

# IN-KJM1900 — Forelesning 4

Simen Kvaal

Onsdag 15/11/2017

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

## 1 Beskjeder og litt av hvert

- Beskjeder
- Litt om arrayer, lister og indeksering

## 2 Kjemisk delmodell

- Forbindelser i birkenesmodellen
- Behandling av sulfat: transport
- Øvrige ioner og deres konsentrasjoner

## 3 Konsentrasjoner i avrenning

## 4 Oppgave 5: Transport av sulfat

- Oppgave 5a: Implementering
- Oppgave 5b: Simuleringer
- Liveeksempel

## 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen

- Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
- Oppgave 6b: likevektsjustering
- Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
    - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

- 1 Likning (2.30) på side 11 skal være:

$$g([\text{H}^+]) = 3K_{AlH}[\text{H}^+]^3 + [\text{H}^+] + 2([\text{Ca}^{2+}] - [\text{SO}_4^{2-}]) - K_H[\text{H}^+]^{-1} = 0$$

Last ned siste versjon!

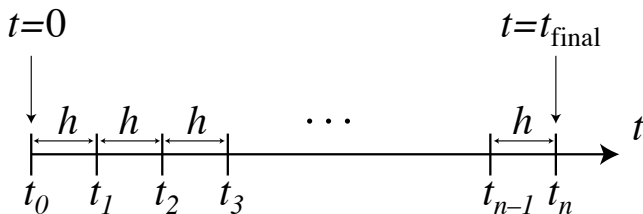
- 1 Oppgave 4 og 5: Massebalansesjekken er *ikke* en testfunksjon!
- 2 Implementer direkte i Euler-loopen eller etter loopen. Printe ut VS–HS.
- 3 Når vi i dag snakker om “Hva skal gjøres?”: det er oppgaveteksten som er veiledene! Forelesningen er en “guide” til oppgaven.
- 4 I dag blir det mulighet for samretting både del I (annet forsøk) og del II
- 5 Samretting er heretter i Vilhelm Bjerknes, IT-aud 3

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

- NumPy `array` vs. Python `list`
- `list` : holder hva som helst, ikke designet for tall i utgangspunktet!  
Memory overhead.
- `array` : designet for tallknusing
- En `list` av tall kan ofte brukes i NumPy-funksjoner
- Det er mindre ofte at en `array` kan brukes der en `list` forventes ...
- Eksempler: `list-arrays.py`



# Tidsaksen i Eulers metode



---

```
# for birkenesmodellen vet vi:  
# - t_final er et heltall (antall dager)  
# - h = 1.0/d, det vil si d punkter per dag  
# - totalt: t_final * d + 1 punkter
```

```
t_final = 31 # simuler en måned  
d = 24      # ett datapunkt per time  
h = 1.0/d  
t_vec = np.linspace(0, t_final, t_final*d + 1)  
t_steps = t_final * d
```

- Tidsarray: `t_steps` intervaller, men `t_steps+1` punkter
- $A$  og  $B$  får `t_steps+1` elementer, så plotting går greit: `plot(t, A)`
- Men (for eksempel)  $Q$  har bare `t_steps` elementer
- En typisk feilmelding som kan oppstå:

---

Traceback (most recent call last):

```
File "bucket2.py", line 50, in <module>
```

```
    VS = h * np.sum(P - Q)
```

```
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (101,) (100,)
```

---

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 **Kjemisk delmodell**
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

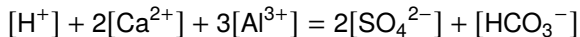
- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 **Kjemisk delmodell**
  - **Forbindelser i birkenesmodellen**
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

# Forbindelser i birkenesmodellen

- Uorganiske ioner, ladede atomer/små molekyler
  - sulfat:  $\text{SO}_4^{2-}$
  - birkarbonat:  $\text{HCO}_3^-$
  - hydronium/protoner:  $\text{H}^+$
  - kalsium:  $\text{Ca}^{2+}$
  - aluminium:  $\text{Al}^{3+}$
- Selvsagt en sterk forenkling
- Konsentrasjoner i klammeparentes:

$$[\text{SO}_4^{2-}] = \frac{M_{\text{SO}_4^{2-}}}{V_{\text{løsning}}}$$

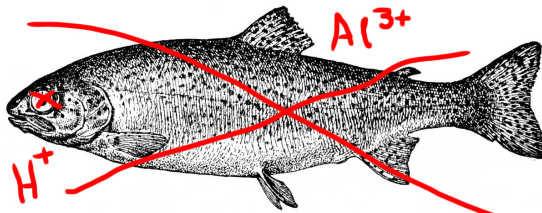
- Elektronøytralitet:



