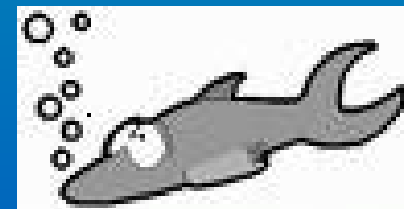


seacarb

Wersja: 2.3.1

Data: 1010-01-26

Elżbieta Kowalczyk



Biblioteka 'seacarb'

- Biblioteka programu R
- Wersja: 2.3.1
 - Data: 1010-01-26
- obliczanie parametrów układu węglanowego w wodach morskich i oceanach
- tworzenie wykresów
- wykonywanie skomplikowanych obliczeń (szybko i kompleksowo)
- posiada 38 funkcji
- zastosowanie: chemia i nauki przyrodnicze

OBLICZANIE STAŁYCH

- **K1** – pierwsza stała dysocjacji kwasu węglowego
- **K1p** – pierwsza stała dysocjacji kwasu fosforowego
- **K2** – druga stała dysocjacji kwasu węglowego
- **K2p** – druga stała dysocjacji kwasu fosforowego
- **K3p** – trzecia stała dysocjacji kwasu fosforowego
- **Kb** – stała dysocjacji kwasu borowego
- **Kf** – stała stabilności fluorowodoru
- **Kh** – stała Henry’ego
- **Khs** – stała dysocjacji siarkowodoru
- **Kn** – stała dysocjacji amonu
- **Ks** – stała stabilności siarkowodoru
- **Ksi** – stała dysocjacji $\text{Si}(\text{OH})_4$

```
> K1(S=35,T=25,P=0,k1k2="1",pHscale="T")
[1] 1.421828e-06
attr(,"unit")
[1] "mol/kg-soln"
attr(,"pH scale")
[1] "total scale"
```

OBLICZENIA

- **amp** – oblicza wartość pH buforu AMP
- **buffer** – oblicza buforowe parametry układu węglanowego wód morskich
- **bor** – oblicza całkowite stężenie boru
- **carb** – oblicza parametry układu węglanowego wód morskich
- **kconv** – przeliczniki do zmiany skali pH
- **Kspa** – oblicza rozpuszczalność aragonitu
- **Kspc** – oblicza rozpuszczalność kalcytu
- **Kw** – podaje liczbę jonów w wodzie
- **oa** – opisuje różne warianty, które mogą być użyte do zmiany ilości i form węglanów w wodzie morskiej
- **pCa** – oblicza zmiany stanów nasycenia aragonitu i kalcytu wynikających ze zmian stężenia wapnia
- **pgas** – oblicza chemię węglanów po zmianach $p\text{CO}_2$ spowodowanych przez pęcherzyki gazu

carb

```
> carb(flag=8, var1=8.2, var2=0.00234, S=35, T=25, P=0, Pt=0, Sit=0,  
+ pHscale="T", kf="pf", k1k2="1")  
  flag  S  T  P  pH          CO2      pCO2      fCO2          HCO3          CO3  
1      8 35 25 0 8.2 7.308176e-06 258.2166 257.4037 0.001646858 0.0002822959  
          DIC      ALK OmegaAragonite OmegaCalcite  
1 0.001936462 0.00234      4.477183      6.792518
```

- flag - należy wybrać konkretne związki

flag = 1 pH i CO₂

flag = 2 CO₂ i HCO₃

...

flag = 8 pH i ALK (zasadowość)

...

flag = 25 pCO₂ and DIC (rozp. nieorg. węgiel)

- var1 - wartość pierwszej zmiennej
- var2 - wartość drugiej zmiennej
- Kf - stała stabilności fluorowodoru
- k1k2 - użycie K1 i K2 („l” wg Lueker lub „r” wg Roy)
- pH scale - wybór skali pH (łączną „T”, wolną „F” lub wody morskiej - „SWS”)

