

泥岩と地下水の地球化学的相互作用 に関する検討

(動力炉・核燃料開発事業団 委託研究成果報告書)

1991年7月

大成建設株式会社

PNC TJ1205 91-003

泥岩と地下水の地球化学的相互作用 に関する検討

(動力炉・核燃料開発事業団 委託研究成果報告書)

1991年7月

大成建設株式会社

泥岩と地下水の地球化学的相互作用 に関する検討

藤原 靖*、大脇 英司*

要旨

本研究は、鉱物と地下水との相互作用に関する既往の研究の現状を把握して、現在までに得られている声間層泥岩の鉱物、地下水分析結果をもとに、鉱物平衡による検討と地球化学コードによる検討を行って、声間層泥岩の特徴を明らかにし、今後確認あるいは検討すべき検討課題を明らかにすることを目的として実施し、以下の結果を得た。

声間層泥岩は鉱物組成から概略的には、青柳の区分でいうところの続成作用の後期圧密段階に入っていると考えられた。鉱物平衡図からみた鉱物安定性では、モンモリロナイトは1000m地下水と800m地下水で安定、緑泥石は1000m地下水で安定、斜長石はアルバイト成分に近いものが安定であり、ローモンタイトは安定に近く生成する可能性が示唆された。地球化学コードEQ3NRによる検討では、1000m地下水では、モンモリロナイト、Mg緑泥石、イライト、ローモンタイト、アルバイト、石英、磁鉄鉱が安定、アノーサイト、非晶質シリカ、石膏、黄鉄鉱が不安定という結果となった。しかしこれらの結果は、アルミニウムイオン濃度が仮定値であり、アルミニウムケイ酸塩鉱物はアルミニウムイオン濃度に大きく影響されるので、正確なアルミニウムイオン濃度の把握が必要なことなどが明かとなった。

本報告書は、大成建設株式会社が動力炉・核燃料開発事業団の委託により実施した研究成果である。

契約番号:020D0174

事業団担当部課室および担当者:環境技術開発推進本部 地層科学研究グループ 塩田哲也

*大成建設株式会社 技術研究所 土木構造・水理研究グループ

Geochemical Study on Mudstone and Ground Water

Yasushi Fujiwara*and Eiji Owaki*

Abstract

This study was performed to characterize of Koetoi Formation and to obtain further research problem related to Koetoi project by referring of literatures and considering the mineralogical and chemical composition and of mineral stability from stability diagram and calculation by geochemical code on Koetoi Foemation. Results are described below.

Koetoi Formation might be classified into the late compaction stage of diagenesis. Judging from the stability diagram, montmorillonite at the layer of 1000 m and 800 m might be stable, chlorite and plagioclase, especially albite would be stable at the layer of 1000 m. laumontite might be almost stable, this means that possibility of formation at the layer of layer. From the results of calculation by geochemical code EQ3NR, montmorillonite, Mg-chlorite, illite, laumontite, albite, quartz and magnetite would be stable and anorthite, amorphous silica, gypsum and pyrite might be unstable at the layer. But these results were obtained under the temporary condition of aluminum ion concentration and aluminosilicate were significantly influenced by this concentration, effort to collect the exact value of aluminum ion concentration should be necessary to estimate mineral stability.

Work performed by Taisei Corporation under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation

PNC Liaison : Geoscience Research Program Tetsuya Shiota

*C.E.Structure & Coastal Engineering Research Group

目次

1. はじめに	-----	1
2. 声問層泥岩の鉱物組成	-----	2
2.1 続成作用による鉱物組成の検討	-----	2
2.2 声問層の鉱物組成	-----	5
3. 声問層泥岩と地下水水質との関係	-----	7
3.1 泥質岩地帯の地下水水質と地層や水系との関係に関する既往の研究	-----	7
3.2 地下水水質と鉱物平衡	-----	13
3.2.1 鉱物平衡を理解するための熱力学的なアプローチについて	-----	13
3.2.2 地下水水質と鉱物平衡に関する既往の研究	-----	17
3.3 地球化学コードを用いた鉱物の安定性の検討について	-----	21
3.3.1 地球化学コードについて	-----	21
3.3.2 地球化学コードを使用した既往の研究	-----	23
3.4 声問層泥岩の地下水水質と鉱物平衡について	-----	31
3.5 地球化学コードEQ3NRを用いた声問層泥岩の安定性の検討	-----	40
3.5.1 安定性検討の対象鉱物の選定	-----	40
3.5.2 EQ3NRに使用する平衡定数について	-----	43
3.5.3 安定性の計算結果	-----	50
4. まとめと今後の検討課題	-----	56
4.1 まとめ	-----	56
4.2 今後の研究課題	-----	59
4.3 今後の問題点	-----	60
5. 参考文献	-----	61
[付録]		

図目次

図-1 鉱物平衡図 ($\log A\ell^{3+} + 3pH \sim \log[H_4SiO_4]$)	-----	34
Fig. - 1 Stability diagram ($\log A\ell^{3+} + 3pH \sim \log[H_4SiO_4]$)		
図-2 鉱物平衡図 ($\log[Ca^{2+}]/[H^+]^2 \sim \log[H_4SiO_4]$)	-----	36
Fig. - 2 Stability diagram ($\log[Ca^{2+}]/[H^+]^2 \sim \log[H_4SiO_4]$)		
図-3 鉱物平衡図 ($\log[Na^+]/[H^+] \sim \log[H_4SiO_4]$)	-----	37
Fig. - 3 Stability diagram ($\log[Na^+]/[H^+] \sim \log[H_4SiO_4]$)		
図-4 鉱物平衡図 ($\log[K^+]/[H^+] \sim \log[H_4SiO_4]$)	-----	38
Fig. - 4 Stability diagram ($\log[K^+]/[H^+] \sim \log[H_4SiO_4]$)		
図-5 鉱物平衡図 ($\log[Mg^{2+}]/[H^+]^2 \sim \log[K^+]/[H^+]$)	-----	39
Fig. - 5 Stability diagram ($\log[Mg^{2+}]/[H^+]^2 \sim \log[K^+]/[H^+]$)		

表目次

表-1 声問層泥岩の鉱物組成(動燃事業団提供)	-----	6
Table - 1 Mineral composition of Koetoi Formation (by PNC)		
表-2 声問層泥岩の地下水水質(動燃事業団提供)	-----	32
Table - 2 Characteristics of ground water of Koetoi Formation (by PNC)		
表-3 鉱物平衡図に用いた活動度	-----	33
Table - 3 Activity values for stability diagrams		
表-4 EQ3NRの計算に使用した平衡定数	-----	43
Table - 4 logK for calculation by EQ3NR		
表-5 平衡定数作成に用いた熱力学データ	-----	48
Table - 5 Thermodynamic data for preparation of logK		
表-6 EQ3NRの計算のため作成した平衡定数	-----	49
Table - 6 Prepared logK for calculation by EQ3NR		
表-7 EQ3NRの計算に使用したデータ	-----	51
Table - 7 Data for calculation by EQ3NR		
表-8 EQ3NRによる計算結果(飽和指数)	-----	52
Table - 8 Results of calculation by EQ3NR(saturation index)		
表-9 アルミニウムイオンと硫酸イオン濃度を変えた場合の EQ3NRによる計算結果(飽和指数)	-----	55
Table - 9 Results of calculation by EQ3NR depending on aluminum and sulfate ion concentration (saturation index)		

1. はじめに

貯蔵工学センター計画における立地環境調査の一環として、声問層を対象に深層ボーリングが実施され、岩石の観察や物理・化学的な性質についての調査試験ならびに原位置での地下水の採取法の検討、採取地下水の分析が行われている。

これらの調査をもとにして声問層の地質的な履歴あるいは現在の状態と今後の変化について、また鉱物や地下水の特性あるいは地下水の循環について把握するため、様々な研究が行われつつある。これら一連の研究から得られる知見はさらに、貯蔵工学センターの設計、そこでの研究課題の抽出、岩盤水理、核種移行、人工バリアーの耐久性や機能など、性能評価に関する検討を行う際の基礎的かつ重要な情報となる。したがって様々な観点から岩石の性質や地下水の性質及び両者の相互作用について検討し、明らかにすることが重要である。またこれらの検討過程から生じる問題点の整理あるいは得られた結果と他の知見とについて、総合的に評価することによって、今後の調査を進めるに当たっての留意点、改良点、研究開発課題などが明らかにされていくと考えられる。

本研究は、鉱物と地下水との相互作用に関する既往の研究の現状を把握して、現在までに得られている声問層泥岩の鉱物・地下水分析結果をもとに、1つの検討方法として、鉱物・地下水分析結果の検討～鉱物平衡による検討～地球化学コードでの計算による検討を行って、声問層泥岩の特徴を明らかにする。さらに今後確認あるいは検討すべき検討課題を明らかにすることを目的として実施した。

*なお本報告では、文献を紹介する際に抜粋した図表は、表-(1)のようにカッコを用いて引用して、本研究に関連した図表と区別した。また鉱物名は文献中のものはそのまま使用し、英名を使用する場合は和名を付記した。なお smectite(スメクタイト)は特別の説明がない場合は、montmorillonite(モンモリロナイト)とする。

2. 声問層泥岩の鉱物組成

2.1 続成作用による鉱物組成の変化

泥質堆積物中に含まれる碎屑性鉱物の主要成分はモンモリロナイト、イライト、緑泥石などの粘土鉱物である。また火山ガラス、珪酸ゲルなどの非晶質物質や石英、長石などの鉱物が含まれている。これらの鉱物の続成作用下における転換は多くの研究者により報告がされている。

青柳らは[1,2]既往の研究から続成作用下における鉱物の転換について、以下のようにまとめている。

粘土鉱物：スメクタイト → イライト / スメクタイト混合層鉱物 → イライト

沸石：火山ガラス → クリノプチロル沸石 → 輝沸石(ヒューランダイト)あるいは方沸石(アナルサイト) → 濁沸石(ローモンタイト)、曹長石(アルバイト)

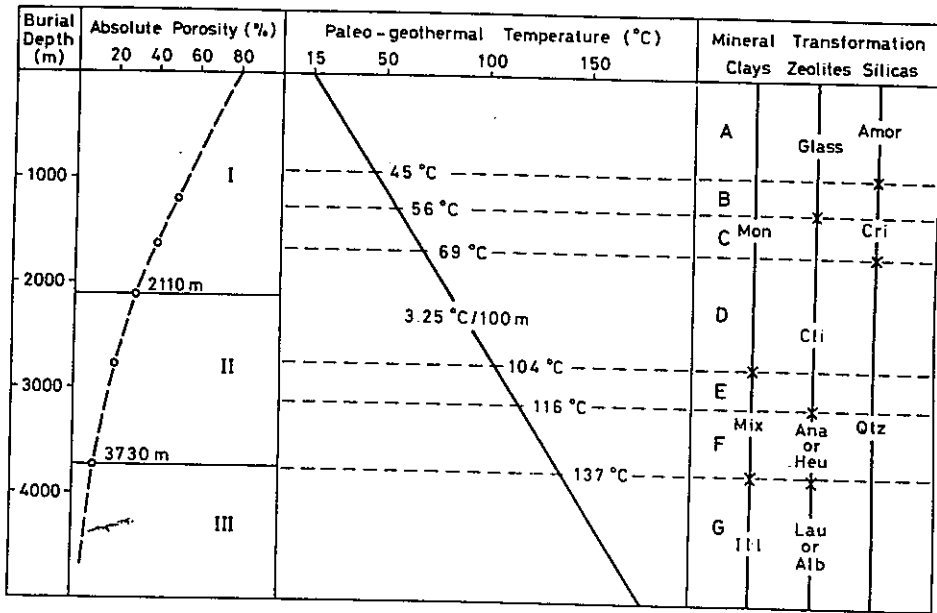
珪酸鉱物：非晶質珪酸 → クリスタバル石 → 石英

炭酸塩鉱物：アラゴナイト → 方解石 → 苦灰石

多くの研究者の報告によると、粘土鉱物・沸石および珪酸鉱物の転換には化学的因子(pH、Eh、イオン種、量)の影響が基本的であるが、圧力、温度、時間の物理的因子も強く影響していることが明らかにされている。とくに、温度はもっとも重要な因子であると考えられ、これらの鉱物の転換の温度条件を解明しようとする試みがなされた。

青柳の検討では図-(1)に示したように、粘土鉱物では、イライト/スメクタイト混合層鉱物の形成に必要な温度は104°C、イライトは137°C、沸石では、クリノプチロル沸石が56°C、輝沸石あるいは方沸石が116°C、濁沸石あるいは曹長石が138°C、珪酸鉱物では、クリスタバル石が45°C、石英が69°Cとしている。

また粒子や孔隙の変化あるいは埋積時間や深度の面より、続成作用をいくつかの段階にわけると、これらの成果をふまえ、泥質岩の孔隙率が30%~10%に意味をもつことに着目して、泥質岩の続成作用の過程を初期圧密段階(孔隙率が80~30%)、後期圧密段階(30~10%)および再結晶段階(10%以下)に区分することを提案している[3]。



Average relationships among burial depth, absolute porosity, paleo-geothermal temperature and transformation of various minerals in the Neogene argillaceous sediments of Japan (after Aoyagi, 1983)

図 - (1)

3段階を簡単にまとめると以下の通りである。

(1) 初期圧密段階

当初の堆積物は、80%の孔隙率を持っているために、海水中に粒子がばらばらに存在している状態と考えられる。堆積物中の粒子は20%を占め、これは碎屑性のアロフェン、モンモリロナイト、イライト、緑泥石、カオリナイト、石英、長石などの鉱物、非晶質珪酸のゲル、火山ガラス、岩片および生物の遺骸などからなる。モンモリロナイトは、海水により十分に膨潤しているため、その底面間隔は20オングストロームに達している。

孔隙率が30%に近づくにしたがい、非晶質珪酸 → 低温型クリストバル石、火山ガラス → クリノプチロル沸石、モンモリロナイトの底面間隔 → 約14オングストロームとなる。

(2) 後期圧密段階

さらに圧密が進むと、堆積物は間隔水および層間水をゆっくりと排出すると共にセメント作用などの影響を受けて岩石化し、孔隙率が約10%になるまで続く。

本邦の白亜系～新第三系泥質岩では、この後期圧密段階における平均埋積深度は1400～2800m、平均地温は55～96°Cである。この時期には、低温型クリストバル石→低温型石英の転換、方解石や苦灰石などのセメント鉱物の生成が活発化する。モンモリロナイト→モンモリロナイト/イライト混合物鉱物の転換が起る時期は、この段階の下限と一致することが多い。モンモリロナイトの層間水はさらに減少を示し、最終的には底面間隔11オングストロームを持つ混合層鉱物の形成にいたる。

(3) 再結晶段階

堆積物は完全に固化した状態の岩石に変わり、自生鉱物や碎屑鉱物よりなる粒子が強固な結合組織を作って圧力を保持するために、埋積荷重圧による間隔水の排出は極めて困難になる。

本邦の泥質岩の場合には、この段階では混合層鉱物→イライトおよびクリノプチロル沸石→方沸石(または輝沸石)→濁沸石(または曹長石)の転換が起る。一般に、モンモリロナイトは存在せず、混合層鉱物およびイライトが主体となる。

以上のことから、続成作用による代表的な鉱物組成の変化をまとめると次の通りである。

<u>初期段階</u>	<u>後期段階</u>	<u>再結晶段階</u>
孔隙率80～30%	孔隙率30～10%	孔隙率10%以下
モンモリロナイト	→モンモリロナイト/イライト混合層鉱物	→イライト
非晶質珪酸	→クリストバル石	→石英
火山ガラス	→クリノプチロル沸石	→輝沸石 →濁沸石

2.2 声問層の鉱物組成

声問層泥岩(深度935~1270m)には珪藻遺骸が含まれており、その他の鉱物成分は同定を行った結果、表-1(動燃事業団より提供)に示した鉱物の含有が確認された。

フィロケイ酸塩では、雲母族、緑泥石、スメクタイトが見られ、特にスメクタイトは14オングストロームのカルシウムタイプと12オングストロームのナトリウムタイプの両者が存在することが明かとなった。テクトケイ酸塩では、シリカ鉱物として石英、長石族として斜長石、沸石族としてクリノプチロライト、ローモンタイト(?)が同定されている。イノケイ酸塩では角閃石が、その他ケイ酸塩以外の鉱物では石膏、イルメナイトがみられた。しかしこれらの鉱物は石英を除き、その量は少ないようである。

声問層の平均的な物理的性質のうちの間隙比(e)は0.5(動燃事業団より提供)であるので、間隙率(n%)は、 $n=(100e/e+1)$ から33%となる。この値は、先にのべた青柳による続成作用の段階区分では初期圧密段階と後期圧密段階の境界に相当する。声問層の粘土鉱物組成はスメクタイト(モンモリロナイト)であり、イライトという表現はない。しかし雲母類という記載があるので、白雲母と同一組成であるイライトがこれに含まれていると考えられる。仮にそのようであれば、後期圧密段階に入っていると考えられる。したがって今後の検討として、スメクタイト/イライト混合層鉱物が存在するの否かについて確認する必要があると考えられる。

シリカ鉱物では石英がみられる。これは単純に再結晶により生じたとは考えにくい。クリストバライトなどの存在についての検討が必要である。

沸石族では、クリノプチロライト沸石や濁沸石がみられることから、比較的後期の圧密段階に相当していると思われる。

以上の鉱物組成から概略的にみると、声問層泥岩は後期圧密段階に入っていると考えられる。しかし声問層の鉱物組成についての深度や間隙率による違い、粘土鉱物に関する詳細な検討あるいは石英の成因などについての今後の検討が必要であると考えられる。

表-1 声問層泥岩の鉱物組成(動燃事業団提供)

Table - 1 Mineral composition of Koetoi Formation (by PNC)

試料 (m)	mi	ch ¹⁾	sm ^{1, 2)} 14 Å	sm ^{1, 2)} 12 Å	cl	?ze ³⁾	qz	pl	gy	il	ho
						9.6Å					
935.10 -935.35	W	W	W	W	W	W	S	M	W	W	W
1030.70 -1031.00	W	W	W	W	W	W	S	M	W	W	W
1115.50 -1115.80	W	W	W	W	W	W	S	M	W	W	W
1208.00 -1208.30	W	W	W	W	W	W	S	M	W	W	—
1268.60 -1268.90	W	W	W	W	W	W	S	M	W	W	W

qz:quartz, pl:plagioclase, mi:mica minerals, ch:chlorite, sm:smectite, gy:gypsum,
il:ilmenite, ho:hornblende, ze:zeolite, cl:clinoptilolite, S:strong, M:medium,
W:weak

1) 水ひ, エチレングリコール処理及び加熱処理にて確認。

2) smectite については14Åはカルシウムtype, 12Åはナトリウムtypeと考えられる。

3) laumontite が推定されるが, 微量であるため同定不可。

3. 声問層泥岩と地下水水質との関係

3.1 泥質岩地帯の地下水水質と地層や水系との関係に関する既往の研究

泥質岩地帯の地下水水質と地層や水系との関係に関して考察した既往の研究について紹介する。その1つとして、青函トンネル掘削時の湧水について水質分析を行い、地球化学的に検討し地層との関連性について検討したものがある[4]。

この研究では、数多くの湧水水質分析データの中から、薬液注入の影響の無い信頼性のあるデータを選び検討して、以下のような5つのパターンの湧水を識別している。

(1) 現代海水直接浸透型湧水

現代海水(津軽海峡海底水で還元性の海水)が直接キレツを通して、あるいはきわめて透水係数の高く、イオン交換能の小さい砂岩性の地層を短い接触時間で浸透してきたと考えられる湧水群である。

本州側の作業坑5km~5.6km、先進導坑4.5km~5.4km付近の地層については、この区間の湧水に、 K^+ 、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} などのイオン濃度の海水相当値からのずれがほとんど認められないので、これらの地層中の微細なキレツ群あるいは透水係数の高い砂岩性の地層が直接海水を誘導しているものと考えられる。

(2) マグネシウム富化海水浸透型湧水

現代海水直接浸透型の第1グループと類似しているが、 Mg^{2+} の濃度が海水相当値よりも高いグループで、通常変質がおこるとすれば、カルシウム富化型になるのが普通なので、マグネシウム富化の原因究明を今後の研究に期待する意味で別のグループとして分類した。

北海道側作業坑3km440m、3km870mの粘土鉱物の主成分であるスメクタイトの陽イオン交換の実験から、この付近のスメクタイトはマグネシウム富化型であることが確認されているが、上記の事実と併せてマグネシウム富化の原因また異状出水の原因についての真の解答を得るにはまだ検討が不十分で今後の研究が必要である。

(3) 硫酸塩豊富型湧水

pHが9以上で総陽イオン量(Σ^+)が約50~100ミリ当量の湧水で、主としてKn-1層あるいは

はその下位層を中心とする玄武岩貫入部の熱水変質地帯に滞水していると思われる深層地下水である。

このグループの湧水が出現した近傍は、熱水変質粘土帯の存在が高い確率で予想され、熱水変質膨張性粘土(スメクタイト)による切羽変状の危険が予測される。

(4) カルシウム富化型高塩化物変質水

Cl^- の濃度が400epm(13000~15000ppm)前後の湧水で、海水の相当値と比較して Ca^{2+} の濃度がきわめて高く(150epm前後)、 K^+ の濃度がきわめて低い(1epm以下)グループで Mg^{2+} の濃度も K^+ の濃度ほどではないがかなり低い(50epm以下)。

北海道側、本州側を通じて玄武岩、安山岩貫入帯と密接に関連していると考えられる。ただ北海道側作業坑のS₆地点は地質断面図上では例外的であり、さらにこの付近の地層との関連を吟味する必要がある。

このグループの湧水は海水起源であるとしても、古代海水が地下水と混合しながら新第三系より長時間を経て変質をうけた変質地下水と考えられる。

(5) $[SO_4^{2-}]/[Cl^-]$ (epm比)が海水相当値よりかなり低い湧水

北海道側ではトンネル掘削がかなり進み、新しい年代の地層に入るにつれて新しいタイプ、すなわち、 $[SO_4^{2-}]/[Cl^-]$ (epm比)が海水相当値よりかなり低い(0.05前後)湧水が出現した。このグループの湧水は作業坑の5km、先進導坑4.5km以遠ではじめて出てきたもので、 Cl^- の濃度は海水相当値にきわめて近いが、 SO_4^{2-} の濃度が低いのが特徴である。

表-(1)にこれらの水質分析結果を、以下にそれぞれのグループとの関係を示す。

現代海水直接浸透型湧水	S8
マグネシウム富化海水浸透型湧水	S9,10,11,12
硫酸塩豊富型湧水	S5
カルシウム富化型高塩化物変質水	S1,2,6
$[SO_4^{2-}]/[Cl^-]$ (epm比)が海水相当値よりかなり低い湧水	S13,17

表-(1) 北海道方湧水水質分析結果

整理 番号	採水位置 (m)	採水位置付近の地質	pH	Na ⁺		K ⁺		Ca ²⁺		Mg ²⁺		Cl ⁻		SO ₄ ²⁻		[SO ₄ ²⁻]/[Cl ⁻] (epm比)
				ppm	epm	ppm	epm	ppm	epm	ppm	epm	ppm	epm	ppm	epm	
I 1	斜坑 422		8.5	1729	75.2	2	0.05	2368	118.4	14	1.2	6450	181.7	565	11.8	0.06
" 2	" 615		8.9	1375	59.8	3	0.08	372	18.6	5	0.4	1940	54.6	630	13.2	0.24
" 3	" 992		9.6	1173	51.0	1	0.03	560	28.0	tr.	-	1450	41.0	1868	39.0	0.95
" 4	" 1117		9.5	950	41.3	3	0.08	504	25.2	5	0.4	500	14.1	2480	51.7	3.67
S 1	作業坑 289	褐灰色泥岩	7.7	8800	382.8	35	0.9	2210	110.3	919	75.9	16550	466.8	2222	46.3	0.10
" 2	" 866	褐灰色泥岩	6.8	5700	247.9	17	0.4	3560	178.0	194	16.0	12650	356.8	1416	29.5	0.08
" 3	" 955	粗粒玄武岩	7.6	6900	300.1	14	0.4	3180	158.7	374	30.9	14650	413.2	1650	34.4	0.08
" 4	" 1511	褐灰色泥岩	7.8	10200	443.7	96	2.5	1390	69.4	846	69.9	17550	495.0	2292	47.7	0.10
" 5	" 2067	灰色泥岩・凝灰岩	6.7	2700	117.4	9	0.2	1143	57.0	61	5.0	4500	126.9	2206	45.9	0.36
" 6	" 2601	褐灰色泥岩	6.2	5800	252.3	22	0.6	2920	145.7	408	33.6	14000	394.8	2020	42.1	0.11
" 7	" 3028	砂質凝灰岩(破碎帯)	6.5	4400	191.3	18	0.5	1323	66.0	34	2.8	8200	231.3	2120	44.1	0.19
" 8	" 3450	安山岩質凝灰岩(破碎帯)	7.2	10300	448.0	320	8.2	640	31.9	1296	106.6	19500	550.0	2560	53.3	0.10
" 9	" 3885	安山岩・火山凝灰岩	7.2	10000	435.0	110	2.8	672	33.5	1586	130.4	19398	547.2	2800	58.3	0.11
" 10	" 4263	凝灰角礫岩・砂質火山凝灰岩	7.6	10000	434.8	150	3.8	672	33.6	1532	126.0	19080	537.5	3000	62.5	0.12
" 11	" 4587	砂質火山凝灰岩(破碎帯)	8.0	9300	404.0	400	10.2	717	35.9	1667	137.0	18868	531.0	2800	58.3	0.11
" 12	" 4868	火山凝灰岩	8.1	8772	381.6	117	3.0	777	38.8	542	44.6	15876	447.8	1800	37.5	0.08
" 13	" 5133	褐色泥岩	8.5	8915	387.8	131	3.4	1134	56.6	327	26.9	16422	463.2	980	20.4	0.04
" 14	" 5462	火山凝灰岩・褐色泥岩	9.2	9359	407.1	161	4.1	945	47.1	718	59.1	17170	484.3	2440	50.8	0.10
" 15	" 5700	褐色泥岩	8.1	8982	390.7	209	5.3	672	33.5	680	56.0	16362	461.6	2160	45.0	0.10
" 16	" 6034	褐色泥岩	7.6	10244	445.6	204	5.2	714	35.6	907	74.6	18036	508.8	2040	42.5	0.08
" 17	" 6212	砂質泥岩	7.1	9624	418.6	368	9.4	336	16.8	832	68.4	20412	575.8	1240	25.8	0.04
海水			8.4	11000	478.3	430	11.0	390	19.5	1272	104.7	19560	552.0	2520	52.4	0.09

2つめは、地すべりがよく起きる第三紀層の軟質岩について、そこで得られた地下水の水質を分析し、地すべり地域内での地下水の区分と地下水の流下経路を検討した研究である[5]。対象地域は福島県一ツ坪田地すべり地帯で、基盤岩は砂岩と泥岩の互層と凝灰岩などで、第三系中新統上部の布沢層と称されている。

水質分析の結果は表-(2)に示したとおりである。その結果をもとに、図-(2)のようなトリニダイアグラムおよびパターンダイアグラムにて表現し、本地質の水質は以下の通り大きく4つのグループに区分されることがわかった。

(1)Aグループ…赤張沢水系

トリニダイアグラムにおいて中間的組成に属しており、一般的な地下水の性質を有している。赤張沢(St-13、St-14)→断裂帯(St-10)→地すべりブロック内(BV-1、2)に連なる一連のパターンダイアグラムの明瞭な一致を示すと共に、上部から下部へ HCO_3^- の増加ならびに $\text{Ca}^{2+} < \text{Na}^+$ の傾向(同一経路内の滞留時間による組成変化)が認められている。したがって、当グループは赤張沢から下部平坦面に流入し、土石流堆積物ならびに旧河床堆積物を經由して地すべりブロック内に至る地下水に該当するものと考えられる。

(2)Bグループ…藤沢水系

藤沢から扇状地性堆積物を經由して地すべりブロック内に流入している地下水と考えられ、St-1、St-4がこれに該当している。水質は中間的な組成を示しているものの、アルカリ非炭酸塩に近く、若干の鉱泉による汚染が考えられる。

(3)Cグループ…鉱泉に汚染された水系

アルカリ非炭酸塩の領域に属する地下水で鉱泉の影響を強く蒙っている。St-2、St-5、St-6、St-7、St-8の各地点がこれに属しており、その流動経路は、上部緩斜面のほぼ中央部を通り、地すべりブロック上部域に至る。

(4)Dグループ…混合した地下水

A、B、Cグループのほぼ中間域に属しており、これらの混合した地下水と考えられる。St-3、St-9、St-12がこれに属する。

表-(2) 水質分析結果一覧表

単 位	pH	電気伝導度 μh/cm	水温 °C	Na ⁺ PPM	K ⁺ PPM	Ca ²⁺ PPM	Mg ²⁺ PPM	Cl ⁻ PPM	SO ₄ ²⁻ PPM	SiO ₂ ²⁺ PPM	Mアルカリ度 meg/l	総硬度 PPM
St- 1	6.7	71	10.4	3.0	0.18	2.0	1.0	9.5	2.7	38	0.19	9.0
2	6.7	72	10.4	2.8	0.17	1.2	0.5	4.6	1.5	31	0.16	5.2
3	6.6	80	12.5	2.5	0.17	1.0	0.9	5.0	1.5	33	0.16	6.4
4	6.0	60	13.2	2.0	0.14	0.9	0.8	5.8	3.0	24	0.10	5.4
5	6.0	68	13.6	2.8	0.18	1.1	0.7	6.6	11.0	23	0.15	5.8
6	6.4	61	11.0	2.5	0.15	0.7	0.5	4.1	4.8	34	0.11	4.0
7	6.3	73	13.4	2.5	0.14	0.8	0.7	4.3	3.4	33	0.12	4.8
8	6.0	69	13.2	2.5	0.15	1.0	0.5	6.2	2.1	25	0.12	4.6
9	6.4	77	12.5	2.5	0.15	1.3	0.9	5.0	1.5	23	0.13	7.0
10	6.2	77	13.4	6.0	0.13	0.9	0.4	4.0	1.1	21	0.20	3.8
11	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
12	6.0	69	12.6	2.3	0.14	1.1	0.7	4.6	2.1	23	0.12	5.6
13	6.7	76	10.7	2.5	0.16	1.2	0.5	3.9	0.55	29	0.20	5.0
14	6.7	66	10.5	2.7	0.16	1.1	0.6	4.8	0.55	30	0.17	5.2
BV-1 孔	6.3	80	14.6	6.0	0.14	1.2	0.6	5.8	1.1	16	0.20	5.6
BV-2 孔	6.5	84	15.1	8.0	0.09	1.5	0.7	4.7	1.50	36	0.32	6.8

したがって、それら水質区分ならびにその分布形態(水塊区分)から、地すべりブロックに流入している地下水流下経路として次の3系統が推定される。

- (1) 赤張沢 (St-13、14) → 土石流・旧河床堆積物 → 地すべりブロック (St-10、BV-1、2)
- (2) 藤沢 (St-1) → 扇状地堆積物 → 地すべりブロック
- (3) 上部緩斜面 (St-6 → 7 → 8) → 地すべりブロック

なお、(1)~(3)の3経路のうち、赤張沢を供給源とする地下水系は、水質組成的に安定しており、かつ地すべりブロックに近づく程、溶存成分が増大しているところから、地すべりブロックへ供給されている地下水の主流と考えられる。

また当地区の地下水は、 Na^+ 、 Cl^- 、および HCO_3^{2-} イオンの濃度が高く、とくに地すべりブロック内のSt-10、BV-1、およびBV-2地点では、 Ca^{2+} と Na^+ の当量比($\text{Ca}^{2+}/\text{Na}^+$)が小さくなっていることが判明した。

以上の研究は、ある地域で得られる地層の情報と地下水の水質とについて関係づけたものである。声問層では、1ボーリング孔の2深度(約800mと1000m)の情報只得られているだけなので限界がある。今後の同層の深度ごとの地下水組成の違いあるいはその上部の勇知層、更別層についての、地層と地下水との比較検討などにより同様の研究成果が得られると考えられる。

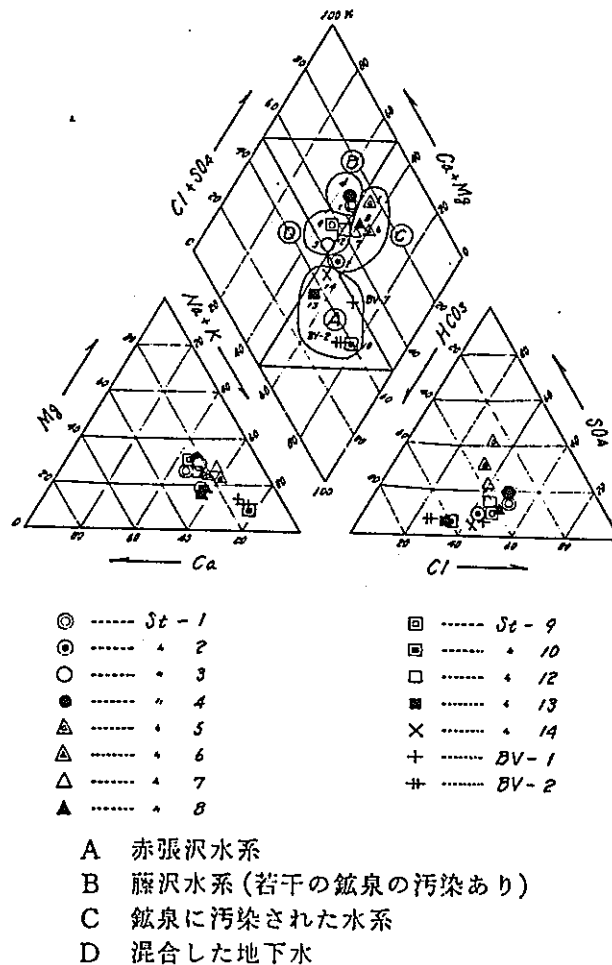


図 - (2) トリリニャーダイアグラム

3.2 地下水水質と鉱物平衡

3.2.1 鉱物平衡を理解するための熱力学的アプローチについて[6]

鉱物平衡を理解するための熱力学的なアプローチは、鉱物の安定性の予測、溶液濃度を支配しているメカニズムの理解、重要な実験パラメーターの決定に大いに役立つと考えられる。熱力学データを利用することにより、成分の地球化学的作用を理解するための研究が一段と進むと考えられるが、熱力学データの正確さがさらに重要な問題となってくる。

鉱物の変化は多くの研究者により長年にわたって研究されてきたが、入手できる情報のほとんどは実験的なものが主体であり、量的な予測に利用することができない。いくつかの例外を除くと、鉱物が存在する環境が鉱物が生成された環境からかけ離れるほど、その鉱物は不安定となる傾向がある。Goldich 図-(3)に示したように、多くのデータを一般化することにより得た鉱物の安定系列によってもこの傾向は確認でき、溶液中で最も不安定な鉱物はマグマが冷却する時に最初に結晶し、最も安定な鉱物は最後に結晶する。しかし実際の鉱物の風化には、溶解速度が風化環境の性質に大きく左右される、この安定系列において風化環境を考慮していないこと、また鉱物の風化で重要な一次鉱物の風化産物である二次鉱物についての考慮がされていないことが問題である。

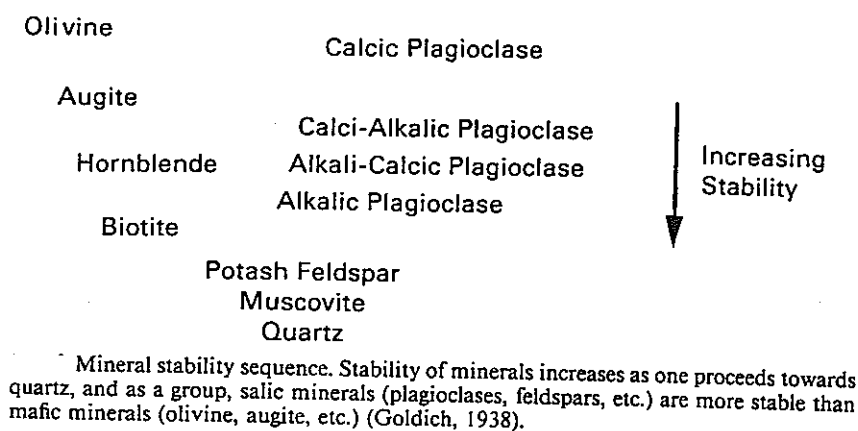


図 - (3)

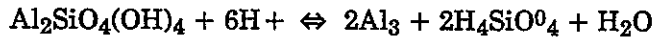
またさらに、多くの研究者により様々な岩石や鉱物の風化系列が確認され、実験的風化系列が表されている。鉱物の生成および風化は、組成、膨張係数、へき開、結晶にもともと存在していた欠陥、硬度および表面の性状に影響される。さらに外因として、環境の物理的、生物学的および化学的条件(酸化・還元、水和作用、加水分解、pH、キレート生成、陽イオン交換、炭酸化作用)が作用する。しかしながら、これらパラメーターは定量的に表わされていないため、鉱物の生成速度や風化系列を予測することはできないので、実験的風化系列の応用には限度がある。

しかし風化系列や風化速度を把握することは重要である。一次鉱物の生成速度や粘土鉱物の生成速度は非常におそく、その変化を観察することはできないが、サンプルを鉱物学的に分析し、その分布を調べることは可能である。微量成分や有害成分についてみた場合、地下水中の成分濃度が鉱物生成のタイプや風化系列により支配されることもあるので、鉱物生成のタイプや系列を把握するには非常に重要である。また、廃棄物の増加により生成環境が変化した場合や、長い半減期をもつ高放射性物質を処理するときなど数百万年単位の長期予測が必要な場合など、鉱物の風化系列の予測が必要となる。

鉱物の ΔG_f° は組成、結晶性、化学結合の性質などに依存し、また正確な環境については、構成イオンの活動度をパラメーターとして定量化できる。したがって、これら熱力学的データは鉱物の生成および生成の予測、鉱物風化系列の予測に有用である。また、その速度は多くの物理的および化学的パラメーターの関数として表わされるので、実験的風化系列の場合と同様に、生成速度を熱力学データで予測することができない。しかし鉱物の化学的性質に関係する環境やパラメーターを定量化できる点において、熱力学的アプローチは実験的方法よりも優れているといえる。

ほとんどの鉱物は一つ以上の共通成分をもっているが、すべての鉱物が平衡状態にあるとは限らない。一般に、共通の成分をもつグループ間で、各鉱物は限られた溶液組成の範囲内で安定(溶解性が低)である。したがって、いくつかの鉱物、例えばギブサイト、カオリナイト、モンモリロナイト、非結晶シリカなどの安定性から考えられる、ごく限られた範囲の溶液組成を調べることにより、その系を理解することができると考えられている。

鉱物の風化系列または安定系列を示す図の作成に熱力学を用いる方法は、多くの研究者によって試みられている。例として、次にカオリナイトとその溶解相の間の平衡状態での反応を示す。



カオリナイトと H_2O は単位活動度をもっているため、平衡式では無視できる。そこで上の反応式の平衡定数(K)は次のように表せる。

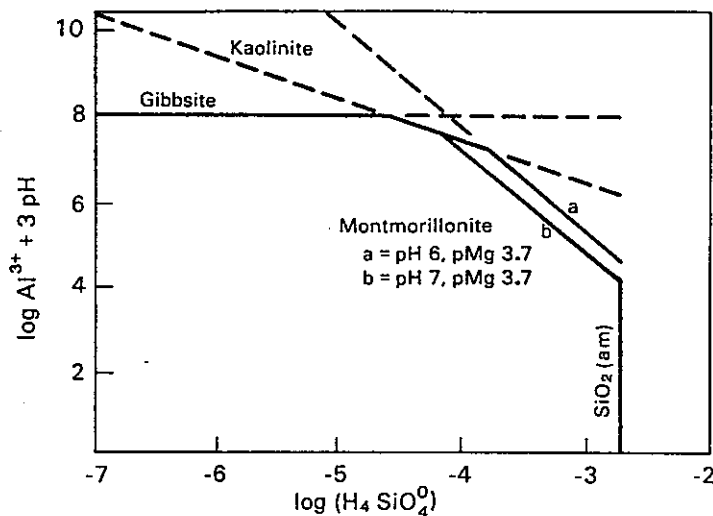
$$K = (\text{Al}^{3+})^2(\text{H}_4\text{SiO}_4)^2 / (\text{H}^+)^6$$

$$\log K = 2 \log (\text{Al}^{3+}) + 2 \log (\text{H}_4\text{SiO}_4) - 6 \log (\text{H}^+)$$

上の式を簡略化し、 $\log K$ に 6.8 ($\log K$ の代表的な値、Kittrick) を代入することにより、

$$\log (\text{Al}^{3+}) + 3\text{pH} = 3.4 - \log (\text{H}_4\text{SiO}_4)$$

が得られる。このように平衡定数を代数的に処理することにより、上記の溶解反応を以下の図-(4)のように表すことができる。同様に、ギブサイト、非結晶シリカおよびモンモリロナイトの溶解度についてもいくつかの仮定条件のもとに代数的に処理して表現している。



Relative solubility of a few clay minerals. Solubility lines for Belle Fourche montmorillonite assume equilibrium with hematite and Na^+ as the exchangeable ion when $\log \text{Na}^+ = -3$. The data for $\text{SiO}_2(\text{am})$ are from Kittrick (1969); for gibbsite, from Kittrick (1966a); for kaolinite, from Kittrick (1966b); and for Belle Fourche montmorillonite, from Kittrick (1971b).