Det vil si at **vannet ikke har netto ladning**

# Giftige ioner

- Høy konsentrasjon av  $H^+$  og  $Al^{3+}$  giftig for fisk o.a.
- $[H^+] < 10^{-5} \text{ mol/L}$ ,  $[Al^{3+}] < 4 \cdot 10^{-6} \text{ mol/L}$
- Mye  $Ca^{2+}$  gjør det litt lettere for fisken, men  $SO_4^{2-}$  og  $HCO_3^-$  har lite å si



- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 **Kjemisk delmodell**
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - **Behandling av sulfat: transport**
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

- Nedbøren bringer sulfat inn i den hydrologiske modellen:

$$C_P(t) = \text{'cpso4' i birkenes.data}$$

Dette er **konsentrasjonen**  $[\text{SO}_4^{2-}]_P$

- Antakelse: sulfat inngår ikke i reaksjoner med jord/vegetasjon.  
**Sterk forenkling.**
- Til enhver tid: ideell blanding av sulfationer i **A** og **B**

$$\text{Masse: } M_A, M_B \quad \text{Konsentrasjon: } C_A = \frac{M_A}{A}, \quad C_B = \frac{M_B}{B}$$

- Sulfat blir transportert med vannet. Sulfat kommer inn med  $P$ , og ut i  $Q$ .
- Dette gir en difflikning:

$$\frac{d}{dt}M_A = P \cdot C_P - Q_A \cdot C_A$$

$$\frac{d}{dt}M_B = A_{\text{sig}} \cdot Q_A \cdot C_A - (Q_B + Q_{\text{over}}) \cdot C_B.$$



- Som sagt kommer sulfaten inn med  $C_P$ , og ut i bekken,  $C_Q$ :

$$C_Q = \frac{1}{Q} [(1 - A_{\text{sig}}) \cdot Q_A \cdot C_A + (Q_B + Q_{\text{over}}) \cdot C_B]$$

- Dette følger av massebevaring og likningene for  $M_A$  og  $M_B$

- Eulers metode for **transport av sulfat**:

$$(M_A)_{j+1} = (M_A)_j + h[P \cdot C_P - Q_A \cdot C_A]$$

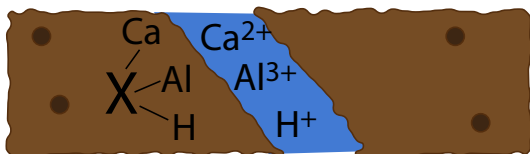
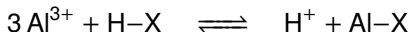
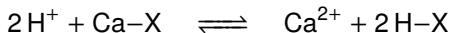
$$(M_B)_{j+1} = (M_B)_j + h[A_{\text{sig}} \cdot Q_A \cdot C_A - (Q_B + Q_{\text{over}}) \cdot C_B]$$

- Denne likner mye på metoden for  $A$  og  $B$  (vannmengdene)
- Merk at  $A$  og  $B$  inngår i likningen. Vi må løse for  $A$  og  $B$  først!
- ... derfor er vanntransport oppgave 4, og sulfattransport oppgave 5
- Vi må bruke **samme tidssteg** i oppgave 4 og 5

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 **Kjemisk delmodell**
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - **Øvrige ioner og deres konsentrasjoner**
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

# Kalsium, aluminium og hydronium

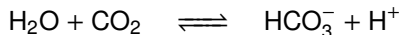
- Konsentrasjonene av  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{H}^+$  og  $\text{Al}^{3+}$ : **komplett bestemt av likevektsreaksjoner**
- Ioneyttereaksjoner mellom vann og fast jordfase X:



- Likevekt bestemt av likninger:

$$K_{H\text{Ca}} = \frac{[\text{H}^+]^2}{[\text{Ca}^{2+}]} \quad K_{\text{AlH}} = \frac{[\text{Al}^{3+}]}{[\text{H}^+]^3}$$

