

6. Umrechnungen von Wasseranalysen anhand von Beispielen

Vor der Interpretation von Analyseergebnissen sind zum Teil umfangreiche Umrechnungen erforderlich. Sie beziehen sich im wesentlichen auf chemische Untersuchungsergebnisse. Die häufigsten Rechenoperationen sollen anhand von Beispielanalysen (s. Anhang 4) demonstriert werden und ergänzen so die theoretischen Abhandlungen (s. 3.).

6.1. Berechnung der Milligramm-Äquivalente (mval)

Für genetische Aussagen und zur Bestimmung der Zuverlässigkeit von Analysen ist die Umrechnung der Analysenwerte von mg l^{-1} in mval l^{-1} erforderlich.

☞ hierfür benötigten Umrechnungsfaktoren $\left(\frac{1}{\text{Äquivalentmasse}} \right)$
enthält Anhang 2.

Beispielanalyse 1:

mg l^{-1} Umrechnungsfaktor mval l^{-1}

$$\text{Na}^+ \quad 5,8 \cdot 0,0435 \quad = 0,25$$

$$\text{K}^+ \quad 0,8 \cdot 0,0256 \quad = 0,02$$

$$\text{Ca}^{2+} \quad 48,6 \cdot 0,0499 \quad = 2,43$$

	mg l ⁻¹	Umrechnungsfaktor	mval l ⁻¹
Mg ²⁺	5,6	· 0,0822	= 0,46
Fe ²⁺	0,92	· 0,0358	= 0,03
Fe ³⁺	0,06	· 0,0537	= <0,01
Mn ²⁺	0,80	· 0,0364	= 0,03
NH ₄ ⁺	0,39	· 0,0554	= 0,02
Σr Kationen			= 3,24
Cl ⁻	11	· 0,0282	= 0,31
SO ₄ ²⁻	75	· 0,0208	= 1,56
HCO ₃ ⁻		m-Wert	= 1,30
Σr Anionen			= 3,17
Ionensumme			= 6,41

6.2. Berechnung der Milligramm-Äquivalent-Prozente (mval%)

Die Berechnung der mval%-Angaben erfolgt unter Bezugnahme auf eine Berechnungsbasis, die je nach Klassifikations- oder Darstellungsmethode die Ionensumme, die Summe der Kationen oder Anionen bzw. nur die der Hauptionen sein kann.

Beispielanalyse 1:

	mval l ⁻¹		mval %
Na ⁺	0,25	$\frac{0,25}{3,16} \cdot 100$	= 8
K ⁺	0,02	$\frac{0,02}{3,16} \cdot 100$	= 1
Ca ²⁺	2,43	$\frac{2,43}{3,16} \cdot 100$	= 77
Mg ²⁺	0,46	$\frac{0,46}{3,16} \cdot 100$	= <u>14</u>
Summe	3,16	= 100%	100%

6.3. Ermittlung der Analysengenauigkeit

Der Analysenfehler kann entsprechend der unter 3.8. gegebenen Formel wie folgt berechnet werden.

Beispielanalyse 1:

$$r \text{ Kationen} = 3,24 \text{ mval l}^{-1}$$

$$r \text{ Anionen} = 3,17 \text{ mval l}^{-1}$$

$$e = \frac{3,17 - 3,24}{6,41} \cdot 100 = \frac{-7}{6,41} = -1,1\%$$

Der Analysenfehler beträgt 1,1%.

6.4. Ermittlung des Natriumhydrogenkarbonat-Gehaltes

Bei den vorliegenden Beispielsanalysen ist bei der Überprüfung nach den unter 3.6. gegebenen Hinweisen ($KH \geq GH$) die Möglichkeit des Vorhandenseins von NaHCO_3 -Gehalt bei den Analysen Nr. 3, 4, 5 und 8 gegeben.

Es kann nach Variante 1 und 2 weiter verfahren werden:

$$m\text{-Wert} \cdot 2,8 = \text{scheinbare KH}$$

$$(\text{scheinbare KH} - \text{GH}) \cdot 30 = \text{mg l}^{-1} \text{ NaHCO}_3$$

Beispielanalyse 5:

$$6,2 \cdot 2,8 = 17,4$$

$$(17,4 - 2,9) \cdot 30 = 435 \text{ mg l NaHCO}_3$$

Die Analyse Nr. 5 enthält $435 \text{ mg l}^{-1} \text{ NaHCO}_3$. Die Natriumhydrogenkarbonat-Führung wird auch durch den erhöhten Na^+ -Gehalt angedeutet, der hier nicht wie bei einer Versalzung von einer Erhöhung des Cl^- -Gehaltes begleitet wird. Ebenso ist der pH-Wert mit 8,3 deutlich gegenüber den übrigen Beispielsanalysen nach der basischen Seite verschoben.