carb

```
> flag <- c(8, 2, 8)
> var1 <- c(8.2, 7.477544e-06, 8.2)
> var2 <- c(0.002343955, 0.001649802, 2400e-6)
> S <- c(35, 35, 30)
> T <- c(25, 25, 30)
> P <- c(0, 0, 0)
> Pt <- c(0, 0, 0)
> Sit <- c(0, 0, 0)
> kf <- c("pf", "pf", "pf")
> k1k2 <- c("1", "1", "1")
> pHscale <- c("T", "T", "T")
> carb(flag=flag, var1=var1, var2=var2, S=S, T=T, P=P,
+ Pt=Pt, Sit=Sit, kf=kf, k1k2=k1k2, pHscale=pHscale)
  flag  S  T  P      pH          CO2      pCO2      fCO2          HCO3          CO3
1     8 35 25 0 8.200000 7.321246e-06 258.6784 257.8641 0.001649803 0.0002828008
2     2 35 25 0 8.190826 7.477544e-06 264.2008 263.3691 0.001649802 0.0002768892
3     8 30 30 0 8.200000 7.087923e-06 275.4922 274.6756 0.001671491 0.0003043554
      DIC          ALK OmegaAragonite OmegaCalcite
1 0.001939925 0.002343955      4.485190      6.804666
2 0.001934169 0.002330145      4.391433      6.662424
3 0.001982935 0.002400000      5.110021      7.727555
```

- OmegaAragonite – stopień nasycenia aragonitu
- OmegaCalcite – stopień nasycenia kalcytu

pgas

```
> pgas(flag=15, vari=2302e-6, var2=2050e-6, pCO2g=750, S=35, T=20, P=0,
+ Pt=0, Sit=0, pHscale="T", kf="pf", k1k2="1")
      comment flag  S  T  P      pH      CO2      pCO2      fCO2      HCO3
1 pgas-initial  15 35 20 0 8.035250 1.332464e-05 412.5409 411.1599 0.001855855
2  pgas-final  24 35 20 0 7.811042 2.422422e-05 750.0000 747.4894 0.002013403
      CO3      DIC      ALK OmegaAragonite OmegaCalcite
1 0.0001808202 0.002050000 0.002302      2.809501      4.32283
2 0.0001170647 0.002154692 0.002302      1.818897      2.79864
```

pCa

```
> pCa(flag=15, vari=2302e-6, var2=2050e-6, Ca=0.01028, S=35, T=20, P=0,
+ Pt=0, Sit=0, pHscale="T", kf="pf", k1k2="1")
      comment flag  S  T  P      pH      CO2      pCO2      fCO2      HCO3
1 pCa-initial  15 35 20 0 8.03525 1.332464e-05 412.5409 411.1599 0.001855855
2  pCa-final  15 35 20 0 8.03525 1.332464e-05 412.5409 411.1599 0.001855855
      CO3      DIC      ALK OmegaAragonite OmegaCalcite
1 0.0001808202 0.00205 0.002302      2.809501      4.32283
2 0.0001808202 0.00205 0.002302      2.809501      4.32283
```

Kw

```
> Kw(S=35,T=25,P=0,pHscale="T")
[1] 6.062772e-14
attr(,"unit")
[1] "mol/kg-soln"
attr(,"pH scale")
[1] "total scale"
```

OBLICZENIA

- **pH** – obliczenie pH potencjometrycznego
- **pHconv** – zmiana pH ze skali ogólnej na inną (łączną, wolną lub wody morskiej skalę oznaczonych pH)
- **pHinsi** – pH w danej temperaturze
- **pHslope** – podaje nachylenie krzywej kalibracji elektrody pH
- **pmix** – oblicza chemię węglanową po wymieszaniu dwóch próbek z różną wartością $p\text{CO}_2$
- **ppH** – oblicza chemizm węglanów po zmianie pH przez dodanie kwasu lub zasady
- **psi** – podaje stosunek molowy CO_2 i CaCO_3
- **pTA** – oblicza chemizm węglanów po dodaniu CO_3^{2-} lub HCO_3^-
- **rho** – oblicza gęstość wody morskiej
- **speciation** – szacuje stężenie różnych form jonowych cząsteczek w zależności od wartości pH
- **tris** – podaje wartość pH buforu TRIS

rho

```
> rho(35,25,0)
[1] 1023.343
attr(,"unit")
[1] "(kg/m3)"
```

psi

```
> psi(flag=24, var1=350, var2=2400e-6, S=35, T=25, P=0, Pt=0,
+ Sit=0, pHscale="T", kf="pf", k1k2="1")
[1] 0.5961571
attr(,"unit")
[1] "mol CO2/mol CaCO3"
attr(,"pH scale")
[1] "total scale"
```

pHinsi

```
> pHinsi(8.2,2.4e-3,25,25,35,0,0)
[1] 8.199998
```

pHinsi(PH=8.2, ALK=2.4e-3, Tinsi=20, Tlab=25, S=35, Pt=0, Sit=0, k1k2 = "",
kf = "pf", pHscale = "T")