- Bikarbonat reagerer med hydronium:



- Ikke ionebytte, men reaksjon mellom løst  $\text{CO}_2$ -gass i jordvæsken og vann.
- Likevektskonstant  $K_H$ :

$$K_H = [\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]$$

- Mikroorganismer, planterøtter som puster: mer løst  $\text{CO}_2$  i jordvæsken enn i overflatevann.
- Når jordvæsken kommer ut i atmosfæren, vil  $\text{CO}_2$  fordampe, og reaksjonen vil gå mot venstre.
- Dette blir relevant i oppgave 6, når vi studerer kjemi i Q

- Alle likevektslikningene:

$$K_{HCa} = \frac{[H^+]^2}{[Ca^{2+}]} \quad K_{AlH} = \frac{[Al^{3+}]}{[H^+]^3} \quad K_H = [H^+][HCO_3^-]$$

- Tre konstanter:  $K_{HCa}$ ,  $K_{AlH}$  of  $K_H$ . Varierer mellom **A**, **B** og bekken **Q**.
- Elektronøytralitet omformulert:

$$[H^+] + 2 \frac{[H^+]^2}{K_{HCa}} + 3K_{AlH}[H^+]^3 = 2[SO_4^{2-}] + \frac{K_H}{[H^+]}$$

- Eller:

$$f(x) = 3K_{AlH}x^3 + 2K_{HCa}^-x^2 + x - 2s - K_Hx^{-1} = 0.$$

$$x = [H^+], \quad s = [SO_4^{2-}]$$

- Likning for elektronøytralitet:

$$f(x) = 3K_{AlHX}x^3 + 2K_{HCa}^-x^2 + x - 2s - K_{HX}^{-1} = 0.$$

$$x = [H^+], \quad s = [SO_4^{2-}]$$

- I et reservoar kjenner vi sulfatkonsentrasjonen  $s$  fra Eulers metode
- Som funksjon av tid
- Vi kan finne  $x$  fra  $f(x) = 0$  — Newtons metode,  
`birkutil.find_concentration`
- Likevektslikningene gir oss så  $[Al^{3+}]$ ,  $[HCO_3^-]$ ,  $[Ca^{2+}]$
- **Konklusjon:** gitt  $[SO_4^{2-}]$  kan vi finne alle de andre konsentrasjonene med Newtons metode og enkle relasjoner

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

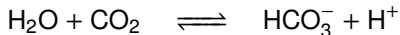


# Avrenning og konsentrasjon

- La  $Y$  være et ion. Gitt konsentrasjoner  $[Y]_A$  og  $[Y]_B$ , finn konsentrasjonen i vrenningen:  $[Y]_Q$
- Blandingsformel:

$$[Y]_Q = \frac{1}{Q}((1 - A_{\text{sig}}) \cdot Q_A \cdot [Y]_A + (Q_B + Q_{\text{over}}) \cdot [Y]_B)$$

- Dette gir oss  $[\text{SO}_4^{2-}]_Q$ ,  $[\text{H}^+]_Q$ ,  $[\text{Al}^{3+}]_Q$ ,  $[\text{Ca}^{2+}]_Q$ ,  $[\text{HCO}_3^-]_Q$ .
- Vannet i  $Q$  er nå elektronøytralt, men reaksjonene er ikke i likevekt
- Jordløsningen blitt til overflatevann,  $\text{CO}_2$  fordampes:



Reaksjonen forskyves til venstre

- Vi får mindre  $\text{H}^+$ , og ionebyttereaksjonene “kommer ut av likevekt”
- Vi må **justere  $[\text{Al}^{3+}]_Q$**
- Komplekse årsaker, pragmatisk løsning, sterke forenklinger

# Justering med Newtons metode

- Vi holder  $[\text{Ca}^{2+}]$  og  $[\text{SO}_4^{2-}]$  konstante – vi antar at de ikke inngår i reaksjoner
- Elektronøytralitet:

$$[\text{H}^+]_Q + 2[\text{Ca}^{2+}]_Q + 3K_{AlH}[\text{H}^+]_Q^3 = 2[\text{SO}_4^{2-}]_Q + \frac{K_H}{[\text{H}^+]_Q}$$