図 - (4)

同じ考え方でいくつかの一次鉱物、二次鉱物についての相対溶解度を表した図を、図-(5)に示す。鉱物の安定性に関する信頼性はこのグラフでの仮定条件および計算に用いられた熱力学的データの精密度に依存することはいうまでもない。このグラフに熱力学的データがそろっている他の鉱物を加えることや、図に含まれていない環境条件にまで拡大することも可能である。このグラフで、ある $H_4SiO_4^0$ 活動度で最小の $\log Al^{3+} + 3pH$ 活動度を示す鉱物が最も安定な鉱物である。たとえば、 $H_4SiO_4^0$ の活動度が-7.0では、安定度の低い鉱物から、Na-glass、K-glass、バーミキュライト、低ソーダ長石(低曹長石)、Ca-glass、方沸石(Ca-glassと同じ)、マイクロクリン(微斜長石)、輝石、モンモリロナイト、灰長石、緑泥石、カオリナイト、ギブサイトの順になる。

熱力学データに基づく安定系列は風化環境の化学的条件(例えば、 $H_4SiO_4^0$ 活動度、pH、他のイオンの活動度)に影響を受ける。逆に、実験的安定系列はそれらの影響を受けずに固定されていて、風化条件の変化は考慮されない。しかしこのような鉱物平衡図から、鉱物の相対的安定性に加えて、これら鉱物の生成に必要な環境条件に関する情報も得ることが可能となると考えられる。

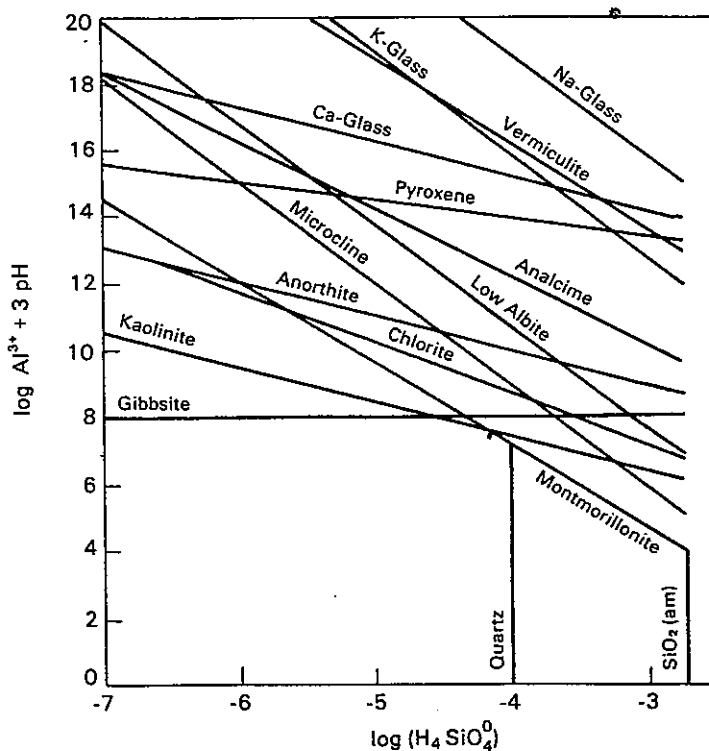


Fig. 4-7. Relative solubility of selected primary and secondary minerals at pH 7.0 when $\log Mg^{2+} = \log Na^+ = \log K^+ = -3$, $\log Ca^{2+} = -2.5$, and $\log Fe^{3+}$ is in equilibrium with hematite. Data for $SiO_2(am)$, gibbsite, kaolinite, and Belle Fourche montmorillonite are from Kittrick (1966a, 1966b, 1969, 1971b), and for all others are from Lindsay (1979).

図 - (5)

3.2.2 地下水水質と鉱物平衡に関する既往の研究

地すべり地帯の特性を知るために、3.2.1に述べた鉱物平衡による方法で、ボーリング孔から採水した地下水の組成や地すべり地域の鉱物組成について検討した例を紹介する[7]。

研究を行った地域の基盤は古生代の石墨千枚岩、石英千枚岩でこれに第三系の安山岩で分断された蛇紋岩が進入している。その北東には新第三系の堆積岩が分布しており、第三系の地すべり地帯に属すると言われている。

得られた水質について、キーダイヤグラムによる整理を行った結果、地下水水質は淡水型で、 $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$ または $\text{Mg}(\text{HCO}_3)_2$ を主成分としていることが明らかにされている。

図-(6)は、粘土鉱物の安定領域を Ca^{2+} 、 H^+ 、 H_4SiO_4 の濃度関数として表わしたものである。当地すべり地の湧水、表流水、鉛直ボーリング孔水のいずれも、カオリナイトの安定領域内にプロットされているが、集水井の掘さく時に採取した粘土のX線回折によるとモンモリロナイトが同定された。

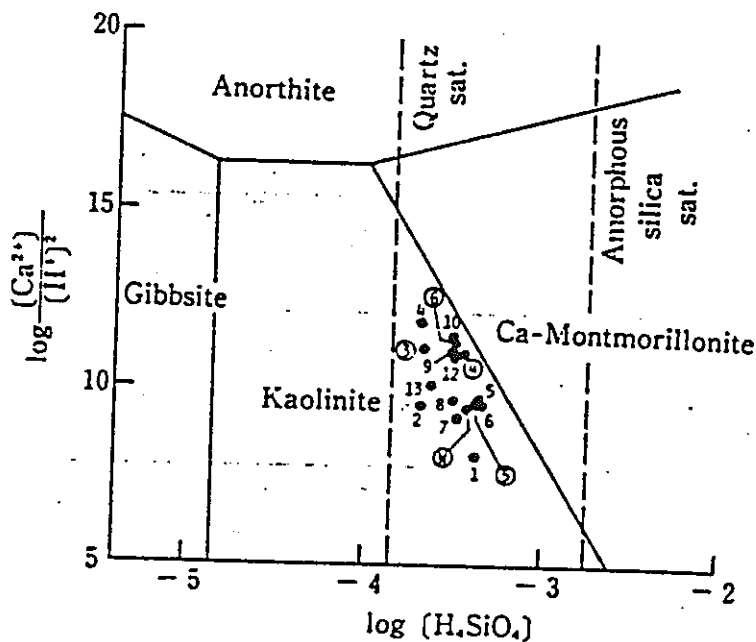
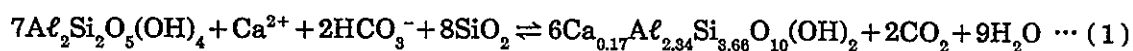


図-(6) 各粘土鉱物の安定領域図 (25°C, 1 気圧)

以上のことから当地すべり地内の粘土鉱物として、少なくともカオリナイトとモンモンリロナイトが共存していることが推測される。そこで、いま当地すべり地の水がカオリナイトとモンモンリロナイトと間で平衡状態になっているとすれば、その反応式は次のように書ける。



また、 CO_2 と H_2O との間に平衡関係が成立すれば、



となる。

(2)式を(1)式に代入し、水、固体の活動度を1とし、また溶存成分の活動度係数を1とすれば、

$$\log [Ca^{2+}] + 8\log [SiO_2] + 2pH = \text{Const.} \cdots \cdots (3)$$

となる。ただし、ここで[]はモル濃度を表す。

したがって、当地すべり地の水がカオリナイトとモンモンリロナイトとでは平衡関係が成立しているかどうかは、(3)式の左辺が一定になっているかどうかを検討すればよいことになる。

この関係を検討するために(3)式の左辺の定数項を縦軸に、 HCO_3^- 濃度を横軸にとり図-(7)に示した。図から明らかなように HCO_3^- 濃度がおおよそ70mg/l以上からは平衡状態に達していることがわかる。また造岩鉱物が CO_2 を含む水と反応すると、 HCO_3^- がおおよそ70mg/lまではカオリナイトを生成し、それ以上の値からはCa-モンモンリロナイトが生成されることが示唆された。このことは地すべりを起しやすい粘土(モンモンリロナイト系粘土)の生成条件とみることもでき、上記の水と鉱物との平衡論的な取り扱いは、地すべり現象を解明するのに重要な概念となるものと考えている。

次に、水質から粘土鉱物の生産量の推定を試みている。当地すべり側斜面の粘土鉱物の生産量を推計するためには、地下水の流量の値が必要であるので、実測値から流出率を求め、その値を用いて地すべり側斜面の地下水の流量の推定を行うことにする。推定では年間の地

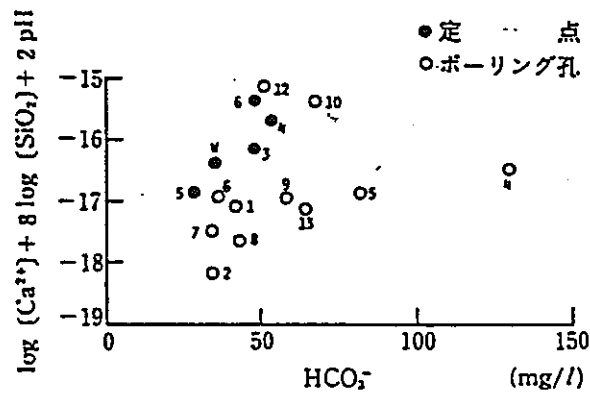


図 - (7) HCO₃⁻と log [Ca²⁺] + 8 log [SiO₂] + 2 pH との関係

下水の流量は $4.04 \times 10^5 \text{m}^3$ となる。

ところで、当地すべり地の造岩鉱物は斜長石、黒雲母、苦土カンラン石および石英が、また粘土鉱物としてカオリナイトとモンモリロナイトが、それぞれ卓越しているものとする。一般に斜長石がCO₂を含む水と反応すると、カオリナイトとモンモリロナイトが生成する。黒雲母が同じ系で反応するときには、カオリナイトの生成がみられる。これらの反応式を用いて、当地すべり地の水質からいかなる造岩鉱物がどの程度風化して、カオリナイトおよびモンモリロナイトがどの程度生成されているかを表-(3)に示す。

この計算結果は当地すべり地の地下水1ℓ当りの値として算出されているので、地下水の1年間の流量をこの計算値に乗じれば、1年間当りのこれらの物質の流出量になる。このようにして計算した結果を表-(4)に示す。当地すべり地では年36.6トン(105g/m²/y)の造岩鉱物が風化して、年10.9トン(31.1g/m²/y)のカオリナイトと12.7トン(36.4g/m²/y)のモンモリロナイトが生成されたことになる。

以上の研究成果は鉱物平衡図を用いて、現在の鉱物組成と比較検討して粘土鉱物の生成過程を把握し、その生成量の推定を行ったものである。したがってこのように鉱物平衡図を使用し得られた知見は非常に重要な情報となることが明らかである。しかしこれらの鉱物平衡図には、いくつかの仮定条件が含まれているので、よりその地域の正確な情報とするには、多くのデータを用いて検討し、確認することが重要と考えられる。

表 - (3)

地下水水質と風化生成物の逆反応による造岩鉱物の再形成

	濃 度 (moles/liter) × 10 ⁴							
	Na ⁺	K ⁺	Mg ²⁺	Ca ²⁺	SiO ₂	HCO ₃ ⁻	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻
地下水	2.77	0.10	1.37	1.57	3.48	6.64	1.44	0.43
降水	0.06	0.05	0.04	0.04	0.00	0.02	0.08	0.03
地下水 - 降水	2.71	0.05	1.33	1.53	3.48	6.62	1.36	0.40
Cl ⁻ =Na ⁺ , SO ₄ ²⁻ =Ca ²⁺ とする	1.35	0.05	1.33	1.13	3.48	6.62	0	0
カオリナイト → 斜長石 (1)	0.67	0.05	1.33	0.45	2.12	4.58	0	0
モンモリロナイト → 斜長石 (2)	0	0.05	1.33	-0.08	1.91	3.71	0	0
カオリナイト → 黒雲母 (3)	0	0	1.18	-0.08	1.81	3.36	0	0
苔土カンラン石の分解 (4)	0	0	0	-0.08	1.22	1.00	0	0
石英の溶解 (5)	0	0	0	-0.08	0	1.00	0	0
残 余	0	0	0	-0.08	0	1.00	0	0

(注) 反応式

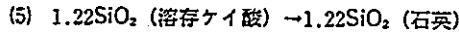
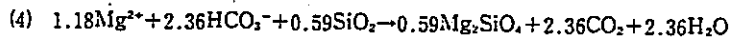
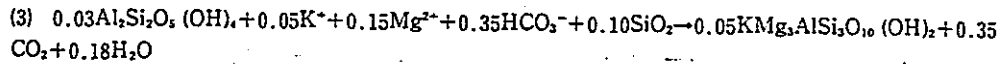
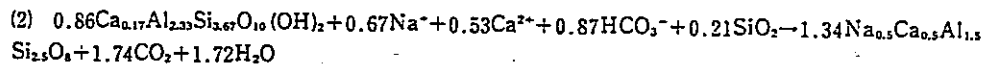
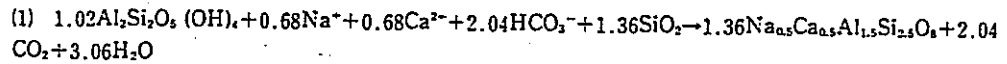


表 - (4)

年間に生成される粘土鉱物量

斜 長 石	14.8	→	カオリナイト	10.6
	(42.4)			(30.4)
	14.6	→	モンモリロナイト	12.7
	(41.8)			(36.4)
黒 雲 母	0.84	→	カオリナイト	0.26
	(2.4)			(0.74)
苔土カンラン石	3.35			
	(9.62)			
石 英	2.96			
	(8.51)			
計	36.55			23.56
	(104.7)			(67.5)

(注) 単位はtons/year, カッコ内g/m²/year

3.3 地球化学コードを用いた鉱物の安定性の検討について

3.3.1 地球化学コードについて

研究対象の系が複雑でない場合、系に関する適切な仮説を立てることは可能である。しかし、対象の系が複雑である場合、例えば沈澱/溶解、吸着/脱着反応に支配される多種のイオンを含んだりする系では、溶解度を支配する固相やイオンの種類別の濃度や割合に関する基礎的な情報、言い換えれば目安が地球化学コードから得られると考えられる。

しかし、現在利用できる鉱物やイオンの数は、必要な熱力学的データが存在しないかあるいは質的に問題があるという理由から非常に限定され、使用されていても信頼性も少ない場合がある。さらに、地球化学コードによる算出方法には、活動度係数式が不適切あるいは不正確であったり、地質学的环境を正確に盛り込めないために、いくつか仮定が含まれていることなどの弱点がある。

こうした計算プログラムの信頼性には多少の問題が当然残るが、イオン種の分布や鉱物の安定性に関する最初の情報を得て、それを参考にしてその他の知見と合わせて考察するには有用な方法であると考えられる。すなわち、地球化学コードから導かれたいくつかの知見の信頼性を確認するため、フィールドでの鉱物分布の調査や鉱物平衡、実験的な検討などの研究と組合せ総合的に検討することによって、鉱物の安定性に関する知見の信頼性が増し、本分野の研究が発展すると考えられる。

表-(5)に、いくつかの地球化学コードのもつキャパビリティを示す。また次項に地球化学コードを使用し、鉱物の安定性について検討を行った既往の研究について紹介する。次節においては、鉱物種のデータベースが比較的充実している地球化学コードであるEQ3NRを使用して、声問層の地下水と鉱物組成について検討を行った結果について述べる。

表 - (5)

Capability of selected geochemical codes (after Kincaid et al., 1984, and personal communication with J.R. Morrey, Battelle, Pacific Northwest Lab., 23 May 1984).

Criterion	GEOCHEM (Sposito & Mattigod, 1980)	REDEQL (UMD Harriss et al., 1983)	MINTEQ (Felmy et al., 1983)	PHREEQE (Parkhurst et al., 1980)	EQUILIB (Morrey, 1978)	EQ3/EQ6 (Wolery, 1979)	SAIS (Fardy & Sylva, 1978)	SOLMNEQ (Kharaka & Barnes, 1973)	CHEMIST (Deland, 1967)
Number of elements	36 (94)	50	32	19 (26)	26		10	25	
Aqueous speciation									
Number of ligands/species	68	30/750	16/373	8/120	186	~20	10	162	(169)
Number of redox species	48 (60)	20	22	6	20		(200)	10	Variable
Activity-coefficient correction	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	No	Yes	No
Calculation of pH	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	No	No	No
Adsorption									
Model	†	‡	5 models§	ion ex- change only	None	None	None	None	None
Precipitation/Dissolution									
Number of minerals	~500	110	238	24	200	250	None	158	None
Quantitative mass transfer	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	No	No	No
Automatic selection of minerals	Yes	Yes	Yes	No	Yes	Yes	No	No	No
Gas generation									
Oxygen	Yes	No	Yes	Yes	Yes	Yes	No	No	No
Carbon dioxide	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	No	Yes	No
Code structure									
Modularity language	FORTRAN IVG	FORTRAN IV	FORTRAN IV	FORTRAN IVH	FORTRAN IV	FORTRAN IV	FORTRAN H	PL/1	FORTRAN

Note: () = maximum.

† James and Healy, 1972.

‡ Schindler et al., 1976; Hohl and Stumm, 1976; Vuceta, 1976.

§ The 5 models are activity Kd, activity Langmuir, simple ion exchange, electrical double layer, and triple layer.

3.3.2 地球化学コードを使用した既往の研究

ここでは地下水の水質と鉱物平衡との関係についてさらに地球化学コードを使用して検討した既往研究について紹介し、声問層泥岩についての検討の参考とする。

ここで紹介する文献は、カリフォルニア州サクラメント溪谷の地下水に関するの地球化学的な研究[8]である。

Fogelman, Fogelman, Rockwellらがが発表した水質分析から 271 例を選択し、WATEQFを使用して飽和指数を算出した。表-(6)に20°C(サクラメント溪谷での地下水の平均温度)での対数平衡定数に沿って鉱物相を選択し、それに対する飽和指数の平均値、最小値、最大値を示した。

多くの鉱物、例えば、長石とモンモリロナイトなどは、化学組成にばらつきがあるが、ここでは典型的な鉱物相での飽和係数を算出した。したがって、これらの鉱物の安定性を推定することは、実際の状態に近似した状態を推定するにすぎないが、どのようなタイプの反応が起こりうるのかを示唆するには有効な手段であると考ええる。

表-(6)

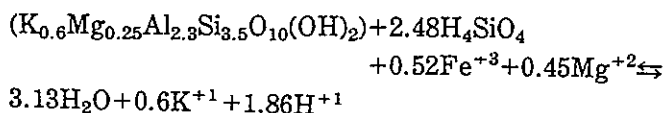
—Mean, minimum, and maximum saturation indices in Sacramento Valley ground water for selected mineral phases

Phase ¹	n	² Log K at 20 °C	Saturation index		
			Mean	Minimum	Maximum
Silica glass	271	-3.07	-0.14	-0.58	0.16
Fe(OH) ₃ amorph..	183	4.885	1.31	.62	3.67
Al(OH) ₃ amorph...	153	-31.77	-1.13	-2.32	.03
Gibbsite	153	-32.95	.05	-1.15	1.22
Fluorite	269	-11.02	-2.38	-3.50	-0.10
Hydroxyapatite	270	-59.57	-2.22	-7.57	1.64
Strengite	183	-26.37	-0.61	-2.06	1.05
Calcite	271	-8.45	-0.33	-1.80	.50
Dolomite	271	-16.92	-0.54	-3.37	1.24
Magnesite	271	-8.16	-0.53	-1.96	.43
Adularia	153	-20.96	.22	-1.81	1.66
Albite	153	-18.32	-0.82	-2.93	.47
Anorthite	153	-19.55	-3.27	-5.95	-1.77
Halloysite	153	-33.38	-0.89	-3.76	1.38
Kaolinite	153	-37.52	3.26	.32	5.53
Illite	153	-40.99	2.31	-1.33	4.53
Montmorillonites:					
1. Calcium	153	-45.73	3.40	-0.37	5.84
2. Belle Fouche.	95	³ -34.97	7.49	4.04	9.01
3. Aberdeen	95	³ -29.69	6.69	3.43	8.10
Muscovite	153	-49.94	1.35	-3.12	4.61
Chlorite	153	-91.29	-1.83	-12.11	3.52

¹Chemical formulas for these phases are as written in WATEQF (Plummer and others, 1978.)

²Data from the latest version of WATEQF.

³The log equilibrium constant at 25°C is used because no enthalpy is given in WATEQF.



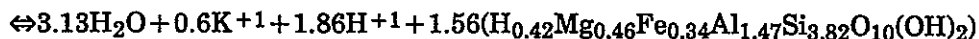
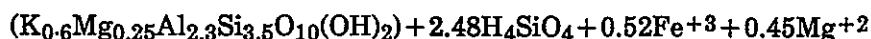
大部分の水は、珪酸ガラスに関しては飽和に近く、堆積物中の火山砕屑物の存在から予想される通りであった。すべての試料において、非晶質水酸化第二鉄が過飽和であったが、それはおそらく、サンプリング中に、0.1マイクロメートルのフィルターを通過することができる小粒子あるいは微粒子状の鉄の溶解度の差を反映しているのであろう。またギブサイトも、ほとんど飽和に近い状態である。

地下水は、炭酸塩鉱物、方解石、ドロマイト及びマグネサイトに関してはほとんど飽和している。鉱物分析を行った井戸から採取したどの堆積物中においても、炭酸塩鉱物が含まれているという記録はない。事実方解石が過飽和である試料がたくさんあるにもかかわらず、二次的な炭酸塩鉱物の生成には実際には限界があるである。

堆積物中に豊富にあるカリ及び曹長石は、サクラメント溪谷の地下水中に平均してほとんど飽和している。これら長石に関して地下水が不飽和である部分は、これらの相の溶解性が乏しいためであろう。地下水試料のすべてにおいて、アノーサイトは不飽和であり、堆積物中にはあまり含まれていない。ハロイサイトは唯一の地下水中では過飽和ではない粘土鉱物である。他のすべての粘土鉱物は、たいていの水から生成し得る。安定性を考える際、一つの相のみが存在する場合が最も安定である。相間の関係は、活動度ダイアグラム(これまで述べてきた鉱物平衡図)を用いて示すことができる。

次に活動度ダイアグラムを用いて、一次鉱物及び二次鉱物間の相関係を示すことにより、水質化学の本来の目的である最も安定な二次相を予測することができる。多くの研究者によって、このような図を用いて、地下水の風化作用を表現され、図を算出する技術が提案されてきた。

二相間の平衡境界を計算した例として、イライト相とモンモリロナイト相間の境界を計算した例を以下に示す。これらの鉱物の化学式にはWATEQFを引用した。イライト、モンモリロナイト間の反応式は以下のように表現される。



相の境界では、この反応のイオン活性度積は、平衡定数(K)に等しいであろうと考え、

$$\frac{[K^{+1}]^{0.6}[H^{+1}]^{1.86}}{[H_4SiO_4]^{2.48}[Fe^{+3}]^{0.52}[Mg^{+2}]^{0.45}} = K$$

括弧は、自由イオン活動度を表し、非理想的水溶液を補正した濃度を示している。対数で書き直すと、活性度は次のような式となる。

$$0.61 \log[K^{+1}]/[H^{+1}] - 0.52 \log[Fe^{+3}]/[H^{+1}]^3 - 0.45 \log[Mg^{+2}]/[H^{+1}]^2 - 2.48 \log[H_4SiO_4] = \log K$$

二次元グラフに、この線をプロットするには、等式の変数を2つに減らさなければならぬ。相図をプロットする際に考慮すべき前提として、次の三点があげられる。(1)固相との平衡を保つことにより、成分の濃度をコントロールする。(2)相遷移過程において固相の成分を維持する。(3)溶液中の種の明確な濃度を指定すること(この研究分野では一般に、それらは平均値を用いている)。

以下においてプロットする際には、自由鉄イオンの活動度を水素イオン活動度の3乗で割った値(活動度商)の対数($\log[Fe^{+3}]/[H^{+1}]^3$)をとり、その値は水酸化鉄の溶解度により 4.885 になるようにコントロールされると仮定し、イライトとモンモリロナイト間の平衡状態では、 $\log[Fe^{+3}]/[H^{+1}]^3$ を水酸化鉄の溶解度がコントロールするとし、 $\log[H_4SiO_4]$ の値は-3.21 とする。これらの仮定のもとに数値を上述の等式に代入すると、イライト、モンモリロナイト間の相境界に対して次のような等式が得られる。

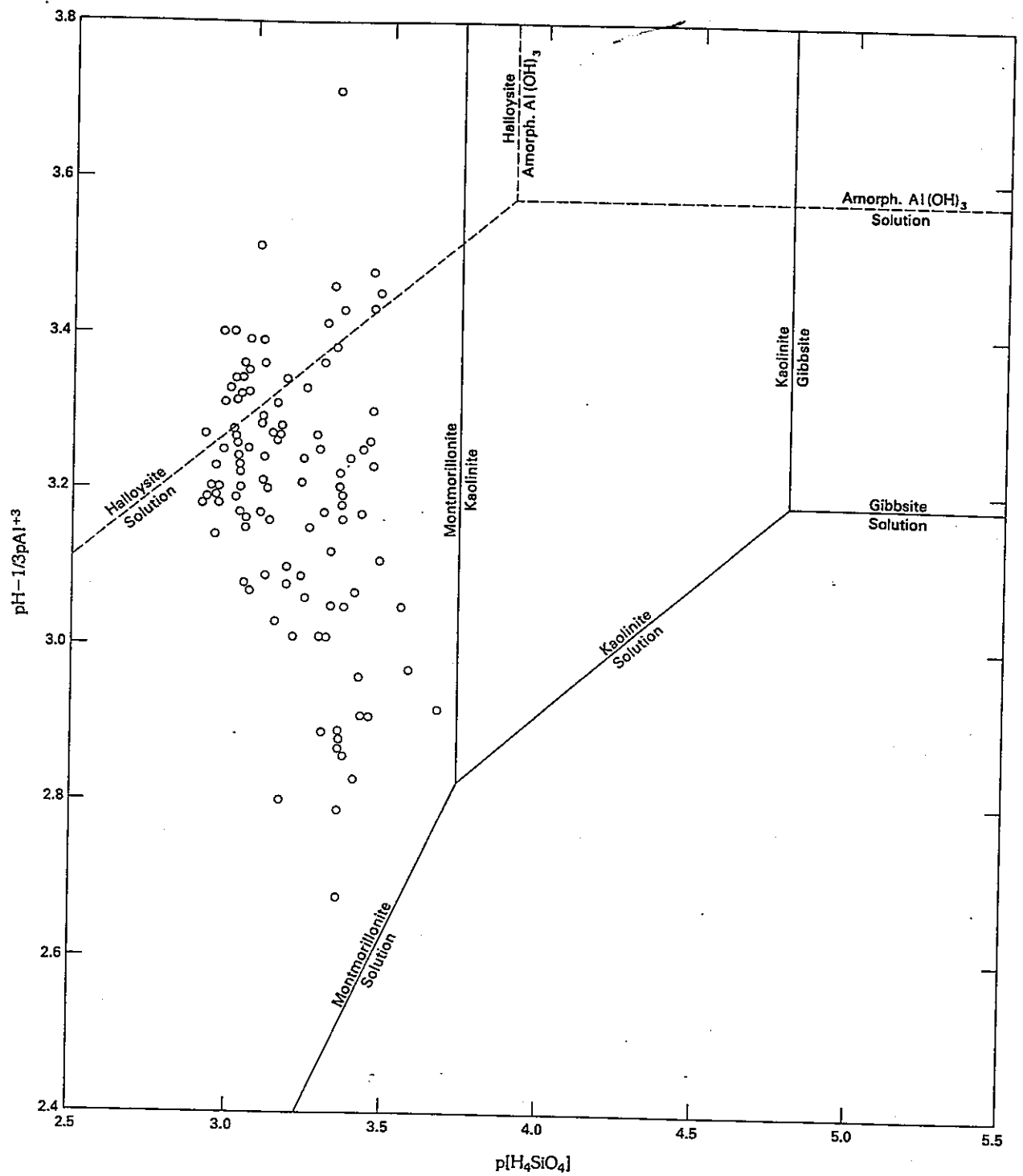
$$\log[K^{+1}]/[H^{+1}] = 0.122 + 0.743 \log[Mg^{+2}]/[H^{+1}]^2$$

MgO-K₂O-Fe₂O₃-Al₂O₃-SiO₂-H₂O系の相関係を説明するために、ここでは、2タイプの図式を紹介する。これらの図式は、従来の説とは異なり準安定相を含んでいない。PacesとBusen-bergによる最近の研究によると、長石の風化過程において初期に形成する固体は、非晶質から結晶性の乏しいタイプのアルミニウムケイ酸塩であり、これは水溶液中では可逆的であろうと考えられる。次には、一般にハロイサイトと呼ばれる準安定アルミニウムケイ酸塩が結晶する。最後には、熱力学的に最も安定な鉱物となる。このような、一次から二次鉱物への生成過程は一般的にはオストワールズ則に従う。オストワールズ則では、系が安定度の小さい状態からより安定度の大きい状態に移っていく際には、最後の最も安定な状態に直接到達することもあるが、一連の中間体を経て最後に最も安定な状態に達することもあると述べている。ハロイサイトもイライトもどちらも、モンモリロナイトまたはカオリナイトに比べて安定ではないにもかかわらず堆積物中に残っている。準安定状態を示す活動度図は、最後に形成されるであろう二次鉱物はもちろんのこと、中間段階をも示している。

以下の図式に含まれる鉱物はすべて、WATEQFからの引用であり、化学式と対数平衡定数もそこから引用している。サクラメント渓谷の粘土鉱物、特にイライトとモンモリロナイトに関する化学的データが得られないため、WATEQFのデータを用いた。そのため、図式中の相境界の位置に多少の不正確さが生じるであろう。このようにモンモリロナイトとイライトに関する熱力学的データに不正確さがある事を考慮すると、鉱物化学の全データ情報をもつてしてもどれだけ状況の解明に役に立つか疑わしい。

図-(8)に、鉱物の安定度分布を $\text{pH}-1/3\text{pAl}+3$ と $\text{p}[\text{H}_4\text{SiO}_4]$ の関数で示しており、ここでpは、 $\text{pH}=-\log[\text{H}^+]$ 、 $\text{pAl}+3=-\log[\text{Al}+3]$ などで用いられているように、 $-\log$ のことである。この、図式は、水溶液から二次鉱物が生成する状態を示している。ここでは、溶液はサクラメント渓谷で観測されたイオン活動度比、及びシリカの活動度平均値を示すと仮定する。アルミニウム対水素の比が小さくシリカの濃度が低い溶液からは固体相は生成しないと考えられる(図-(7)の右下)。アルミニウム対水素の比が高い場合、シリカ濃度が高くなるにつれて、安定な固相はギブサイトからカオリナイトに、さらにモンモリロナイトに変化する。

ハロイサイトと非晶質水酸化アルミニウムの境界は点線で示され、それらが両方とも準安定相である事を強調している。ハロイサイトと平衡にある溶液では、モンモリロナイトとカオリナイトは過飽和であろう。溪谷のすべてのサンプルは、モンモリロナイト安定域にプロットされている。サンプルの10%はハロイサイトが過飽和になっている。



—Phase relations among minerals and aqueous solution in terms of $\text{pH} - \frac{1}{3}\text{pAl}^{+3}$ and $\text{p}[\text{H}_4\text{SiO}_4]$ at 20°C. (NOTE.—The aqueous solution is assumed to have the following ion activity ratios: $\log [\text{Fe}^{+3}]/[\text{H}^{+1}]^3 = 4.885$, $\log [\text{K}^{+1}]/[\text{H}^{+1}] = 2.75$, and $\log [\text{Mg}^{+2}]/[\text{H}^{+1}]^2 = 11.25$.)

☒ - (8)

図-(9)は、鉱物の相安定域を、マグネシウム活動度対水素活動度の2乗の対数活動度比及びカリウム対水素の対数活動度比で示している。相遷移中、アルミニウムは固体相に厳密に保持されていると仮定している。イオン活性度とシリカ活性度についての仮定は、活動度図に関しては前に最初に述べている。

図-(9)は実際には2つの図を重ねており、そのため準安定相であるイライトを示すことができる。もしイライト、モンモリロナイト、正長石の3相を同時に考慮するとイライトは、モンモリロナイト又は正長石に対して不安定である。実線はクロライト(緑泥石)、モンモリロナイト、イライト、カオリナイト間の相関係を表している。これらの鉱物の中で、モンモリロナイトは、サクラメント溪谷の地下水と平衡状態にある最も安定な相である。破線は、正長石、白雲母、イライト間の相関係を示している。これらの3つの鉱物の中で、イライトは、サクラメント溪谷の地下水に接する最も安定な鉱物である。

イライトは、風化に対する抵抗力が強く、井戸19N101W-32Gから得たサンプルにみられるほとんどのイライトは砕岩質である。イライトの中には、一次鉱物の風化で生成したものもある。イライトは、正長石や白雲母から生成するという報告がある。

サクラメント溪谷の、地下水から得た対数活動度は、Aberdeenモンモリロナイトと同じ化学式と安定性をもつ、モンモリロナイトの安定域にプロットされている。溶液中のイオンの活動度比の差によりサクラメント溪谷の、やや組成の異なるモンモリロナイトが作り出され、その中には、最も安定な相をなすものもある。準安定相は、一次鉱物の続成作用過程の中間段階の形状となるか(ハロイサイト)または風化作用に抵抗して準安定相のまま残っているものもある(イライト)と考えられる。

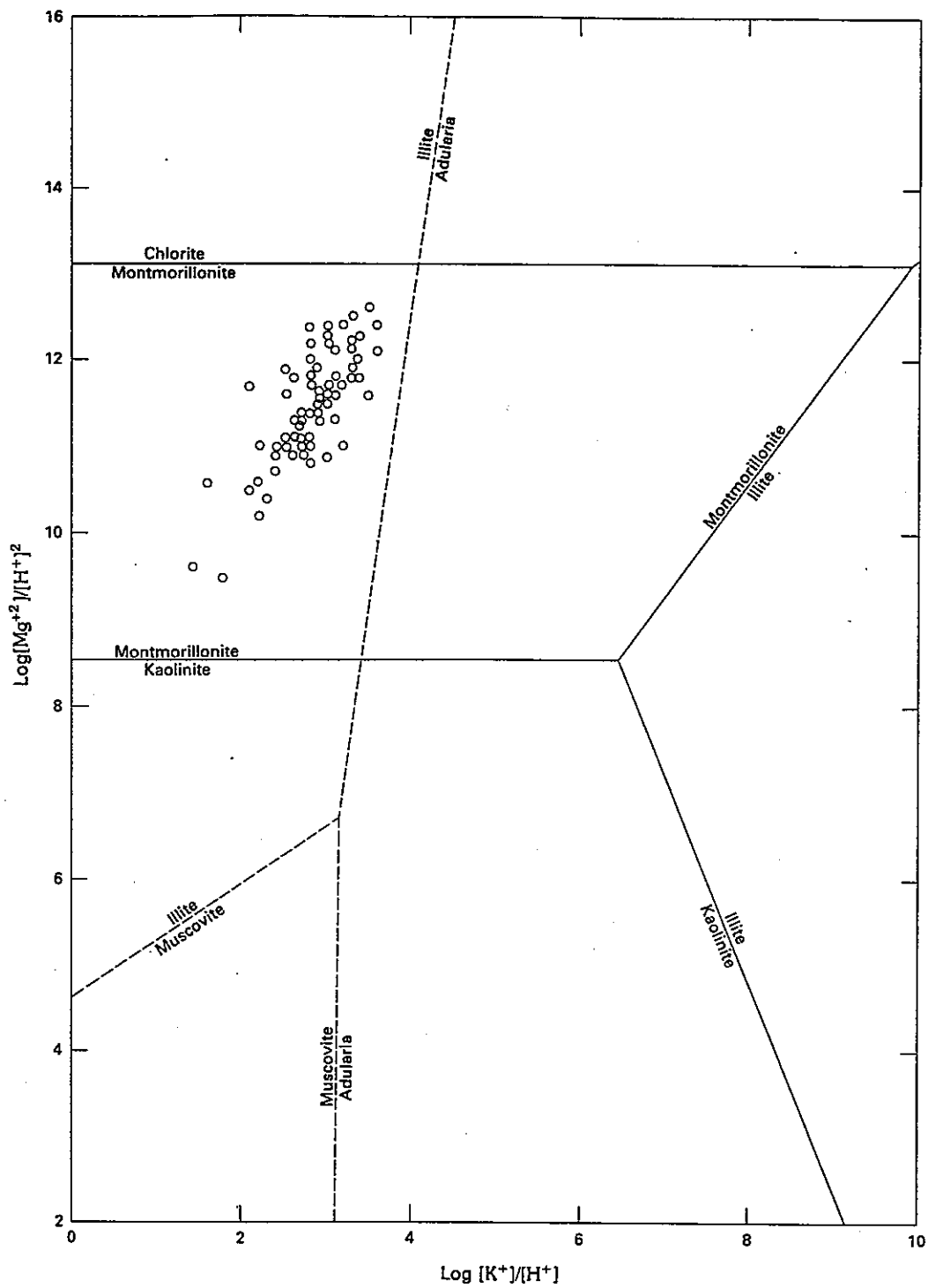


FIGURE 13.—Phase relations among minerals and coexisting aqueous solution in terms of $\log [Mg^{+2}]/[H^{+}]^2$ and $\log [K^{+}]/[H^{+}]$ at 20°C. (NOTE.—Phase relations among chlorite, montmorillonite, illite, and kaolinite are shown by solid lines, and among illite, adularia, and muscovite by dashed lines. The aqueous solution is assumed to have the following activities of dissolved species: $\log [Fe^{+3}]/[H^{+}]^3=4.885$, $\log [H_4SiO_4]=-3.21$.)