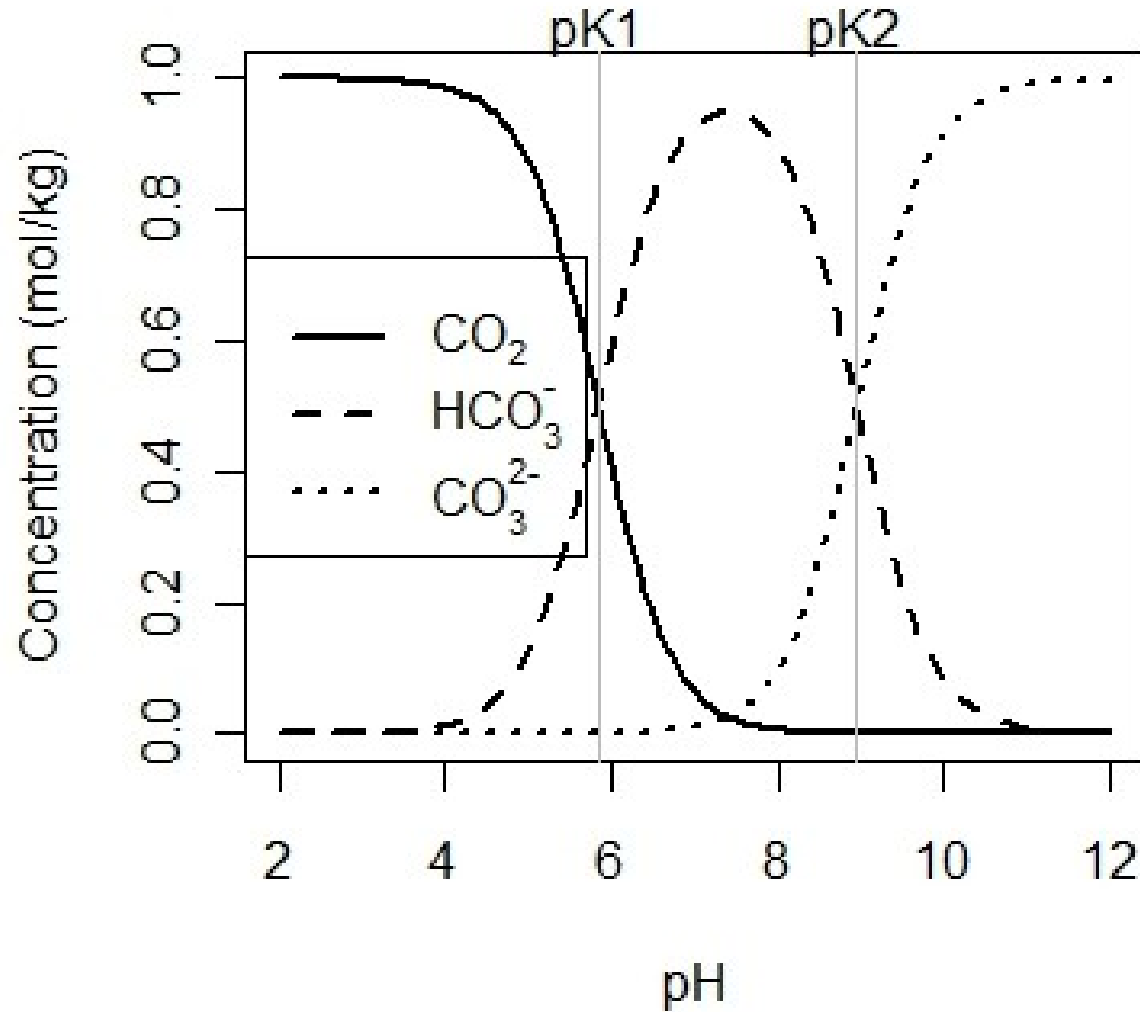
- Tinsi – temp. na m-scu
- Tlab – temp. w lab.

RYSOWANIE WYKRESÓW

- ***bjerrum*** - oblicza buforowe parametry układu węglanowego wód morskich
- ***K_{hs}*** - stała dysocjacji siarkowodoru
- ***oa*** - opisuje różne warianty, które mogą być użyte do zmiany ilości i form węglanów w wodzie morskiej
- ***speciation*** - szacuje stężenie różnych form jonowych cząsteczek w zależności od wartości pH