- Vi anvender likevektsbetingelser og får:

$$g(x) = 3K_{AlH}x^3 + x + 2(c - s) - K_Hx^{-1} = 0$$

$$x = [\text{H}^+]_Q \quad s = [\text{SO}_4^{2-}]_Q \quad c = [\text{Ca}^{2+}]_Q$$

- Vi løser for  $x = [\text{H}^+]_Q$  – Newtons metode, men ny funksjon
- Finner  $[\text{Al}^{3+}]_Q$  ved likevekt
- Nye likevektskonstanter for bekken (se oppgavetekst)

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat**
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat**
  - **Oppgave 5a: Implementering**
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

# Hva skal gjøres?

- Skrive skript. Lurt å bygge ut program fra oppgave 4.
- Transport av sulfat med Eulers metode

$$(M_A)_{j+1} = (M_A)_j + h[P \cdot C_P - Q_A \cdot C_A]$$

$$(M_B)_{j+1} = (M_B)_j + h[A_{\text{sig}} \cdot Q_A \cdot C_A - (Q_B + Q_{\text{over}}) \cdot C_B]$$

- Muligheter: Ny simuleringsloop etter oppgave 4, eller inkludere i samme loop
- Initialbetingelser:  $M_A(0) = 4 \cdot 10^{-5} \cdot A(0)$ ,  $M_B(0) = 4 \cdot 10^{-5} \cdot B(0)$
- Beregne konsentrasjon i avrenning  $C_Q$ . Merk! Ikke definert (sett til null) når  $Q = 0$ .

Som for vanntransport:

$$VS = M_A(t_{\text{final}}) - M_A(0) + M_B(t_{\text{final}}) - M_B(0) \quad (1)$$

$$HS = \int_0^{t_{\text{final}}} g(t) dt \approx h \sum_{j=1}^{n-1} g(t_j) \quad (2)$$

med

$$g(t) = P(t) \cdot C_P(t) - [1 - A_{\text{sig}}(t)] \cdot Q_A(t) \cdot C_A(t) - [Q_B(t) + Q_{\text{over}}(t)] \cdot C_B(t) \quad (3)$$

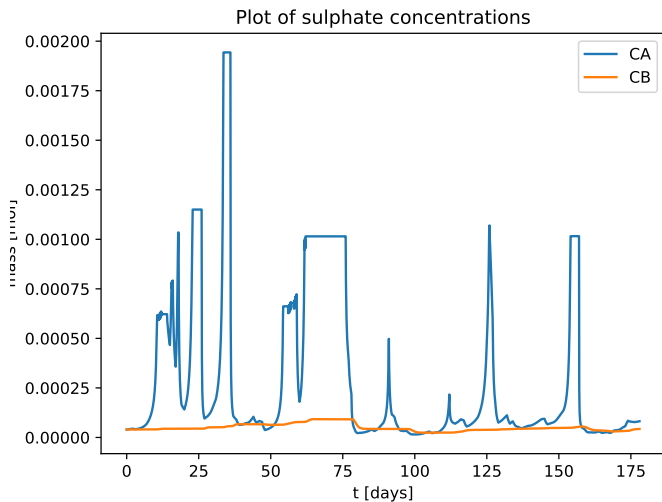
Testen skal inngå som integrert del av simuleringrutinen.

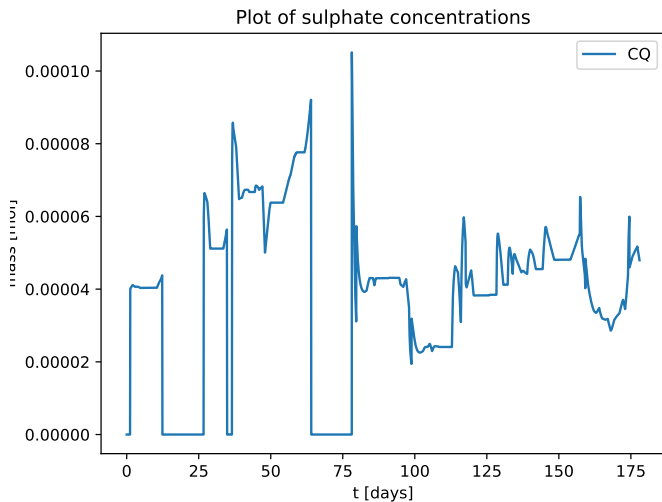
- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat**
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer**
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