☒ - (9)

3.4 声問層泥岩の地下水水質と鉱物平衡について

これまで地下水の水質と鉱物平衡との関係についてみてきたが、本節では声問層泥岩の鉱物平衡からみた鉱物の安定性に関する検討を行った。

声問層泥岩の地下水の分析結果(動燃事業団提供)について表-2に示した。ここで、3月20日から10月14日にかけて採水されたものを総称して1000m地下水(①~⑦)とし、ボーリング孔外管ケーシング水の口もと採水試料を800m地下水(⑧)と便宜的に呼ぶこととした。

1000m地下水の水質は明らかに海水と比較して、ナトリウムイオンと塩素イオン濃度がほぼ海水と同程度であるのに対して、カルシウム、マグネシウム、硫酸イオンなどは鉱物の生成あるいは鉱物とのイオン交換反応により濃度が大きく減少している。

これらのデータから鉱物平衡図にプロットするため、pH、珪素、カリウム、ナトリウム、カルシウム、マグネシウム濃度から、表-3に示したように $\log A\ell^{3+} + 3pH$ 、 $\log[H_4SiO_4]$ 、 $\log[K^+]/[H^+]$ 、 $\log[Na^+]/[H^+]$ 、 $\log[Ca^{2+}]/[H^+]^2$ 、 $\log[Mg^{2+}]/[H^+]^2$ を算出した。算出した値を用いて、図-1~5に示した鉱物平衡図にプロットした。

図-1はいくつかの一次鉱物と二次鉱物について $\log A\ell^{3+} + 3pH$ と $\log[H_4SiO_4]$ との関係から示したものである。800m地下水と1000m地下水のアルミニウムイオン濃度が検出限界以下であるため測定がなされておらずプロットすることができない。しかし $\log[H_4SiO_4]$ の範囲は定まる。1000m地下水は黄色で示した範囲のいずれかにあり、800m地下水は赤線上にある。この図では、ある $\log[H_4SiO_4]$ では、 $\log A\ell^{3+} + 3pH$ の活動度の低いものほど安定である。したがってモンモリロナイト、緑泥石、アルバイト、アノーサイトの順に安定な鉱物である。しかもこれらの鉱物は、ひろい $\log A\ell^{3+} + 3pH$ の活動度の範囲にわたって安定であることがわかる。

シリカ鉱物のうち、非晶質シリカは800m地下水の方がやや安定であることがわかる。

表-2 声問層泥岩の地下水水質(動燃事業団提供)

Table - 2 Characteristics of ground water of Koetoi Formation (by PNC)

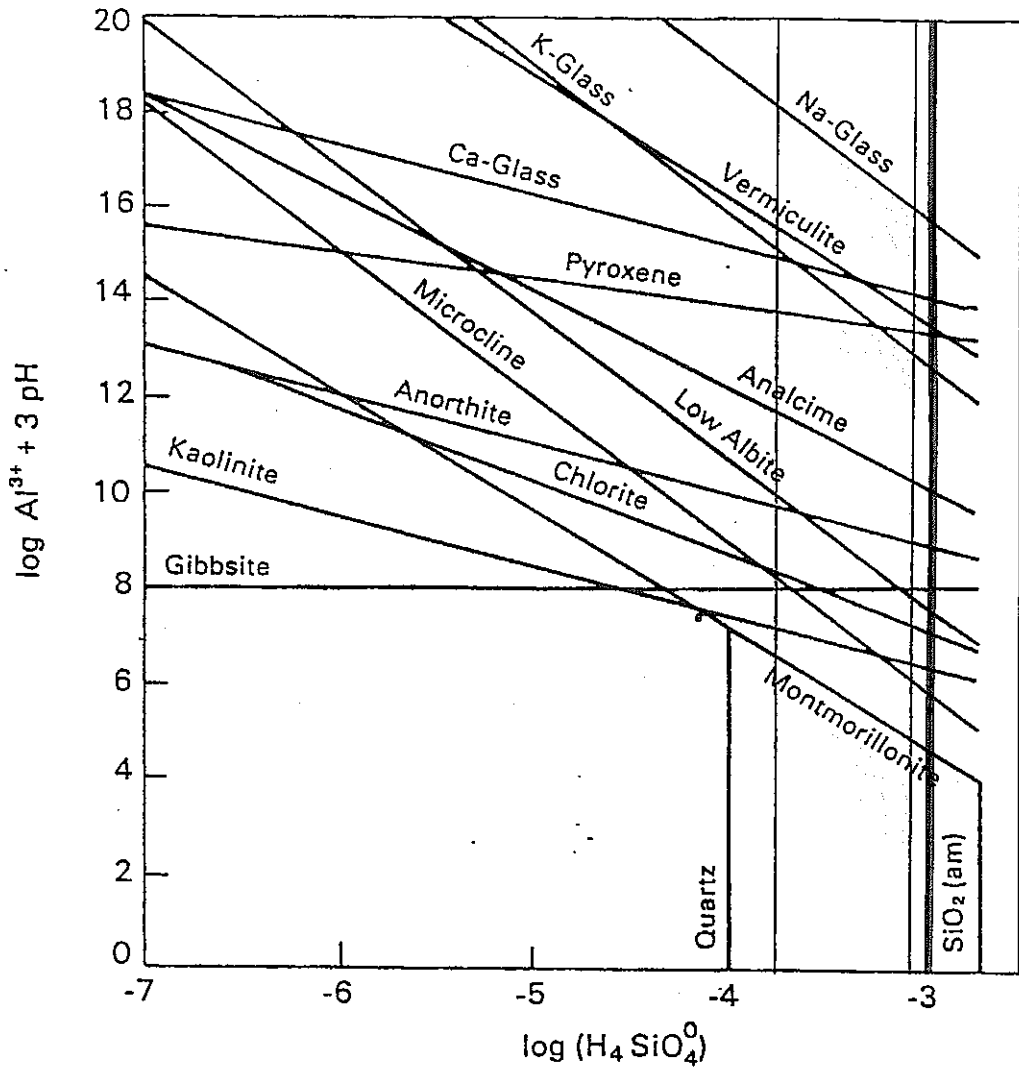
深部ボーリング孔内地下水採水分析結果

測定項目	単位	3月20日	4月3日	9月15日	9月22日	10月1日	10月11日	10月15日	4月3日	備考	
		ボーリング孔内滞留水の口もと採水	2週間で約3,400ℓ湧水させた後のボーリング孔内水口もと採水	採水10ℓ後の原位置採水サンプル	採水524ℓ後の原位置採水サンプル	採水1,145ℓ後の原位置採水サンプル	採水1,736ℓ後の原位置採水サンプル	採水1,900ℓ後の原位置採水サンプル	ボーリング孔外管ケーシング水の口もと採水(地下800m?)		
原位置センサー値	pH	—	—	8.51	8.39	8.36	8.48	8.39	—	検定補正	
	Eh	mV	—	-247	-131	-106	-215	-225	—	ORP 換算	
	EC [at 25°C]	μS/cm	—	—	58,700 [48,700]	58,400 [48,200]	58,100 [48,000]	58,100 [48,000]	58,400 [48,200]	—	
	水温	°C	—	—	34.55	34.57	34.61	34.62	34.59	—	
地上センサー値	pH	—	—	8.81	8.67	8.50	8.43	8.42	—	検定補正	
	Eh	mV	—	+278	-28	-200	-154	-171	—	ORP 換算	
	EC [at 25°C]	μS/cm	—	—	34,000 [38,200]	35,800 [43,700]	35,700 [43,800]	36,000 [43,400]	39,500 [43,100]	—	
	水温	°C	—	—	20.00	16.81	16.63	17.24	21.18	—	
採水サンプル室内測定値	pH	—	8.39	8.47	8.53	8.38	8.28	8.44	8.50	8.33	
	Eh	mV	290	250	157	130	93	193	152	318	
	EC	μS/cm	25,800	31,400	45,000	44,800	44,100	44,500	44,400	1,551	
	溶存酸素	μg/ml	6.90	0.67	1.300	0.940	0.764	1.83	1.05	7.50	
	Si ⁴⁺	"	4.28	8.59	14.2	18.0	20.6	17.2	16.4	30.7	
	Al ³⁺	"	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	
	Mg ²⁺	"	55.1	67.8	74.3	80.9	99.1	102	100	3.08	
	Ca ²⁺	"	15.7	23.8	21.2	33.7	40.7	40.4	35.9	3.65	
	Na ⁺	"	5,750	7,210	10,700	10,700	11,000	11,200	10,800	200	
	K ⁺	"	200	276	421	409	409	383	390	19.0	
	Fe ²⁺	"	6.3	3.80	1.20	0.31	0.13	0.03	0.17	0.68	
	Fe ³⁺	"	ND (<0.2)	ND (<0.2)	0.70	0.15	0.17	0.31	0.13	ND (<0.2)	
	CO ₃ ²⁻	"	312	252	246	168	348	348	396	120	
	HCO ₃ ⁻	"	812	931	1,030	1,090	834	866	744	909	
	SO ₄ ²⁻	"	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	
	SO ₃ ²⁻	"	ND (<2.0)	ND (<2.0)	ND (<2.0)	ND (<2.0)	ND (<2.0)	ND (<2.0)	ND (<2.0)	ND (<2.0)	
	NO ₃ ⁻	"	ND (<5.0)	ND (<5.0)	ND (<5.0)	ND (<5.0)	ND (<5.0)	ND (<5.0)	ND (<5.0)	ND (<5.0)	
	NO ₂ ⁻	"	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	ND (<1.0)	
	PO ₄ ³⁻	"	5.5	6.3	9.2	9.3	8.1	8.1	7.6	4.8	
	F ⁻	"	ND (<0.3)	ND (<0.3)	0.76	ND (<0.3)	ND (<0.3)	ND (<0.3)	ND (<0.3)	ND (<0.3)	
	Cl ⁻	"	8,000	14,000	16,500	16,100	16,100	14,600	14,600	27.2	
	Br ⁻	"	ND (<5.0)	ND (<5.0)	170	170	150	170	160	ND (<5.0)	
	I ⁻	"	34.50	45.5	68.0	71.0	71.0	63.0	63.0	0.31	
D/H	‰	—	-37.9	-22.1	-16.7	-11.2	-10.7	-13.9	-93.3		
¹⁸ O/ ¹⁶ O	‰	—	-3.99	+0.14	+0.99	+0.99	+0.11	+0.11	-12.66		
³ H	TR	—	1.1±0.1	◎	—	◎	—	—	—		
U	μg/ml	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	ND (<0.1)	1.35	1.35	0.58±0.1	0.27以下		
							1.05	1.05	ND (<0.1)		

表-3 鉱物平衡図に用いた活動度

Table - 3 Activity values for stability diagrams

試料名	$\log[A^{3+}]$ 3pH	$\log[H_4SiO_4]$	$\log[K^+]/$ [H ⁺]	$\log[Na^+]/$ [H ⁺]	$\log[Ca^{2+}]/$ [H ⁺] ²	$\log[Mg^{2+}]/$ [H ⁺] ²
①3月20日 ボーリング孔内滞留 水の口もと採水	<19.7	-3.8	6.1	7.8	13.4	14.1
②4月3日 約3,400ℓ湧水後ボー リング孔口もと採水	<20.0	-3.5	6.3	8.0	13.7	14.4
③9月15日 採水10ℓ後の原位置 採水サンプル	<20.1	-3.3	6.5	8.2	13.7	14.5
④9月22日 採水524ℓ後の原位 置採水サンプル	<19.7	-3.2	6.4	8.1	13.7	14.3
⑤10月1日 採水1,145ℓ後の原位 置採水サンプル	<19.6	-3.1	6.4	8.0	13.7	14.3
⑥10月11日 採水1,736ℓ後の原位 置採水サンプル	<20.0	-3.2	6.5	8.2	14.0	14.6
⑦10月15日 採水1,900ℓ後の原位 置採水サンプル	<19.7	-3.2	6.4	8.1	13.7	14.4
⑧4月3日 孔外管ケーシングの 口もと採水	<19.6	-3.0	5.0	6.3	12.6	12.3



*黄色の範囲:1000m地下水、赤線:800m地下水

図-1 鉱物平衡図($\log A\ell^3 + +3pH \sim \log[H_4SiO_4]$)

Fig. - 1 Stability diagram ($\log A\ell^3 + +3pH \sim \log[H_4SiO_4]$)

図-2は $\log[\text{H}_4\text{SiO}_4]$ と $\log[\text{Ca}^{2+}]/[\text{H}^+]^2$ とについて示した図である。1000m地下水はCaバイデライト、カオリナイト、ローモンタイトの3者の境界部に位置し、特に④⑤⑥⑦の試料はローモンタイトの境界に近い。鉱物の同定結果ではゼオライトとしてクリノプチロライトの他にローモンタイトと思われるものが検出されている。したがって鉱物平衡図からみて1000m地下水ではローモンタイトが生成する可能性があると考えられる。

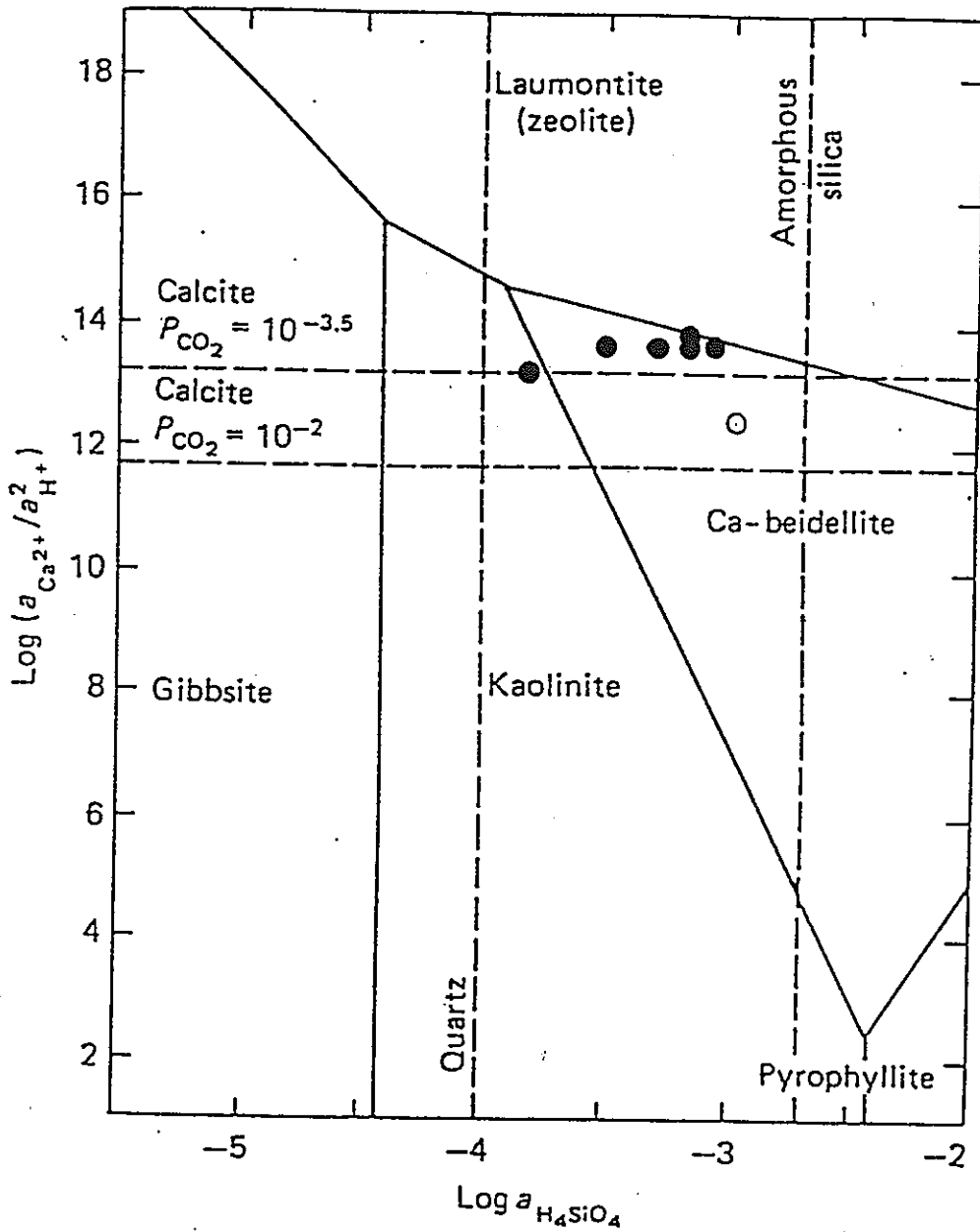
図-3は $\log[\text{H}_4\text{SiO}_4]$ と $\log[\text{Na}^+]/[\text{H}^+]$ とについて示した図である。1000m地下水と800m地下水はNaバイデライトが安定な領域にある。そのなかでも1000m地下水はアルバイトが安定な領域に近いところにプロットされている。このことは、斜長石のうちアルバイトに近い成分の方が安定であることを示しており、声間層泥岩の斜長石はアルバイトに近い成分であると考えられる。

図-4は $\log[\text{H}_4\text{SiO}_4]$ と $\log[\text{K}^+]/[\text{H}^+]$ とについて示した図である。1000m地下水と800m地下水ともにカリ長石が安定な領域にプロットされている。鉱物の同定で確認された雲母類の1つである白雲母(マスコバイト)は安定な領域とはなっていない。

図-5は $\log[\text{K}^+]/[\text{H}^+]$ と $\log[\text{Mg}^{2+}]/[\text{H}^+]^2$ とについて示した図である。1000m地下水はモンモリロナイトよりもさらに緑泥石が安定な領域にプロットされている。800m地下水はモンモリロナイトが安定な領域にプロットされているが、緑泥石は安定でないことが分かる。

以上の鉱物平衡図からみた声間層泥岩の鉱物安定性についてまとめると、以下の通りである。

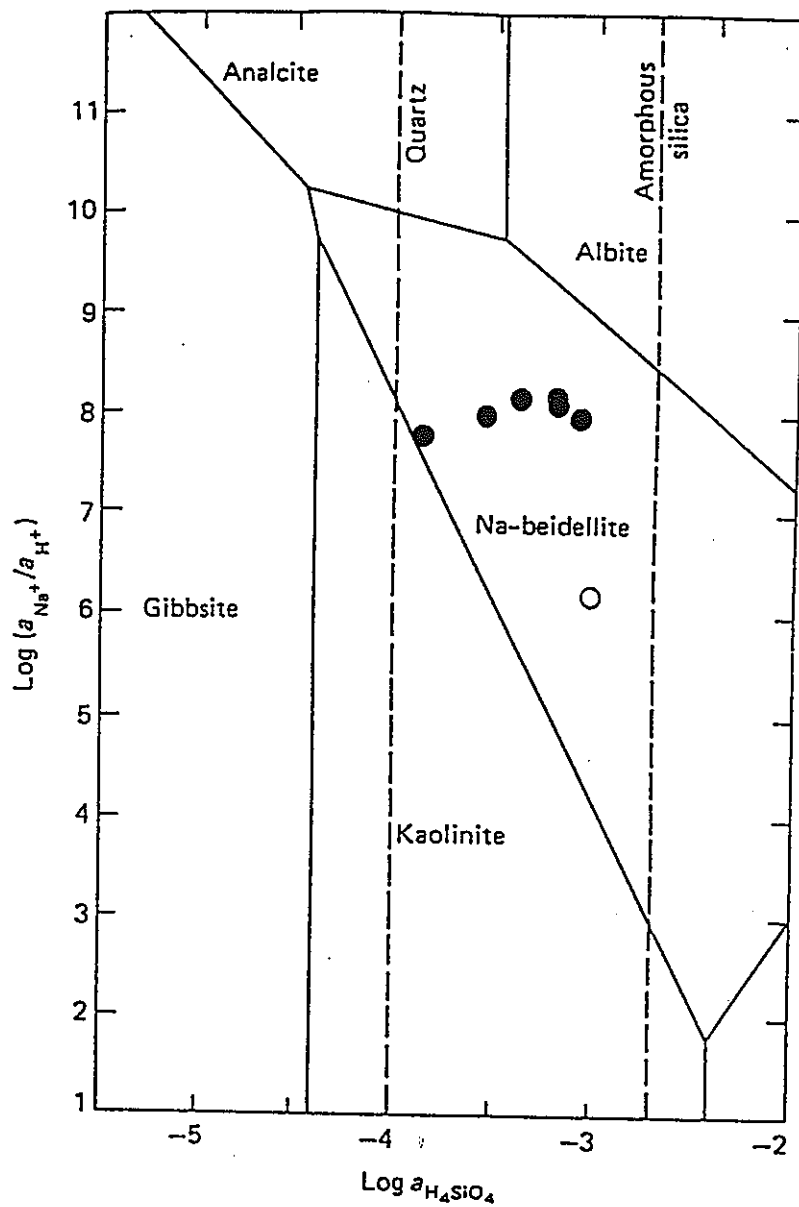
モンモリロナイトは1000m地下水と800m地下水で安定であり、緑泥石は1000地下水で安定である。斜長石はアルバイト成分に近いものが安定であり、ローモンタイトは安定に近く、生成する可能性が考えられる。また800m地下水の方が非晶質シリカが安定である。



*● : 1000m地下水、○ : 800m地下水

図-2 鉱物平衡図($\log[Ca^{2+}]/[H^+]^2 \sim \log[H_4SiO_4]$) [9]

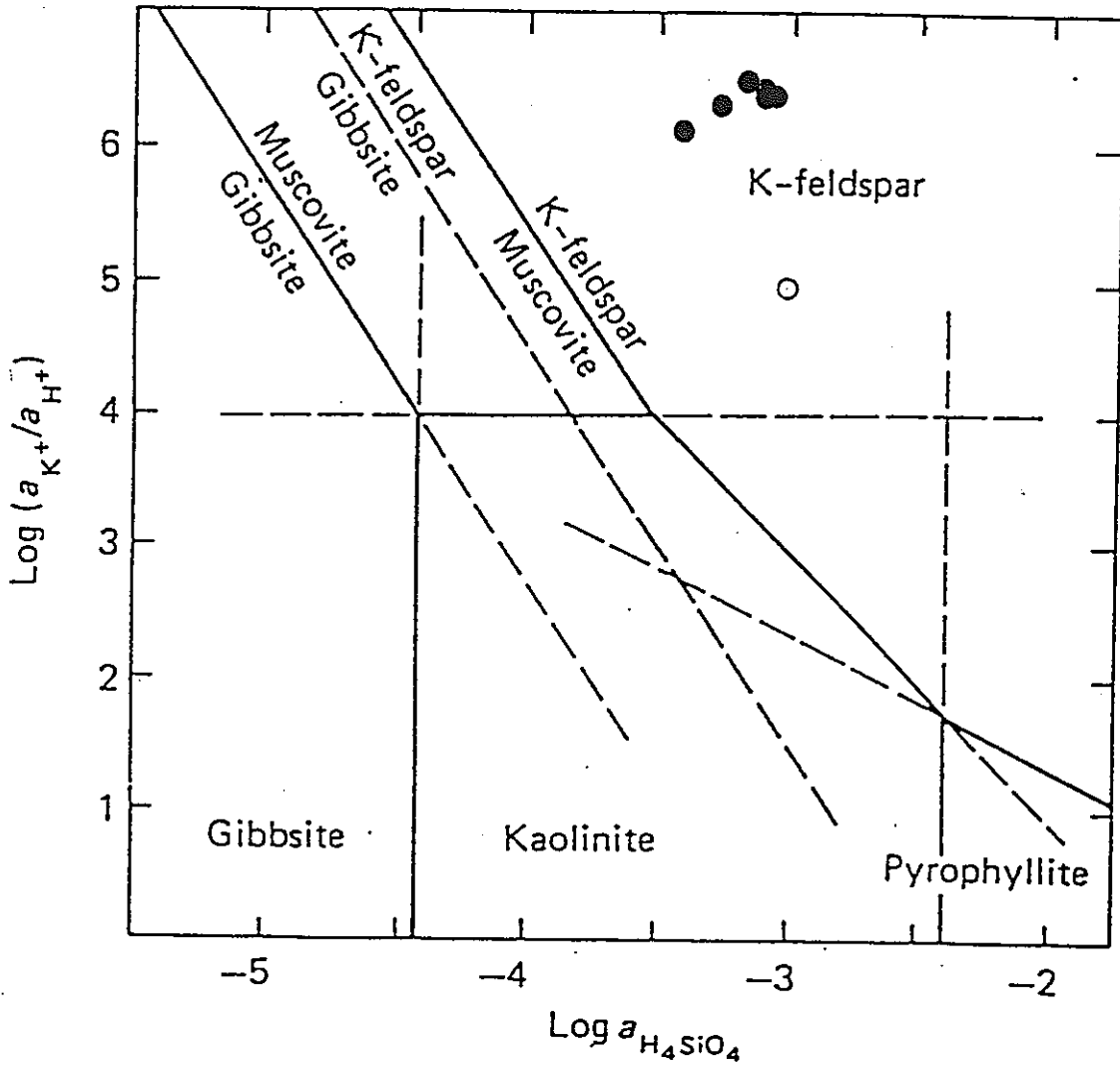
Fig. - 2 Stability diagram ($\log[Ca^{2+}]/[H^+]^2 \sim \log[H_4SiO_4]$)



*● : 1000m地下水、○ : 800m地下水

図-3 鉱物平衡図($\log[\text{Na}^+]/[\text{H}^+] \sim \log[\text{H}_4\text{SiO}_4]$) [9]

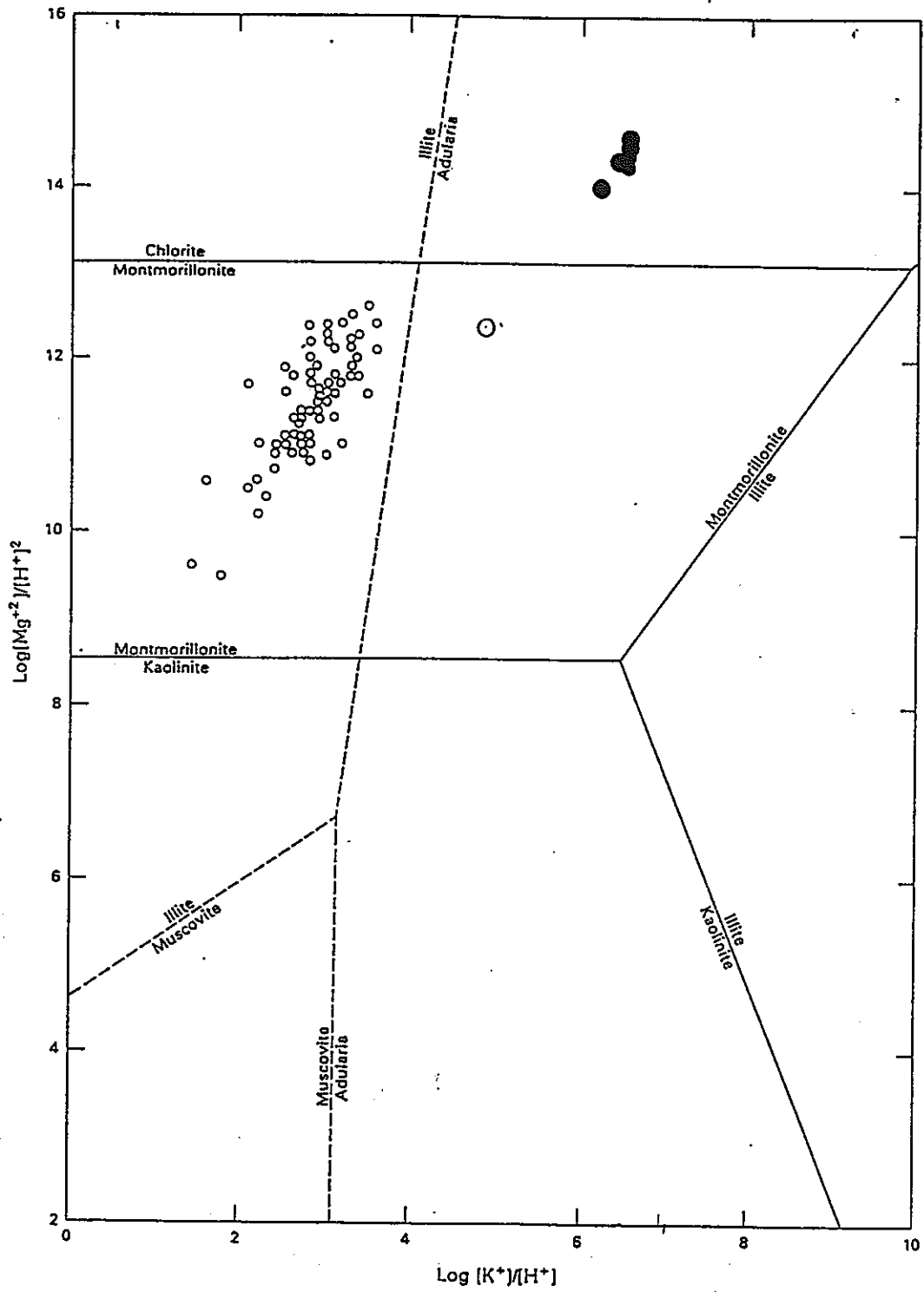
Fig. - 3 Stability diagram ($\log[\text{Na}^+]/[\text{H}^+] \sim \log[\text{H}_4\text{SiO}_4]$)



*● : 1000m地下水、○ : 800m地下水

図-4 鉱物平衡図($\log[K^+]/[H^+] \sim \log[H_4SiO_4]$) [9]

Fig. - 4 Stability diagram ($\log[K^+]/[H^+] \sim \log[H_4SiO_4]$)



*● : 1000m地下水、○ : 800m地下水

図-5 鉱物平衡図($\text{log}[\text{Mg}^{2+}]/[\text{H}^+]^2 \sim \text{log}[\text{K}^+]/[\text{H}^+]$)

Fig. - 5 Stability diagram ($\text{log}[\text{Mg}^{2+}]/[\text{H}^+]^2 \sim \text{log}[\text{K}^+]/[\text{H}^+]$)

3.5 地球化学コードEQ3NRを用いた声問層泥岩の安定性の検討

3.5.1 安定性検討の対象鉱物の選定

同定された鉱物は次の通りである。

mica(雲母)類

chlorite(緑泥石)

smectite(スメクタイト)

clinoptilolite(クリノプチロライト)

laumontite(ローモンタイト)

quartz(石英)

plagioclase(斜長石)

gypsum(石膏)

ilmenite(イルメナイト)

hornblends(角閃石)

これらの鉱物のうち、計算に必要な平衡定数が得られるかどうかを検討して以下の鉱物を対象鉱物とした。

(1)mica(雲母)類

mica類には、muscovite(白雲母)、paragonite(パラゴナイト)、biotite(黒雲母)などがあるが、泥質岩起源の岩石に一般的にみられるmuscovite(白雲母)、paragonite(パラゴナイト)とmuscovite(白雲母)と成分が同じで、実際に含まれていると考えられるillite(イライト)とした。

(2)chlorite(緑泥石)

chloriteは熱力学データが極めて少なく、計算に必要なデータが得られたMg-chlorite ($\text{Mg}_5\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_8$)とした。

(3)smectite(スメクタイト)

smectiteには、montmorillonite、beidellite、nontronite、saponiteなどがあるが、堆積岩中にひろくにみられるmontmorilloniteとした。同定結果によれば14オングストローム鉱物をカルシウムタイプ、12オングストローム鉱物をナトリウムタイプとしているので、対象鉱物はCa-montmorilloniteとNa-montmorilloniteとした。

(4)zeolite(沸石)

zeoliteではclinoptilolite(クリノプチロライト)が確認され、laumontite(ローモンタイト)の存在の可能性が明らかにされている。そこで熱力学データの得られたlaumontiteを対象鉱物とした。

(5)シリカ 鉱物

シリカ 鉱物は α -quartz(石英)と珪藻遺骸はamorphous silica(非晶質シリカ)とした。

(6)plagioclase(斜長石)

plagioclaseは固溶体でalbite($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ 、アルバイト)からanorthite($\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ 、アノーサイト)まで、連続的に化学組成が変化する。そこで対象鉱物はalbiteとanorthiteとした。

(7)gypsum(石膏)

対象鉱物はgypsumとした。

(8)ilmenite(イルメナイト)

ilmeniteは純粋なものは FeTiO_4 である。しかしilmenite熱力学的なデータが得られないので近縁なmagnetite(磁鉄鉱)を対象鉱物とした。

(9)hornblends(角閃石)

hornblendsは非常に複雑な組成の固溶体であり、4種の角閃石の端成分がある。ここで熱力学データが無く、成分を特定できないので対象鉱物としない。

なお参考として、泥質岩にしばしばみられるpyrite(黄鉄鉱)を加えた。

以上から安定性検討の対象鉱物として以下のものを選定した。

muscovite(白雲母)、paragonite(パラゴナイト)、illite(イライト)

Mg-chlorite(Mg緑泥石)

Ca-montmorillonite、Na-montmorillonite

laumontite(ローモンタイト)

quartz(石英)、amorphous silica(非晶質シリカ)

albite(アルバイト)、anorthite(アノーサイト)

gypsum(石膏)、参考としてpyrite(黄鉄鉱)

magnetite(磁鉄鉱)

3.5.2 EQ3NRに使用する平衡定数について

使用した平衡定数と化学式について表-4に示した。なお、*印をつけたものは米国

Lawrence Berkeley LaboratoryのJ.A.Apps氏作成のデータベースを使用した。

表-4 EQ3NRの計算に使用した平衡定数

Table-4 logK for calculation by EQ3NR

```

-----
muscovite          ymin
1.00muscovite = 3.00alo2- + 1.00k+ + 3.00sio2 + 2.00h+
entered by= j apps/njp          date= 03/28/88
source=                          quality=
volume= 140.710 cc/mol
5 chemical elements=
 12.000 o          1.000 k          3.000 al
  3.000 si          2.000 h
5 aqueous species=
-1.000 muscovite   3.000 alo2-          1.000 k+
 3.000 sio2(aq)    2.000 h+
* log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =
  -62.1151  -57.0178  -51.4365  -46.6121
  -42.2152  -39.1986  -37.2354  -36.3442
delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =
  0.0000    0.0000    0.0000    0.0000
  0.0000    0.0000    0.0000    0.0000
raw data from supcrt, refer to supcrt data
-----

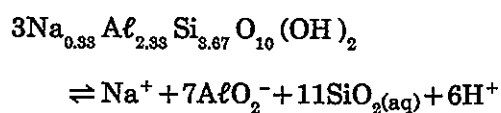
paragonite        ymin 1.00paragonite = 3.00alo2- + 1.00na+
entered by= j apps/njp          date= 03/28/88 + 3.00sio2 + 2.0
source=                          quality=
volume= 132.530 cc/mol
5 chemical elements=
 12.000 o          1.000 na          3.000 al

 3.000 si          2.000 h
5 aqueous species=
-1.000 paragonite  3.000 alo2-          1.000 na+
 3.000 sio2(aq)    2.000 h+
* log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =
  -59.9039  -55.1362  -49.9131  -45.3901
  -41.2593  -38.4291  -36.5979  -35.8042
delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =
  0.0000    0.0000    0.0000    0.0000
  0.0000    0.0000    0.0000    0.0000
raw data from supcrt, refer to supcrt data
-----

```


Na-montmorillonite、Ca-montmorillonite、Mg-chloriteについては平衡定数が得られていなかったため、文献[10]より平衡定数の算出に必要な生成エントロピー(S_f^0)、エンタルピー(H_f^0)、比熱(C_p)を参照して、以下の反応式に基づいて反応のエントロピー(S_r^0)、エンタルピー(H_r^0)、比熱($C_p(r)$)を算出した。なお計算に必要な各イオンの生成エントロピー、エンタルピー、比熱は表-5に示した値を使用した。

(1) Na-montmorillonite



$$S_f^0: 62.8\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

$$S_r^0: -12.7\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

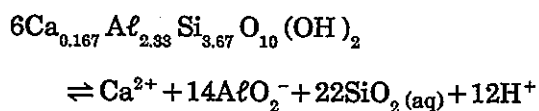
$$H_f^0: -1366874\text{cal/mol}$$

$$H_r^0: 59652\text{cal/mol}$$

$$C_p: 72.94\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

$$C_p(r): -100.3\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

(2) Ca-montmorillonite



$$S_f^0: 61.2\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

$$S_r^0: -18.1\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

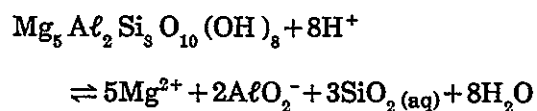
$$H_f^0: -1368000\text{cal/mol}$$

$$H_r^0: 58301\text{cal/mol}$$

$$C_p: 71.6\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

$$C_p(r): -67.5\text{cal/deg}\cdot\text{mol}$$

(3) Mg-chlorite



$$S_f^0: 112.0 \text{ cal / deg} \cdot \text{ mol}$$

$$S_r^0: -84.6 \text{ cal / deg} \cdot \text{ mol}$$

$$H_f^0: -2109900 \text{ cal / mol}$$

$$H_r^0: -62382 \text{ cal / mol}$$

$$C_p: 80.64 \text{ cal / deg} \cdot \text{ mol}$$

$$C_p(r): 82.56 \text{ cal / deg} \cdot \text{ mol}$$

以下に得られた平衡定数で作成したデータベースを表-6に示した。

表-5 平衡定数作成に用いた熱力学データ

Table - 5 Thermodynamic data for preparation of logK

	$S_f^0 \text{ cal / deg} \cdot \text{ mol}$	$H_f^0 \text{ cal / mol}$	$C_p \text{ cal / deg} \cdot \text{ mol}$
Na	14.1	-57470	11.1
Ca	-13.5	-129800	0.2
Mg	-28.5	-110360	9.2
$\text{SiO}_2(\text{aq})$	14.8	-210700	1.0
AlO_2^-	-3.8	-220928	-14.89
H_2O	16.7	-68315.7	18.0

表-6 EQ3NRの計算のため作成した平衡定数

Table - 6 Prepared logK for calculation by EQ3NR

na-montmorillonite	na0.33al2.33si3.67o10(oh)2		
entered by= y.fujiwara	date= 05/27/91		
source=	quality=		
volume=	cc/mol		
5 chemical elements=			
12.000 o	2.330 al	3.67 si	
0.330 na	2.000 h		
5 species in reaction=			
-1.000 na-mont	3.670 sio2(aq)	0.330 na+	
2.000 h+	2.330 alo2-		
log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =			
-50.5879	-46.5149	-42.0361	-38.2241
-34.7829	-32.3433	-30.5918	-29.3290
delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =			
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

ca-montmorillonite	ca0.167al2.33si3.67o10(oh)2		
entered by= y.fujiwara	date= 05/27/91		
source=	quality=		
volume=	cc/mol		
5 chemical elements=			
12.000 o	2.330 al	3.67 si	
0.167 ca	2.000 h		
5 species in reaction=			
-1.000 ca-mont	2.000 h+	0.167 ca++	
2.330 alo2-	3.670 sio2(aq)		
log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =			
-50.6589	-46.7035	-43.4299	-38.4453
-34.8730	-32.2402	-30.2600	-28.7485
delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =			
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

chlorite	mg5al2si3o10(oh)8		
entered by= y.fujiwara	date= 05/27/91		
source=	quality=		
volume=	cc/mol		
5 chemical elements=			
18.000 o	2.000 al	3.000 si	
8.000 h	5.000 mg		
6 species in reaction=			
-1.000 chlorite	2.000 alo2-	3.000 sio2(aq)	
-8.000 h+	8.000 h2o	5.000 mg++	
log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =			
31.4929	27.2521	23.7562	18.4686
14.7172	11.9846	9.9570	8.4339
delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) =			
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

3.5.3 安定性の計算結果

計算に使用した地下水のイオン種とその濃度を表-7の通りである。ただし、表-2で示した8試料の分析結果のうち、1000m地下水では、①と②が水温、酸化還元電位Eh、水素イオン濃度pHの原位置データがないので、計算は③~⑦について行った。800m地下水(⑧)も水温と酸化還元電位Ehの原位置データが得られていないので、水温はボーリング孔内の水温分布図(動燃事業団提供)を参考に28°Cとし、酸化還元電位Ehと水素イオン濃度pHは実験室内の測定値を使用した。

またアルミニウムイオン濃度と硫酸イオン濃度は検出限界以下で測定値が得られていないので、仮の濃度として以下の検出限界値を用いた。

$$\text{Al}^{3+} = 0.100\text{ppm}$$

$$\text{SO}_4^{2-} = 1.00\text{ppm}$$

以上の条件のもとにEQ3NRで計算し、得られた飽和指数(saturation index = $\log Q/K$)を表-8に示した。飽和指数は活動度積を熱力学的平衡定数で除したものの対数値で、値が正の時は鉱物は過飽和となり、ゼロの時は飽和となり、負の時は不飽和となる。

表-7に示した条件では、1000m地下水では、Ca-montmorillonite、Na-montmorillonite、Mg-chlorite(Mg緑泥石)、illite(イライト)、muscovite(白雲母)、paragonite(パラゴナイト)、laumontite(ローモンタイト)、albite(アルバイト)、 α -quartz(石英)、magnetite(磁鉄鉱)の飽和指数は正の値で過飽和という結果となり安定となった。anorthite(アノーサイト)、amorphous silica(非晶質シリカ)、gypsum(石膏)、pyrite(黄鉄鉱)の飽和指数は負の値で不飽和という結果となり不安定となった。

鉱物平衡図からみた安定性では、montmorilloniteとMg-chloriteは安定であった。特にMg-chloriteの方が安定であったので、飽和指数においてもその順序となっており、一致がみられた。またlaumontiteも鉱物平衡図からみて比較的安定な領域に近い位置にプロットされ、飽和指数からみても正の値となり安定にあると考えられる。

表-7 EQ3NRの計算に使用したデータ

Table-7 Data for calculation by EQ3NR

項目	③9月15日 採水10ℓ後 の原位置採 水試料	④9月22日 採水524ℓ後 の原位置採 水試料	⑤10月1日 採水1,145ℓ 後の原位置 採水試料	⑥10月11日 採水1,736ℓ 後の原位置 採水試料	⑦10月15日 採水1,900ℓ 後の原位置 採水試料	⑧4月3日 孔外管ケー シングの口 元採水試料
水温	34.55*	34.57*	34.61*	34.62*	34.59*	28.0**
pH	8.51*	8.39*	8.36*	8.48*	8.39*	8.33
Eh(mv)	-247*	-131*	-106*	-215*	-225*	318
Si ⁴⁺	14.2	18.0	20.6	17.2	16.4	30.7
Al ³⁺	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1
Mg ²⁺	74.3	80.9	99.1	102.0	100.0	3.08
Ca ²⁺	21.2	33.7	40.7	40.4	35.9	3.65
Na ⁺	10700	10700	11000	11200	10800	200
K ⁺	421	409	409	383	390	19.0
Fe ²⁺	1.20	0.31	0.13	0.03	0.17	0.68
HCO ₃ ²⁻	1030	1090	834	866	744	909
SO ₄ ²⁻	<1.0	<1.0	<1.0	<1.0	<1.0	<1.0
Cl ⁻	16500	16100	16100	14600	14600	27.2

イオン濃度はppm

*印は原位置センサー値

**図より判読

表-8 EQ3NRによる計算結果(飽和指数)

Table-8 Results of calculation by EQ3NR(saturation index)

鉱物	③9月15日 採水10ℓ後 の原位置採 水試料	④9月22日 採水524ℓ後 の原位置採 水試料	⑤10月1日 採水1,145ℓ 後の原位置 採水試料	⑥10月11日 採水1,736ℓ 後の原位置 採水試料	⑦10月15日 採水1,900ℓ 後の原位置 採水試料	⑧4月3日 孔外管ケー シングの口 元採水試料
Ca-montmorillonite	2.668(ss)	3.336(ss)	3.627(ss)	3.059(ss)	3.191(ss)	5.217(ss)
Na-montmorillonite	2.602(ss)	3.269(ss)	3.548(ss)	2.984(ss)	3.120(ss)	4.947(ss)
Mg-chlorite	5.596(ss)	5.177(ss)	5.557(ss)	6.325(ss)	5.533(ss)	-0.587
illite	4.275(ss)	4.828(ss)	5.091(ss)	4.622(ss)	4.697(ss)	5.923(ss)
muscovite	9.276(ss)	9.850(ss)	10.083(ss)	9.550(ss)	9.708(ss)	10.994(ss)
paragonite	9.155(ss)	9.742(ss)	9.987(ss)	9.491(ss)	9.625(ss)	10.402(ss)
laumontite	3.282(ss)	3.750(ss)	4.068(ss)	3.710(ss)	3.618(ss)	5.046(ss)
low albite	3.997(ss)	4.349(ss)	4.540(ss)	4.279(ss)	4.231(ss)	4.065(ss)
albite	2.793(ss)	3.144(ss)	3.335(ss)	3.075(ss)	3.027(ss)	2.848(ss)
anorthite	-3.509	-3.276	-3.076	-3.252	-3.324	-2.905
quartz	0.486(ss)	0.604(ss)	0.664(ss)	0.573(ss)	0.562(ss)	0.959(ss)
amorphous silica	-0.731	-0.613	-0.553	-0.643	-0.654	-0.304(s)
gypsum	-4.713	-4.712	-4.640	-4.639	-4.680	-4.586
pyrite	-12.531	-37.746	-43.389	-21.009	-16.455	-142.002
magnetite	14.776(ss)	16.031(ss)	15.518(ss)	10.838(ss)	12.182(ss)	20.565(ss)
ファイル名	PNC3.out	PNC4.out	PNC5.out	PNC6.out	PNC7.out	PNC8.out