6.5. Errechnen fehlender und Kontrolle gegebener Größen einer Analyse

Aus der Kenntnis der rechnerischen Zusammenhänge innerhalb einer Analyse ist es möglich, fehlende Größen zu errechnen bzw. angegebene auf ihre Richtigkeit zu prüfen.

a) Errechnen von HCO_3^- in mg l^{-1} und mval l^{-1}

Analog der Beispielsanalysen wird HCO_3^- in mg l^{-1} oder mval l^{-1} zumeist von den Laboratorien nicht ausgewiesen. Es muß somit aus dem m-Wert oder der Karbonathärte (KH) errechnet werden:

$$\text{m-Wert} \cdot 61 = \text{mg l}^{-1} \text{HCO}_3^-$$

Beispielsanalyse 1: $1,3 \cdot 61 = 79,3 \text{ mg l}^{-1} \text{HCO}_3^-$

Bei vielen Analysen ist der m-Wert nicht gegeben, und HCO_3^- muß aus KH errechnet werden:

$$\text{KH} \cdot 21,8 = \text{mg l}^{-1} \text{HCO}_3^-$$

Beispielsanalyse 6: $15,4 \cdot 21,8 = 323 \text{ mg l}^{-1} \text{HCO}_3^-$

Für die häufigsten Auswerteverfahren wird jedoch HCO_3^- in mval l^{-1} benötigt. Diese Größe kann bei m-Wert-Angabe als

$$\text{m-Wert} = \text{mval l}^{-1} \text{HCO}_3^-$$

bei der Angabe von KH aus

$$\text{KH} : 2,8 = \text{mval l}^{-1} \text{HCO}_3^-$$

ermittelt werden.

Beispielsanalyse 6: $15,4 : 2,8 = 5,5 \text{ mval l}^{-1}$

Vorsicht ist bei NaHCO_3^- -haltigen Wässern (KH = GH) geboten!

b) Errechnen von Na^+ und K^+ in mval l^{-1}

Na^+ und K^+ sind in vielen Analysen nicht bestimmt. Sie können, wenn die wesentlichsten Ionen bestimmt sind, als Differenz aus der Summe Anionen und Kationen (ohne $\text{Na}^+ + \text{K}^+$) errechnet werden:

$$\text{mval l}^{-1} (\text{Na}^+ + \text{K}^+) = \sum r \text{ Anionen} - \sum r \text{ Kationen (ohne } \text{Na}^+ + \text{K}^+)$$

Beispielsanalyse 9:

$$\begin{aligned}r \text{ Anionen} &= 71,91 \text{ mval l}^{-1} \\r \text{ Kationen (ohne Na}^+ + \text{K}^+) &= 22,05 \text{ mval l}^{-1} \\(\text{Na}^+ + \text{K}^+) \text{ (mval l}^{-1}) &= 71,91 - 22,05 = 49,86 \text{ mval l}^{-1}\end{aligned}$$

c) Errechnen der Gesamthärte aus den zweiwertigen Kationen in mg l^{-1}

Ist die Gesamthärte (GH) nicht angegeben, kann sie über die zweiwertigen Kationen wie folgt errechnet werden:

$$\text{GH} = \text{Ca-H} + \text{Mg-H} + \text{weitere zweiwertige Kationen}$$

Beispielsanalyse 2:

$$\text{Ca}^{2+} = 82,9 \text{ mg l}^{-1}$$

$$\text{Mg}^{2+} = 4,3 \text{ mg l}^{-1}$$

$$\text{GH} = \frac{82,9}{20,04} \cdot 2,8 + \frac{4,3}{12,16} \cdot 2,8$$

$$\text{Ca}^{2+} = 20,04$$

$$\text{Mg}^{2+} = 12,16$$

$$= 11,6 + 1,0$$

$$= 12,6 \text{ }^\circ\text{dH}$$

Umgekehrt können durch Division mit 2,8 die zweiwertigen Kationen in mval l^{-1} erhalten werden. Meist liegen nur Ca^{2+} und Mg^{2+} als Härtebildner vor.

$$\frac{\text{GH}}{2,8} = \text{mval l}^{-1} \text{ Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + \text{weitere zweiwertige Kationen}$$

6.6. Beurteilung der Stickstoffverbindungen laut TGL Trinkwasser

Eine weitere Umrechnung ist bei der hygienischen Bewertung einer Wasseranalyse von Interesse. Die TGL 22 433 - Trinkwasser - sieht bei der Grenzwertberechnung für Stickstoffverbindungen vor, daß bei Nachweis eines nicht anthropogenen bedingten Ursprungs der Gehalt an NH_4^+ , NO_2^- und NO_3^- , berechnet als NO_2^- , 15 mg l^{-1} nicht überschreiten darf. Es kann folgende Formel benutzt werden, wobei die Forderung, nur die Hälfte des NO_3^- -Gehaltes zu benutzen, bereits berücksichtigt wurde:

$$15 \text{ mg l}^{-1} \text{NO}_2^- = \text{mg l}^{-1} \text{NO}_2^- + 0,37 \cdot \text{mg l}^{-1} \text{NO}_3^- + 2,55 \cdot \text{mg l}^{-1} \text{NH}_4^+$$

Die oben genannten Berechnungen können auch als Kontrollrechnungen ausgeführt werden. Eine Zusammenfassung der Umrechnungsmöglichkeiten enthält Anhang 2 und 3.