# Hva skal gjøres?

- Bruk samme verdi av tidssteg  $h = 1/d$  som i oppgave 4 (vantransport)
- Plotting av  $C_A$ ,  $C_B$  i ett plott,  $C_Q$  i et annet plott







- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat**
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - **Liveeksempel**
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

- Svært enkel “hydrologisk” modell

$A(t)$  = vannstand i bøtte

$P(t)$  = vannstrøm inn, “hageslange”

$Q(t)$  = vannstrøm gjennom hull

$C_P(t)$  = konsentrasjon av sulfat i vannst

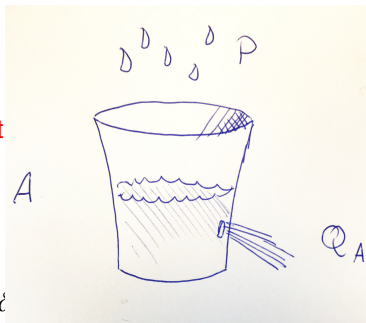
$M_A(t)$  = masse av sulfat i bøtte

- Sulfatbudsjett

$$\delta M_A(t) = C_P(t) \cdot P(t) \delta t - M_A(t) / A(t) \cdot Q(t) \delta t$$

- Eulers metode med steglengde  $h$ :

$$(M_A)_{k+1} = (M_A)_k + [C_P(t_k)P(t_k) - M_A(t_k)Q(t_k)/A(t_k)]h$$



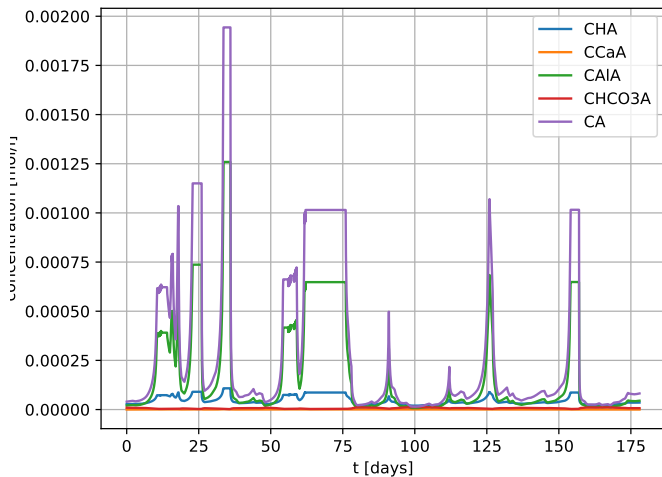
- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsursingsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

# Hva skal gjøres?

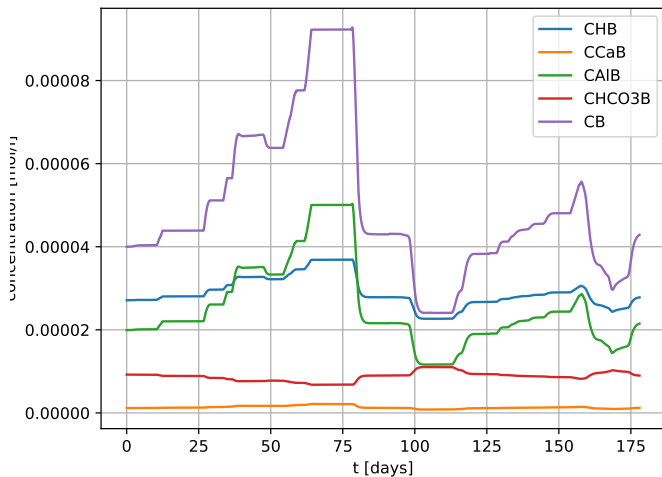
- Status: vi kjenner  $A$ ,  $B$ ,  $Q$ , og  $C_A$ ,  $C_B$  og  $C_Q$
- Utvide skript: Beregne konsentrasjoner av øvrige ioner. ( $[H^+]$  med Newtons metode, og de øvrige ved likevektsbetingelser)
- Her bruker vi Oppgave 1b, og modulfunksjonen `birkutil.find_concentration`
- I **A** og **B**, og også for avrenning med “blandeformelen”
- Det kan være **lurt å plote!**
- Verdier for likevektskonstanter:  $K_{AlH} = 10^9$  og  $K_H = 2.5 \cdot 10^{-10}$ .
  - A:  $K_{HCa} = 10^{-2.2}$
  - B:  $K_{HCa} = 10^{-3.2}$