斜長石についてみると、鉱物平衡図ではalbiteが安定な領域寄りであり、地下水中のナトリウムイオン濃度が高いことやalbiteの飽和指数が正の値で、anorthiteの飽和指数が負の値であることから、含まれる斜長石はalbite成分寄りで安定であると考えられる。

α -quartzとamorphous silicaは、地下水中のシリコン濃度が高い試料でより飽和指数が大きくなる傾向を示し、かつamorphous silicaの飽和指数は負の値となっている。したがって珪藻遺骸が溶解過程にあると考えられるので、今後の珪藻遺骸の溶蝕状態などによっても確認できるであろう。

gypsum、pyriteはともに不安定である。特にpyriteは不安定であり、鉱物同定でも検出されていないが、gypsumは僅かと考えられるが検出されている。magnetiteは安定であり、 Fe^{2+} イオン濃度が高い試料で飽和指数が大きくなっている。gypsumやmagnetiteはイオウあるいは鉄を含むため成分に特徴があるので、これらの鉱物について微視的に追跡し、観察することによって、安定性についての詳しい検討ができると考えられる。

800m地下水ではCa-montmorillonite、Na-montmorillonite、illite、muscovite、paragonite、laumontite、albite、 α -quartz、amorphous silica、magnetiteの飽和指数が正であり鉱物は過飽和もしくは飽和となり安定という結果となった。Mg-chlorite、anorthite、gypsum、pyriteの飽和指数は負であり、鉱物は不飽和で不安定という結果となった。

1000m地下水と異なる点は、800m地下水ではMg-chloriteが不安定でamorphous silicaがやや安定な点である。これは鉱物平衡図でも800m地下水ではMg-chloriteが不安定であったことと一致している。このことは800m地下水のマグネシウムイオン濃度が1000m地下水のそれに比べかなり低いことによると考えられる。amorphous silicaは鉱物平衡図からも、800m地下水の方が安定であり、これはシリコンイオン濃度が1000m地下水のそれに比べ高いことによると考えられる。

以上の条件では、アルミニウムイオン濃度と硫酸イオン濃度が仮定値であるので、当然アルミニウムケイ酸塩はアルミニウムイオン濃度に影響されるであろうし、含イオン鉱物は硫酸イオン濃度に影響される。そこで、アルミニウムイオン濃度と硫酸イオン濃度を以下の通りに仮定し、③試料のアルミニウムイオン濃度と硫酸イオン濃度を変えて計算を行った。

$$\text{Al}^{3+} = 0.100, 0.010, 0.005, 0.001\text{ppm}$$

$$\text{SO}_4^{2-} = 1.00, 0.10, 0.05, 0.01\text{ppm}$$

これらの条件での計算結果を表-9に示した。表から明らかなように、アルミニウムイオン濃度が減少するにしたがって、アルミニウムケイ酸塩の飽和指数が小さくなってきている。Na-montmorilloniteを例にとると、アルミニウムイオン0.100ppmで飽和指数2.602、アルミニウムイオン0.010ppmで飽和指数0.272、アルミニウムイオン0.050ppmで飽和指数-0.430、アルミニウムイオン0.001ppmで飽和指数-2.058となっている。アルミニウムイオン0.001ppmでは雲母類とalbiteなどが安定となるだけである。

したがってアルミニウムイオンの濃度により計算結果が大きく変わることから、今後は地下水中のアルミニウムイオンを正確に把握する必要があると考えられる。またモンモリロナイトやイライトなどの現在の鉱物組成からみると、アルミニウムイオンは0.100~0.050ppmの範囲にあると予想される。モンモリロナイトやイライトなどの鉱物の量比についても今後、確認しなければならないと考えられる。

硫酸イオン濃度についてみると、やはり硫酸イオン濃度の減少にともなってgypsumとpyritの飽和指標が小さくなっている。しかし、モンモリロナイトやイライトなどの飽和指標の変化ほどは大きくない。

表-9 アルミニウムイオンと硫酸イオン濃度を変えた場合の
EQ3NRによる計算結果(飽和指数)

Table - 9 Results of calculation by EQ3NR depending on aluminum
and sulfate ion concentration (saturation index)

鉱物	③9月15日 採水10ℓ後の原位置採水試料			
	Al=0.100 SO ₄ ²⁻ =1.0	Al=0.010 SO ₄ ²⁻ =0.1	Al=0.050 SO ₄ ²⁻ =0.01	Al=0.001 SO ₄ ²⁻ =0.01
Ca-montmorillonite	2.668(ss)	0.338(s)	-0.363	-1.992
Na-montmorillonite	2.602(ss)	0.272(s)	-0.430	-2.058
Mg-chlorite	5.596(ss)	3.596(ss)	2.994(ss)	1.596(ss)
illite	4.275(ss)	1.975(ss)	1.283(ss)	-0.325(s)
muscovite	9.276(ss)	6.276(ss)	5.373(ss)	3.276(ss)
paragonite	9.155(ss)	6.155(ss)	5.252(ss)	3.155(ss)
laumontite	3.282(ss)	1.282(ss)	0.680(ss)	-0.718
low albite	3.997(ss)	2.997(ss)	2.696(ss)	1.997(ss)
albite	2.793(ss)	1.793(ss)	1.492(ss)	0.793(ss)
anorthite	-3.509	-5.509	-6.111	-7.509
quartz	0.486(ss)	0.486(ss)	0.486(ss)	0.486(ss)
amorphous silica	-0.731	-0.731	-0.731	-0.731
gypsum	-4.713	-5.713	-6.014	-6.713
pyrite	-12.531	-14.531	-15.133	-16.531
magnetite	14.776(ss)	14.776(ss)	14.776(ss)	14.776(ss)
ファイル名	PNC3.out	PNC31.out	PNC32.out	PNC33.out

4. まとめと今後の検討課題

4.1 まとめ

- (1) 鉱物組成および間隙率から概略的にみると、声問層泥岩は後期圧密段階に入っていると考えられる。しかし声問層の鉱物組成についての深度や間隙率による違い、粘土鉱物に関する詳細な検討あるいは石英の成因などについての今後の検討が必要であると考えられた。
- (2) 泥質岩地帯の地下水水質に関する既往の文献から、ある地域で得られる地層の情報と地下水の水質とについて関係づけられることが明らかとなったが、現時点では声問層地下水に関するデータ数に限界があるので、今後の調査の進行によって同様の研究成果が得られると考えられた。
- (3) 鉱物平衡図から、鉱物の相対的安定性に加えて、これら鉱物の生成に必要な環境条件に関する情報も得ることが可能となると考えられた。このように鉱物平衡図を使用した知見は非常に重要な情報となることが明らかであるが、鉱物平衡図にはいくつかの仮定条件が含まれているので、よりその地域の正確な情報とするには、多くのデータを用いて検討し、確認することが重要と考えられる。
- (4) 研究対象の系が複雑でない場合、系に関する適切な仮説を立てることは可能である。しかし、対象の系が複雑である場合、例えば沈澱/溶解、吸着/脱着反応に支配される多種のイオンを含んだりする系では、溶解度を支配する固体や水性種の種類別の濃度や割合に関する基礎的な情報が、地球化学コードから得られると考えられる。こうした計算プログラムの信頼性には多少の問題が当然残るが、水性種の分布や鉱物の安定性に関する最初の情報を得て、それを参考にしてその他の知見と合わせて考察するには有用な方法であると考えられる。すなわち、地球化学コードから導かれたいくつかの知見の信頼性を確認するため、フィールドでの鉱物分布の調査や鉱物平衡、実験的な検討などの研究と組合せ総合的に検討することによって、鉱物の安定性に関する知見の信頼性が増し、本分野の研究が発展すると考えられる。
- (5) 鉱物平衡図からみた声問層泥岩の鉱物安定性について次の通りである。モンモリロナイトは1000m地下水と800m地下水で安定であり、緑泥石は1000地下水で安定である。斜長

石はアルバイト成分に近いものが安定であり、ローモンタイトは安定に近く、生成する可能性が考えられる。また800m地下水の方が非晶質シリカが安定であると考えられた。

(6) EQ3NRによる計算結果からみた声間層泥岩の鉱物安定性は以下の通りである。

(i) アルミニウムイオン濃度と硫酸イオン濃度を検出限界値($Al^{3+} = 0.100ppm$ 、 $SO_4^{2-} = 1.00ppm$)とした場合

- ① 1000m地下水では、Ca-montmorillonite、Na-montmorillonite、Mg-chlorite(Mg緑泥石)、illite(イライト)、muscovite(白雲母)、paragonite(パラゴナイト)、laumontite(ローモンタイト)、albite(アルバイト)、 α -quartz(石英)、magnetite(磁鉄鉱)の飽和指数は正の値で過飽和で安定となった。anorthite(アノーサイト)、amorphous silica(非晶質シリカ)、gypsum(石膏)、pyrite(黄鉄鉱)の飽和指数は負の値で不飽和で不安定となった。
- ② 鉱物平衡図からみた安定性では、montmorilloniteとMg-chloriteは安定で、Mg-chloriteの方が安定であり、飽和指数においてもその順序となっていた。laumontiteも鉱物平衡図からみて比較的安定な領域に近い位置にプロットされ、飽和指数からみても正の値となり安定にあると考えられた。
- ③ 斜長石は、鉱物平衡図ではalbiteが安定な領域寄りであり、地下水中のナトリウムイオン濃度が高いことやalbiteの飽和指数が正の値で、anorthiteの飽和指数が負の値であることから、含まれる斜長石はalbite成分寄りであると考えられた。
- ④ α -quartzとamorphous silicaは、地下水中のシリコン濃度が高い試料でより飽和指数が大きくなる傾向を示し、かつamorphous silicaの飽和指数は負の値となっている。したがって珪藻遺骸が溶解過程にあると考えられた。
- ⑤ gypsum、pyriteはともに不安定である。特にpyriteは不安定であり、鉱物同定でも検出されていないが、gypsumは僅かと考えられるが検出されている。magnetiteは安定であり、 Fe^{2+} イオン濃度が高い試料で飽和指数が大きくなっていた。
- ⑥ 800m地下水ではCa-montmorillonite、Na-montmorillonite、illite、muscovite、paragonite、laumontite、albite、 α -quartz、amorphous silica、magnetiteの飽和指数が正であり鉱物は過飽和もしくは飽和となり安定という結果となった。Mg-

chlorite、anorthite、 gypsum、pyriteの飽和指数は負であり、鉱物は不飽和で不安定という結果となった。Mg-chloriteが不安定でamorphous silicaがやや安定な点で、1000m地下水と異なっていた。

(ii) アルミニウムイオン濃度と硫酸イオン濃度を変えて($Al^{3+} = 0.100, 0.010, 0.005,$

0.001ppm 、 $SO_4^{2-} = 1.00, 0.10, 0.05, 0.01\text{ppm}$)計算を行った場合

- ① アルミニウムイオン濃度が減少するにしたがって、アルミニウムケイ酸塩の飽和指数が小さくなってきている。Na-montmorilloniteを例にとると、アルミニウムイオン0.100ppmで飽和指数2.602、アルミニウムイオン0.010ppmで飽和指数0.272、アルミニウムイオン0.050ppmで飽和指数-0.430、アルミニウムイオン0.001ppmで飽和指数-2.058となっていた。アルミニウムイオン0.001ppmでは雲母類とalbiteなどが安定となるだけである。アルミニウムイオンの濃度により計算結果が大きく変わることから、今後は地下水中のアルミニウムイオンを正確に把握する必要があると考えられた。
- ② 硫酸イオン濃度についてみると、硫酸イオン濃度の減少にともなってgypsumとpyriteの飽和指標が小さくなっているがモンモリロナイトやイライトなどの飽和指標の変化ほどは大きくなった。

4.2 今後の研究課題

鉱物分析は、鉱物種の同定を行うことはもちろんのこと、粒径分析を行い粘土画分 (<0.2 μm と0.2~0.5 μm)、シルト画分(0.5~2 μm と2 μm ~0.02mm)、砂画分(0.02~2mm)の量比を知ること、あるいは泥質岩では特に粘土鉱物に着目してみれば、それぞれの画分の主要鉱物についての検討が必要であると考えられる。

モンモリロナイトについては、今回12オングストロームのナトリウムタイプと14オングストロームのカルシウムタイプとが同定されているが、この点についても両者の比率あるいは地下水組成からみた交換性陽イオンの平衡状態と分析結果との比較検討も必要と考えられる。さらに今回の同定ではイライトに関する明確な表現がないが、泥岩の続成作用の点からみると重要な鉱物であるのでこの点に関しての分析あるいは混合層鉱物の有無の確認が必要と考えられる。

今回の検討で主要な鉱物についての安定性に関する知見が鉱物平衡図およびEQ3NRによる計算結果から得られたが、この点に関して不安定となった非晶質シリカ(珪藻遺骸)の形態観察あるいは成分的に特徴があり微視的に追跡できる可能性のある鉄鉱物や含イオウ鉱物についての形態観察を行い、それらの安定性について検討することも必要と考えられる。

800m地下水では緑泥石が不安定という結果となったが、800mの位置の鉱物組成からみてもそのような状態であるのかどうかについての確認が必要であると考えられる。

第三紀の泥岩層で海水水質の地下水組成であるような声間層泥岩に類似した条件を持つデータをさがし、今回の検討と同様な方法で検討を行い、得られた結果と比較することによっても重要な知見が得られると考えられる。

4.3 今後の問題点

鉱物平衡図あるいは地球化学コードを使用した検討には、必ずアルミニウムイオンと硫酸イオン濃度が必要である。特にアルミニウムイオンはアルミニウムケイ酸塩鉱物の安定性の評価に大きく影響する。したがって、検出限界以下の試料であっても、水酸化物の生成などの前処理をおこない濃縮して、できるだけ正確な測定を行う必要があると考えられる。

これまで得られている地下水のデータは1地点の2深度のデータである。したがってこのような地下水が普遍的であるのか、同一地域内あるいは深度の違いあるいは隆起の程度でどのように変化するかなどのを検討することも重要と考えられ、研究結果の信頼性を高めるうえでも、より多くの原位置データの収集が必要であると考えられる。また声問層の外に、その上部の勇知層、更別層についての地層と地下水との比較検討なども必要と考えられる。

岩石試料や地下水試料の採取後の試料の保存方法とその処理方法、分析項目と分析方法、得られた分析結果の評価項目と評価方法などについても体系的にまとめ、貯蔵工学センターに関連した今後の研究開発に有効になる情報とするための整理や作業が必要と考えられる。

5. 参考文献

参考にした文献は以下の通りである。

- [1] 青柳宏一, 海成泥質堆積物の続成作用 : 地質学会誌, No. 15, pp. 3~14 (1978)
- [2] 青柳宏一, 下田右, 泥質堆積物および泥質岩における続成作用 : 粘土科学, Vol. 31, No. 1, pp. 23~31 (1991)
- [3] 青柳宏一, 浅川忠, 継変作用下における炭化水素の第一次移動 : 石技誌, Vol. 42, pp. 76~89 (1977)
- [4] 青山芳夫, 立松英信, 阿部弘, 松村宮吉, 青函トンネル坑内水の地球化学的研究 : 鉄道技術研究報告, No. 1107, pp. 1~36 (1979)
- [5] 守随治雄, 福島県一ツ坪田地すべりにおける粘土鉱物および水質の特徴について : 応用地質, Vol. 25, No. 1, pp. 23~33 (1984)
- [6] L.C.Hull, Geochemistry of ground water in the Sacramento valley, California : Geochemical Survey Professional Paper, 1401-B, pp.25~33 (1984)
- [7] 乙黒真一, 吉岡龍馬, 奥村武信, 田中一夫, 天然水の化学組成からみた横地地すべり地の特性 : 鳥取大学演習所報告, No. 16, pp. 115~137 (1986)
- [8] J.B.Dixon, S.B.Weed, Minerals in soil environment : Second edition, Soil Science of America, Madison, Wisconsin (1989)
- [9] J.I.Drever, The geochemistry of natural waters: Secon edition, Prentice Hall, Inc., New Jersey (1988)
- [10] H.C.Helgeson, Thermodynamics of hydrothermal systems at elevated temperatures and pressures : American Journal of Science, Vol. 267, pp. 729~804 (1969)

付録

(EQ3NRによる計算結果)

*ファイル名は表-8および表-9参照のこと。


```

# eeee qqq 33333 n n rrrr
e q q 3 nn n r r
eeee q q 33 n n n rrrr
e q q q 3 n nn r r
eeee qqq 3333 n n r r
q

```

```

eq3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

```

```

input file name= hbi01 created= 05/25/91 creator= y.fujiiwara
koetol 09/15/90 -1015m sample after 10 litre of water had flowed out

```

```

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

```

the activity coefficients of aqueous solute species and the activity of water are calculated according to b-dot

```

temperature= 34.55 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

```

solution density = 1.00000 g/ml

```

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

```

```

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
tolcl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolsat = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect convergence)

```

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	bas
na+	0.10700E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.42100E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.74300E+02	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.33700E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.12000E+01	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E+00	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.10300E+04	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

sio2(aq)	0.30400E+02	2	tot conc, mg/l
so4--	0.10000E+01	2	tot conc, mg/l
f-	0.30000E+00	2	tot conc, mg/l
cl-	0.16500E+05	2	tot conc, mg/l
h+	-0.85100E+01	16	log activity

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

clo4-	al13(oh)28(3+)	al(oh)3*	al2(oh)5**
naalo2	kcl	kco3-	fecl+
fecl2	fecl3-	fecl4--	fe(so4)2-
koh	mgcl+		

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.46542E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.10768E-01	0	tot conc, molal	
ca++	0.84082E-03	0	tot conc, molal	
mg++	0.30570E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-05	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.50596E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.85100E+01	16	log activity	
cl-	0.46540E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.10410E-04	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.21487E-04	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.16881E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

iter = 0	delmax = 0.000E+00	delfnc = 0.000E+00	xi = -0.218E-01
iter = 1	delmax = 0.947E-02	delfnc = 0.000E+00	beta(conc al+++) = -0.541E-02
iter = 2	delmax = 0.620E-03	delfnc = 0.935E+00	beta(conc al+++) = -0.712E-04
iter = 3	delmax = 0.895E-05	delfnc = 0.986E+00	beta(conc al+++) = -0.451E-06
iter = 4	delmax = 0.519E-07	delfnc = 0.994E+00	beta(conc al+++) = -0.231E-08
iter = 5	delmax = 0.270E-09	delfnc = 0.995E+00	beta(conc al+++) = -0.118E-10

del(conc al+++) = 0.270E-09 beta(conc al+++) = -0.110E-10

iter = 6 delmax = 0.138E-11 delfnc = 0.995E+00
 del(conc al+++) = 0.138E-11 beta(conc al+++) = -0.672E-13

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888945.2364	888945.2364	0.5556116082E+02
na	10699.8930	10699.8930	0.4654197477E+00
k	421.0032	421.0032	0.1076781421E-01
ca	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
si	14.2101	14.2101	0.5059583250E-03
h	111912.8888	111912.8888	0.1110357067E+03
c	202.7522	202.7522	0.1688054149E-01
cl	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
s	0.3338	0.3338	0.1041037706E-04
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000934.3122	1000934.3122	0.5556116082E+02
na+	10700.0000	10700.0000	0.4654197477E+00
k+	421.0000	421.0000	0.1076781421E-01
ca++	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg++	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al+++	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
sio2(a	30.4000	30.4000	0.5059583250E-03
h+	111923.9924	111923.9924	0.1110357067E+03
co3--	1012.9844	1012.9844	0.1688054149E-01
cl-	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
so4--	1.0000	1.0000	0.1041037706E-04
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551051920E+02	h2o	0.5551051920E+02
na+	0.4654197477E+00	na+	0.4654197477E+00
k+	0.1076781421E-01	k+	0.1076781421E-01

ca++	0.8408183633E-03	ca++	0.8408183633E-03
mg++	0.3056984160E-02	mg++	0.3056984160E-02
al+++	0.3706174487E-05	al+++	0.3706174487E-05
sio2(aq)	0.5059583250E-03	sio2(aq)	0.5059583250E-03
h+	0.1110188262E+03	h+	0.1110188262E+03
cl-	0.4654049023E+00	cl-	0.4654049023E+00
so4--	0.1041037706E-04	so4--	0.1041037706E-04
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.2148727774E-04	fe++	0.2148727774E-04
hco3-	0.1688054149E-01	hco3-	0.1688054149E-01

ph = 8.51000
 activity of water = 0.98468
 log activity of water = -0.00671
 osmotic coefficient = 0.00765
 stoichiometric sum of molalities = 111.9817543548574
 titration alkalinity = 0.0169856275331 eq/kg h2o
 ionic strength = 0.4772802061944
 equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4654197477164

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
 sigma(mz) cations = 0.4741736917E+00
 sigma(mz) anions = -0.4725635687E+00
 total charge = 0.9467372604E+00
 mean charge = 0.4733686302E+00
 charge imbalance = 0.1610123014E-02

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
 mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

0.17 per cent of the total charge
 0.34 per cent of the mean charge
 0.34 per cent of sigma(mz) cations
 0.34 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 8.0025
 log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.3507
 log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.3613
 log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 14.0191
 log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 7.6628
 log (act(sio2(aq))) = -3.3576
 log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -9.0428
 log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -22.9167
 log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.5343
 log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 11.4479
 log (act(o2(aq))) = -65.5315
 log (act(h2(aq))) = -11.8453
 log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -25.4600
 log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 3.0178
 log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.4382

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6940
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -14.1119

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4556E+00	-0.3414	-0.1661	0.3108E+00	-0.5075
cl-	0.4556E+00	-0.3414	-0.1914	0.2932E+00	-0.5328
hco3-	0.1688E-01	-1.7726	-0.1555	0.1180E-01	-1.9282
k+	0.1077E-01	-1.9679	-0.1914	0.6930E-02	-2.1593
nacl	0.9833E-02	-2.0073	0.0000	0.9833E-02	-2.0073
mg++	0.3054E-02	-2.5151	-0.4858	0.9979E-03	-3.0009
ca++	0.8407E-03	-3.0754	-0.5834	0.2194E-03	-3.6587
sio2(aq)	0.4390E-03	-3.3576	0.0000	0.4390E-03	-3.3576
h3sio4-	0.6698E-04	-4.1741	-0.1661	0.4570E-04	-4.3401
f-	0.1424E-04	-4.8464	-0.1779	0.9455E-05	-5.0243
fe(oh)+	0.1122E-04	-4.9499	-0.1661	0.7656E-05	-5.1160
fe++	0.1026E-04	-4.9887	-0.5834	0.2679E-05	-5.5721
oh-	0.9860E-05	-5.0061	-0.1779	0.6546E-05	-5.1840
so4--	0.6772E-05	-5.1693	-0.7275	0.1268E-05	-5.8967
alo2-	0.3666E-05	-5.4358	-0.1661	0.2501E-05	-5.6019
naso4-	0.3178E-05	-5.4979	-0.1596	0.2200E-05	-5.6575
mg(oh)+	0.1764E-05	-5.7535	-0.1661	0.1203E-05	-5.9196
mgf+	0.1040E-05	-5.9832	-0.1661	0.7092E-06	-6.1492
naf	0.4599E-06	-6.3374	0.0000	0.4599E-06	-6.3374
naoh	0.4155E-06	-6.3814	0.0000	0.4155E-06	-6.3814
mgso4	0.2904E-06	-6.5370	0.0000	0.2904E-06	-6.5370
kso4-	0.1071E-06	-6.9701	-0.1779	0.7112E-07	-7.1480
caso4	0.6245E-07	-7.2044	0.0000	0.6245E-07	-7.2044
ca(oh)+	0.5745E-07	-7.2407	-0.1661	0.3920E-07	-7.4068
caf+	0.4784E-07	-7.3202	-0.1661	0.3264E-07	-7.4862
al(oh)3	0.4005E-07	-7.3974	0.0000	0.4005E-07	-7.3974
h+	0.3856E-08	-8.4138	-0.0962	0.3090E-08	-8.5100
fef+	0.1250E-08	-8.9029	-0.1661	0.8531E-09	-9.0690
feso4	0.7220E-09	-9.1414	0.0000	0.7220E-09	-9.1414
fe(oh)4-	0.6145E-09	-9.2115	-0.1661	0.4192E-09	-9.3776
hcl	0.1265E-09	-9.8980	0.0000	0.1265E-09	-9.8980
al(oh)2+	0.7164E-10	-10.1449	-0.1661	0.4887E-10	-10.3109
hf	0.5147E-10	-10.2885	0.0000	0.5147E-10	-10.2885
fe(oh)3-	0.1532E-10	-10.8147	-0.1661	0.1045E-10	-10.9807
h2(aq)	0.1275E-11	-11.8946	0.0493	0.1428E-11	-11.8453
fe(oh)2+	0.9292E-12	-12.0319	-0.1661	0.6339E-12	-12.1980
hso4-	0.7172E-12	-12.1444	-0.1661	0.4893E-12	-12.3104
al(oh)++	0.3124E-13	-13.5052	-0.5834	0.8154E-14	-14.0886
hf2-	0.2355E-14	-14.6279	-0.1661	0.1607E-14	-14.7940
alf2+	0.8174E-15	-15.0876	-0.1661	0.5576E-15	-15.2536
fe(oh)++	0.6425E-15	-15.1921	-0.7275	0.1203E-15	-15.9196
alf++	0.6114E-15	-15.2137	-0.6477	0.1376E-15	-15.8614
alf3	0.6691E-16	-16.1745	0.0000	0.6691E-16	-16.1745
hs-	0.1690E-16	-16.7721	-0.1779	0.1122E-16	-16.9500
al+++	0.1469E-16	-16.8330	-1.0342	0.1358E-17	-17.8672
h2s(aq)	0.2507E-18	-18.6009	0.0000	0.2507E-18	-18.6009
alf4-	0.2415E-18	-18.6171	-0.1661	0.1648E-18	-18.7831
h2f2	0.4991E-20	-20.3018	0.0000	0.4991E-20	-20.3018
also4+	0.3001E-20	-20.5227	-0.1661	0.2047E-20	-20.6888
fecl1+	0.1555E-20	-20.8084	-0.7275	0.2912E-21	-21.5359
fef++	0.1547E-20	-20.8104	-0.6477	0.3482E-21	-21.4582
alf5--	0.5678E-21	-21.2458	-0.7275	0.1063E-21	-21.9733

fe+++	0.3327E-21	-21.4780	-1.0342	0.3075E-22	-22.5122
fef2+	0.1173E-21	-21.9306	-0.1661	0.8005E-22	-22.0966
fecl3	0.1804E-22	-22.7438	0.0000	0.1804E-22	-22.7438
fecl2+	0.1788E-22	-22.7477	-0.1661	0.1220E-22	-22.9138
fef3	0.2195E-23	-23.6585	0.0000	0.2195E-23	-23.6585
feso4+	0.5937E-24	-24.2264	-0.1661	0.4050E-24	-24.3925
s--	0.3065E-24	-24.5136	-0.6477	0.6898E-25	-25.1613
fecl4-	0.1120E-24	-24.9507	-0.1661	0.7642E-25	-25.1168
alf6---	0.2224E-25	-25.6528	-1.6631	0.4831E-27	-27.3159
(feoh++)2	0.2646E-27	-27.5774	-2.9731	0.2815E-30	-30.5505
al3(oh)4(5+)	0.5088E-29	-29.2935	-3.4249	0.1913E-32	-32.7184
sif6--	0.2363E-36	-36.6265	-0.7275	0.4426E-37	-37.3540
al13(oh)34+5	0.1949E-37	-37.7101	-8.9215	0.2336E-46	-46.6316
o2(aq)	0.2625E-65	-65.5809	0.0493	0.2961E-65	-65.5315

----- mean ionic properties -----

species		log a(+/-)		true (a)		stoichiometric (b)	
species	species	log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.52017	3.019E-01	4.556E-01	6.626E-01	4.654E-01	6.486E-01
na+	so4--	-2.30392	4.967E-03	1.120E-02	4.434E-01	1.311E-02	3.788E-01
na+	f-	-2.76592	1.714E-03	2.547E-03	6.730E-01	2.711E-03	6.323E-01
na+	hs-	-8.72875	1.867E-09	2.775E-09	6.750E-01		
na+	hco3-	-1.21783	6.056E-02	8.770E-02	6.905E-01	8.864E-02	6.832E-01
na+	oh-	-2.84577	1.426E-03	2.119E-03	6.730E-01	2.384E-02	5.982E-02
na+	alo2-	-3.05469	8.817E-04	1.292E-03	6.822E-01		
k+	cl-	-1.34606	4.508E-02	7.004E-02	6.436E-01	7.079E-02	6.367E-01
k+	so4--	-3.40510	3.935E-04	9.226E-04	4.265E-01	1.065E-03	3.695E-01
k+	f-	-3.59181	2.560E-04	3.916E-04	6.536E-01	4.124E-04	6.208E-01
k+	hs-	-9.55463	2.788E-10	4.266E-10	6.536E-01		
k+	hco3-	-2.04372	9.042E-03	1.348E-02	6.707E-01	1.348E-02	6.707E-01
k+	oh-	-3.67166	2.130E-04	3.258E-04	6.536E-01	3.627E-03	5.873E-02
k+	alo2-	-3.88057	1.317E-04	1.987E-04	6.626E-01		
ca++	cl-	-1.57481	2.662E-02	5.588E-02	4.764E-01	5.668E-02	4.696E-01
ca++	so4--	-4.77774	1.668E-05	7.545E-05	2.211E-01	9.356E-05	1.783E-01
ca++	f-	-4.56914	2.697E-05	5.545E-05	4.863E-01	5.941E-05	4.540E-01
ca++	hs-	-12.51958	3.023E-13	6.216E-13	4.863E-01		
ca++	hco3-	-2.50502	3.126E-03	6.211E-03	5.033E-01	6.211E-03	5.033E-01
ca++	oh-	-4.67561	2.111E-05	4.340E-05	4.863E-01	1.078E-03	1.957E-02
ca++	alo2-	-4.95416	1.111E-05	2.244E-05	4.953E-01		
mg++	cl-	-1.35554	4.410E-02	8.590E-02	5.134E-01	8.716E-02	5.060E-01
mg++	so4--	-4.44884	3.558E-05	1.438E-04	2.474E-01	1.784E-04	1.994E-01
mg++	f-	-4.34987	4.468E-05	8.525E-05	5.241E-01	9.135E-05	4.891E-01
mg++	hs-	-12.30031	5.008E-13	9.555E-13	5.241E-01		
mg++	hco3-	-2.28575	5.179E-03	9.547E-03	5.425E-01	9.550E-03	5.423E-01
mg++	oh-	-4.45634	3.497E-05	6.671E-05	5.241E-01	1.658E-03	2.109E-02
mg++	alo2-	-4.73489	1.841E-05	3.449E-05	5.338E-01		
al+++	cl-	-4.86643	1.360E-05	3.433E-05	3.962E-01	2.472E-02	5.501E-04
al+++	so4--	-10.68492	2.066E-11	1.463E-10	1.412E-01	6.887E-06	2.999E-06
al+++	f-	-8.23505	5.820E-09	1.435E-08	4.055E-01	1.099E-05	5.295E-04
al+++	hs-	-17.17929	6.618E-18	1.632E-17	4.055E-01		
al+++	hco3-	-5.91291	1.222E-06	2.899E-06	4.215E-01	2.055E-03	5.947E-04
al+++	oh-	-8.35483	4.417E-09	1.089E-08	4.055E-01	2.867E-04	1.541E-05
al+++	alo2-	-8.66820	2.147E-09	5.187E-09	4.139E-01		
h+	cl-	-4.52142	3.010E-05	4.192E-05	7.181E-01	5.083E+00	5.922E-06
h+	so4--	-7.63891	2.297E-08	4.653E-08	4.936E-01	3.177E-01	7.228E-08
h+	f-	-6.76717	1.709E-07	2.344E-07	7.294E-01	2.961E-02	5.773E-06

ca(oh)+ 0.5745E-07 0.01

h+	hs-	-12.73000	1.862E-13	2.553E-13	7.294E-01		
h+	hco3-	-5.21908	6.038E-06	8.068E-06	7.484E-01	9.680E-01	6.2
h+	alo2-	-7.05594	8.792E-08	1.189E-07	7.394E-01		
fe++	cl-	-2.21259	6.129E-03	1.287E-02	4.764E-01	1.670E-02	3.6
fe++	so4--	-5.73442	1.843E-06	8.337E-06	2.211E-01	1.496E-05	1.2
fe++	f-	-5.20693	6.210E-06	1.277E-05	4.863E-01	1.750E-05	3.5
fe++	hs-	-13.15736	6.960E-14	1.431E-13	4.863E-01		
fe++	hco3-	-3.14280	7.198E-04	1.430E-03	5.033E-01	1.829E-03	3.9
fe++	oh-	-5.31340	4.860E-06	9.993E-06	4.863E-01	3.177E-04	1.5
fe++	alo2-	-5.59195	2.559E-06	5.167E-06	4.953E-01		
fe+++	cl-	-6.02767	9.383E-07	2.368E-06	3.962E-01		
fe+++	so4--	-12.54292	2.865E-13	2.029E-12	1.412E-01		
fe+++	f-	-9.39630	4.015E-10	9.901E-10	4.055E-01		
fe+++	hs-	-18.34054	4.565E-19	1.126E-18	4.055E-01		
fe+++	hco3-	-7.07416	8.430E-08	2.000E-07	4.215E-01		
fe+++	oh-	-9.51608	3.047E-10	7.515E-10	4.055E-01		
fe+++	alo2-	-9.82945	1.481E-10	3.578E-10	4.139E-01		

- (a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that
 1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
 2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4556E+00	97.89
nacl	0.9833E-02	2.11
naso4-	0.3178E-05	0.00
naf	0.4599E-06	0.00
naoh	0.4155E-06	0.00
naco3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.1077E-01	100.00
kso4-	0.1071E-06	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.8407E-03	99.98
caso4	0.6245E-07	0.01
ca(oh)+	0.5745E-07	0.01

caf+	0.4784E-07	0.01
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.3054E-02	99.90
mg(oh)+	0.1764E-05	0.06
mgf+	0.1040E-05	0.03
mgso4	0.2904E-06	0.01
mgco3	0.0000E+00	0.00
mghco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3666E-05	98.92
al(oh)3	0.4005E-07	1.08
al(oh)2+	0.7164E-10	0.00
al(oh)++	0.3124E-13	0.00
alf2+	0.8174E-15	0.00
alf++	0.6114E-15	0.00
alf3	0.6691E-16	0.00
alf++	0.1469E-16	0.00
alf4-	0.2415E-18	0.00
also4+	0.3001E-20	0.00
alf5--	0.5678E-21	0.00
alf6--	0.2224E-25	0.00
al3(oh)4(5+)	0.5088E-29	0.00
al13(oh)34+5	0.1949E-37	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.4390E-03	86.76
h3sio4-	0.6698E-04	13.24
sif6--	0.2363E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4556E+00	97.89
nacl	0.9833E-02	2.11

hcl	0.1265E-09	0.00
fecl++	0.1555E-20	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.6772E-05	65.05
na2so4	0.3178E-05	30.52
mgso4	0.2904E-06	2.79
kso4-	0.1071E-06	1.03
caso4	0.6245E-07	0.60
feso4	0.7220E-09	0.01
hso4-	0.7172E-12	0.00
hs-	0.1690E-16	0.00
h2s(aq)	0.2507E-18	0.00
also4+	0.3001E-20	0.00
feso4+	0.5937E-24	0.00
s--	0.3065E-24	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1424E-04	90.19
mgf+	0.1040E-05	6.58
naf	0.4599E-06	2.91
caf+	0.4784E-07	0.30
fef+	0.1250E-08	0.01
hf	0.5147E-10	0.00
hf2-	0.2355E-14	0.00
alf2+	0.8174E-15	0.00
alf++	0.6114E-15	0.00
alf3	0.6691E-16	0.00
alf4-	0.2415E-18	0.00
h2f2	0.4991E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
alf5--	0.5678E-21	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
alf6---	0.2224E-25	0.00
sif6--	0.2363E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe(oh)+	0.1122E-04	52.23

fe++	0.1026E-04	47.76
fef+	0.1250E-08	0.01
feso4	0.7220E-09	0.00
fe(oh)4-	0.6145E-09	0.00
fe(oh)3-	0.1532E-10	0.00
fe(oh)2+	0.9292E-12	0.00
fe(oh)++	0.6425E-15	0.00
fecl++	0.1555E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
fe+++	0.3327E-21	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
feso4+	0.5937E-24	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00
(feoh++)2	0.2646E-27	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1688E-01	100.00
total		100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
o2(aq) /h2o	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
h2(aq) /h2o	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
hs- /so4--	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
fe+++ /fe++	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	2.668	3.756	ssatd	na-montmoril	2.602	3.663	ssatd
mg-chlorite	5.596	7.879	ssatd	pyrite	-12.531	-17.643	
magnetite	14.776	20.804	ssatd	gypsum	-4.713	-6.635	
quartz	0.486	0.684	ssatd	low albite	3.997	5.628	ssatd
anorthite	-3.509	-4.941		muscovite	9.276	13.061	ssatd
illite	4.275	6.019	ssatd	amorphous si	-0.731	-1.029	
paragonite	9.155	12.890	ssatd	albite	2.793	3.932	ssatd

7
laumontite 3.282 4.621 ssatd

0 approx. saturated pure minerals
0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

11 supersaturated pure minerals
0 supersatd. end-members of specified solid solutions
0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.267469E-62	-62.57273
s2(g)	0.542811E-42	-42.26535
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.192428E-08	-8.71573
h2s(g)	0.326654E-17	-17.48591
steam	0.534169E-01	-1.27232

----- end of output -----
----- no pickup file written -----
----- reading the input file -----
----- end of input file -----

start time = 11:09:26
end time = 11:09:34

6

```

eeee  qqq  33333  n  n  rrrr
e      q  q      3  nn n  r  r
eeee  q  q      33  n n n  rrrr
e      q  q  q      3  n nn  r  r
eeee  qqq  3333  n  n  r  r
q

```

eq3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 05/25/91 creator= y.fujiwara
koetoi 09/15/90 -1015m sample after 10 litre of water had flowed out

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 34.55 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
toldl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolst = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect
convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis spec
na+	0.10700E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.42100E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.74300E+02	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.33700E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.12000E+01	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E-01	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.10300E+04	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

```

sio2(aq)  0.30400E+02  2  tot conc, mg/l
so4--    0.10000E+00  2  tot conc, mg/l
f-       0.30000E+00  2  tot conc, mg/l
cl-      0.16500E+05  2  tot conc, mg/l
h+       -0.85100E+01  16  log activity

```

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

```

clo4-    al13(oh)28(3+)  al(oh)3*    al2(oh)5+
naalo2   kcl              kco3-       fecl+
fecl2    fecl3-        fecl4--     fe(so4)2-
koh      mgcl+

```

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.46542E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.10768E-01	0	tot conc, molal	
ca++	0.84082E-03	0	tot conc, molal	
mg++	0.30570E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-06	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.50596E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.85100E+01	16	log activity	
cl-	0.46540E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.10410E-05	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.21487E-04	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.16881E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

```

iter = 0  delmax = 0.000E+00  delfnc = 0.000E+00
          del(      ) = 0.000E+00  beta(      ) = -0.218E-01
iter = 1  delmax = 0.946E-02  delfnc = 0.000E+00
          del( xi ) = -0.946E-02  beta(conc al+++ ) = -0.541E-02
iter = 2  delmax = 0.623E-03  delfnc = 0.934E+00
          del(conc al+++ ) = 0.623E-03  beta(conc al+++ ) = -0.710E-04
iter = 3  delmax = 0.892E-05  delfnc = 0.986E+00
          del(conc so4-- ) = -0.892E-05  beta(conc al+++ ) = -0.449E-06
iter = 4  delmax = 0.518E-07  delfnc = 0.994E+00
          del(conc al+++ ) = 0.518E-07  beta(conc al+++ ) = -0.230E-08
iter = 5  delmax = 0.269E-09  delfnc = 0.995E+00
          del(conc al+++ ) = 0.269E-09  beta(conc al+++ ) = -0.117E-10

```

iter = 6 delmax = 0.137E-11 delfnc = 0.995E+00
 del(conc al+++) = 0.137E-11 beta(conc al+++) = -0.753E-13