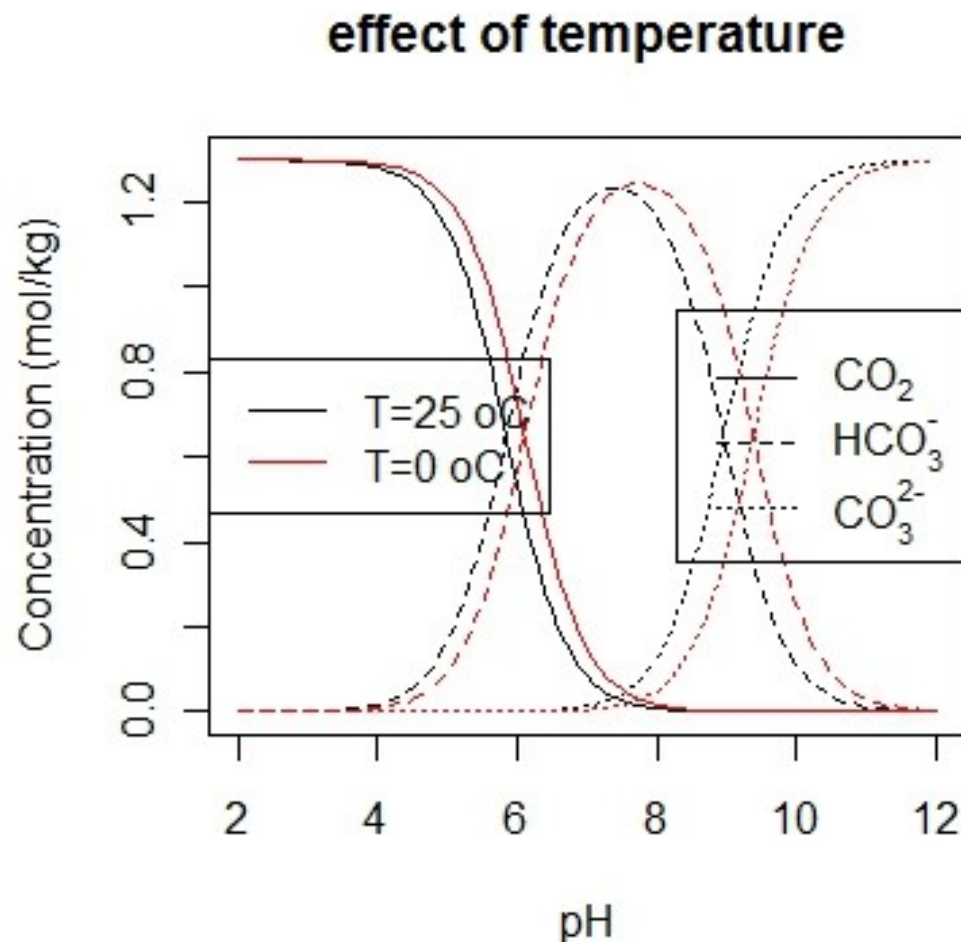
bjerrum

DIC speciation



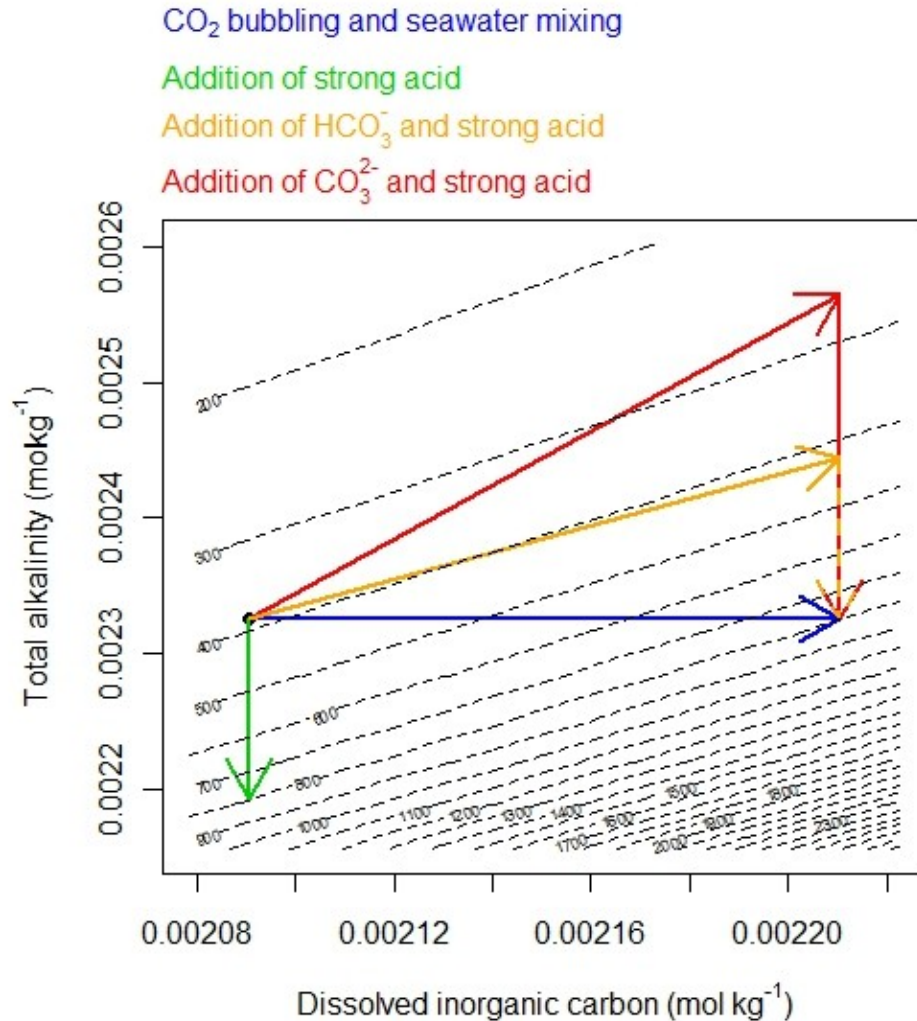
bjerrum

```
> bjerrum(K1(T=25,S=35),K2(T=25,S=35),conc=1.3,main="effect of temperature" )  
> bjerrum(K1(T=0,S=35),K2(T=0,S=35),conc=1.3,add=TRUE,col="red")  
> legend("left",lty=1,col=c("black","red"),legend=c("T=25 oC","T=0 oC"))  
> legend("right",lty=1:3,legend=c(expression(CO[2]),expression(HCO[3]^"-"),  
+ expression(CO[3]^"2-")))
```