# Plottekesempel





# Plottekesempel



- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 **Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen**
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - **Oppgave 6b: likevektsjustering**
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

# Hva skal gjøres?

- Beregning av justert  $[Al^{3+}]$ : for-løkke over tid
- Newtons metode, som beskrevet over og i oppgaveteksten
- **NB:** Ny funksjon  $g(x)$ . Må regne ut den deriverte og plugge inn i Newtons metode. Anvend samme  $x_0$  som i `birkutil.find_concentration`
- Sulfat og kalsium er kjent. Finn hydronium med Newton, og deretter aluminium og bikarbonat med likevekt
- Likevektskonstanter:  $K_{AlH} = 10^9$  og  $K_H = 1.2 \cdot 10^{-11}$ .

- 1 Beskjeder og litt av hvert
  - Beskjeder
  - Litt om arrayer, lister og indeksering
- 2 Kjemisk delmodell
  - Forbindelser i birkenesmodellen
  - Behandling av sulfat: transport
  - Øvrige ioner og deres konsentrasjoner
- 3 Konsentrasjoner i avrenning
- 4 Oppgave 5: Transport av sulfat
  - Oppgave 5a: Implementering
  - Oppgave 5b: Simuleringer
  - Liveeksempel
- 5 Oppgave 6: Hele forsuringsmodellen
  - Oppgave 6a: beregning av konsentrasjoner
  - Oppgave 6b: likevektsjustering
  - Oppgave 6b: plotting, plotting og mer plotting

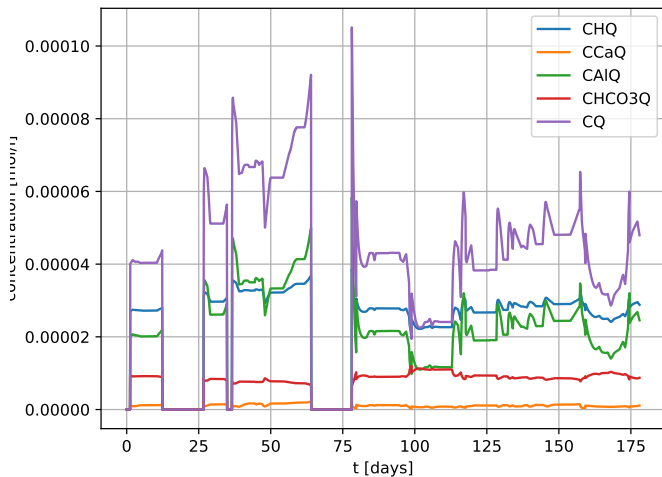
# Hva skal gjøres?

- Plotting av alle konsentrasjoner i avrenning, før og etter justering
- Plotte avvik fra elektronøytralitet før/etter justering:

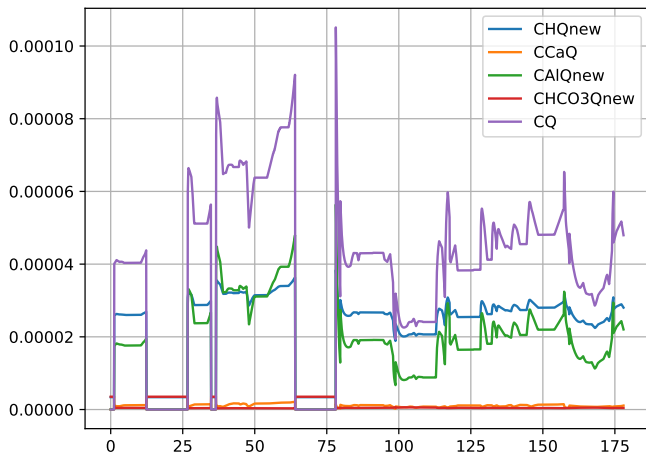
$$e = [H^+]_Q + 2[Ca^{2+}]_Q + 3 \cdot [Al^{3+}]_Q - 2 \cdot [SO_4^{2-}]_Q - [HCO_3^-]_Q$$

- Skal være veldig små tall både før og etter justering

# Plottekesempel



# Plottekesempel



# Plottekesempel