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888944.5295	888944.5295	0.5556111664E+02
na	10699.8930	10699.8930	0.4654197477E+00
k	421.0032	421.0032	0.1076781421E-01
ca	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al	0.0100	0.0100	0.3706174487E-06
si	14.2101	14.2101	0.5059583250E-03
h	111912.8887	111912.8887	0.1110357066E+03
c	202.7522	202.7522	0.1688054149E-01
cl	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
s	0.0334	0.0334	0.1041037706E-05
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000933.5162	1000933.5162	0.5556111664E+02
na+	10700.0000	10700.0000	0.4654197477E+00
k+	421.0000	421.0000	0.1076781421E-01
ca++	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg++	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al+++	0.0100	0.0100	0.3706174487E-06
sio2(a	30.4000	30.4000	0.5059583250E-03
h+	111923.9923	111923.9923	0.1110357066E+03
co3--	1012.9844	1012.9844	0.1688054149E-01
cl-	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
so4--	0.1000	0.1000	0.1041037706E-05
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551047501E+02	h2o	0.5551047501E+02
na+	0.4654197477E+00	na+	0.4654197477E+00
k+	0.1076781421E-01	k+	0.1076781421E-01

ca++	0.8408183633E-03	ca++	0.8408183633E-03
mg++	0.3056984160E-02	mg++	0.3056984160E-02
al+++	0.3706174487E-06	al+++	0.3706174487E-06
sio2(aq)	0.5059583250E-03	sio2(aq)	0.5059583250E-03
h+	0.1110188261E+03	h+	0.1110188261E+03
cl-	0.4654049023E+00	cl-	0.4654049023E+00
so4--	0.1041037706E-05	so4--	0.1041037706E-05
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.2148727774E-04	fe++	0.2148727774E-04
hco3-	0.1688054149E-01	hco3-	0.1688054149E-01

ph = 8.51000
 activity of water = 0.98468
 log activity of water = -0.00671
 osmotic coefficient = 0.00765
 stoichiometric sum of molalities = 111.9817415418869
 titration alkalinity = 0.0169723218843 eq/kg h2o
 ionic strength = 0.4772669004431
 equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4654197477164

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
 sigma(mz) cations = 0.4741771821E+00
 sigma(mz) anions = -0.4725450215E+00
 total charge = 0.9467222036E+00
 mean charge = 0.4733611018E+00
 charge imbalance = 0.1632160670E-02

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
 mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

0.17 per cent of the total charge
 0.34 per cent of the mean charge
 0.34 per cent of sigma(mz) cations
 0.35 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 8.0025
 log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.3507
 log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.3613
 log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 14.0191
 log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 6.6628
 log (act(sio2(aq))) = -3.3576
 log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -9.0428
 log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -23.9167
 log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.5343
 log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 11.4479
 log (act(o2(aq))) = -65.5315
 log (act(h2(aq))) = -11.8453
 log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -26.4600
 log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 3.0178
 log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.4382

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6940
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -15.1119

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4556E+00	-0.3414	-0.1661	0.3108E+00	-0.5075
cl-	0.4556E+00	-0.3414	-0.1914	0.2932E+00	-0.5328
hco3-	0.1688E-01	-1.7726	-0.1555	0.1180E-01	-1.9282
k+	0.1077E-01	-1.9679	-0.1914	0.6930E-02	-2.1593
nacl	0.9834E-02	-2.0073	0.0000	0.9834E-02	-2.0073
mg++	0.3054E-02	-2.5151	-0.4858	0.9980E-03	-3.0009
ca++	0.8407E-03	-3.0754	-0.5834	0.2194E-03	-3.6587
sio2(aq)	0.4390E-03	-3.3576	0.0000	0.4390E-03	-3.3576
h3sio4-	0.6698E-04	-4.1741	-0.1661	0.4570E-04	-4.3401
f-	0.1424E-04	-4.8464	-0.1779	0.9455E-05	-5.0243
fe(oh)+	0.1122E-04	-4.9499	-0.1661	0.7656E-05	-5.1160
fe++	0.1026E-04	-4.9887	-0.5834	0.2679E-05	-5.5721
oh-	0.9860E-05	-5.0061	-0.1779	0.6546E-05	-5.1840
mg(oh)+	0.1764E-05	-5.7535	-0.1661	0.1203E-05	-5.9196
mgf+	0.1040E-05	-5.9831	-0.1661	0.7093E-06	-6.1492
so4--	0.6772E-06	-6.1693	-0.7275	0.1268E-06	-6.8967
naf	0.4599E-06	-6.3374	0.0000	0.4599E-06	-6.3374
naoh	0.4156E-06	-6.3814	0.0000	0.4156E-06	-6.3814
alo2-	0.3666E-06	-6.4358	-0.1661	0.2501E-06	-6.6019
naso4-	0.3178E-06	-6.4979	-0.1596	0.2200E-06	-6.6575
ca(oh)+	0.5746E-07	-7.2407	-0.1661	0.3920E-07	-7.4067
caf+	0.4785E-07	-7.3201	-0.1661	0.3264E-07	-7.4862
mgso4	0.2904E-07	-7.5370	0.0000	0.2904E-07	-7.5370
kso4-	0.1071E-07	-7.9701	-0.1779	0.7112E-08	-8.1480
caso4	0.6246E-08	-8.2044	0.0000	0.6246E-08	-8.2044
al(oh)3	0.4005E-08	-8.3974	0.0000	0.4005E-08	-8.3974
h+	0.3856E-08	-8.4138	-0.0962	0.3090E-08	-8.5100
fef+	0.1250E-08	-8.9029	-0.1661	0.8531E-09	-9.0690
fe(oh)4-	0.6145E-09	-9.2115	-0.1661	0.4192E-09	-9.3775
hcl	0.1265E-09	-9.8980	0.0000	0.1265E-09	-9.8980
feso4	0.7221E-10	-10.1414	0.0000	0.7221E-10	-10.1414
hf	0.5147E-10	-10.2885	0.0000	0.5147E-10	-10.2885
fe(oh)3-	0.1532E-10	-10.8146	-0.1661	0.1045E-10	-10.9807
al(oh)2+	0.7164E-11	-11.1449	-0.1661	0.4887E-11	-11.3109
h2(aq)	0.1275E-11	-11.8946	0.0493	0.1428E-11	-11.8453
fe(oh)2+	0.9292E-12	-12.0319	-0.1661	0.6339E-12	-12.1980
hso4-	0.7172E-13	-13.1444	-0.1661	0.4893E-13	-13.3104
al(oh)++	0.3124E-14	-14.5052	-0.5834	0.8154E-15	-15.0886
hf2-	0.2355E-14	-14.6279	-0.1661	0.1607E-14	-14.7940
fe(oh)++	0.6425E-15	-15.1921	-0.7275	0.1203E-15	-15.9196
alf2+	0.8174E-16	-16.0876	-0.1661	0.5576E-16	-16.2537
alf++	0.6114E-16	-16.2137	-0.6477	0.1376E-16	-16.8614
alf3	0.6691E-17	-17.1745	0.0000	0.6691E-17	-17.1745
hs-	0.1690E-17	-17.7721	-0.1779	0.1122E-17	-17.9500
al+++	0.1469E-17	-17.8330	-1.0342	0.1358E-18	-18.8672
h2s(aq)	0.2507E-19	-19.6009	0.0000	0.2507E-19	-19.6009
alf4-	0.2415E-19	-19.6171	-0.1661	0.1648E-19	-19.7831
h2f2	0.4991E-20	-20.3018	0.0000	0.4991E-20	-20.3018
fecl++	0.1555E-20	-20.8084	-0.7275	0.2912E-21	-21.5358
fef++	0.1547E-20	-20.8104	-0.6477	0.3482E-21	-21.4582
fe++	0.3327E-21	-21.4780	-1.0342	0.3075E-22	-22.5122
fef2+	0.1173E-21	-21.9306	-0.1661	0.8005E-22	-22.0966

alf5--	0.5678E-22	-22.2458	-0.7275	0.1063E-22	-22.9733
also4+	0.3001E-22	-22.5227	-0.1661	0.2047E-22	-22.6888
fecl3	0.1804E-22	-22.7438	0.0000	0.1804E-22	-22.7438
fecl2+	0.1788E-22	-22.7477	-0.1661	0.1220E-22	-22.9137
fef3	0.2195E-23	-23.6585	0.0000	0.2195E-23	-23.6585
fecl4-	0.1120E-24	-24.9507	-0.1661	0.7642E-25	-25.1168
feso4+	0.5937E-25	-25.2264	-0.1661	0.4051E-25	-25.3925
s--	0.3065E-25	-25.5136	-0.6477	0.6898E-26	-26.1613
alf6---	0.2224E-26	-26.6528	-1.6631	0.4831E-28	-28.3159
(feoh++)2	0.2646E-27	-27.5774	-2.9731	0.2815E-30	-30.5505
al3(oh)4(5+)	0.5088E-32	-32.2935	-3.4249	0.1913E-35	-35.7184
sif6--	0.2363E-36	-36.6265	-0.7275	0.4426E-37	-37.3540
al13(oh)34+5	0.1949E-50	-50.7103	-8.9213	0.2336E-59	-59.6316
o2(aq)	0.2625E-65	-65.5809	0.0493	0.2941E-65	-65.5315

----- mean ionic properties -----

species	species	true (a)				stoichiometric (b)	
		log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.52017	3.019E-01	4.556E-01	6.626E-01	4.654E-01	6.486E-01
na+	so4--	-2.63725	2.305E-03	5.199E-03	4.434E-01	6.087E-03	3.788E-01
na+	f-	-2.76592	1.714E-03	2.547E-03	6.730E-01	2.711E-03	6.323E-01
na+	hs-	-9.22875	5.905E-10	8.775E-10	6.730E-01		
na+	hco3-	-1.21783	6.056E-02	8.770E-02	6.905E-01	8.864E-02	6.832E-01
na+	oh-	-2.84577	1.426E-03	2.119E-03	6.730E-01	2.341E-02	6.094E-02
na+	alo2-	-3.55468	2.788E-04	4.087E-04	6.822E-01		
k+	cl-	-1.34605	4.508E-02	7.004E-02	6.436E-01	7.079E-02	6.367E-01
k+	so4--	-3.73843	1.826E-04	4.282E-04	4.265E-01	4.942E-04	3.695E-01
k+	f-	-3.59181	2.560E-04	3.916E-04	6.536E-01	4.124E-04	6.208E-01
k+	hs-	-10.05463	8.818E-11	1.349E-10	6.536E-01		
k+	hco3-	-2.04371	9.042E-03	1.348E-02	6.707E-01	1.348E-02	6.707E-01
k+	oh-	-3.67166	2.130E-04	3.258E-04	6.536E-01	3.560E-03	5.982E-02
k+	alb2-	-4.38057	4.163E-05	6.283E-05	6.626E-01		
ca++	cl-	-1.57480	2.662E-02	5.588E-02	4.764E-01	5.668E-02	4.696E-01
ca++	so4--	-5.27773	5.276E-06	2.386E-05	2.211E-01	2.959E-05	1.783E-01
ca++	f-	-4.56913	2.697E-05	5.545E-05	4.863E-01	5.941E-05	4.540E-01
ca++	hs-	-13.18623	6.513E-14	1.339E-13	4.863E-01		
ca++	hco3-	-2.50501	3.126E-03	6.211E-03	5.033E-01	6.211E-03	5.033E-01
ca++	oh-	-4.67560	2.111E-05	4.340E-05	4.863E-01	1.052E-03	2.006E-02
ca++	alo2-	-5.62082	2.394E-06	4.834E-06	4.953E-01		
mg++	cl-	-1.35552	4.410E-02	8.590E-02	5.134E-01	8.716E-02	5.060E-01
mg++	so4--	-4.94882	1.125E-05	4.548E-05	2.474E-01	5.611E-05	1.994E-01
mg++	f-	-4.34986	4.468E-05	8.525E-05	5.241E-01	9.135E-05	4.891E-01
mg++	hs-	-12.96696	1.079E-13	2.059E-13	5.241E-01		
mg++	hco3-	-2.28573	5.179E-03	9.547E-03	5.425E-01	9.550E-03	5.423E-01
mg++	oh-	-4.45633	3.497E-05	6.671E-05	5.241E-01	1.618E-03	2.161E-02
mg++	alo2-	-5.40154	3.967E-06	7.432E-06	5.338E-01		
al+++	cl-	-5.11642	7.648E-06	1.930E-05	3.962E-01	1.390E-02	5.501E-04
al+++	so4--	-11.68492	2.066E-12	1.463E-11	1.412E-01	6.887E-07	2.999E-06
al+++	f-	-8.48505	3.273E-09	8.071E-09	4.055E-01	6.181E-06	5.295E-04
al+++	hs-	-18.17929	6.618E-19	1.632E-18	4.055E-01		
al+++	hco3-	-6.16291	6.872E-07	1.630E-06	4.215E-01	1.156E-03	5.947E-04
al+++	oh-	-8.60483	2.484E-09	6.126E-09	4.055E-01	1.568E-04	1.584E-05
al+++	alo2-	-9.66820	2.147E-10	5.187E-10	4.139E-01		
h+	cl-	-4.52142	3.010E-05	4.192E-05	7.181E-01	5.083E+00	5.922E-06
h+	so4--	-7.97225	1.066E-08	2.160E-08	4.936E-01	1.475E-01	7.228E-08
h+	f-	-6.76717	1.709E-07	2.344E-07	7.294E-01	2.961E-02	5.773E-06

h+	hs-	-13.23000	5.888E-14	8.073E-14	7.294E-01				
h+	hco3-	-5.21908	6.038E-06	8.068E-06	7.484E-01	9.680E-01	6.238E-06		
h+	alo2-	-7.55594	2.780E-08	3.760E-08	7.394E-01				
fe++	cl-	-2.21259	6.129E-03	1.287E-02	4.764E-01	1.670E-02	3.671E-01		
fe++	so4--	-6.23441	5.829E-07	2.636E-06	2.211E-01	4.730E-06	1.232E-01		
fe++	f-	-5.20692	6.210E-06	1.277E-05	4.863E-01	1.750E-05	3.549E-01		
fe++	hs-	-13.82402	1.500E-14	3.084E-14	4.863E-01				
fe++	hco3-	-3.14280	7.198E-04	1.430E-03	5.033E-01	1.829E-03	3.934E-01		
fe++	oh-	-5.31339	4.860E-06	9.993E-06	4.863E-01	3.100E-04	1.568E-02		
fe++	alo2-	-6.25861	5.513E-07	1.113E-06	4.953E-01				
fe+++	cl-	-6.02767	9.383E-07	2.368E-06	3.962E-01				
fe+++	so4--	-13.14291	7.196E-14	5.096E-13	1.412E-01				
fe+++	f-	-9.39630	4.015E-10	9.901E-10	4.055E-01				
fe+++	hs-	-19.09054	8.118E-20	2.002E-19	4.055E-01				
fe+++	hco3-	-7.07416	8.430E-08	2.000E-07	4.215E-01				
fe+++	oh-	-9.51608	3.047E-10	7.515E-10	4.055E-01				
fe+++	alo2-	-10.57944	2.634E-11	6.363E-11	4.139E-01				

(a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that

1. effective $cte(h^+) = cte(h^+) - conc(h_2o)$
2. effective $cte(oh^-) = cte(h_2o) - conc(h_2o)$

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4556E+00	97.89
nacl	0.9834E-02	2.11
naf	0.4599E-06	0.00
naoh	0.4156E-06	0.00
nao4-	0.3178E-06	0.00
naco3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.1077E-01	100.00
kso4-	0.1071E-07	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.8407E-03	99.99
ca(oh)+	0.5746E-07	0.01
caf+	0.4785E-07	0.01

caso4	0.6246E-08	0.00
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.3054E-02	99.91
mg(oh)+	0.1764E-05	0.06
mgf+	0.1040E-05	0.03
mgso4	0.2904E-07	0.00
mgco3	0.0000E+00	0.00
mghco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3666E-06	98.92
al(oh)3	0.4005E-08	1.08
al(oh)2+	0.7164E-11	0.00
al(oh)++	0.3124E-14	0.00
alf2+	0.8174E-16	0.00
alf++	0.6114E-16	0.00
alf3	0.6691E-17	0.00
al+++	0.1469E-17	0.00
alf4-	0.2415E-19	0.00
alf5--	0.5678E-22	0.00
also4+	0.3001E-22	0.00
alf6--	0.2224E-26	0.00
al3(oh)4(5+)	0.5088E-32	0.00
al13(oh)34+5	0.1949E-50	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.4390E-03	86.76
h3sio4-	0.6698E-04	13.24
sif6--	0.2363E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4556E+00	97.89
nacl	0.9834E-02	2.11

hcl	0.1265E-09	0.00
fecl1+	0.1555E-20	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.6772E-06	65.05
na2so4-	0.3178E-06	30.52
mgso4	0.2904E-07	2.79
kso4-	0.1071E-07	1.03
caso4	0.6246E-08	0.60
fes04	0.7221E-10	0.01
hso4-	0.7172E-13	0.00
hs-	0.1690E-17	0.00
h2s(aq)	0.2507E-19	0.00
also4+	0.3001E-22	0.00
feso4+	0.5937E-25	0.00
s--	0.3065E-25	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1424E-04	90.19
mgf+	0.1040E-05	6.58
naf	0.4599E-06	2.91
caf+	0.4785E-07	0.30
fef+	0.1250E-08	0.01
hf	0.5147E-10	0.00
hf2-	0.2355E-14	0.00
alf2+	0.8174E-16	0.00
alf++	0.6114E-16	0.00
alf3	0.6691E-17	0.00
alf4-	0.2415E-19	0.00
h2f2	0.4991E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
alf5--	0.5678E-22	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
alf6--	0.2224E-26	0.00
sif6--	0.2363E-36	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe(oh)+	0.1122E-04	52.23

fe++	0.1026E-04	47.76
fef+	0.1250E-08	0.01
fe(oh)4-	0.6145E-09	0.00
feso4	0.7221E-10	0.00
fe(oh)3-	0.1532E-10	0.00
fe(oh)2+	0.9292E-12	0.00
fe(oh)++	0.6425E-15	0.00
fecl1+	0.1555E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
fe+++	0.3327E-21	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00
feso4+	0.5937E-25	0.00
(feoh++)2	0.2646E-27	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1688E-01	100.00

total 100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
o2(aq) /h2o	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
h2(aq) /h2o	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
hs- /so4--	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
fe+++ /fe++	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	st
ca-montmorill	0.338	0.476	satd	na-montmorill	0.272	0.382	sat
mg-chlorite	3.596	5.063	ssatd	pyrite	-14.531	-20.459	
magnetite	14.776	20.804	ssatd	gypsum	-5.713	-8.043	
quartz	0.486	0.684	ssatd	low albite	2.997	4.220	ssa
anorthite	-5.509	-7.757		muscovite	6.276	8.837	ssa
illite	1.975	2.781	ssatd	amorphous si	-0.731	-1.029	
paragonite	6.155	8.666	ssatd	albite	1.793	2.524	ssa

laumontite 1.282 1.805 ssatd

2 approx. saturated pure minerals
0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

9 supersaturated pure minerals
0 supersatd. end-members of specified solid solutions
0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.267469E-62	-62.57273
s2(g)	0.542814E-44	-44.26535
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.192428E-08	-8.71573
h2s(g)	0.326654E-18	-18.48591
steam	0.534169E-01	-1.27232

----- end of output -----
----- no pickup file written -----
----- reading the input file -----
----- end of input file -----

start time = 11:33:23
end time = 11:33:31

```

FFFFF U U J III W W AAA RRRR AAA
F U U J I W W A A R R A A
F U U J I W W A A R R A A
FFFF U U J I W W A A RRRR A A
F U U J J I W W W AAAAA R R AAAAA
F U U J J I W W W A A R R A A
F UUUU JJJ III W W A A R R A A
    
```

```

PPPPPPPP NN NN CCCCCCCC 333333 222222
PPPPPPPP NN NN CCCCCCCC 333333 222222
PP PP NN NN CC 33 33 22 22
PP PP NN NN CC 33 33 22 22
PP PP NNNN NN CC 33 33 22 22
PP PP NNNN NN CC 33 33 22 22
PPPPPPPP NN NN NN CC 33 22
PPPPPPPP NN NN NN CC 33 22
PP NN NNNN CC 33 22
PP NN NNNN CC 33 22
PP NN NN CC 33 33 22
PP NN NN CC 33 33 22
PP NN NN CCCCCCCC 333333 2222222222
PP NN NN CCCCCCCC 333333 2222222222
    
```

```

000000 UU UU TTTTTTTTTT ??? 11
000000 UU UU TTTTTTTTTT ??? 11
00 00 UU UU TT ??? 1111
00 00 UU UU TT ??? 1111
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT ??? 11
00 00 UU UU TT ??? 11
00 00 UU UU TT ??? 11
00 00 UU UU TT ??? 11
00 00 UU UU TT ?? 11
00 00 UU UU TT ?? 11
.... 000000 UUUUUUUUUU TT ?? 111111
.... 000000 UUUUUUUUUU TT ?? 111111
    
```

FUJIWARA.EQ3MINIPNC32.OUT;1 (2591,93,0), last revised on 12-JUL-1991 19:00, is a 67 block s

The records are variable length with FORTRAN (FTN) carriage control. The longest recor

to SYS\$PRINT on 12-JUL-1991 19:00 by user FUJIWARA, UIC [FUJIWARA], under account 4010 at

IRSS\$LIAO: on 12-JUL-1991 19:01 from queue LIAO.

Digital Equipment Corporation - VAX/VMS Version V5.2-1

eg3nr.3245R86 run 19:00:42 12-JUL-9 supported by eqlib.3245R106

----- reading the input file -----
input file name= hbi01 created= 05/25/91 creator= y.fujiwara
koetoi 09/15/90 -1015m sample after 10 litre of water had flowed out
endit.

```

jobid= hbi01
tempc= 3.45500E+01 time= 1.00000E+00 hrs
rho= 0.10000E+01 tdspkg= 0.00000E+00 tdspl= 0.00000E+00
fep= -0.24700E+00 uredox=
tolbt= 0.00000E+00 toldl= 0.00000E+00 tolsat= 0.00000E+00
itermx= 0
    
```

```

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
iopti-10= -1 0 -1 0 0 0 0 0 0 0
loggi-10= 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
iopri-10= 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0
iodbi-10= 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
    
```

```

uebal= uacion= pick1.
nxmod= 4
species= naalo2
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al(oh)3*
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al13(oh)28(3+)
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al2(oh)5*+
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
    
```

```

run master data file csp jflag uphase
species master species
na+ 0.10700E+05 2
k+ 0.42100E+03 2
mg++ 0.74300E+02 2
ca++ 0.33700E+02 2
fe++ 0.12000E+01 2
al+++ 0.50000E-02 2
hco3- 0.10300E+04 2
sio2(aq) 0.30400E+02 2
so4-- 0.50000E-01 2
f- 0.30000E+00 2
cl- 0.16500E+05 2
h+ -0.85100E+01 16
    
```

endit.

----- the input file has been read -----

```

naalo2 has been user-suppressed
al(oh)3* has been user-suppressed
al13(oh)28(3+) has been user-suppressed
al2(oh)5*+ has been user-suppressed
    
```

----- file data1 has been successfully read -----

```

eeee  qqq  33333  n  n  rrrr
e      q  q      3  nn  n  r  r
eeee  q  q      33  n  n  n  rrrr
e      q  q  q    3  n  nn  r  r
eeee  qqq  33333  n  n  r  r
      q
  
```

eq3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 05/25/91 creator= y.fujiwara
koetoi 09/15/90 -1015m sample after 10 litre of water had flowed out

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 34.55 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
toldl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolsat = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis species
na+	0.10700E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.42100E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.74300E+02	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.33700E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.12000E+01	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.50000E-02	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.10300E+04	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

```

sio2(aq)  0.30400E+02  2  tot conc, mg/l
so4--    0.50000E-01  2  tot conc, mg/l
f-       0.30000E+00  2  tot conc, mg/l
cl-      0.16500E+05  2  tot conc, mg/l
h+       -0.85100E+01  16  log activity
  
```

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

```

clo4-    al13(oh)28(3+)  al(oh)3+  al2(oh)5*+
naalo2   kcl          kco3-     fecl+
fecl2    fecl3-      fecl4--   fe(so4)2-
koh      mgcl+
  
```

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.46542E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.10768E-01	0	tot conc, molal	
ca++	0.84082E-03	0	tot conc, molal	
mg++	0.30570E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.18531E-06	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.50596E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.85100E+01	16	log activity	
cl-	0.46540E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.52052E-06	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.21487E-04	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.16881E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

iter = 0	delmax = 0.000E+00	delfnc = 0.000E+00	beta(xi) = -0.218E-01
iter = 1	delmax = 0.946E-02	delfnc = 0.000E+00	beta(conc al+++) = -0.541E-02
iter = 2	delmax = 0.623E-03	delfnc = 0.934E+00	beta(conc al+++) = -0.710E-04
iter = 3	delmax = 0.892E-05	delfnc = 0.986E+00	beta(conc al+++) = -0.449E-06
iter = 4	delmax = 0.517E-07	delfnc = 0.994E+00	beta(conc al+++) = -0.230E-08
iter = 5	delmax = 0.269E-09	delfnc = 0.995E+00	beta(conc al+++) = -0.117E-10

iter = 6 delmax = 0.137E-11 delfnc = 0.995E+00
 del(conc al+++) = 0.137E-11 beta(conc al+++) = -0.767E-13

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888944.4902	888944.4902	0.5556111418E+02
na	10699.8930	10699.8930	0.4654197477E+00
k	421.0032	421.0032	0.1076781421E-01
ca	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al	0.0050	0.0050	0.1853087243E-06
si	14.2101	14.2101	0.5059583250E-03
h	111912.8887	111912.8887	0.1110357066E+03
c	202.7522	202.7522	0.1688054149E-01
cl	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
s	0.0167	0.0167	0.5205188532E-06
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000933.4720	1000933.4720	0.5556111418E+02
na+	10700.0000	10700.0000	0.4654197477E+00
k+	421.0000	421.0000	0.1076781421E-01
ca++	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg++	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al+++	0.0050	0.0050	0.1853087243E-06
sio2(a	30.4000	30.4000	0.5059583250E-03
h+	111923.9923	111923.9923	0.1110357066E+03
co3--	1012.9844	1012.9844	0.1688054149E-01
cl-	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
so4--	0.0500	0.0500	0.5205188532E-06
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551047256E+02	h2o	0.5551047256E+02
na+	0.4654197477E+00	na+	0.4654197477E+00
k+	0.1076781421E-01	k+	0.1076781421E-01

ca++	0.8408183633E-03	ca++	0.8408183633E-03
mg++	0.3056984160E-02	mg++	0.3056984160E-02
al+++	0.1853087243E-06	al+++	0.1853087243E-06
sio2(aq)	0.5059583250E-03	sio2(aq)	0.5059583250E-03
h+	0.1110188261E+03	h+	0.1110188261E+03
cl-	0.4654049023E+00	cl-	0.4654049023E+00
so4--	0.5205188532E-06	so4--	0.5205188532E-06
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.2148727774E-04	fe++	0.2148727774E-04
hco3-	0.1688054149E-01	hco3-	0.1688054149E-01

ph = 8.51000
 activity of water = 0.98468
 log activity of water = -0.00671
 osmotic coefficient = 0.00765
 stoichiometric sum of molalities = 111.9817408300552
 titration alkalinity = 0.0169715826816 eq/kg h2o
 ionic strength = 0.4772661612443
 equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4654197477164

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
 sigma(mz) cations = 0.4741773760E+00
 sigma(mz) anions = -0.4725439911E+00
 total charge = 0.9467213671E+00
 mean charge = 0.4733606835E+00
 charge imbalance = 0.1633384984E-02

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
 mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

0.17 per cent of the total charge
 0.35 per cent of the mean charge
 0.34 per cent of sigma(mz) cations
 0.35 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 8.0025
 log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.3507
 log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.3613
 log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 14.0191
 log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 6.3618
 log (act(sio2(aq))) = -3.3576
 log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -9.0428
 log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -24.2178
 log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.5343
 log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 11.4479
 log (act(o2(aq))) = -65.5315
 log (act(h2(aq))) = -11.8453
 log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -26.7610
 log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 3.0178
 log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.4382

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6940
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -15.4129

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4556E+00	-0.3414	-0.1661	0.3108E+00	-0.5075
cl-	0.4556E+00	-0.3414	-0.1914	0.2932E+00	-0.5328
hco3-	0.1688E-01	-1.7726	-0.1555	0.1180E-01	-1.9282
k+	0.1077E-01	-1.9679	-0.1914	0.6930E-02	-2.1593
nacl	0.9834E-02	-2.0073	0.0000	0.9834E-02	-2.0073
mg++	0.3054E-02	-2.5151	-0.4858	0.9980E-03	-3.0009
ca++	0.8407E-03	-3.0754	-0.5834	0.2194E-03	-3.6587
sio2(aq)	0.4390E-03	-3.3576	0.0000	0.4390E-03	-3.3576
h3sio4-	0.6698E-04	-4.1741	-0.1661	0.4570E-04	-4.3401
f-	0.1424E-04	-4.8464	-0.1779	0.9455E-05	-5.0243
fe(oh)+	0.1122E-04	-4.9499	-0.1661	0.7656E-05	-5.1160
fe++	0.1026E-04	-4.9887	-0.5834	0.2679E-05	-5.5721
oh-	0.9860E-05	-5.0061	-0.1779	0.6546E-05	-5.1840
mg(oh)+	0.1764E-05	-5.7535	-0.1661	0.1203E-05	-5.9196
mgf+	0.1040E-05	-5.9831	-0.1661	0.7093E-06	-6.1492
naf-	0.4599E-06	-6.3374	0.0000	0.4599E-06	-6.3374
naoh	0.4156E-06	-6.3814	0.0000	0.4156E-06	-6.3814
so4--	0.3386E-06	-6.4703	-0.7275	0.6342E-07	-7.1978
alo2-	0.1833E-06	-6.7368	-0.1661	0.1251E-06	-6.9029
naso4-	0.1589E-06	-6.7989	-0.1596	0.1100E-06	-6.9585
ca(oh)+	0.5746E-07	-7.2407	-0.1661	0.3920E-07	-7.4067
caf+	0.4785E-07	-7.3201	-0.1661	0.3264E-07	-7.4862
mgso4	0.1452E-07	-7.8380	0.0000	0.1452E-07	-7.8380
kso4-	0.5356E-08	-8.2711	-0.1779	0.3556E-08	-8.4491
h+	0.3856E-08	-8.4138	-0.0962	0.3090E-08	-8.5100
caso4	0.3123E-08	-8.5054	0.0000	0.3123E-08	-8.5054
al(oh)3	0.2003E-08	-8.6984	0.0000	0.2003E-08	-8.6984
fef+	0.1251E-08	-8.9029	-0.1661	0.8531E-09	-9.0690
fe(oh)4-	0.6145E-09	-9.2115	-0.1661	0.4192E-09	-9.3775
hcl	0.1265E-09	-9.8980	0.0000	0.1265E-09	-9.8980
hf	0.5147E-10	-10.2885	0.0000	0.5147E-10	-10.2885
feso4	0.3610E-10	-10.4425	0.0000	0.3610E-10	-10.4425
fe(oh)3-	0.1532E-10	-10.8146	-0.1661	0.1045E-10	-10.9807
al(oh)2+	0.3582E-11	-11.4459	-0.1661	0.2444E-11	-11.6120
h2(aq)	0.1275E-11	-11.8946	0.0493	0.1428E-11	-11.8453
fe(oh)2+	0.9292E-12	-12.0319	-0.1661	0.6339E-12	-12.1980
hso4-	0.3586E-13	-13.4454	-0.1661	0.2446E-13	-13.6115
hf2-	0.2355E-14	-14.6279	-0.1661	0.1607E-14	-14.7940
al(oh)++	0.1562E-14	-14.8063	-0.5834	0.4077E-15	-15.3896
fe(oh)++	0.6425E-15	-15.1921	-0.7275	0.1203E-15	-15.9196
alf2+	0.4087E-16	-16.3886	-0.1661	0.2788E-16	-16.5547
alf+	0.3057E-16	-16.5147	-0.6477	0.6880E-17	-17.1624
alf3	0.3346E-17	-17.4755	0.0000	0.3346E-17	-17.4755
hs-	0.8451E-18	-18.0731	-0.1779	0.5610E-18	-18.2510
al+++	0.7344E-18	-18.1340	-1.0342	0.6789E-19	-19.1682
h2s(aq)	0.1253E-19	-19.9019	0.0000	0.1253E-19	-19.9019
alf4-	0.1208E-19	-19.9181	-0.1661	0.8238E-20	-20.0842
h2f2	0.4991E-20	-20.3018	0.0000	0.4991E-20	-20.3018
fecl1+	0.1555E-20	-20.8084	-0.7275	0.2912E-21	-21.5358
fef++	0.1547E-20	-20.8104	-0.6477	0.3482E-21	-21.4582
fe+++	0.3327E-21	-21.4780	-1.0342	0.3075E-22	-22.5122
fef2+	0.1173E-21	-21.9306	-0.1661	0.8005E-22	-22.0966

alf5--	0.2839E-22	-22.5468	-0.7275	0.5317E-23	-23.2743
fecl3	0.1804E-22	-22.7438	0.0000	0.1804E-22	-22.7438
fecl2+	0.1788E-22	-22.7477	-0.1661	0.1220E-22	-22.9137
also4+	0.7503E-23	-23.1248	-0.1661	0.5119E-23	-23.2908
fef3	0.2195E-23	-23.6585	0.0000	0.2195E-23	-23.6585
fecl4-	0.1120E-24	-24.9507	-0.1661	0.7642E-25	-25.1168
feso4+	0.2969E-25	-25.5274	-0.1661	0.2025E-25	-25.6935
s--	0.1533E-25	-25.8146	-0.6477	0.3449E-26	-26.4623
alf6---	0.1112E-26	-26.9538	-1.6631	0.2416E-28	-28.6170
(feoh++)2	0.2646E-27	-27.9774	-2.9731	0.2815E-30	-30.5505
al3(oh)4(5+)	0.6359E-33	-33.1966	-3.4249	0.2391E-36	-36.6215
sif6--	0.2363E-36	-36.6265	-0.7275	0.4426E-37	-37.3540
al13(oh)34+5	0.2379E-54	-54.6237	-8.9213	0.2851E-63	-63.5450
o2(aq)	0.2625E-65	-65.5809	0.0493	0.2941E-65	-65.5315

----- mean ionic properties -----

species	species	true (a)				stoichiometric (b)	
		log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.52017	3.019E-01	4.556E-01	6.626E-01	4.654E-01	6.486E-01
na+	so4--	-2.73759	1.830E-03	4.127E-03	4.434E-03	4.831E-03	3.788E-01
na+	f-	-2.76592	1.714E-03	2.547E-03	6.730E-01	2.711E-03	6.323E-01
na+	hs-	-9.37926	4.176E-10	6.205E-10	6.730E-01		
na+	hco3-	-1.21783	6.056E-02	8.770E-02	6.905E-01	8.864E-02	6.832E-01
na+	oh-	-2.84577	1.426E-03	2.119E-03	6.730E-01	2.338E-02	6.100E-02
na+	alo2-	-3.70520	1.972E-04	2.890E-04	6.822E-01		
k+	cl-	-1.34605	4.508E-02	7.004E-02	6.436E-01	7.079E-02	6.367E-01
k+	so4--	-3.83877	1.450E-04	3.399E-04	4.265E-01	3.923E-04	3.695E-01
k+	f-	-3.59181	2.560E-04	3.916E-04	6.536E-01	4.124E-04	6.208E-01
k+	hs-	-10.20515	6.235E-11	9.539E-11	6.536E-01		
k+	hco3-	-2.04371	9.042E-03	1.348E-02	6.707E-01	1.348E-02	6.707E-01
k+	oh-	-3.67166	2.130E-04	3.258E-04	6.536E-01	3.557E-03	5.988E-02
k+	alo2-	-4.53108	2.944E-05	4.443E-05	6.626E-01		
ca++	cl-	-1.57480	2.662E-02	5.588E-02	4.764E-01	5.668E-02	4.696E-01
ca++	so4--	-5.42824	3.730E-06	1.687E-05	2.211E-01	2.092E-05	1.783E-01
ca++	f-	-4.56913	2.697E-05	5.545E-05	4.863E-01	5.941E-05	4.540E-01
ca++	hs-	-13.38692	4.103E-14	8.436E-14	4.863E-01		
ca++	hco3-	-2.50501	3.126E-03	6.211E-03	5.033E-01	6.211E-03	5.033E-01
ca++	oh-	-4.67560	2.111E-05	4.340E-05	4.863E-01	1.051E-03	2.008E-02
ca++	alo2-	-5.82150	1.508E-06	3.046E-06	4.953E-01		
mg++	cl-	-1.35552	4.410E-02	8.590E-02	5.134E-01	8.716E-02	5.060E-01
mg++	so4--	-5.09933	7.956E-06	3.216E-05	2.474E-01	3.989E-05	1.994E-01
mg++	f-	-4.34986	4.468E-05	8.525E-05	5.241E-01	9.135E-05	4.891E-01
mg++	hs-	-13.16765	6.798E-14	1.297E-13	5.241E-01		
mg++	hco3-	-2.28573	5.179E-03	9.547E-03	5.425E-01	9.550E-03	5.423E-01
mg++	oh-	-4.45633	3.497E-05	6.671E-05	5.241E-01	1.616E-03	2.164E-02
mg++	alo2-	-5.60223	2.499E-06	4.682E-06	5.338E-01		
al+++	cl-	-5.19168	6.432E-06	1.623E-05	3.962E-01	1.169E-02	5.501E-04
al+++	so4--	-11.98595	1.033E-12	7.315E-12	1.412E-01	3.444E-07	2.999E-06
al+++	f-	-8.56031	2.752E-09	6.787E-09	4.055E-01	5.197E-06	5.295E-04
al+++	hs-	-18.48032	3.309E-19	8.160E-19	4.055E-01		
al+++	hco3-	-6.23817	5.779E-07	1.371E-06	4.215E-01	9.717E-04	5.947E-04
al+++	oh-	-8.68009	2.089E-09	5.151E-09	4.055E-01	1.317E-04	1.587E-05
al+++	alo2-	-9.96923	1.073E-10	2.593E-10	4.139E-01		
h+	cl-	-4.52142	3.010E-05	4.192E-05	7.181E-01	5.083E+00	5.922E-06
h+	so4--	-8.07259	8.461E-09	1.714E-08	4.936E-01	1.171E-01	7.228E-08
h+	f-	-6.76717	1.709E-07	2.344E-07	7.294E-01	2.961E-02	5.773E-06

h+	hs-	-13.38051	4.164E-14	5.709E-14	7.294E-01		
h+	hco3-	-5.21908	6.038E-06	8.068E-06	7.484E-01	9.680E-01	6.238E-06
h+	alo2-	-7.70645	1.966E-08	2.659E-08	7.394E-01		
fe++	cl-	-2.21259	6.129E-03	1.287E-02	4.764E-01	1.670E-02	3.671E-01
fe++	so4--	-6.38493	4.122E-07	1.864E-06	2.211E-01	3.344E-06	1.232E-01
fe++	f-	-5.20692	6.210E-06	1.277E-05	4.863E-01	1.750E-05	3.549E-01
fe++	hs-	-14.02471	9.447E-15	1.943E-14	4.863E-01		
fe++	hco3-	-3.14280	7.198E-04	1.430E-03	5.033E-01	1.829E-03	3.934E-01
fe++	oh-	-5.31339	4.860E-06	9.993E-06	4.863E-01	3.095E-04	1.570E-02
fe++	alo2-	-6.45929	3.473E-07	7.012E-07	4.953E-01		
fe+++	cl-	-6.02767	9.383E-07	2.368E-06	3.962E-01		
fe+++	so4--	-13.32353	4.748E-14	3.362E-13	1.412E-01		
fe+++	f-	-9.39630	4.015E-10	9.901E-10	4.055E-01		
fe+++	hs-	-19.31631	4.827E-20	1.190E-19	4.055E-01		
fe+++	hco3-	-7.07416	8.430E-08	2.000E-07	4.215E-01		
fe+++	oh-	-9.51608	3.047E-10	7.515E-10	4.055E-01		
fe+++	alo2-	-10.80522	1.566E-11	3.783E-11	4.139E-01		