oa

```
> oa(flag=24, var1=384, var2=2325e-6, pCO2s=1e6, pCO2f=793, S=34.3, T=16,  
+ P=0, pHscale="I", kf="pf", k1k2="1", plot=TRUE)
```



\$description

Approach
1 CO2 bubbling
2 Mixing
3 Addition of acid
4 Addition of HCO3 and acid
5 Addition of CO3 and acid

Description of manipulations

1 Bubble seawater with a gas with pCO2=793uatm
2 Mix 0.99673101 kg of the normal seawater with 0.00326899 kg of high-pCO2 seawater
3 Add 0.0001319 mol of H+ to 1 kg of the initial seawater
4 Add 0.0001197 mol of HCO3 and then 0.0001197 mol of H+ to 1 kg of initial seawater
5 Add 0.0001197 mol of CO3 and then 0.00023941 mol of H+ to 1 kg of initial seawater

\$perturbation

	Method	1st param. Value	1st param.
1	CO2 bubbling	Air pCO2 (uatm)	793
2	Mixing	Weight fraction high-CO2	0.00326899
3	Addition of acid	H+ (mol/kg)	0.0001319
4	Addition of HCO3 and acid	HCO3 (mol/kg)	0.0001197
5	Addition of CO3 and acid	CO3 (mol/kg)	0.0001197
	2nd param. Value	2nd param.	
1	<NA>	<NA>	
2	<NA>	<NA>	
3	<NA>	<NA>	
4	H+ (mol/kg)	0.0001197	
5	H+ (mol/kg)	0.00023941	

\$summary

	comment	flag	S	T	P	pH	CO2	pCO2	fCO2
1	initial	24	34.3	16	0	8.067787	1.396412e-05	384	382.6486
2	final-CO2 bubbling	24	34.3	16	0	7.791245	2.883737e-05	793	790.2092
3	final-SW mixing	24	34.3	16	0	7.791245	2.883737e-05	793	790.2092
4	final-acid	25	34.3	16	0	7.767762	2.883737e-05	793	790.2092
5	final-HCO3-and-acid	24	34.3	16	0	7.791245	2.883737e-05	793	790.2092
6	final-CO3-and-acid	24	34.3	16	0	7.791245	2.883737e-05	793	790.2092
	HCO3	CO3	DIC	ALK	Omega	Aragonite	Omega	Calcite	
1	0.001907302	0.0001693656	0.002090632	0.0023250	2.607806		4.056350		
2	0.002083620	0.0000978772	0.002210335	0.0023250	1.507063		2.344184		
3	0.002083620	0.0000978772	0.002210335	0.0023250	1.507063		2.344184		
4	0.001973950	0.0000878449	0.002090632	0.0021931	1.352591		2.103907		
5	0.002083620	0.0000978772	0.002210335	0.0023250	1.507063		2.344184		
6	0.002083620	0.0000978772	0.002210335	0.0023250	1.507063		2.344184		

DZIĘKUJĘ ZA UWAGĘ