(a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that
 1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
 2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4556E+00	97.89
nacl	0.9834E-02	2.11
naf	0.4599E-06	0.00
naoh	0.4156E-06	0.00
naso4-	0.1589E-06	0.00
naco3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.1077E-01	100.00
kso4-	0.5356E-08	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.8407E-03	99.99
ca(oh)+	0.5746E-07	0.01
caf+	0.4785E-07	0.01

caso4	0.3123E-08	0.00
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.3054E-02	99.91
mg(oh)+	0.1764E-05	0.06
mgf+	0.1040E-05	0.03
mgso4	0.1452E-07	0.00
mgco3	0.0000E+00	0.00
mgchco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.1833E-06	98.92
al(oh)3	0.2003E-08	1.08
al(oh)2+	0.3582E-11	0.00
al(oh)++	0.1562E-14	0.00
alf2+	0.4087E-16	0.00
alf++	0.3057E-16	0.00
alf3	0.3346E-17	0.00
al+++	0.7344E-18	0.00
alf4-	0.1208E-19	0.00
alf5--	0.2839E-22	0.00
also4+	0.7503E-23	0.00
alf6---	0.1112E-26	0.00
al3(oh)4(5+)	0.6359E-33	0.00
al13(oh)34+5	0.2379E-54	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(ag)

species	molal conc	per cent
sio2(ag)	0.4390E-03	86.76
h3sio4-	0.6698E-04	13.24
sif6--	0.2363E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4556E+00	97.89
nacl	0.9834E-02	2.11

hcl	0.1265E-09	0.00
fecl++	0.1555E-20	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.3386E-06	65.05
naso4-	0.1589E-06	30.52
mgso4	0.1452E-07	2.79
ksO4-	0.5356E-08	1.03
caso4	0.3123E-08	0.60
feso4	0.3610E-10	0.01
hso4-	0.3586E-13	0.00
hs-	0.8451E-18	0.00
h2s(aq)	0.1253E-19	0.00
also4+	0.7503E-23	0.00
feso4+	0.2969E-25	0.00
s--	0.1533E-25	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1424E-04	90.19
mgf+	0.1040E-05	6.58
naf	0.4599E-06	2.91
caf+	0.4785E-07	0.30
fef+	0.1251E-08	0.01
hf	0.5147E-10	0.00
hf2-	0.2355E-14	0.00
alf2+	0.4087E-16	0.00
alf++	0.3057E-16	0.00
alf3	0.3346E-17	0.00
alf4-	0.1208E-19	0.00
h2f2	0.4991E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
alf5--	0.2839E-22	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
alf6---	0.1112E-26	0.00
sif6--	0.2363E-36	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe(oh)+	0.1122E-04	52.23

fe++	0.1026E-04	47.76
fef+	0.1251E-08	0.01
fe(oh)4-	0.6145E-09	0.00
feso4	0.3610E-10	0.00
fe(oh)3-	0.1532E-10	0.00
fe(oh)2+	0.9292E-12	0.00
fe(oh)++	0.6425E-15	0.00
fecl++	0.1555E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
fe+++	0.3327E-21	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00
feso4+	0.2969E-25	0.00
(feoh++)2	0.2646E-27	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1688E-01	100.00

total 100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
o2(aq) /h2o	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
h2(aq) /h2o	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
hs- /so4--	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
fe+++ /fe++	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	-0.363	-0.512		na-montmoril	-0.430	-0.605	
mg-chlorite	2.994	4.215	ssatd	pyrite	-15.133	-21.307	
magnetite	14.776	20.804	ssatd	gypsum	-6.014	-8.467	
quartz	0.486	0.684	ssatd	low albite	2.696	3.797	ssatd
anorthite	-6.111	-8.605		muscovite	5.373	7.565	ssatd
illite	1.283	1.806	ssatd	amorphous si	-0.731	-1.029	
paragonite	5.252	7.394	ssatd	albite	1.492	2.100	ssatd

laumontite 0.680 0.957 ssatd

0 approx. saturated pure minerals
 0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
 0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

9 supersaturated pure minerals
 0 supersatd. end-members of specified solid solutions
 0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.267469E-62	-62.57273
s2(g)	0.135703E-44	-44.86741
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.192428E-08	-8.71573
h2s(g)	0.163327E-18	-18.78694
steam	0.534169E-01	-1.27232

----- end of output -----
 ----- no pickup file written -----
 ----- reading the input file -----
 ----- end of input file -----

start time = 19:00:41
 end time = 19:00:50


```

eeee  qqq  33333  n  n  rrrr
e      q  q      3  nn n  r  r
eeee  q  q      33  n n n  rrrr
e      q  q  q      3  n  nn  r  r
eeee  qqq  3333  n  n  r  r
q

```

eg3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 05/25/91 creator= y.fujiwara
koetol 09/15/90 -1015m sample after 10 litre of water had flowed out

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 34.55 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
toldl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolsat = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect
convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis species
na+	0.10700E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.42100E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.74300E+02	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.33700E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.12000E+01	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E-02	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.10300E+04	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

```

sio2(aq)  0.30400E+02  2  tot conc, mg/l
so4--     0.10000E-01  2  tot conc, mg/l
f-        0.30000E+00  2  tot conc, mg/l
cl-       0.16500E+05  2  tot conc, mg/l
h+        -0.85100E+01  16 log activity

```

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
clo4-	al13(oh)28(3+)			
naalo2	kl1			
fecl2	fecl3-			
koh	mgcl+			
	al(oh)3*			
	kco3-			
	fecl4--			
	al2(oh)5**			
	fecl+			
	fe(so4)2-			

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.46542E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.10768E-01	0	tot conc, molal	
ca++	0.84082E-03	0	tot conc, molal	
mg++	0.30570E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-07	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.50596E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.85100E+01	16	log activity	
cl-	0.46540E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.10410E-06	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.21487E-04	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.16881E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

iter = 0	delmax = 0.000E+00	delfnc = 0.000E+00		
	del() = 0.000E+00	beta(xi) = -0.218E-01		
iter = 1	delmax = 0.946E-02	delfnc = 0.000E+00		
	del(xi) = -0.946E-02	beta(conc al+++) = -0.541E-02		
iter = 2	delmax = 0.623E-03	delfnc = 0.934E+00		
	del(conc al+++) = 0.623E-03	beta(conc al+++) = -0.710E-04		
iter = 3	delmax = 0.892E-05	delfnc = 0.986E+00		
	del(conc so4--) = -0.892E-05	beta(conc al+++) = -0.449E-06		
iter = 4	delmax = 0.517E-07	delfnc = 0.994E+00		
	del(conc al+++) = 0.517E-07	beta(conc al+++) = -0.230E-08		
iter = 5	delmax = 0.269E-09	delfnc = 0.995E+00		
	del(conc al+++) = 0.269E-09	beta(conc al+++) = -0.117E-10		

iter = 6 delmax = 0.137E-11 delfnc = 0.995E+00
del(conc al+++) = 0.137E-11 beta(conc al+++) = -0.430E-13

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888944.4588	888944.4588	0.5556111222E+02
na	10699.8930	10699.8930	0.4654197477E+00
k	421.0032	421.0032	0.1076781421E-01
ca	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al	0.0010	0.0010	0.3706174487E-07
si	14.2101	14.2101	0.5059583250E-03
h	111912.8887	111912.8887	0.1110357066E+03
c	202.7522	202.7522	0.1688054149E-01
cl	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
s	0.0033	0.0033	0.1041037706E-06
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000933.4366	1000933.4366	0.5556111222E+02
na+	10700.0000	10700.0000	0.4654197477E+00
k+	421.0000	421.0000	0.1076781421E-01
ca++	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg++	74.3000	74.3000	0.3056984160E-02
al+++	0.0010	0.0010	0.3706174487E-07
sio2(a	30.4000	30.4000	0.5059583250E-03
h+	111923.9923	111923.9923	0.1110357066E+03
co3--	1012.9844	1012.9844	0.1688054149E-01
cl-	16500.0000	16500.0000	0.4654049023E+00
so4--	0.0100	0.0100	0.1041037706E-06
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	1.2000	1.2000	0.2148727774E-04

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551047059E+02	h2o	0.5551047059E+02
na+	0.4654197477E+00	na+	0.4654197477E+00
k+	0.1076781421E-01	k+	0.1076781421E-01

ca++	0.8408183633E-03	ca++	0.8408183633E-03
mg++	0.3056984160E-02	mg++	0.3056984160E-02
al+++	0.3706174487E-07	al+++	0.3706174487E-07
sio2(aq)	0.5059583250E-03	sio2(aq)	0.5059583250E-03
h+	0.1110188261E+03	h+	0.1110188261E+03
cl-	0.4654049023E+00	cl-	0.4654049023E+00
so4--	0.1041037706E-06	so4--	0.1041037706E-06
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.2148727774E-04	fe++	0.2148727774E-04
hco3-	0.1688054149E-01	hco3-	0.1688054149E-01

ph = 8.51000
activity of water = 0.98468
log activity of water = -0.00671
osmotic coefficient = 0.00765
stoichiometric sum of molalities = 111.9817402605899
titration alkalinity = 0.0169709913194 eq/kg h2o
ionic strength = 0.4772655698860
equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4654197477164

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
sigma(mz) cations = 0.4741775312E+00
sigma(mz) anions = -0.4725431667E+00
total charge = 0.9467206979E+00
mean charge = 0.4733603490E+00
charge imbalance = 0.1634364435E-02

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

0.17 per cent of the total charge
0.35 per cent of the mean charge
0.34 per cent of sigma(mz) cations
0.35 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 8.0025
log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.3507
log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.3613
log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 14.0191
log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 5.6428
log (act(sio2(aq))) = -3.3576
log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -9.0428
log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -24.9167
log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.5343
log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 11.4479
log (act(o2(aq))) = -65.5315
log (act(h2(aq))) = -11.8453
log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -27.4600
log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 3.0178
log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.4382

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6940
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -16.1119

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4556E+00	-0.3414	-0.1661	0.3108E+00	-0.5075
cl-	0.4556E+00	-0.3414	-0.1914	0.2932E+00	-0.5328
hco3-	0.1688E-01	-1.7726	-0.1555	0.1180E-01	-1.9282
k+	0.1077E-01	-1.9679	-0.1914	0.6930E-02	-2.1593
nacl	0.9834E-02	-2.0073	0.0000	0.9834E-02	-2.0073
mg++	0.3054E-02	-2.5151	-0.4858	0.9980E-03	-3.0009
ca++	0.8407E-03	-3.0754	-0.5834	0.2194E-03	-3.6587
sio2(aq)	0.4390E-03	-3.3576	0.0000	0.4390E-03	-3.3576
h3sio4-	0.6698E-04	-4.1741	-0.1661	0.4570E-04	-4.3401
f-	0.1424E-04	-4.8464	-0.1779	0.9455E-05	-5.0243
fe(oh)+	0.1122E-04	-4.9499	-0.1661	0.7656E-05	-5.1160
fe++	0.1026E-04	-4.9887	-0.5834	0.2679E-05	-5.5721
oh-	0.9860E-05	-5.0061	-0.1779	0.6546E-05	-5.1840
mg(oh)+	0.1764E-05	-5.7535	-0.1661	0.1203E-05	-5.9196
mgf+	0.1040E-05	-5.9831	-0.1661	0.7093E-06	-6.1492
naf	0.4599E-06	-6.3374	0.0000	0.4599E-06	-6.3374
naoh	0.4156E-06	-6.3814	0.0000	0.4156E-06	-6.3814
so4--	0.6772E-07	-7.1693	-0.7275	0.1268E-07	-7.8967
ca(oh)+	0.5746E-07	-7.2407	-0.1661	0.3920E-07	-7.4067
caf+	0.4785E-07	-7.3201	-0.1661	0.3264E-07	-7.4862
alo2-	0.3666E-07	-7.4358	-0.1661	0.2501E-07	-7.6019
nao4-	0.3178E-07	-7.4979	-0.1596	0.2200E-07	-7.6575
h+	0.3856E-08	-8.4138	-0.0962	0.3090E-08	-8.5100
mgso4	0.2904E-08	-8.5370	0.0000	0.2904E-08	-8.5370
fef+	0.1251E-08	-8.9029	-0.1661	0.8531E-09	-9.0690
kso4-	0.1071E-08	-8.9701	-0.1779	0.7112E-09	-9.1480
caso4	0.6246E-09	-9.2044	0.0000	0.6246E-09	-9.2044
fe(oh)4-	0.6145E-09	-9.2115	-0.1661	0.4192E-09	-9.3775
al(oh)3	0.4005E-09	-9.3974	0.0000	0.4005E-09	-9.3974
hcl	0.1265E-09	-9.8980	0.0000	0.1265E-09	-9.8980
hf	0.5147E-10	-10.2885	0.0000	0.5147E-10	-10.2885
fe(oh)3-	0.1532E-10	-10.8146	-0.1661	0.1045E-10	-10.9807
feso4	0.7221E-11	-11.1414	0.0000	0.7221E-11	-11.1414
h2(aq)	0.1275E-11	-11.8946	0.0493	0.1428E-11	-11.8453
fe(oh)2+	0.9292E-12	-12.0319	-0.1661	0.6339E-12	-12.1980
al(oh)2+	0.7164E-12	-12.1449	-0.1661	0.4887E-12	-12.3109
hso4-	0.7172E-14	-14.1444	-0.1661	0.4893E-14	-14.3104
hf2-	0.2355E-14	-14.6279	-0.1661	0.1607E-14	-14.7940
fe(oh)++	0.6426E-15	-15.1921	-0.7275	0.1203E-15	-15.9196
al(oh)++	0.3124E-15	-15.5052	-0.5834	0.8154E-16	-16.0886
alf2+	0.8174E-17	-17.0876	-0.1661	0.5576E-17	-17.2537
alf+	0.6114E-17	-17.2137	-0.6477	0.1376E-17	-17.8614
alf3	0.6691E-18	-18.1745	0.0000	0.6691E-18	-18.1745
hs-	0.1690E-18	-18.7721	-0.1779	0.1122E-18	-18.9500
al+++	0.1469E-18	-18.8330	-1.0342	0.1358E-19	-19.8672
h2f2	0.4991E-20	-20.3018	0.0000	0.4991E-20	-20.3018
h2s(aq)	0.2507E-20	-20.6009	0.0000	0.2507E-20	-20.6009
alf4-	0.2415E-20	-20.6171	-0.1661	0.1648E-20	-20.7832
fecl1+	0.1555E-20	-20.8084	-0.7275	0.2912E-21	-21.5358
fef++	0.1547E-20	-20.8104	-0.6477	0.3482E-21	-21.4582
fe+++	0.3327E-21	-21.4780	-1.0342	0.3075E-22	-22.5122
fef2+	0.1173E-21	-21.9306	-0.1661	0.8005E-22	-22.0966

fecl3	0.1804E-22	-22.7438	0.0000	0.1804E-22	-22.7438
fecl2+	0.1788E-22	-22.7477	-0.1661	0.1220E-22	-22.9137
alf5--	0.5678E-23	-23.2458	-0.7275	0.1063E-23	-23.9733
fef3	0.2195E-23	-23.6585	0.0000	0.2195E-23	-23.6585
also4+	0.3001E-24	-24.5227	-0.1661	0.2047E-24	-24.6888
fecl4-	0.1120E-24	-24.9507	-0.1661	0.7642E-25	-25.1168
feso4+	0.5937E-26	-26.2264	-0.1661	0.4051E-26	-26.3925
s--	0.3065E-26	-26.5136	-0.6477	0.6898E-27	-27.1613
(feoh++)2	0.2646E-27	-27.5774	-2.9731	0.2815E-30	-30.5505
alf6---	0.2224E-27	-27.6528	-1.6631	0.4831E-29	-29.3159
al3(oh)4(5+)	0.5088E-35	-35.2935	-3.4249	0.1913E-38	-38.7184
sif6--	0.2363E-36	-36.6265	-0.7275	0.4426E-37	-37.3540
al13(oh)34+5	0.1949E-63	-63.7103	-8.9213	0.2336E-72	-72.6316
o2(aq)	0.2625E-65	-65.5809	0.0493	0.2941E-65	-65.5315

----- mean ionic properties -----

species	species	true (a)				stoichiometric (b)	
		log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.52017	3.019E-01	4.556E-01	6.626E-01	4.654E-01	6.486E-01
na+	so4--	-2.97058	1.070E-03	2.413E-03	4.434E-01	2.825E-03	3.788E-01
na+	f-	-2.76592	1.714E-03	2.547E-03	6.730E-01	2.711E-03	6.323E-01
na+	hs-	-9.72875	1.867E-10	2.775E-10	6.730E-01		
na+	hco3-	-1.21783	6.056E-02	8.770E-02	6.905E-01	8.864E-02	6.832E-01
na+	oh-	-2.84577	1.426E-03	2.119E-03	6.730E-01	2.336E-02	6.105E-02
na+	alo2-	-4.05468	8.817E-05	1.292E-04	6.822E-01		
k+	cl-	-1.34605	4.508E-02	7.004E-02	6.436E-01	7.079E-02	6.367E-01
k+	so4--	-4.07176	8.477E-05	1.988E-04	4.265E-01	2.294E-04	3.695E-01
k+	f-	-3.59181	2.560E-04	3.916E-04	6.536E-01	4.124E-04	6.208E-01
k+	hs-	-10.55463	2.788E-11	4.266E-11	6.536E-01		
k+	hco3-	-2.04371	9.042E-03	1.348E-02	6.707E-01	1.348E-02	6.707E-01
k+	oh-	-3.67166	2.130E-04	3.258E-04	6.536E-01	3.554E-03	5.993E-02
k+	alo2-	-4.88057	1.317E-05	1.987E-05	6.626E-01		
ca++	cl-	-1.57480	2.662E-02	5.588E-02	4.764E-01	5.668E-02	4.696E-01
ca++	so4--	-5.77773	1.668E-06	7.545E-06	2.211E-01	9.356E-06	1.783E-01
ca++	f-	-4.56913	2.697E-05	5.545E-05	4.863E-01	5.941E-05	4.540E-01
ca++	hs-	-13.85290	1.403E-14	2.885E-14	4.863E-01		
ca++	hco3-	-2.50501	3.126E-03	6.211E-03	5.033E-01	6.211E-03	5.033E-01
ca++	oh-	-4.67560	2.111E-05	4.340E-05	4.863E-01	1.050E-03	2.011E-02
ca++	alo2-	-6.28748	5.158E-07	1.042E-06	4.953E-01		
mg++	cl-	-1.35552	4.410E-02	8.590E-02	5.134E-01	8.716E-02	5.060E-01
mg++	so4--	-5.44881	3.558E-06	1.438E-05	2.474E-01	1.784E-05	1.994E-01
mg++	f-	-4.34986	4.468E-05	8.525E-05	5.241E-01	9.135E-05	4.891E-01
mg++	hs-	-13.63363	2.325E-14	4.435E-14	5.241E-01		
mg++	hco3-	-2.28573	5.179E-03	9.547E-03	5.425E-01	9.550E-03	5.423E-01
mg++	oh-	-4.54633	3.497E-05	6.671E-05	5.241E-01	1.614E-03	2.167E-02
mg++	alo2-	-6.06821	8.547E-07	1.601E-06	5.338E-01		
al+++	cl-	-5.36642	4.301E-06	1.086E-05	3.962E-01	7.818E-03	5.501E-04
al+++	so4--	-12.68492	2.066E-13	1.463E-12	1.412E-01	6.887E-08	2.999E-06
al+++	f-	-8.73505	1.841E-09	4.539E-09	4.055E-01	3.476E-06	5.295E-04
al+++	hs-	-19.17929	6.618E-20	1.632E-19	4.055E-01		
al+++	hco3-	-6.41291	3.864E-07	9.168E-07	4.215E-01	6.498E-04	5.947E-04
al+++	oh-	-8.85483	1.397E-09	3.445E-09	4.055E-01	8.793E-05	1.589E-05
al+++	alo2-	-10.66820	2.147E-11	5.187E-11	4.139E-01		
h+	cl-	-4.52142	3.010E-05	4.192E-05	7.181E-01	5.083E+00	5.922E-06
h+	so4--	-8.30558	4.948E-09	1.002E-08	4.936E-01	6.845E-02	7.228E-08
h+	f-	-6.76717	1.709E-07	2.344E-07	7.294E-01	2.961E-02	5.773E-06

h+	hs-	-13.73000	1.862E-14	2.553E-14	7.294E-01		
h+	hco3-	-5.21908	6.038E-06	8.068E-06	7.484E-01	9.680E-01	6.238E-06
h+	alo2-	-8.05593	8.792E-09	1.189E-08	7.394E-01		
fe++	cl-	-2.21259	6.129E-03	1.287E-02	4.764E-01	1.670E-02	3.671E-01
fe++	so4--	-6.73441	1.843E-07	8.337E-07	2.211E-01	1.496E-06	1.232E-01
fe++	f-	-5.20692	6.210E-06	1.277E-05	4.863E-01	1.750E-05	3.549E-01
fe++	hs-	-14.49069	3.231E-15	6.643E-15	4.863E-01		
fe++	hco3-	-3.14280	7.198E-04	1.430E-03	5.033E-01	1.829E-03	3.934E-01
fe++	oh-	-5.31339	4.860E-06	9.993E-06	4.863E-01	3.092E-04	1.572E-02
fe++	alo2-	-6.92527	1.188E-07	2.398E-07	4.953E-01		
fe+++	cl-	-6.02767	9.383E-07	2.368E-06	3.962E-01		
fe+++	so4--	-13.74291	1.808E-14	1.280E-13	1.412E-01		
fe+++	f-	-9.39630	4.015E-10	9.901E-10	4.055E-01		
fe+++	hs-	-19.84054	1.444E-20	3.560E-20	4.055E-01		
fe+++	hco3-	-7.07416	8.430E-08	2.000E-07	4.215E-01		
fe+++	oh-	-9.51608	3.047E-10	7.515E-10	4.055E-01		
fe+++	alo2-	-11.32944	4.683E-12	1.131E-11	4.139E-01		

- (a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that
 1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
 2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4554E+00	97.89
nacl	0.9834E-02	2.11
naf	0.4599E-06	0.00
naoh	0.4156E-06	0.00
nao4-	0.3178E-07	0.00
naco3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.1077E-01	100.00
kso4-	0.1071E-08	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.8407E-03	99.99
ca(oh)+	0.5746E-07	0.01
caf+	0.4785E-07	0.01

caso4	0.6244E-09	0.00
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.3054E-02	99.91
mg(oh)+	0.1764E-05	0.06
mgf+	0.1040E-05	0.03
mgso4	0.2904E-08	0.00
mgco3	0.0000E+00	0.00
mgkho3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3666E-07	98.92
al(oh)3	0.4005E-09	1.08
al(oh)2+	0.7164E-12	0.00
al(oh)++	0.3124E-15	0.00
alf2+	0.8174E-17	0.00
alf++	0.6114E-17	0.00
alf3	0.6691E-18	0.00
al+++	0.1469E-18	0.00
alf4-	0.2415E-20	0.00
alf5--	0.5678E-23	0.00
also4+	0.3001E-24	0.00
alf6---	0.2224E-27	0.00
al3(oh)4(5+)	0.5088E-35	0.00
al13(oh)34+5	0.1949E-63	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.4390E-03	86.76
h3sio4-	0.6698E-04	13.24
sif6--	0.2363E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4556E+00	97.89
nacl	0.9834E-02	2.11

hcl	0.1265E-09	0.00
fecl1++	0.1555E-20	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.6772E-07	65.05
na2so4	0.3178E-07	30.52
mgso4	0.2904E-08	2.79
kso4-	0.1071E-08	1.03
caso4	0.6246E-09	0.60
feso4	0.7221E-11	0.01
hso4-	0.7172E-14	0.00
hs-	0.1690E-18	0.00
h2s(aq)	0.2507E-20	0.00
also4+	0.3001E-24	0.00
feso4+	0.5937E-26	0.00
s--	0.3065E-26	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1424E-04	90.19
mgf+	0.1040E-05	6.58
naf	0.4599E-06	2.91
caf+	0.4785E-07	0.30
fef+	0.1251E-08	0.01
hf	0.5147E-10	0.00
hf2-	0.2355E-14	0.00
alf2+	0.8174E-17	0.00
alf++	0.6114E-17	0.00
alf3	0.6691E-18	0.00
h2f2	0.4991E-20	0.00
alf4-	0.2415E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
alf5--	0.5678E-23	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
alf6---	0.2224E-27	0.00
sif6--	0.2363E-36	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe(oh)+	0.1122E-04	52.23

fe++	0.1026E-04	47.76
fef+	0.1251E-08	0.01
fe(oh)4-	0.6145E-09	0.00
fe(oh)3-	0.1532E-10	0.00
feso4	0.7221E-11	0.00
fe(oh)2+	0.9292E-12	0.00
fe(oh)++	0.6426E-15	0.00
fecl1++	0.1555E-20	0.00
fef++	0.1547E-20	0.00
fe+++	0.3327E-21	0.00
fef2+	0.1173E-21	0.00
fecl3	0.1804E-22	0.00
fecl2+	0.1788E-22	0.00
fef3	0.2195E-23	0.00
fecl4-	0.1120E-24	0.00
feso4+	0.5937E-26	0.00
(feoh++)2	0.2646E-27	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1688E-01	100.00

total 100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
o2(aq) /h2o	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
h2(aq) /h2o-	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
hs- /so4--	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696
fe+++ /fe++	-0.247	-0.4046E+01	-62.573	-5.696

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	-1.992	-2.805		na-montmoril	-2.058	-2.898	
mg-chlorite	1.596	2.247	ssatd	pyrite	-16.531	-23.275	
magnetite	14.776	20.804	ssatd	gypsum	-6.713	-9.451	
quartz	0.486	0.684	ssatd	low albite	1.997	2.812	ssatd
anorthite	-7.509	-10.573		muscovite	3.276	4.613	ssatd
illite	-0.325	-0.457	satd	amorphous si	-0.731	-1.029	
paragonite	3.155	4.442	ssatd	albite	0.793	1.116	ssatd

laumontite -0.718 -1.011

1 approx. saturated pure minerals
 0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
 0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

7 supersaturated pure minerals
 0 supersatd. end-members of specified solid solutions
 0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.267469E-62	-62.57273
s2(g)	0.542814E-46	-46.26535
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.192428E-08	-8.71573
h2s(g)	0.326654E-19	-19.48591
steam	0.534169E-01	-1.27232

----- end of output -----
 ----- no pickup file written -----
 ----- reading the input file -----
 ----- end of input file -----

start time = 11:33:57
 end time = 11:34:04

Digital Equipment Corporation - VAX/VMS Version V5.2-1

FFFF U U J III W W AAA RRRR AAA
F U U J I W W A A R R A A
F U U J I W W A A RRRR A A
F U U J J I W W A A A A A A A A A A
F U U J J I W W A A R R A A A A
F UUUU JJJ III W W A A R R A A

PPPPPPP NN NN CCCCCCCC 44 44
PPPPPPP NN NN CCCCCCCC 44 44
PP PP NN NN CC 44 44
PP PP NN NN CC 44 44
PP PP NNNN NN CC 44 44
PP PP NNNN NN CC 44 44
PPPPPPP NN NN NN CC 4444444444
PPPPPPP NN NN NN CC 4444444444
PP NN NNNN CC 44
PP NN NNNN CC 44
PP NN NN CC 44
PP NN NN CC 44
PP NN NN CC 44
PP NN NN CCCCCCCC 44
PP NN NN CCCCCCCC 44

000000 UU UU TTTTTTTTTT ??? 11
000000 UU UU TTTTTTTTTT ??? 11
00 00 UU UU TT ??? 1111
00 00 UU UU TT ??? 1111
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT 11
00 00 UU UU TT 11
000000 UUUUUUUUUU TT ?? 111111
000000 UUUUUUUUUU TT ?? 111111

IWARA.EQ3MIN]PNC4.OUT;1 (5371,73,0), last revised on 12-JUL-1991 11:34, is a 67 block sequential
The records are variable length with FORTRAN (FTN) carriage control. The longest record is 9

SYS\$PRINT on 12-JUL-1991 12:28 by user FUJIWARA, UIC (FUJIWARA), under account 4010 at priority
LIAO: on 12-JUL-1991 12:28 from queue LIAO.

Digital Equipment Corporation - VAX/VMS Version V5.2-1

eq3nr.3245R86 run 11:34:25 12-JUL-9
supported by eqlib.3245R106

----- reading the input file -----
input file name= hbi01 created= 05/25/91 creator= y.fujiwara
koetoi 09/22/90 -1015m sample after 524 litre of water had flowed out
endit.

jobid= hbi01
tempc= 3.45700E+01 time= 1.00000E+00 hrs
rho= 0.10000E+01 tds pkg= 0.00000E+00 tdspl= 0.00000E+00
fep= -0.13100E+00 uredox=
tolbt= 0.00000E+00 toldl= 0.00000E+00 tolsat= 0.00000E+00
itermx= 0
iopt1-10= 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
iop91-10= -1 0 -1 0 0 0 0 0 0 0
iop1-10= 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
iodb1-10= 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0
uebal= uacion= pick1.
nxmod= 4
species= naalo2
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al(oh)3+
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al13(oh)28(3+)
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al2(oh)5++
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
run master data file csp jflag uphase
species master species
na+ 0.10700E+05 2
k+ 0.40900E+03 2
mg++ 0.80900E+02 2
ca++ 0.33700E+02 2
fe++ 0.31000E+00 2
al+++ 0.10000E+00 2
hco3- 0.10900E+04 2
sio2(aq) 0.38600E+02 2
so4-- 0.10000E+01 2
f- 0.30000E+00 2
cl- 0.16100E+05 2
h+ -0.83900E+01 16

endit.

----- the input file has been read -----

naalo2 has been user-suppressed
al(oh)3+ has been user-suppressed
al13(oh)28(3+) has been user-suppressed
al2(oh)5++ has been user-suppressed

----- file data1 has been successfully read -----

```

eeee qqq 3333 n n rrrr
e q q 3 nn n r r
eeee q q 33 n n n rrrr
e q q q 3 n nn r r
eeee qqq 3333 n n r r
q

```

eq3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 05/25/91 creator= y.fujiwara
koston 09/22/90 -1015m sample after 524 litre of water had flowed out

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 34.57 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
tolcl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolsat = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect
convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis species
na+	0.10700E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.40900E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.80900E+02	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.33700E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.31000E+00	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E+00	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.10900E+04	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

```

sio2(aq) 0.38600E+02 2 tot conc, mg/l
so4-- 0.10000E+01 2 tot conc, mg/l
f- 0.30000E+00 2 tot conc, mg/l
cl- 0.16100E+05 2 tot conc, mg/l
h+ -0.83900E+01 16 log activity

```

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

```

clo4- al13(oh)28(3+) al(oh)3* al2(oh)5**
naalo2 kcl kco3- fecl1+
fecl2 fecl3- fecl4-- fe(so4)2-
koh mgcl+

```

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.46542E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.10461E-01	0	tot conc, molal	
ca++	0.84082E-03	0	tot conc, molal	
mg++	0.33285E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-05	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.64243E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.83900E+01	16	log activity	
cl-	0.45412E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.10410E-04	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.55509E-05	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.17864E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

```

iter = 0 delmax = 0.000E+00 delfnc = 0.000E+00 beta(xi) = -0.321E-01
del( ) = 0.000E+00
iter = 1 delmax = 0.139E-01 delfnc = 0.000E+00 beta(conc al+++ ) = -0.794E-02
del(xi) = -0.139E-01
iter = 2 delmax = 0.879E-03 delfnc = 0.937E+00 beta(conc al+++ ) = -0.134E-03
del(conc al+++ ) = 0.879E-03
iter = 3 delmax = 0.145E-04 delfnc = 0.983E+00 beta(conc al+++ ) = -0.880E-06
del(conc fe++) = 0.145E-04
iter = 4 delmax = 0.975E-07 delfnc = 0.993E+00 beta(conc al+++ ) = -0.447E-08
del(conc al+++ ) = 0.975E-07
iter = 5 delmax = 0.510E-09 delfnc = 0.995E+00 beta(conc al+++ ) = -0.225E-10
del(conc al+++ ) = 0.510E-09

```

iter = 6 delmax = 0.256E-11 delfnc = 0.995E+00
del(conc al+++) = 0.256E-11 beta(conc al+++) = -0.966E-13

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888996.6071	888996.6071	0.5556437161E+02
na	10699.8930	10699.8930	0.4654197477E+00
k	409.0031	409.0031	0.1046089314E-01
ca	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg	80.9000	80.9000	0.3328533224E-02
al	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
si	18.0431	18.0431	0.6424339258E-03
h	111913.8673	111913.8673	0.1110366776E+03
c	214.5630	214.5630	0.1786387400E-01
cl	16100.0000	16100.0000	0.4541223592E+00
s	0.3338	0.3338	0.1041037706E-04
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	0.3100	0.3100	0.5550880083E-05

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000992.1546	1000992.1546	0.5556437161E+02
na+	10700.0000	10700.0000	0.4654197477E+00
k+	409.0000	409.0000	0.1046089314E-01
ca++	33.7000	33.7000	0.8408183633E-03
mg++	80.9000	80.9000	0.3328533224E-02
al+++	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
sio2(a)	38.6000	38.6000	0.6424339258E-03
h+	111924.9710	111924.9710	0.1110366776E+03
co3--	1071.9932	1071.9932	0.1786387400E-01
cl-	16100.0000	16100.0000	0.4541223592E+00
so4--	1.0000	1.0000	0.1041037706E-04
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	0.3100	0.3100	0.5550880083E-05

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551077999E+02	h2o	0.5551077999E+02
na+	0.4654197477E+00	na+	0.4654197477E+00
k+	0.1046089314E-01	k+	0.1046089314E-01

ca++	0.8408183633E-03	ca++	0.8408183633E-03
mg++	0.3328533224E-02	mg++	0.3328533224E-02
al+++	0.3706174487E-05	al+++	0.3706174487E-05
sio2(aq)	0.6424339258E-03	sio2(aq)	0.6424339258E-03
h+	0.1110188137E+03	h+	0.1110188137E+03
cl-	0.4541223592E+00	cl-	0.4541223592E+00
so4--	0.1041037706E-04	so4--	0.1041037706E-04
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.5550880083E-05	fe++	0.5550880083E-05
hco3-	0.1786387400E-01	hco3-	0.1786387400E-01

activity of water = 0.98468
 log activity of water = -0.00671
 osmotic coefficient = 0.00765
 stoichiometric sum of molalities = 111.9715278328833
 titration alkalinity = 0.0179571221497 eq/kg h2o
 ionic strength = 0.4727219071225
 equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4654197477164

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
 sigma(mz) cations = 0.4746085813E+00
 sigma(mz) anions = -0.4624831001E+00
 total charge = 0.9370916814E+00
 mean charge = 0.4685458407E+00
 charge imbalance = 0.1212548122E-01

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
 mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

1.29 per cent of the total charge
 2.59 per cent of the mean charge
 2.55 per cent of sigma(mz) cations
 2.62 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 7.8830
 log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.2186
 log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.1223
 log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 13.8167
 log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 7.7796
 log (act(sio2(aq))) = -3.2397
 log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -8.9331
 log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -22.6767
 log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.4166
 log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 10.6787
 log (act(o2(aq))) = -58.4055
 log (act(h2(aq))) = -15.4052
 log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -39.4624
 log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 4.0290
 log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.2934

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6934
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -13.9931

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4558E+00	-0.3412	-0.1658	0.3112E+00	-0.5070
cl-	0.4445E+00	-0.3521	-0.1910	0.2863E+00	-0.5431
hco3-	0.1786E-01	-1.7480	-0.1553	0.1249E-01	-1.9034
k+	0.1046E-01	-1.9804	-0.1910	0.6739E-02	-2.1714
nacl	0.9612E-02	-2.0172	0.0000	0.9612E-02	-2.0172
mg++	0.3326E-02	-2.4781	-0.4851	0.1088E-02	-2.9633
ca++	0.8407E-03	-3.0754	-0.5824	0.2199E-03	-3.6577
sio2(aq)	0.5758E-03	-3.2397	0.0000	0.5758E-03	-3.2397
h3sio4-	0.6663E-04	-4.1763	-0.1658	0.4549E-04	-4.3421
f-	0.1416E-04	-4.8490	-0.1776	0.9405E-05	-5.0266
oh-	0.7484E-05	-5.1258	-0.1776	0.4972E-05	-5.3034
so4--	0.6747E-05	-5.1709	-0.7258	0.1268E-05	-5.8967
alo2-	0.3653E-05	-5.4373	-0.1658	0.2494E-05	-5.6031
naso4-	0.3180E-05	-5.4976	-0.1594	0.2203E-05	-5.6570
fe++	0.3027E-05	-5.5189	-0.5824	0.7920E-06	-6.1013
fe(oh)+	0.2518E-05	-5.5989	-0.1658	0.1719E-05	-5.7647
mg(oh)+	0.1461E-05	-5.8354	-0.1658	0.9971E-06	-6.0012
mgf+	0.1128E-05	-5.9479	-0.1658	0.7697E-06	-6.1137
naf	0.4581E-06	-6.3390	0.0000	0.4581E-06	-6.3390
mgso4	0.3169E-06	-6.4991	0.0000	0.3169E-06	-6.4991
naoh	0.3160E-06	-6.5003	0.0000	0.3160E-06	-6.5003
kso4-	0.1041E-06	-6.9824	-0.1776	0.6917E-07	-7.1601
caso4	0.6261E-07	-7.2033	0.0000	0.6261E-07	-7.2033
al(oh)3	0.5258E-07	-7.2791	0.0000	0.5258E-07	-7.2791
caf+	0.4770E-07	-7.3215	-0.1658	0.3256E-07	-7.4873
ca(oh)+	0.4373E-07	-7.3593	-0.1658	0.2985E-07	-7.5251
h+	0.5084E-08	-8.2938	-0.0962	0.4074E-08	-8.3900
fe(oh)4-	0.4801E-08	-8.3186	-0.1658	0.3278E-08	-8.4844
fef+	0.3677E-09	-9.4345	-0.1658	0.2510E-09	-9.6003
feso4	0.2136E-09	-9.6704	0.0000	0.2136E-09	-9.6704
hcl	0.1628E-09	-9.7882	0.0000	0.1628E-09	-9.7882
al(oh)2+	0.1238E-09	-9.9072	-0.1658	0.8453E-10	-10.0730
hf	0.6752E-10	-10.1706	0.0000	0.6752E-10	-10.1706
fe(oh)2+	0.1259E-10	-10.9001	-0.1658	0.8593E-11	-11.0659
fe(oh)3-	0.1986E-11	-11.7021	-0.1658	0.1356E-11	-11.8679
hso4-	0.9453E-12	-12.0244	-0.1658	0.6453E-12	-12.1902
al(oh)++	0.7099E-13	-13.1488	-0.5824	0.1857E-13	-13.7311
fe(oh)++	0.1143E-13	-13.9420	-0.7258	0.2149E-14	-14.6678
hf2-	0.3072E-14	-14.5126	-0.1658	0.2097E-14	-14.6784
alf2+	0.2424E-14	-14.6154	-0.1658	0.1655E-14	-14.7812
alf+	0.1818E-14	-14.7403	-0.6465	0.4104E-15	-15.3868
h2(aq)	0.3515E-15	-15.4541	0.0489	0.3933E-15	-15.4052
alf3	0.1975E-15	-15.7043	0.0000	0.1975E-15	-15.7043
al+++	0.4389E-16	-16.3576	-1.0327	0.4070E-17	-17.3904
alf4-	0.7089E-18	-18.1494	-0.1658	0.4839E-18	-18.3152
fef++	0.3609E-19	-19.4426	-0.6465	0.8146E-20	-20.0891
fecl++	0.3558E-19	-19.4488	-0.7258	0.6689E-20	-20.1746
also4+	0.8994E-20	-20.0460	-0.1658	0.6140E-20	-20.2118
h2f2	0.8583E-20	-20.0663	0.0000	0.8583E-20	-20.0663
fe++	0.7794E-20	-20.1082	-1.0327	0.7228E-21	-21.1410
fef2+	0.2724E-20	-20.5648	-0.1658	0.1860E-20	-20.7306
alf5--	0.1652E-20	-20.7819	-0.7258	0.3107E-21	-21.5077

fecl2+	0.4006E-21	-21.3973	-0.1658	0.2735E-21	-21.5631
fecl3	0.3955E-21	-21.4029	0.0000	0.3955E-21	-21.4029
fef3	0.5083E-22	-22.2939	0.0000	0.5083E-22	-22.2939
feso4+	0.1396E-22	-22.8552	-0.1658	0.9527E-23	-23.0210
fecl4-	0.2398E-23	-23.6202	-0.1658	0.1637E-23	-23.7860
(feoh++)2	0.8287E-25	-25.0816	-2.9659	0.8965E-28	-28.0475
alf6---	0.6402E-25	-25.1937	-1.6592	0.1403E-26	-26.8528
al3(oh)4(5+)	0.4476E-28	-28.3491	-3.4188	0.1706E-31	-31.7680
hs-	0.1274E-30	-30.8948	-0.1776	0.8464E-31	-31.0724
h2s(aq)	0.2492E-32	-32.6035	0.0000	0.2492E-32	-32.6035
al13(oh)34+5	0.2392E-35	-35.6213	-8.8792	0.3159E-44	-44.5005
sif6--	0.9036E-36	-36.0440	-0.7258	0.1699E-36	-36.7699
s--	0.1752E-38	-38.7564	-0.6465	0.3955E-39	-39.4028
o2(aq)	0.3513E-58	-58.4543	0.0489	0.3931E-58	-58.4055

----- mean ionic properties -----

		true (a)				stoichiometric (b)	
species	species	log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.52507	2.985E-01	4.501E-01	6.631E-01	4.597E-01	6.493E-01
na+	so4--	-2.30359	4.971E-03	1.119E-02	4.441E-01	1.311E-02	3.790E-01
na+	f-	-2.76682	1.711E-03	2.540E-03	6.734E-01	2.711E-03	6.310E-01
na+	hs-	-15.78973	1.623E-16	2.410E-16	6.734E-01		
na+	hco3-	-1.20519	6.235E-02	9.024E-02	6.909E-01	9.118E-02	6.838E-01
na+	oh-	-2.90524	1.244E-03	1.847E-03	6.734E-01	2.626E-02	4.736E-02
na+	alo2-	-3.05506	8.809E-04	1.290E-03	6.826E-01		
k+	cl-	-1.35727	4.393E-02	6.819E-02	6.442E-01	6.892E-02	6.373E-01
k+	so4--	-3.41320	3.862E-04	9.038E-04	4.273E-01	1.044E-03	3.698E-01
k+	f-	-3.59903	2.518E-04	3.848E-04	6.542E-01	4.064E-04	6.194E-01
k+	hs-	-16.62193	2.388E-17	3.651E-17	6.542E-01		
k+	hco3-	-2.03739	9.175E-03	1.367E-02	6.712E-01	1.367E-02	6.712E-01
k+	oh-	-3.73744	1.830E-04	2.798E-04	6.542E-01	3.938E-03	4.649E-02
k+	alo2-	-3.88727	1.296E-04	1.955E-04	6.631E-01		
ca++	cl-	-1.58132	2.622E-02	5.497E-02	4.770E-01	5.576E-02	4.703E-01
ca++	so4--	-4.77723	1.670E-05	7.531E-05	2.218E-01	9.356E-05	1.785E-01
ca++	f-	-4.57033	2.690E-05	5.523E-05	4.869E-01	5.941E-05	4.527E-01
ca++	hs-	-21.93419	1.164E-22	2.390E-22	4.869E-01		
ca++	hco3-	-2.48815	3.250E-03	6.449E-03	5.039E-01	6.450E-03	5.039E-01
ca++	oh-	-4.75488	1.758E-05	3.611E-05	4.869E-01	1.227E-03	1.433E-02
ca++	alo2-	-4.95464	1.110E-05	2.239E-05	4.958E-01		
mg++	cl-	-1.34983	4.469E-02	8.694E-02	5.140E-01	8.821E-02	5.066E-01
mg++	so4--	-4.42999	3.715E-05	1.498E-04	2.480E-01	1.861E-04	1.996E-01
mg++	f-	-4.33884	4.583E-05	8.735E-05	5.247E-01	9.398E-05	4.877E-01
mg++	hs-	-21.70270	1.983E-22	3.779E-22	5.247E-01		
mg++	hco3-	-2.25666	5.538E-03	1.020E-02	5.429E-01	1.020E-02	5.428E-01
mg++	oh-	-4.52339	2.996E-05	5.711E-05	5.247E-01	1.941E-03	1.544E-02
mg++	alo2-	-4.72315	1.892E-05	3.541E-05	5.343E-01		
al+++	cl-	-4.75493	1.758E-05	4.431E-05	3.968E-01	2.427E-02	7.244E-04
al+++	so4--	-10.49419	3.205E-11	2.261E-10	1.417E-01	6.887E-06	4.653E-06
al+++	f-	-8.11756	7.628E-09	1.879E-08	4.061E-01	1.099E-05	6.941E-04
al+++	hs-	-27.65191	2.229E-28	5.489E-28	4.061E-01		
al+++	hco3-	-5.77511	1.678E-06	3.977E-06	4.220E-01	2.144E-03	7.828E-04
al+++	oh-	-8.32518	4.730E-09	1.165E-08	4.061E-01	3.314E-04	1.427E-05
al+++	alo2-	-8.54992	2.819E-09	6.802E-09	4.144E-01		
h+	cl-	-4.66656	3.115E-05	4.754E-05	7.185E-01	5.021E+00	6.803E-06
h+	so4--	-7.55891	2.761E-08	5.587E-08	4.942E-01	3.177E-01	8.690E-08
h+	f-	-6.70831	1.957E-07	2.683E-07	7.296E-01	2.961E-02	6.611E-06

h+	hs-	-19.73121	1.857E-20	2.545E-20	7.296E-01		
h+	hco3-	-5.14668	7.134E-06	9.530E-06	7.486E-01	9.958E-01	7.164E-06
h+	alo2-	-6.99655	1.008E-07	1.363E-07	7.396E-01		
fe++	cl-	-2.39584	4.019E-03	8.426E-03	4.770E-01	1.046E-02	3.842E-01
fe++	so4--	-5.99901	1.002E-06	4.519E-06	2.218E-01	7.602E-06	1.318E-01
fe++	f-	-5.38485	4.122E-06	8.466E-06	4.869E-01	1.114E-05	3.699E-01
fe++	hs-	-22.74871	1.784E-23	3.663E-23	4.869E-01		
fe++	hco3-	-3.30267	4.981E-04	9.886E-04	5.039E-01	1.210E-03	4.117E-01
fe++	oh-	-5.56940	2.695E-06	5.335E-06	4.869E-01	2.302E-04	1.171E-02
fe++	alo2-	-5.76916	1.702E-06	3.432E-06	4.958E-01		
fe+++	cl-	-5.69258	2.030E-06	5.115E-06	3.968E-01		
fe+++	so4--	-11.99442	1.013E-12	7.148E-12	1.417E-01		
fe+++	f-	-9.05521	8.806E-10	2.169E-09	4.061E-01		
fe+++	hs-	-28.58956	2.573E-29	6.336E-29	4.061E-01		
fe+++	hco3-	-6.71275	1.938E-07	4.591E-07	4.220E-01		
fe+++	oh-	-9.26283	5.460E-10	1.345E-09	4.061E-01		
fe+++	alo2-	-9.48756	3.254E-10	7.852E-10	4.144E-01		

(a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass
 balance lumpings, except that

1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4558E+00	97.93
nacl	0.9612E-02	2.07
nao4-	0.3180E-05	0.00
naf	0.4581E-06	0.00
naoh	0.3160E-06	0.00
naco3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.1046E-01	100.00
kso4-	0.1041E-06	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.8407E-03	99.98
caso4	0.6261E-07	0.01
caf+	0.4770E-07	0.01

ca(oh)+	0.4373E-07	0.01
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.3326E-02	99.91
mg(oh)+	0.1461E-05	0.04
mgf+	0.1128E-05	0.03
mgso4	0.3169E-06	0.01
mgco3	0.0000E+00	0.00
mghco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3653E-05	98.58
al(oh)3	0.5258E-07	1.42
al(oh)2+	0.1238E-09	0.00
al(oh)++	0.7099E-13	0.00
alf2+	0.2424E-14	0.00
alf+	0.1818E-14	0.00
alf3	0.1975E-15	0.00
al+++	0.4389E-16	0.00
alf4-	0.7089E-18	0.00
also4+	0.8994E-20	0.00
alf5--	0.1652E-20	0.00
alf6---	0.6402E-25	0.00
al3(oh)4(5+)	0.4476E-28	0.00
al13(oh)34+5	0.2392E-35	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.5758E-03	89.63
h3sio4-	0.6663E-04	10.37
sif6--	0.9036E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4445E+00	97.88
nacl	0.9612E-02	2.12

hcl	0.1628E-09	0.00
fecl++	0.3558E-19	0.00
fecl2+	0.4006E-21	0.00
fecl3	0.3955E-21	0.00
fecl4-	0.2398E-23	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.6747E-05	64.81
naso4-	0.3180E-05	30.54
mgso4	0.3169E-06	3.04
kso4-	0.1041E-06	1.00
caso4	0.6261E-07	0.60
feso4	0.2136E-09	0.00
hso4-	0.9453E-12	0.00
also4+	0.8994E-20	0.00
feso4+	0.1396E-22	0.00
hs-	0.1274E-30	0.00
h2s(aq)	0.2492E-32	0.00
s--	0.1752E-38	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1416E-04	89.65
mgf+	0.1128E-05	7.14
naf	0.4581E-06	2.90
caf+	0.4770E-07	0.30
fef+	0.3677E-09	0.00
hf	0.6752E-10	0.00
hf2-	0.3072E-14	0.00
alf2+	0.2424E-14	0.00
alf++	0.1818E-14	0.00
alf3	0.1975E-15	0.00
alf4-	0.7089E-18	0.00
fef++	0.3609E-19	0.00
h2f2	0.8583E-20	0.00
fef2+	0.2724E-20	0.00
alf5--	0.1652E-20	0.00
fef3	0.5083E-22	0.00
alf6---	0.6402E-25	0.00
sif6--	0.9036E-36	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe++	0.3027E-05	54.54

fe(oh)+	0.2518E-05	45.36
fe(oh)4-	0.4801E-08	0.09
fef+	0.3677E-09	0.01
feso4	0.2136E-09	0.00
fe(oh)2+	0.1259E-10	0.00
fe(oh)3-	0.1986E-11	0.00
fe(oh)++	0.1143E-13	0.00
fef++	0.3609E-19	0.00
fecl++	0.3558E-19	0.00
fe+++	0.7794E-20	0.00
fef2+	0.2724E-20	0.00
fecl2+	0.4006E-21	0.00
fecl3	0.3955E-21	0.00
fef3	0.5083E-22	0.00
feso4+	0.1396E-22	0.00
fecl4-	0.2398E-23	0.00
(feoh++)2	0.8287E-25	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1786E-01	100.00

total		100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.131	-0.2146E+01	-55.447	-3.021
o2(aq) /h2o	-0.131	-0.2146E+01	-55.447	-3.021
h2(aq) /h2o*	-0.131	-0.2146E+01	-55.447	-3.021
hs- /so4--	-0.131	-0.2146E+01	-55.447	-3.021
fe+++ /fe++	-0.131	-0.2146E+01	-55.447	-3.021

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	3.336	4.497	ssatd	na-montmoril	3.269	4.602	ssatd
mg-chlorite	5.177	7.290	ssatd	pyrite	-37.746	-53.149	
magnetite	16.031	22.573	ssatd	gypsum	-4.712	-6.634	
quartz	0.604	0.850	ssatd	low albite	4.349	6.124	ssatd
anorthite	-3.276	-4.613		muscovite	9.850	13.870	ssatd
illite	4.828	6.798	ssatd	amorphous sl	-0.613	-0.863	
paragonite	9.742	13.717	ssatd	albite	3.144	4.427	ssatd

35
laumontite 3.750 5.280 ssatd

0 approx. saturated pure minerals
0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

11 supersaturated pure minerals
0 supersatd. end-members of specified solid solutions
0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.357630E-55	-55.44657
s2(g)	0.710370E-63	-63.14851
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.530082E-12	-12.27566
h2s(g)	0.324819E-31	-31.48836
steam	0.534762E-01	-1.27184

----- end of output -----
----- no pickup file written -----
----- reading the input file -----
----- end of input file -----

start time = 11:34:24
end time = 11:34:32


```

eeee qqq 3333 n n rrrr
e q q 3 nn n r r
eeee q q 33 n n n rrrr
e q q 3 n nn r r
eeee qqq 3333 n n r r
q
  
```

eg3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 05/27/91 creator= y.fujiwara
koetoi 10/01/90 -1015m sample after 1145 litre of water had flowed out

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 34.61 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
tolcl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolsat = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect
convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis species
na+	0.11000E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.40900E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.99100E+02	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.40700E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.13000E+00	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E+00	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.83400E+03	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

```

sio2(aq) 0.44100E+02 2 tot conc, mg/l
so4-- 0.10000E+01 2 tot conc, mg/l
f- 0.30000E+00 2 tot conc, mg/l
cl- 0.16100E+05 2 tot conc, mg/l
h+ -0.83600E+01 16 log activity
  
```

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

```

clo4- al13(oh)28(3+) al(oh)3* al2(oh)5--
naalo2 kcl kco3- fecl+
fecl2 fecl3- fecl4-- fe(so4)2-
koh mgcl+
  
```

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.47847E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.10461E-01	0	tot conc, molal	
ca++	0.10155E-02	0	tot conc, molal	
mg++	0.40774E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-05	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.73397E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.83600E+01	16	log activity	
cl-	0.45412E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.10410E-04	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.23278E-05	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.13668E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

```

iter = 0 delmax = 0.000E+00 delfnc = 0.000E+00 -
del( ) = 0.000E+00 beta( xi ) = -0.504E-011
iter = 1 delmax = 0.218E-01 delfnc = 0.000E+00
del( xi ) = -0.218E-01 beta(conc al+++ ) = -0.128E-011
iter = 2 delmax = 0.144E-02 delfnc = 0.934E+00
del(conc al+++ ) = 0.144E-02 beta(conc al+++ ) = -0.299E-03
iter = 3 delmax = 0.417E-04 delfnc = 0.971E+00
del(conc so4-- ) = -0.417E-04 beta(conc al+++ ) = -0.220E-05
iter = 4 delmax = 0.243E-06 delfnc = 0.994E+00
del(conc al+++ ) = 0.243E-06 beta(conc al+++ ) = -0.114E-07
iter = 5 delmax = 0.134E-08 delfnc = 0.995E+00
del(conc al+++ ) = 0.134E-08 beta(conc al+++ ) = -0.581E-10
  
```

iter = 6 delmax = 0.681E-11 delfnc = 0.995E+00
del(conc al+++) = 0.681E-11 beta(conc al+++) = -0.276E-12

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888798.2877	888798.2877	0.5555197618E+02
na	10999.8900	10999.8900	0.4784688995E+00
k	409.0031	409.0031	0.1046089314E-01
ca	40.7000	40.7000	0.1015469062E-02
mg	99.1000	99.1000	0.4077350339E-02
al	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
si	20.6140	20.6140	0.7339724386E-03
h	111909.6519	111909.6519	0.1110324952E+03
c	164.1702	164.1702	0.1366832194E-01
cl	16100.0000	16100.0000	0.4541223592E+00
s	0.3338	0.3338	0.1041037706E-04
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	0.1300	0.1300	0.2327788422E-05

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000768.8509	1000768.8509	0.5555197618E+02
na+	11000.0000	11000.0000	0.4784688995E+00
k+	409.0000	409.0000	0.1046089314E-01
ca++	40.7000	40.7000	0.1015469062E-02
mg++	99.1000	99.1000	0.4077350339E-02
al+++	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
sio2(a	44.1000	44.1000	0.7339724386E-03
h+	111920.7551	111920.7551	0.1110324952E+03
co3--	820.2223	820.2223	0.1366832194E-01
cl-	16100.0000	16100.0000	0.4541223592E+00
so4--	1.0000	1.0000	0.1041037706E-04
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	0.1300	0.1300	0.2327788422E-05

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551097121E+02	h2o	0.5551097121E+02
na+	0.4784688995E+00	na+	0.4784688995E+00
k+	0.1046089314E-01	k+	0.1046089314E-01

ca++	0.1015469062E-02	ca++	0.1015469062E-02
mg++	0.4077350339E-02	mg++	0.4077350339E-02
al+++	0.3706174487E-05	al+++	0.3706174487E-05
sio2(aq)	0.7339724386E-03	sio2(aq)	0.7339724386E-03
h+	0.1110188268E+03	h+	0.1110188268E+03
cl-	0.4541223592E+00	cl-	0.4541223592E+00
so4--	0.1041037706E-04	so4--	0.1041037706E-04
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.2327788422E-05	fe++	0.2327788422E-05
hco3-	0.1366832194E-01	hco3-	0.1366832194E-01

ph = 8.36000
activity of water = 0.98425
log activity of water = -0.00689
osmotic coefficient = 0.00787
stoichiometric sum of molalities = 111.9814063335705
titration alkalinity = 0.0137647507949 eq/kg h2o
ionic strength = 0.4787528587754
equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4784688995215

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
sigma(mz) cations = 0.4892594174E+00
sigma(mz) anions = -0.4580519239E+00
total charge = 0.9473113413E+00
mean charge = 0.4736556707E+00
charge imbalance = 0.3120749347E-01

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

3.29 per cent of the total charge
6.59 per cent of the mean charge
6.38 per cent of sigma(mz) cations
6.81 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 7.8646
log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.1880
log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.1428
log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 13.8440
log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 7.8053
log (act(sio2(aq))) = -3.1789
log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -8.9039
log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -22.6253
log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.3945
log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 10.2530
log (act(o2(aq))) = -56.8764
log (act(h2(aq))) = -16.1638
log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -42.4498
log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 3.9835
log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.3799

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6924
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -13.9639

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4688E+00	-0.3292	-0.1662	0.3196E+00	-0.4954
cl-	0.4443E+00	-0.3524	-0.1915	0.2858E+00	-0.5439
hco3-	0.1367E-01	-1.8643	-0.1556	0.9552E-02	-2.0199
k+	0.1046E-01	-1.9804	-0.1915	0.6730E-02	-2.1720
nacl	0.9852E-02	-2.0065	0.0000	0.9852E-02	-2.0065
mg++	0.4074E-02	-2.3900	-0.4860	0.1330E-02	-2.8760
ca++	0.1015E-02	-2.9934	-0.5837	0.2648E-03	-3.5772
sio2(aq)	0.6624E-03	-3.1789	0.0000	0.6624E-03	-3.1789
h3sio4-	0.7160E-04	-4.1451	-0.1662	0.4883E-04	-4.3113
f-	0.1392E-04	-4.8565	-0.1780	0.9236E-05	-5.0345
oh-	0.7008E-05	-5.1544	-0.1780	0.4651E-05	-5.3324
so4--	0.6649E-05	-5.1773	-0.7281	0.1244E-05	-5.9053
alo2-	0.3650E-05	-5.4377	-0.1662	0.2490E-05	-5.6039
naso4-	0.3205E-05	-5.4941	-0.1597	0.2219E-05	-5.6538
mg(oh)+	0.1673E-05	-5.7766	-0.1662	0.1141E-05	-5.9428
mgf+	0.1356E-05	-5.8678	-0.1662	0.9247E-06	-6.0340
fe++	0.1308E-05	-5.8833	-0.5837	0.3412E-06	-6.4670
fe(oh)+	0.1015E-05	-5.9935	-0.1662	0.6924E-06	-6.1597
naf	0.4624E-06	-6.3350	0.0000	0.4624E-06	-6.3350
mgso4	0.3802E-06	-6.4200	0.0000	0.3802E-06	-6.4200
naoh	0.3037E-06	-6.5176	0.0000	0.3037E-06	-6.5176
kso4-	0.1021E-06	-6.9909	-0.1780	0.6777E-07	-7.1690
caso4	0.7393E-07	-7.1312	0.0000	0.7393E-07	-7.1312
caf+	0.5648E-07	-7.2481	-0.1662	0.3852E-07	-7.4143
al(oh)3	0.5608E-07	-7.2512	0.0000	0.5608E-07	-7.2512
ca(oh)+	0.4930E-07	-7.3072	-0.1662	0.3363E-07	-7.4733
h+	0.5447E-08	-8.2638	-0.0962	0.4365E-08	-8.3600
fe(oh)4-	0.4067E-08	-8.3908	-0.1662	0.2774E-08	-8.5569
hcl	0.1742E-09	-9.7590	0.0000	0.1742E-09	-9.7590
fef+	0.1558E-09	-9.8074	-0.1662	0.1063E-09	-9.9736
al(oh)2+	0.1415E-09	-9.8492	-0.1662	0.9652E-10	-10.0154
feso4	0.9027E-10	-10.0444	0.0000	0.9027E-10	-10.0444
hf	0.7109E-10	-10.1482	0.0000	0.7109E-10	-10.1482
fe(oh)2+	0.1219E-10	-10.9139	-0.1662	0.8317E-11	-11.0800
hso4-	0.9948E-12	-12.0023	-0.1662	0.6785E-12	-12.1684
fe(oh)3-	0.7016E-12	-12.1539	-0.1662	0.4786E-12	-12.3201
al(oh)++	0.8697E-13	-13.0606	-0.5837	0.2268E-13	-13.6444
fe(oh)++	0.1190E-13	-13.9244	-0.7281	0.2226E-14	-14.6524
hf2-	0.3180E-14	-14.4976	-0.1662	0.2169E-14	-14.6638
alf2+	0.3056E-14	-14.5149	-0.1662	0.2084E-14	-14.6810
alf++	0.2341E-14	-14.6306	-0.6482	0.5262E-15	-15.2788
alf3	0.2443E-15	-15.6120	0.0000	0.2443E-15	-15.6120
h2(aq)	0.6120E-16	-16.2133	0.0495	0.6858E-16	-16.1638
al+++	0.8754E-16	-16.2400	-1.0347	0.5312E-17	-17.2747
alf4-	0.8618E-18	-18.0646	-0.1662	0.5878E-18	-18.2308
fecl1+	0.3960E-19	-19.4023	-0.7281	0.7406E-20	-20.1304
fef++	0.3945E-19	-19.4039	-0.6482	0.8868E-20	-20.0522
al2so4+	0.1152E-19	-19.9384	-0.1662	0.7860E-20	-20.1046
h2f2	0.9503E-20	-20.0221	0.0000	0.9503E-20	-20.0221
fe+++	0.8674E-20	-20.0618	-1.0347	0.8008E-21	-21.0965
fef2+	0.2904E-20	-20.5370	-0.1662	0.1981E-20	-20.7031
alf5--	0.1981E-20	-20.7032	-0.7281	0.3704E-21	-21.4313

fecl2+	0.4427E-21	-21.3539	-0.1662	0.3019E-21	-21.5201
fecl3	0.4368E-21	-21.3598	0.0000	0.4368E-21	-21.3598
fef3	0.5338E-22	-22.2727	0.0000	0.5338E-22	-22.2727
feso4+	0.1518E-22	-22.8186	-0.1662	0.1036E-22	-22.9848
fecl4-	0.2647E-23	-23.5773	-0.1662	0.1805E-23	-23.7434
(feoh++)2	0.9079E-25	-25.0420	-2.9757	0.9601E-28	-28.0177
alf6---	0.7586E-25	-25.1200	-1.6646	0.1642E-26	-26.7846
al3(oh)4(5+)	0.7682E-28	-28.1146	-3.4272	0.2873E-31	-31.5417
hs-	0.1225E-33	-33.9118	-0.1780	0.8131E-34	-34.0898
al13(oh)34+5	0.8675E-35	-35.0617	-8.9362	0.1005E-43	-43.9979
h2s(aq)	0.2562E-35	-35.5914	0.0000	0.2562E-35	-35.5914
sif6--	0.1236E-35	-35.9080	-0.7281	0.2312E-36	-36.6361
s--	0.1584E-41	-41.8002	-0.6482	0.3561E-42	-42.4484
o2(aq)	0.1186E-56	-56.9259	0.0495	0.1329E-56	-56.8764

----- mean ionic properties -----

		true (a)				stoichiometric (b)	
species	species	log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.51962	3.023E-01	4.563E-01	6.624E-01	4.661E-01	6.484E-01
na+	so4--	-2.29868	5.027E-03	1.134E-02	4.431E-01	1.336E-02	3.763E-01
na+	f-	-2.76494	1.718E-03	2.554E-03	6.728E-01	2.749E-03	6.251E-01
na+	hs-	-17.29259	5.098E-18	7.577E-18	6.728E-01		
na+	hco3-	-1.25763	5.525E-02	8.003E-02	6.904E-01	8.087E-02	6.833E-01
na+	oh-	-2.91390	1.219E-03	1.812E-03	6.728E-01	2.830E-02	4.309E-02
na+	alo2-	-3.04962	8.920E-04	1.308E-03	6.821E-01		
k+	cl-	-1.35794	4.386E-02	6.817E-02	6.434E-01	6.892E-02	6.363E-01
k+	so4--	-3.41643	3.833E-04	8.994E-04	4.262E-01	1.044E-03	3.670E-01
k+	f-	-3.60325	2.493E-04	3.815E-04	6.534E-01	4.064E-04	6.134E-01
k+	hs-	-18.13091	7.398E-19	1.132E-18	6.534E-01		
k+	hco3-	-2.09594	8.018E-03	1.196E-02	6.705E-01	1.196E-02	6.705E-01
k+	oh-	-3.75221	1.769E-04	2.708E-04	6.534E-01	4.184E-03	4.229E-02
k+	alo2-	-3.88793	1.294E-04	1.954E-04	6.624E-01		
ca++	cl-	-1.55498	2.786E-02	5.852E-02	4.761E-01	5.938E-02	4.692E-01
ca++	so4--	-4.74125	1.814E-05	8.216E-05	2.208E-01	1.028E-04	1.765E-01
ca++	f-	-4.54873	2.827E-05	5.815E-05	4.861E-01	6.327E-05	4.468E-01
ca++	hs-	-23.91894	1.205E-24	2.479E-24	4.861E-01		
ca++	hco3-	-2.53899	2.891E-03	5.746E-03	5.031E-01	5.746E-03	5.031E-01
ca++	oh-	-4.74735	1.789E-05	3.681E-05	4.861E-01	1.417E-03	1.263E-02
ca++	alo2-	-4.92830	1.179E-05	2.383E-05	4.950E-01		
mg++	cl-	-1.32127	4.772E-02	9.299E-02	5.132E-01	9.439E-02	5.056E-01
mg++	so4--	-4.39068	4.067E-05	1.646E-04	2.471E-01	2.060E-04	1.974E-01
mg++	f-	-4.31502	4.841E-05	9.240E-05	5.239E-01	1.006E-04	4.815E-01
mg++	hs-	-23.68523	2.064E-24	3.940E-24	5.239E-01		
mg++	hco3-	-2.30528	4.951E-03	9.130E-03	5.423E-01	9.133E-03	5.421E-01
mg++	oh-	-4.51364	3.065E-05	5.849E-05	5.239E-01	2.252E-03	1.361E-02
mg++	alo2-	-4.69459	2.020E-05	3.786E-05	5.336E-01		
al+++	cl-	-4.72660	1.877E-05	4.740E-05	3.960E-01	2.427E-02	7.732E-04
al+++	so4--	-10.45310	3.525E-11	2.498E-10	1.410E-01	6.887E-06	5.115E-06
al+++	f-	-8.09457	8.043E-09	1.984E-08	4.053E-01	1.099E-05	7.318E-04
al+++	hs-	-29.88606	1.300E-30	3.207E-30	4.053E-01		
al+++	hco3-	-5.83361	1.467E-06	3.482E-06	4.213E-01	1.754E-03	8.363E-04
al+++	oh-	-8.31801	4.808E-09	1.186E-08	4.053E-01	3.630E-04	1.325E-05
al+++	alo2-	-8.52159	3.009E-09	7.273E-09	4.137E-01		
h+	cl-	-4.45195	3.532E-05	4.919E-05	7.180E-01	5.021E+00	7.035E-06
h+	so4--	-7.54178	2.872E-08	5.821E-08	4.934E-01	3.177E-01	9.040E-08
h+	f-	-6.69726	2.008E-07	2.753E-07	7.293E-01	2.961E-02	6.782E-06

h+	hs-	-21.22492	5.958E-22	8.170E-22	7.293E-01			
h+	hco3-	-5.18995	6.457E-06	8.629E-06	7.483E-01	8.710E-01	7.413E-06	
h+	alo2-	-6.98194	1.042E-07	1.410E-07	7.393E-01			
fe++	cl-	-2.51826	3.032E-03	6.368E-03	4.761E-01	7.830E-03	3.872E-01	
fe++	so4--	-6.18618	6.514E-07	2.949E-06	2.208E-01	4.923E-06	1.323E-01	
fe++	f-	-5.51202	3.076E-06	6.328E-06	4.861E-01	8.342E-06	3.687E-01	
fe++	hs-	-24.88223	1.312E-25	2.698E-25	4.861E-01			
fe++	hco3-	-3.50227	3.146E-04	6.253E-04	5.031E-01	7.576E-04	4.152E-01	
fe++	oh-	-5.71063	1.947E-06	4.005E-06	4.861E-01	1.868E-04	1.042E-02	
fe++	alo2-	-5.89159	1.284E-06	2.593E-06	4.950E-01			
fe+++	cl-	-5.68204	2.079E-06	5.252E-06	3.960E-01			
fe+++	so4--	-11.98181	1.043E-12	7.395E-12	1.410E-01			
fe+++	f-	-9.05002	8.912E-10	2.199E-09	4.053E-01			
fe+++	hs-	-30.84150	1.440E-31	3.554E-31	4.053E-01			
fe+++	hco3-	-6.78906	1.625E-07	3.858E-07	4.213E-01			
fe+++	oh-	-9.27346	5.328E-10	1.314E-09	4.053E-01			
fe+++	alo2-	-9.47703	3.334E-10	8.059E-10	4.137E-01			

(a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that
 1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
 2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4686E+00	97.94
nacl	0.9852E-02	2.06
na2so4-	0.3205E-05	0.00
na2f-	0.4624E-06	0.00
naoh	0.3037E-06	0.00
na2co3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.1046E-01	100.00
k2so4-	0.1021E-06	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.1015E-02	99.98
ca2so4	0.7393E-07	0.01
caf+	0.5648E-07	0.01

ca(oh)+	0.4930E-07	0.00
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.4074E-02	99.92
mg(oh)+	0.1673E-05	0.04
mgf+	0.1356E-05	0.03
mgso4	0.3802E-06	0.01
mgco3	0.0000E+00	0.00
mgghco3+	0.0000E+00	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3650E-05	98.48
al(oh)3	0.5608E-07	1.51
al(oh)2+	0.1415E-09	0.00
al(oh)++	0.8697E-13	0.00
alf2+	0.3056E-14	0.00
alf++	0.2341E-14	0.00
alf3	0.2443E-15	0.00
al+++	0.5754E-16	0.00
alf4-	0.8618E-18	0.00
also4+	0.1152E-19	0.00
alf5--	0.1981E-20	0.00
alf6---	0.7586E-25	0.00
al3(oh)4(5+)	0.7682E-28	0.00
al13(oh)34+5	0.8675E-35	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.6624E-03	90.25
h3sio4-	0.7160E-04	9.75
sif6--	0.1236E-35	0.00

total 100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4443E+00	97.83
nacl	0.9852E-02	2.17

hcl	0.1742E-09	0.00
fecl1+	0.3960E-19	0.00
fecl2+	0.4427E-21	0.00
fecl3	0.4368E-21	0.00
fecl4-	0.2647E-23	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.6649E-05	63.86
naso4-	0.3205E-05	30.79
mgso4	0.3802E-06	3.65
kso4-	0.1021E-06	0.98
caso4	0.7393E-07	0.71
feso4	0.9027E-10	0.00
hso4-	0.9948E-12	0.00
also4+	0.1152E-19	0.00
feso4+	0.1518E-22	0.00
hs-	0.1225E-33	0.00
h2s(aq)	0.2562E-35	0.00
s--	0.1584E-41	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1392E-04	88.13
mgf+	0.1356E-05	8.59
naf	0.4624E-06	2.93
caf+	0.5648E-07	0.36
fef+	0.1558E-09	0.00
hf	0.7109E-10	0.00
hf2-	0.3180E-14	0.00
alf2+	0.3056E-14	0.00
alf++	0.2341E-14	0.00
alf3	0.2443E-15	0.00
alf4-	0.8618E-18	0.00
fef++	0.3945E-19	0.00
h2f2	0.9503E-20	0.00
fef2+	0.2904E-20	0.00
alf5--	0.1981E-20	0.00
fef3	0.5338E-22	0.00
alf6---	0.7586E-25	0.00
sif6--	0.1236E-35	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe++	0.1308E-05	56.21

fe(oh)+	0.1015E-05	43.61
fe(oh)4-	0.4067E-08	0.17
fef+	0.1558E-09	0.01
feso4	0.9027E-10	0.00
fe(oh)2+	0.1219E-10	0.00
fe(oh)3-	0.7016E-12	0.00
fe(oh)++	0.1190E-13	0.00
fecl1+	0.3960E-19	0.00
fef++	0.3945E-19	0.00
fe+++	0.8674E-20	0.00
fef2+	0.2904E-20	0.00
fecl2+	0.4427E-21	0.00
fecl3	0.4368E-21	0.00
fef3	0.5338E-22	0.00
feso4+	0.1518E-22	0.00
fecl4-	0.2647E-23	0.00
(feoh++)2	0.9079E-25	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1367E-01	100.00

total		100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
o2(aq) /h2o	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
h2(aq) /h2o	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
hs- /so4--	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
fe+++ /fe++	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	sta
ca-montmoril	3.627	5.107	ssatd	na-montmoril	3.548	4.997	ssat
mg-chlorite	5.557	7.826	ssatd	pyrite	-43.389	-61.102	
magnetite	15.518	21.854	ssatd	gypsum	-4.640	-6.534	
quartz	0.664	0.935	ssatd	low albite	4.540	6.393	ssat
anorthite	-3.076	-4.332		muscovite	10.083	14.200	ssat
illite	5.091	7.170	ssatd	amorphous si	-0.553	-0.778	
paragonite	9.987	14.065	ssatd	albite	3.335	4.697	ssat

fe(oh)+	0.1015E-05	43.61
fe(oh)4-	0.4067E-08	0.17
fef+	0.1558E-09	0.01
feso4	0.9027E-10	0.00
fe(oh)2+	0.1219E-10	0.00
fe(oh)3-	0.7016E-12	0.00
fe(oh)++	0.1190E-13	0.00
fecl++	0.3960E-19	0.00
fef++	0.3945E-19	0.00
fe+++	0.8674E-20	0.00
fef2+	0.2904E-20	0.00
fecl2+	0.4427E-21	0.00
fecl3	0.4368E-21	0.00
fef3	0.5338E-22	0.00
feso4+	0.1518E-22	0.00
fecl4-	0.2647E-23	0.00
(feoh++)2	0.9079E-25	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1367E-01	100.00

total		100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
o2(aq) /h2o	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
h2(aq) /h2o	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
hs- /so4--	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445
fe+++ /fe++	-0.106	-0.1736E+01	-53.917	-2.445

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple affinity, kcal

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	3.627	5.107	ssatd	na-montmoril	3.548	4.997	ssatd
mg-chlorite	5.557	7.826	ssatd	pyrite	-43.389	-61.102	
magnetite	15.518	21.854	ssatd	gypsum	-4.640	-6.534	
quartz	0.664	0.935	ssatd	low albite	4.540	6.393	ssatd
anorthite	-3.076	-4.332		muscovite	-10.083	14.200	ssatd
illite	5.091	7.170	ssatd	amorphous si	-0.553	-0.778	
paragonite	9.987	14.065	ssatd	albite	3.335	4.697	ssatd

laumontite 4.068 5.729 ssatd

0 approx. saturated pure minerals
 0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
 0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

11 supersaturated pure minerals
 0 supersatd. end-members of specified solid solutions
 0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.120974E-53	-53.91730
s2(g)	0.249675E-67	-67.60262
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.924332E-13	-13.03417
h2s(g)	0.334346E-34	-34.47580
steam	0.535716E-01	-1.27107

----- end of output -----

----- no pickup file written -----

----- reading the input file -----

----- end of input file -----

start time = 11:44:54

end time = 11:45:01


```

eeee  qqq  33333  n  n  rrrr
e   q  q  q  3  nn  n  r  r
eeee  q  q  33  n  n  n  rrrr
e   q  q  q  3  n  nn  r  r
eeee  qqq  3333  n  n  r  r
      q

```

eq3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 05/27/91 creator= y.fujiwara
koetoi 10/11/90 -1015m sample after 1736 litre of water had flowed out

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 34.62 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
toldl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolsat = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect
convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis species
na+	0.11200E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.38300E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.10200E+03	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.40400E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.30000E-01	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E+00	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.86600E+03	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

sio2(aq)	0.36900E+02	2	tot conc, mg/l
so4--	0.10000E+01	2	tot conc, mg/l
f-	0.30000E+00	2	tot conc, mg/l
cl-	0.14600E+05	2	tot conc, mg/l
h+	-0.84800E+01	16	log activity

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

clo4-	al13(oh)28(3+)	al(oh)3*	al2(oh)5**
naalo2	kcl	kco3-	fecl+
fecl2	fecl3-	fecl4--	fe(so4)2-
koh	mgcl+		

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.48717E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.97959E-02	0	tot conc, molal	
ca++	0.10080E-02	0	tot conc, molal	
mg++	0.41967E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-05	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.61414E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.84800E+01	16	log activity	
cl-	0.41181E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.10410E-04	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.53718E-06	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.14193E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

iter = 0	delmax = 0.000E+00	delfnc = 0.000E+00	beta(xi) = -0.969E-01
iter = 1	delmax = 0.420E-01	delfnc = 0.000E+00	beta(conc al+++) = -0.251E-01
iter = 2	delmax = 0.275E-02	delfnc = 0.934E+00	beta(conc al+++) = -0.986E-03
iter = 3	delmax = 0.124E-03	delfnc = 0.955E+00	beta(conc al+++) = -0.947E-05
iter = 4	delmax = 0.940E-06	delfnc = 0.992E+00	beta(conc al+++) = -0.489E-07
iter = 5	delmax = 0.530E-08	delfnc = 0.994E+00	beta(conc al+++) = -0.239E-09

iter = 6 delmax = 0.260E-10 delfnc = 0.995E+00
del(conc al+++) = 0.260E-10 beta(conc al+++) = -0.117E-11

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888819.8147	888819.8147	0.5555332167E+02
na	11199.8880	11199.8880	0.4871683341E+00
k	383.0029	383.0029	0.9795897488E-02
ca	40.4000	40.4000	0.1007984032E-02
mg	102.0000	102.0000	0.4196667352E-02
al	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
sl	17.2484	17.2484	0.6141402037E-03
h	111910.1972	111910.1972	0.1110330362E+03
c	170.4693	170.4693	0.1419276595E-01
cl	14600.0000	14600.0000	0.4118128226E+00
s	0.3338	0.3338	0.1041037706E-04
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	0.0300	0.0300	0.5371819435E-06

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000793.0898	1000793.0898	0.5555332167E+02
na+	11200.0000	11200.0000	0.4871683341E+00
k+	383.0000	383.0000	0.9795897488E-02
ca++	40.4000	40.4000	0.1007984032E-02
mg++	102.0000	102.0000	0.4196667352E-02
al+++	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
sio2(a	36.9000	36.9000	0.6141402037E-03
h+	111921.3005	111921.3005	0.1110330362E+03
co3--	851.6937	851.6937	0.1419276595E-01
cl-	14600.0000	14600.0000	0.4118128226E+00
so4--	1.0000	1.0000	0.1041037706E-04
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	0.0300	0.0300	0.5371819435E-06

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551074337E+02	h2o	0.5551074337E+02
na+	0.4871683341E+00	na+	0.4871683341E+00
k+	0.9795897488E-02	k+	0.9795897488E-02

ca++	0.1007984032E-02	ca++	0.1007984032E-02
mg++	0.4196667352E-02	mg++	0.4196667352E-02
al+++	0.3706174487E-05	al+++	0.3706174487E-05
sio2(aq)	0.6141402037E-03	sio2(aq)	0.6141402037E-03
h+	0.1110188434E+03	h+	0.1110188434E+03
cl-	0.4118128226E+00	cl-	0.4118128226E+00
so4--	0.1041037706E-04	so4--	0.1041037706E-04
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.5371819435E-06	fe++	0.5371819435E-06
hco3-	0.1419276595E-01	hco3-	0.1419276595E-01

ph = 8.48000
 activity of water = 0.98396
 log activity of water = -0.00702
 osmotic coefficient = 0.00802
 stoichiometric sum of molalities = 111.9476625059650
 titration alkalinity = 0.0142962122825 eq/kg h2o
 ionic strength = 0.4627957608458
 equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4871683340583

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
 sigma(mz) cations = 0.4982085830E+00
 sigma(mz) anions = -0.4169684983E+00
 total charge = 0.9151770813E+00
 mean charge = 0.4575885406E+00
 charge imbalance = 0.8124008477E-01

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
 mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

8.88 per cent of the total charge
 17.75 per cent of the mean charge
 16.31 per cent of sigma(mz) cations
 19.48 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 7.9942
 log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.2809
 log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.3832
 log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 14.0988
 log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 7.6871
 log (act(sio2(aq))) = -3.2694
 log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -9.0652
 log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -22.8646
 log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.5150
 log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 9.8026
 log (act(o2(aq))) = -63.5337
 log (act(h2(aq))) = -12.8338
 log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -29.3697
 log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 1.8683
 log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.4828

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6923
 log (act(al3+) x act(h+)xx 3) = -14.0813

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6923
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -14.0813

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4780E+00	-0.3206	-0.1652	0.3268E+00	-0.4858
cl-	0.4027E+00	-0.3951	-0.1901	0.2599E+00	-0.5852
hco3-	0.1419E-01	-1.8479	-0.1549	0.9936E-02	-2.0028
k+	0.9796E-02	-2.0090	-0.1901	0.6323E-02	-2.1991
nacl	0.9157E-02	-2.0383	0.0000	0.9157E-02	-2.0383
mg++	0.4193E-02	-2.3775	-0.4837	0.1377E-02	-2.8612
ca++	0.1008E-02	-2.9966	-0.5801	0.2650E-03	-3.5768
sio2(aq)	0.5377E-03	-3.2694	0.0000	0.5377E-03	-3.2694
h3sio4-	0.7642E-04	-4.1168	-0.1652	0.5224E-04	-4.2820
f-	0.1386E-04	-4.8581	-0.1769	0.9226E-05	-5.0350
oh-	0.9217E-05	-5.0354	-0.1769	0.6134E-05	-5.2123
so4--	0.6570E-05	-5.1824	-0.7222	0.1246E-05	-5.9046
alo2-	0.3663E-05	-5.4361	-0.1652	0.2504E-05	-5.6013
naso4-	0.3276E-05	-5.4846	-0.1589	0.2273E-05	-5.6435
mg(oh)+	0.2278E-05	-5.6425	-0.1652	0.1557E-05	-5.8077
mgf+	0.1398E-05	-5.8544	-0.1652	0.9559E-06	-6.0196
naf	0.4723E-06	-6.3258	0.0000	0.4723E-06	-6.3258
naoh	0.4095E-06	-6.3878	0.0000	0.4095E-06	-6.3878
mgso4	0.3942E-06	-6.4043	0.0000	0.3942E-06	-6.4043
fe(oh)+	0.2724E-06	-6.5648	-0.1652	0.1862E-06	-6.7300
fe++	0.2647E-06	-6.5773	-0.5801	0.6960E-07	-7.1574
kso4-	0.9585E-07	-7.0184	-0.1769	0.6379E-07	-7.1953
caso4	0.7413E-07	-7.1300	0.0000	0.7413E-07	-7.1300
ca(oh)+	0.6494E-07	-7.1875	-0.1652	0.4439E-07	-7.3527
caf+	0.5636E-07	-7.2491	-0.1652	0.3852E-07	-7.4143
al(oh)3	0.4275E-07	-7.3690	0.0000	0.4275E-07	-7.3690
ht	0.4133E-08	-8.3838	-0.0962	0.3311E-08	-8.4800
hcl	0.1201E-09	-9.9203	0.0000	0.1201E-09	-9.9203
al(oh)2+	0.8165E-10	-10.0881	-0.1652	0.5581E-10	-10.2533
hf	0.5388E-10	-10.2685	0.0000	0.5388E-10	-10.2685
fe(oh)4-	0.4107E-10	-10.3865	-0.1652	0.2807E-10	-10.5517
fef+	0.3168E-10	-10.4992	-0.1652	0.2166E-10	-10.6644
feso4	0.1845E-10	-10.7340	0.0000	0.1845E-10	-10.7340
hso4-	0.7544E-12	-12.1224	-0.1652	0.5157E-12	-12.2876
fe(oh)3-	0.3276E-12	-12.4846	-0.1652	0.2240E-12	-12.6498
h2(aq)	0.1313E-12	-12.8817	0.0479	0.1466E-12	-12.8338
fe(oh)2+	0.7082E-13	-13.1498	-0.1652	0.4841E-13	-13.3150
al(oh)++	0.3783E-13	-13.4222	-0.5801	0.9946E-14	-14.0023
hf2-	0.2402E-14	-14.6194	-0.1652	0.1642E-14	-14.7846
alf2+	0.1012E-14	-14.9949	-0.1652	0.6917E-15	-15.1601
alf++	0.7695E-15	-15.1138	-0.6436	0.1748E-15	-15.7574
alf3	0.8100E-16	-16.0915	0.0000	0.8100E-16	-16.0915
fe(oh)++	0.5184E-16	-16.2853	-0.7222	0.9829E-17	-17.0075
al+++	0.1891E-16	-16.7233	-1.0296	0.1766E-17	-17.7529
alf4-	0.2848E-18	-18.5455	-0.1652	0.1947E-18	-18.7107
h2f2	0.5457E-20	-20.2631	0.0000	0.5457E-20	-20.2631
also4+	0.3831E-20	-20.4167	-0.1652	0.2618E-20	-20.5820
hs-	0.1937E-20	-20.7129	-0.1769	0.1289E-20	-20.8897
alf5--	0.6463E-21	-21.1896	-0.7222	0.1225E-21	-21.9117
fef++	0.1306E-21	-21.8841	-0.6436	0.2967E-22	-22.5278
fecl1++	0.1190E-21	-21.9246	-0.7222	0.2255E-22	-22.6468
h2s(aq)	0.3080E-22	-22.5114	0.0000	0.3080E-22	-22.5114

fe+++	0.2870E-22	-22.5421	-1.0296	0.2681E-23	-23.5717
fef2+	0.9675E-23	-23.0144	-0.1652	0.6613E-23	-23.1796
fecl2+	0.1223E-23	-23.9126	-0.1652	0.8359E-24	-24.0779
fecl3	0.1100E-23	-23.9586	0.0000	0.1100E-23	-23.9586
fe3	0.1782E-24	-24.7491	0.0000	0.1782E-24	-24.7491
feso4+	0.5082E-25	-25.2939	-0.1652	0.3474E-25	-25.4591
alf6---	0.2426E-25	-25.6152	-1.6504	0.5425E-27	-27.2656
fecl4-	0.6050E-26	-26.2182	-0.1652	0.4136E-26	-26.3835
s--	0.3279E-28	-28.4842	-0.6436	0.7449E-29	-29.1279
al3(oh)4(5+)	0.8102E-29	-29.0914	-3.4054	0.3186E-32	-32.4968
(feoh++)2	0.1667E-29	-29.7781	-2.9499	0.1870E-32	-32.7281
sif6--	0.3258E-36	-36.4870	-0.7222	0.6178E-37	-37.2092
al13(oh)34+5	0.4510E-37	-37.3458	-8.7865	0.7374E-46	-46.1323
o2(aq)	0.2621E-63	-63.5816	0.0479	0.2926E-63	-63.5337

----- mean ionic properties -----

		true (a)				stoichiometric (b)	
species	species	log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.53548	2.914E-01	4.387E-01	6.643E-01	4.479E-01	6.506E-01
na+	so4--	-2.29205	5.104E-03	1.145E-02	4.458E-01	1.352E-02	3.776E-01
na+	f-	-2.76039	1.736E-03	2.574E-03	6.745E-01	2.774E-03	6.260E-01
na+	hs-	-10.68776	2.052E-11	3.043E-11	6.745E-01		
na+	hco3-	-1.24428	5.698E-02	8.237E-02	6.918E-01	8.315E-02	6.852E-01
na+	oh-	-2.84903	1.416E-03	2.099E-03	6.745E-01	2.654E-02	5.335E-02
na+	alo2-	-3.04356	9.046E-04	1.323E-03	6.836E-01		
k+	cl-	-1.39212	4.054E-02	6.280E-02	6.455E-01	6.351E-02	6.383E-01
k+	so4--	-3.43425	3.679E-04	8.575E-04	4.291E-01	9.997E-04	3.680E-01
k+	f-	-3.61703	2.415E-04	3.685E-04	6.554E-01	3.933E-04	6.141E-01
k+	hs-	-11.54440	2.855E-12	4.356E-12	6.554E-01		
k+	hco3-	-2.10093	7.926E-03	1.179E-02	6.722E-01	1.179E-02	6.722E-01
k+	oh-	-3.70567	1.969E-04	3.005E-04	6.554E-01	3.763E-03	5.233E-02
k+	alo2-	-3.90020	1.258E-04	1.894E-04	6.643E-01		
ca++	cl-	-1.58237	2.616E-02	5.467E-02	4.785E-01	5.550E-02	4.714E-01
ca++	so4--	-4.74068	1.817E-05	8.137E-05	2.233E-01	1.024E-04	1.774E-01
ca++	f-	-4.54891	2.825E-05	5.786E-05	4.883E-01	6.311E-05	4.477E-01
ca++	hs-	-15.11874	7.608E-16	1.558E-15	4.883E-01		
ca++	hco3-	-2.52744	2.969E-03	5.877E-03	5.051E-01	5.878E-03	5.051E-01
ca++	oh-	-4.66710	2.152E-05	4.408E-05	4.883E-01	1.282E-03	1.679E-02
ca++	alo2-	-4.92648	1.184E-05	2.383E-05	4.971E-01		
mg++	cl-	-1.34386	4.530E-02	8.793E-02	5.153E-01	8.928E-02	5.074E-01
mg++	so4--	-4.38291	4.141E-05	1.660E-04	2.495E-01	2.090E-04	1.981E-01
mg++	f-	-4.31040	4.893E-05	9.306E-05	5.258E-01	1.015E-04	4.820E-01
mg++	hs-	-14.88023	1.318E-15	2.506E-15	5.258E-01		
mg++	hco3-	-2.28893	5.141E-03	9.452E-03	5.459E-01	9.455E-03	5.437E-01
mg++	oh-	-4.42859	3.727E-05	7.089E-05	5.258E-01	2.062E-03	1.808E-02
mg++	alo2-	-4.68796	2.051E-05	3.832E-05	5.353E-01		
al+++	cl-	-4.87711	1.327E-05	3.333E-05	3.981E-01	2.256E-02	5.883E-04
al+++	so4--	-10.64392	2.270E-11	1.589E-10	1.429E-01	6.887E-06	3.296E-06
al+++	f-	-8.21447	6.103E-09	1.498E-08	4.073E-01	1.099E-05	5.552E-04
al+++	hs-	-20.10553	7.843E-21	1.925E-20	4.073E-01		
al+++	hco3-	-5.94031	1.147E-06	2.712E-06	4.231E-01	1.804E-03	6.359E-04
al+++	oh-	-8.34743	4.493E-09	1.103E-08	4.073E-01	3.253E-04	1.381E-05
al+++	alo2-	-8.63923	2.295E-09	5.522E-09	4.156E-01		
h+	cl-	-4.53259	2.934E-05	4.079E-05	7.192E-01	4.781E+00	6.136E-06
h+	so4--	-7.62153	2.390E-08	4.823E-08	4.956E-01	3.177E-01	7.523E-08
h+	f-	-6.75750	1.748E-07	2.394E-07	7.302E-01	2.961E-02	5.904E-06

h+	hs-	-14.68487	2.066E-15	2.829E-15	7.302E-01		
h+	hco3-	-5.24139	5.736E-06	7.659E-06	7.490E-01	8.876E-01	6.462E-06
h+	alo2-	-7.04067	9.106E-08	1.230E-07	7.401E-01		
fe++	cl-	-2.77593	1.675E-03	3.501E-03	4.785E-01	4.500E-03	3.723E-01
fe++	so4--	-6.53101	2.944E-07	1.319E-06	2.233E-01	2.365E-04	1.245E-01
fe++	f-	-5.74247	1.809E-06	3.705E-06	4.883E-01	5.117E-06	3.536E-01
fe++	hs-	-16.31230	4.872E-17	9.977E-17	4.883E-01		
fe++	hco3-	-3.72100	1.901E-04	3.764E-04	5.051E-01	4.765E-04	3.990E-01
fe++	oh-	-5.86066	1.378E-06	2.823E-06	4.883E-01	1.039E-04	1.326E-02
fe++	alo2-	-6.12003	7.585E-07	1.526E-06	4.971E-01		
fe+++	cl-	-6.33181	4.658E-07	1.170E-06	3.981E-01		
fe+++	so4--	-12.97145	1.068E-13	7.476E-13	1.429E-01		
fe+++	f-	-9.66917	2.142E-10	5.259E-10	4.073E-01		
fe+++	hs-	-21.56023	2.753E-22	6.758E-22	4.073E-01		
fe+++	hco3-	-7.39502	4.027E-08	9.517E-08	4.231E-01		
fe+++	oh-	-9.80213	1.577E-10	3.872E-10	4.073E-01		
fe+++	alo2-	-10.09393	8.055E-11	1.938E-10	4.156E-01		

(a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that
 1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
 2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4780E+00	98.12
nacl	0.9157E-02	1.88
nao4-	0.3276E-05	0.00
naf	0.4723E-06	0.00
naoh	0.4095E-06	0.00
naco3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.9796E-02	100.00
kso4-	0.9585E-07	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.1008E-02	99.98
caso4	0.7413E-07	0.01
ca(oh)+	0.6494E-07	0.01

caf+	0.5636E-07	0.01
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.4193E-02	99.90
mg(oh)+	0.2278E-05	0.05
mgf+	0.1398E-05	0.03
mgso4	0.3942E-06	0.01
mgco3	0.0000E+00	0.00
mghco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3663E-05	98.84
al(oh)3	0.4275E-07	1.15
al(oh)2+	0.8165E-10	0.00
al(oh)++	0.3783E-13	0.00
alf2+	0.1012E-14	0.00
alf++	0.7695E-15	0.00
alf3	0.8100E-16	0.00
al+++	0.1891E-16	0.00
alf4-	0.2848E-18	0.00
also4+	0.3831E-20	0.00
alf5--	0.6463E-21	0.00
alf6---	0.2426E-25	0.00
al3(oh)4(5+)	0.8102E-29	0.00
al13(oh)34+5	0.4510E-37	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.5377E-03	87.56
h3sio4-	0.7642E-04	12.44
sif6--	0.3258E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4027E+00	97.78
nacl	0.9157E-02	2.22

hcl	0.1201E-09	0.00
fecl++	0.1190E-21	0.00
fecl2+	0.1223E-23	0.00
fecl3	0.1100E-23	0.00
fecl4-	0.6050E-26	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.6570E-05	63.11
nao4-	0.3276E-05	31.47
mgso4	0.3942E-06	3.79
kso4-	0.9585E-07	0.92
caso4	0.7413E-07	0.71
feso4	0.1845E-10	0.00
hso4-	0.7544E-12	0.00
also4+	0.3831E-20	0.00
hs-	0.1937E-20	0.00
h2s(aq)	0.3080E-22	0.00
feso4+	0.5082E-25	0.00
s--	0.3279E-28	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1386E-04	87.80
mgf+	0.1398E-05	8.86
naf	0.4723E-06	2.99
caf+	0.5636E-07	0.36
hf	0.5388E-10	0.00
fef+	0.3168E-10	0.00
hf2-	0.2402E-14	0.00
alf2+	0.1012E-14	0.00
alf++	0.7695E-15	0.00
alf3	0.8100E-16	0.00
alf4-	0.2848E-18	0.00
h2f2	0.5457E-20	0.00
alf5--	0.6463E-21	0.00
fef++	0.1306E-21	0.00
fef2+	0.9675E-23	0.00
fef3	0.1782E-24	0.00
alf6---	0.2426E-25	0.00
sif6--	0.3258E-36	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe(oh)+	0.2724E-06	50.71

fe++	0.2647E-06	49.27
fe(oh)4-	0.4107E-10	0.01
fef+	0.3168E-10	0.01
feso4	0.1845E-10	0.00
fe(oh)3-	0.3276E-12	0.00
fe(oh)2+	0.7082E-13	0.00
fe(oh)++	0.5184E-16	0.00
fef++	0.1306E-21	0.00
fecl++	0.1190E-21	0.00
fe+++	0.2870E-22	0.00
fef2+	0.9675E-23	0.00
fecl2+	0.1223E-23	0.00
fecl3	0.1100E-23	0.00
fef3	0.1782E-24	0.00
feso4+	0.5082E-25	0.00
fecl4-	0.6050E-26	0.00
(feoh++)2	0.1667E-29	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1419E-01	100.00

total		100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.215	-0.3521E+01	-60.575	-4.958
o2(aq) /h2o	-0.215	-0.3521E+01	-60.575	-4.958
h2(aq) /h2o	-0.215	-0.3521E+01	-60.575	-4.958
hs- /so4--	-0.215	-0.3521E+01	-60.575	-4.958
fe+++ /fe++	-0.215	-0.3521E+01	-60.575	-4.958

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	3.059	4.309	ssatd	na-montmoril	2.984	4.202	ssatd
mg-chlorite	6.325	8.907	ssatd	pyrite	-21.009	-29.587	
magnetite	10.838	15.263	ssatd	gypsum	-4.639	-6.533	
quartz	0.573	0.807	ssatd	low albite	4.279	6.027	ssatd
anorthite	-3.252	-4.580		muscovite	9.550	13.450	ssatd
illite	4.622	6.510	ssatd	amorphous si	-0.643	-0.906	
paragonite	9.491	13.367	ssatd	albite	3.075	4.330	ssatd

laumontite 3.710 5.225 ssatd

0 approx. saturated pure minerals
0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

11 supersaturated pure minerals
0 supersatd. end-members of specified solid solutions
0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.266371E-60	-60.57451
s2(g)	0.791388E-48	-48.10161
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.197644E-09	-9.70412
h2s(g)	0.402060E-21	-21.39571
steam	0.535858E-01	-1.27095

----- end of output -----
----- no pickup file written -----
----- reading the input file -----
----- end of input file -----

start time = 12:24:35
end time = 12:24:41

Digital Equipment Corporation - VAX/VMS Version V5.2-1 *****

```
FFFF U U J III W W AAA RRRR AAA
F U U J I W W A A R R A A
F U U J I W W A A R R A A
FFFF U U J J I W W A A RRRR A A
F U U J J I W W A A A A R R A A A A
F U U J J I W W A A R R A A
F UUUU JJJ III W W A A R R A A
```

```
PPPPPPPP NN NN CCCCCCCC 77777777
PPPPPPPP NN NN CCCCCCCC 77777777
PP PP NN NN CC 77
PP PP NN NN CC 77
PP PP NNNN NN CC 77
PP PP NNNN NN CC 77
PPPPPPPP NN NN NN CC 77
PPPPPPPP NN NN NN CC 77
PP NN NNNN CC 77
PP NN NNNN CC 77
PP NN NN CC 77
PP NN NN CC 77
PP NN NN CCCCCCCC 77
PP NN NN CCCCCCCC 77
```

```
000000 UU UU TTTTTTTTTT 7777 11
000000 UU UU TTTTTTTTTT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 1111
00 00 UU UU TT 7777 1111
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
00 00 UU UU TT 7777 11
000000 UUUUUUUUUU TT 77 111111
000000 UUUUUUUUUU TT 77 111111
```

JIWARA.EQ3MIN[PNC7.OUT;1 (10597,54,0), last revised on 12-JUL-1991 12:25, is a 67 block sequ
The records are variable length with FORTRAN (FTN) carriage control. The longest record is:
SYS\$PRINT on 12-JUL-1991 12:28 by user FUJIWARA, UIC [FUJIWARA], under account 4010 at prio:
\$LIAO: on 12-JUL-1991 12:54 from queue LIAO.

Digital Equipment Corporation - VAX/VMS Version V5.2-1 *****

eq3nr.3245R86 run 12:25:40 12-JUL-9
supported by eqlib.3245R106

----- reading the input file -----
input file name= hbi01 created= 06/01/91 creator= y.fujiwara
koetol 10/15/90 -1015m sample after 1900 litre of water had flowed out
endit.

```
jobid= hbi01
tempc= 3.45900E+01 time= 1.00000E+00 hrs
rho= 0.10000E+01 tdspkg= 0.00000E+00 tdspl= 0.00000E+00
fep= -0.22500E+00 uredox=
tolbt= 0.00000E+00 toldl= 0.00000E+00 tolsat= 0.00000E+00
itermx= 0
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
iop1-10= -1 0 -1 0 0 0 0 0 0 0
iop91-10= 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
iop1-10= 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0
iodb1-10= 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
uebal= uacion= pick1.
nxmod= 4
species= naalo2
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al(oh)3*
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al13(oh)28(3+)
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
species= al2(oh)5*+
type= 0 option= -1 xlkmod= 0.00000E+00
run master data file csp jflag uphase
species master species
na+ 0.10800E+05 2
k+ 0.39000E+03 2
mg++ 0.10000E+03 2
ca++ 0.35900E+02 2
fe++ 0.17000E+00 2
al+++ 0.10000E+00 2
hco3- 0.74400E+03 2
sio2(aq) 0.35100E+02 2
so4-- 0.10000E+01 2
f- 0.30000E+00 2
cl- 0.14600E+05 2
h+ -0.83900E+01 16
```

----- the input file has been read -----

```
naalo2 has been user-suppressed
al(oh)3* has been user-suppressed
al13(oh)28(3+) has been user-suppressed
al2(oh)5*+ has been user-suppressed
```

----- file data1 has been successfully read -----

```

eeee  qqq  33333  n  n  rrrr
e      q  q      3  nn n  r  r
eeee  q  q      33  n  n  rrrr
e      q  q      3  n  nn r  r
eeee  qqq  33333  n  n  r  r
q

```

eq3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 06/01/91 creator= y.fujiwara
koetoi 10/15/90 -1015m sample after 1900 litre of water had flowed out

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 34.59 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
toldl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolst = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect
convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis species
na+	0.10800E+05	2	tot conc, mg/l		
k+	0.39000E+03	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.10000E+03	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.35900E+02	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.17000E+00	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E+00	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.74400E+03	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

```

sio2(aq)  0.35100E+02  2  tot conc, mg/l
so4--    0.10000E+01  2  tot conc, mg/l
f-       0.30000E+00  2  tot conc, mg/l
cl-      0.14600E+05  2  tot conc, mg/l
h+       -0.83900E+01  16  log activity

```

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

```

clo4-    al13(oh)28(3+)  al(oh)3+  al2(oh)5+
naalo2   kcl             kco3-     fecl+
fecl2    fecl3-         fecl4--   fe(so4)2-
koh      mgcl+

```

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.46977E+00	0	tot conc, molal	
k+	0.99749E-02	0	tot conc, molal	
ca++	0.89571E-03	0	tot conc, molal	
mg++	0.41144E-02	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-05	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.58418E-03	0	tot conc, molal	
h+	-0.83900E+01	16	log activity	
cl-	0.41181E+00	0	tot conc, molal	
so4--	0.10410E-04	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.30440E-05	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.12193E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

```

iter = 0  delmax = 0.000E+00  delfnc = 0.000E+00  beta( ) =
del( ) = 0.000E+00  xi ) = -0.841E-01
iter = 1  delmax = 0.365E-01  delfnc = 0.000E+00  beta(conc  al+++ ) = -0.212E-01
del( xi ) = -0.365E-01  beta(conc  al+++ ) = -0.744E-03
iter = 2  delmax = 0.237E-02  delfnc = 0.935E+00  beta(conc  al+++ ) = -0.643E-05
del(conc  so4-- ) = -0.237E-02  beta(conc  al+++ ) = -0.325E-07
iter = 3  delmax = 0.823E-04  delfnc = 0.965E+00  beta(conc  al+++ ) = -0.157E-09
del(conc  fe++ ) = 0.823E-04  beta(conc  al+++ ) =
iter = 4  delmax = 0.569E-06  delfnc = 0.993E+00  beta(conc  al+++ ) =
del(conc  al+++ ) = 0.569E-06  beta(conc  al+++ ) =
iter = 5  delmax = 0.333E-08  delfnc = 0.994E+00  beta(conc  al+++ ) =
del(conc  al+++ ) = 0.333E-08  beta(conc  al+++ ) =

```


iter = 6 delmax = 0.162E-10 delfnc = 0.995E+00
 del(conc al+++) = 0.162E-10 beta(conc al+++) = -0.752E-12

newton-raphson iteration converged in 6 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888722.3562	888722.3562	0.5554723028E+02
na	10799.8920	10799.8920	0.4697694650E+00
k	390.0030	390.0030	0.9974934779E-02
ca	35.9000	35.9000	0.8957085828E-03
mg	100.0000	100.0000	0.4114379757E-02
al	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
si	16.4070	16.4070	0.5841821450E-03
h	111908.1325	111908.1325	0.1110309877E+03
c	146.4540	146.4540	0.1219332317E-01
cl	14600.0000	14600.0000	0.4118128226E+00
s	0.3338	0.3338	0.1041037706E-04
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	0.1700	0.1700	0.3044031013E-05

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000683.3535	1000683.3535	0.5554723028E+02
na+	10800.0000	10800.0000	0.4697694650E+00
k+	390.0000	390.0000	0.9974934779E-02
ca++	35.9000	35.9000	0.8957085828E-03
mg++	100.0000	100.0000	0.4114379757E-02
al+++	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
sio2(a)	35.1000	35.1000	0.5841821450E-03
h+	111919.2356	111919.2356	0.1110309877E+03
co3--	731.7091	731.7091	0.1219332317E-01
cl-	14600.0000	14600.0000	0.4118128226E+00
so4--	1.0000	1.0000	0.1041037706E-04
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	0.1700	0.1700	0.3044031013E-05

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

species	original basis	moles/kg h2o	species	existing basis	moles/kg h2o
h2o		0.5551065031E+02	h2o		0.5551065031E+02
na+		0.4697694650E+00	na+		0.4697694650E+00
k+		0.9974934779E-02	k+		0.9974934779E-02

ca++	0.8957085828E-03	ca++	0.8957085828E-03
mg++	0.4114379757E-02	mg++	0.4114379757E-02
al+++	0.3706174487E-05	al+++	0.3706174487E-05
sio2(aq)	0.5841821450E-03	sio2(aq)	0.5841821450E-03
h+	0.1110187944E+03	h+	0.1110187944E+03
cl-	0.4118128226E+00	cl-	0.4118128226E+00
so4--	0.1041037706E-04	so4--	0.1041037706E-04
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.3044031013E-05	fe++	0.3044031013E-05
hco3-	0.1219332317E-01	hco3-	0.1219332317E-01

ph = 8.39000
 activity of water = 0.98454
 log activity of water = -0.00677
 osmotic coefficient = 0.00773
 stoichiometric sum of molalities = 111.9281721259083
 titration alkalinity = 0.0122795845156 eq/kg h2o
 ionic strength = 0.4530797558082
 equiv. stoich. ionic strength (na+) = 0.4697694649848

----- electrical balance totals -----

equiv/kg
 sigma(mz) cations = 0.4808915194E+00
 sigma(mz) anions = -0.4152387500E+00
 total charge = 0.8961302694E+00
 mean charge = 0.4480651347E+00
 charge imbalance = 0.6565276939E-01

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
 mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

7.33 per cent of the total charge
 14.65 per cent of the mean charge
 13.65 per cent of sigma(mz) cations
 15.81 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) = 7.8890
 log (act(k+) / act(h+)xx 1) = 6.1997
 log (act(ca++) / act(h+)xx 2) = 13.1543
 log (act(mg++) / act(h+)xx 2) = 13.9117
 log (act(al+++) / act(h+)xx 3) = 7.7790
 log (act(sio2(aq))) = -3.2809
 log (act(cl-) x act(h+)xx 1) = -8.9740
 log (act(so4--) x act(h+)xx 2) = -22.6767
 log (act(f-) x act(h+)xx 1) = -13.4230
 log (act(fe++) / act(h+)xx 2) = 10.4210
 log (act(o2(aq))) = -64.5577
 log (act(h2(aq))) = -12.3261
 log (act(hs-) x act(h+)xx 1) = -27.1484
 log (act(fe+++) / act(h+)xx 3) = 2.2322
 log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) = -10.4582

log (act(oh-) x act(h+)xx 1) = -13.6929
 log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) = -13.9919

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
na+	0.4609E+00	-0.3364	-0.1646	0.3155E+00	-0.5010
cl-	0.4029E+00	-0.3948	-0.1892	0.2606E+00	-0.5840
hco3-	0.1219E-01	-1.9139	-0.1543	0.8546E-02	-2.0682
k+	0.9975E-02	-2.0011	-0.1892	0.6452E-02	-2.1903
nacl	0.8869E-02	-2.0521	0.0000	0.8869E-02	-2.0521
mg++	0.4111E-02	-2.3861	-0.4822	0.1354E-02	-2.8683
ca++	0.8955E-03	-3.0479	-0.5778	0.2367E-03	-3.6257
sio2(aq)	0.5237E-03	-3.2809	0.0000	0.5237E-03	-3.2809
h3sio4-	0.6045E-04	-4.2186	-0.1646	0.4138E-04	-4.3832
f-	0.1390E-04	-4.8569	-0.1761	0.9268E-05	-5.0330
oh-	0.7468E-05	-5.1268	-0.1761	0.4978E-05	-5.3029
so4--	0.6632E-05	-5.1783	-0.1784	0.1268E-05	-5.8947
alo2-	0.3653E-05	-5.4373	-0.1646	0.2501E-05	-5.6019
naso4-	0.3217E-05	-5.4926	-0.1583	0.2234E-05	-5.6509
mg(oh)+	0.1816E-05	-5.7410	-0.1646	0.1243E-05	-5.9056
fe++	0.1655E-05	-5.7812	-0.5778	0.4375E-06	-6.3590
fe(oh)+	0.1389E-05	-5.8574	-0.1646	0.9506E-06	-6.0220
mgf+	0.1379E-05	-5.8603	-0.1646	0.9443E-06	-6.0249
naf	0.4579E-06	-6.3393	0.0000	0.4579E-06	-6.3393
mgso4	0.3946E-06	-6.4039	0.0000	0.3946E-06	-6.4039
naoh	0.3209E-06	-6.4937	0.0000	0.3209E-06	-6.4937
kso4-	0.9938E-07	-7.0027	-0.1761	0.6625E-07	-7.1788
caso4	0.6741E-07	-7.1713	0.0000	0.6741E-07	-7.1713
al(oh)3	0.5266E-07	-7.2785	0.0000	0.5266E-07	-7.2785
caf+	0.5047E-07	-7.2969	-0.1646	0.3455E-07	-7.4615
ca(oh)+	0.4701E-07	-7.3278	-0.1646	0.3218E-07	-7.4924
h+	0.5085E-08	-8.2937	-0.0963	0.4074E-08	-8.3900
fef+	0.1997E-09	-9.6996	-0.1646	0.1367E-09	-9.8642
hcl	0.1482E-09	-9.8291	0.0000	0.1482E-09	-9.8291
al(oh)2+	0.1236E-09	-9.9080	-0.1646	0.8460E-10	-10.0726
feso4	0.1180E-09	-9.9280	0.0000	0.1180E-09	-9.9280
fe(oh)4-	0.7674E-10	-10.1150	-0.1646	0.5253E-10	-10.2796
hf	0.6655E-10	-10.1768	0.0000	0.6655E-10	-10.1768
fe(oh)3-	0.1099E-11	-11.9591	-0.1646	0.7521E-12	-12.1237
hso4-	0.9431E-12	-12.0254	-0.1646	0.6456E-12	-12.1900
h2(aq)	0.4236E-12	-12.3731	0.0469	0.4719E-12	-12.3261
fe(oh)2+	0.2008E-12	-12.6973	-0.1646	0.1374E-12	-12.8619
al(oh)++	0.7024E-13	-13.1534	-0.5778	0.1857E-13	-13.7312
hf2-	0.2976E-14	-14.5263	-0.1646	0.2037E-14	-14.6909
alf2+	0.2345E-14	-14.6299	-0.1646	0.1605E-14	-14.7945
alf++	0.1766E-14	-14.7530	-0.6407	0.4039E-15	-15.3937
alf3	0.1888E-15	-15.7240	0.0000	0.1888E-15	-15.7240
fe(oh)++	0.1796E-15	-15.7457	-0.7184	0.3435E-16	-16.4641
al+++	0.4317E-16	-16.3648	-1.0263	0.4064E-17	-17.3910
alf4-	0.6658E-18	-18.1767	-0.1646	0.4598E-18	-18.3413
hs-	0.2616E-18	-18.5823	-0.1761	0.1744E-18	-18.7584
also4+	0.8958E-20	-20.0478	-0.1646	0.6132E-20	-20.2124
h2f2	0.8334E-20	-20.0791	0.0000	0.8334E-20	-20.0791
h2s(aq)	0.5131E-20	-20.2898	0.0000	0.5131E-20	-20.2898
alf5--	0.1507E-20	-20.8218	-0.7184	0.2883E-21	-21.5402
fef++	0.5605E-21	-21.2514	-0.6407	0.1282E-21	-21.8921
fecl2++	0.5086E-21	-21.2936	-0.7184	0.9727E-22	-22.0120

fe+++	0.12226E-21	-21.9115	-1.0263	0.1154E-22	-22.9378
fef2+	0.4205E-22	-22.3762	-0.1646	0.2879E-22	-22.5408
fecl2+	0.5285E-23	-23.2769	-0.1646	0.3618E-23	-23.4415
fecl3	0.4767E-23	-23.3217	0.0000	0.4767E-23	-23.3217
fef3	0.7769E-24	-24.1097	0.0000	0.7769E-24	-24.1097
feso4+	0.2223E-24	-24.6531	-0.1646	0.1522E-24	-24.8177
alf6--	0.5618E-25	-25.2504	-1.6414	0.1283E-26	-26.8918
fecl4-	0.2624E-25	-25.5810	-0.1646	0.1796E-25	-25.7456
s--	0.3571E-26	-26.4472	-0.6407	0.8167E-27	-27.0879
al3(oh)4(5+)	0.4182E-28	-28.3786	-3.3915	0.1698E-31	-31.7702
(feoh++)2	0.1963E-28	-28.7070	-2.9336	0.2288E-31	-31.6406
al13(oh)34+5	0.1567E-35	-35.8048	-8.6935	0.3175E-44	-44.4983
sif6--	0.7398E-36	-36.1309	-0.7184	0.1415E-36	-36.8493
o2(aq)	0.2486E-64	-64.6046	0.0469	0.2769E-64	-64.5577

----- mean ionic properties -----

species	species	true (a)				stoichiometric (b)	
		log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-0.54248	2.868E-01	4.309E-01	6.654E-01	4.398E-01	6.520E-01
na+	so4--	-2.29958	5.017E-03	1.121E-02	4.475E-01	1.320E-02	3.802E-01
na+	f-	-2.76701	1.710E-03	2.531E-03	6.755E-01	2.724E-03	6.278E-01
na+	hs-	-9.62971	2.346E-10	3.473E-10	6.755E-01		
na+	hco3-	-1.28461	5.193E-02	7.497E-02	6.927E-01	7.568E-02	6.861E-01
na+	oh-	-2.90196	1.253E-03	1.855E-03	6.755E-01	2.521E-02	4.972E-02
na+	alo2-	-3.05145	8.883E-04	1.298E-03	6.845E-01		
k+	cl-	-1.38713	4.101E-02	6.340E-02	6.468E-01	6.409E-02	6.398E-01
k+	so4--	-3.42578	3.752E-04	8.706E-04	4.309E-01	1.012E-03	3.708E-01
k+	f-	-3.61166	2.445E-04	3.724E-04	6.567E-01	3.969E-04	6.161E-01
k+	hs-	-10.47436	3.355E-11	5.109E-11	6.567E-01		
k+	hco3-	-2.12926	7.426E-03	1.103E-02	6.733E-01	1.103E-02	6.733E-01
k+	oh-	-3.74660	1.792E-04	2.729E-04	6.567E-01	3.673E-03	4.879E-02
k+	alo2-	-3.89640	1.270E-04	1.909E-04	6.654E-01		
ca++	cl-	-1.59788	2.524E-02	5.258E-02	4.800E-01	5.336E-02	4.731E-01
ca++	so4--	-4.76123	1.733E-05	7.707E-05	2.249E-01	9.656E-05	1.795E-01
ca++	f-	-4.56392	2.729E-05	5.573E-05	4.898E-01	6.067E-05	4.499E-01
ca++	hs-	-13.71419	1.931E-14	3.943E-14	4.898E-01		
ca++	hco3-	-2.58739	2.586E-03	5.106E-03	5.064E-01	5.107E-03	5.064E-01
ca++	oh-	-4.74385	1.804E-05	3.683E-05	4.898E-01	1.179E-03	1.530E-02
ca++	alo2-	-4.94318	1.140E-05	2.286E-05	4.985E-01		
mg++	cl-	-1.34539	4.514E-02	8.739E-02	5.166E-01	8.870E-02	5.090E-01
mg++	so4--	-4.38250	4.145E-05	1.651E-04	2.510E-01	2.070E-04	2.003E-01
mg++	f-	-4.31143	4.882E-05	9.262E-05	5.270E-01	1.009E-04	4.840E-01
mg++	hs-	-13.66170	3.454E-14	6.553E-14	5.270E-01		
mg++	hco3-	-2.33491	4.625E-03	8.486E-03	5.450E-01	8.489E-03	5.448E-01
mg++	oh-	-4.49137	3.226E-05	6.120E-05	5.270E-01	1.960E-03	1.646E-02
mg++	alo2-	-4.69069	2.038E-05	3.800E-05	5.365E-01		
al+++	cl-	-4.16572	1.638E-05	4.100E-05	3.995E-01	2.256E-02	7.261E-04
al+++	so4--	-10.49446	3.203E-11	2.224E-10	1.440E-01	6.887E-06	4.650E-06
al+++	f-	-8.12252	7.542E-09	1.846E-08	4.086E-01	1.099E-05	6.862E-04
al+++	hs-	-18.41657	3.832E-19	9.378E-19	4.086E-01		
al+++	hco3-	-5.89893	1.262E-06	2.974E-06	4.243E-01	1.610E-03	7.839E-04
al+++	oh-	-8.32494	4.732E-09	1.158E-08	4.086E-01	3.094E-04	1.529E-05
al+++	alo2-	-8.54918	2.824E-09	6.774E-09	4.169E-01		
h+	cl-	-4.48698	3.259E-05	4.526E-05	7.199E-01	4.781E+00	6.815E-06
h+	so4--	-7.55891	2.761E-08	5.555E-08	4.970E-01	3.177E-01	8.690E-08
h+	f-	-6.71151	1.943E-07	2.659E-07	7.308E-01	2.961E-02	6.563E-06

h+	hs-	-13.57421	2.666E-14	3.647E-14	7.308E-01		
h+	hco3-	-5.22911	5.900E-06	7.874E-06	7.494E-01	8.227E-01	7.172E-06
h+	alo2-	-6.99595	1.009E-07	1.363E-07	7.406E-01		
fe++	cl-	-2.50897	3.098E-03	6.453E-03	4.800E-01	8.022E-03	3.861E-01
fe++	so4--	-6.12787	7.449E-07	3.313E-06	2.249E-01	5.629E-06	1.323E-01
fe++	f-	-5.47501	3.350E-06	6.839E-06	4.898E-01	9.122E-06	3.672E-01
fe++	hs-	-14.62528	2.370E-15	4.839E-15	4.898E-01		
fe++	hco3-	-3.49849	3.173E-04	6.266E-04	5.064E-01	7.678E-04	4.133E-01
fe++	oh-	-5.65494	2.213E-06	4.519E-06	4.898E-01	1.772E-04	1.249E-02
fe++	alo2-	-5.85427	1.399E-06	2.806E-06	4.985E-01		
fe+++	cl-	-6.17241	6.723E-07	1.683E-06	3.995E-01		
fe+++	so4--	-12.71316	1.936E-13	1.344E-12	1.440E-01		
fe+++	f-	-9.50921	3.096E-10	7.576E-10	4.086E-01		
fe+++	hs-	-19.80326	1.573E-20	3.849E-20	4.086E-01		
fe+++	hco3-	-7.28561	5.181E-08	1.221E-07	4.243E-01		
fe+++	oh-	-9.71163	1.943E-10	4.754E-10	4.086E-01		
fe+++	alo2-	-9.93587	1.159E-10	2.781E-10	4.169E-01		

- (a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that
 1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
 2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.4609E+00	98.11
nacl	0.8869E-02	1.89
naso4-	0.3217E-05	0.00
naf	0.4579E-06	0.00
naoh	0.3209E-06	0.00
naco3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.9975E-02	100.00
kso4-	0.9938E-07	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.8955E-03	99.98
caso4	0.6741E-07	0.01
caf+	0.5047E-07	0.01

ca(oh)+	0.4701E-07	0.01
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.4111E-02	99.91
mg(oh)+	0.1816E-05	0.04
mgf+	0.1379E-05	0.03
mgso4	0.3946E-06	0.01
mgco3	0.0000E+00	0.00
mghco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3653E-05	98.58
al(oh)3	0.5266E-07	1.42
al(oh)2+	0.1236E-09	0.00
al(oh)++	0.7024E-13	0.00
alf2+	0.2345E-14	0.00
alf++	0.1766E-14	0.00
alf3	0.1888E-15	0.00
al+++	0.4317E-16	0.00
alf4-	0.6658E-18	0.00
also4+	0.8958E-20	0.00
alf5--	0.1507E-20	0.00
alf6---	0.5618E-25	0.00
al3(oh)4(5+)	0.4182E-28	0.00
al13(oh)34+5	0.1567E-35	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.5237E-03	89.65
h3sio4-	0.6045E-04	10.35
sif6--	0.7398E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.4029E+00	97.85
nacl	0.8869E-02	2.15

hcl	0.1482E-09	0.00
fecl++	0.5086E-21	0.00
fecl2+	0.5285E-23	0.00
fecl3	0.4767E-23	0.00
fecl4-	0.2624E-25	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.6632E-05	63.71
naso4-	0.3217E-05	30.90
mqso4	0.3946E-06	3.79
kso4-	0.9938E-07	0.95
caso4	0.6741E-07	0.65
feso4	0.1180E-09	0.00
hso4-	0.9431E-12	0.00
hs-	0.2616E-18	0.00
also4+	0.8958E-20	0.00
h2s(aq)	0.5131E-20	0.00
feso4+	0.2223E-24	0.00
s--	0.3571E-26	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1390E-04	88.04
mgf+	0.1379E-05	8.74
naf	0.4579E-06	2.90
caf+	0.5047E-07	0.32
fef+	0.1997E-09	0.00
hf	0.6655E-10	0.00
hf2-	0.2976E-14	0.00
alf2+	0.2345E-14	0.00
alf++	0.1766E-14	0.00
alf3	0.1888E-15	0.00
alf4-	0.6658E-18	0.00
h2f2	0.8334E-20	0.00
alf5--	0.1507E-20	0.00
fef++	0.5605E-21	0.00
fef2+	0.4205E-22	0.00
fef3	0.7769E-24	0.00
alf6---	0.5618E-25	0.00
sif6--	0.7398E-36	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe++	0.1655E-05	54.37

fe(oh)+	0.1389E-05	45.62
fef+	0.1997E-09	0.01
feso4	0.1180E-09	0.00
fe(oh)4-	0.7674E-10	0.00
fe(oh)3-	0.1099E-11	0.00
fe(oh)2+	0.2008E-12	0.00
fe(oh)++	0.1796E-15	0.00
fef++	0.5605E-21	0.00
fecl++	0.5086E-21	0.00
fe+++	0.1226E-21	0.00
fef2+	0.4205E-22	0.00
fecl2+	0.5285E-23	0.00
fecl3	0.4767E-23	0.00
fef3	0.7769E-24	0.00
feso4+	0.2223E-24	0.00
fecl4-	0.2624E-25	0.00
(feoh++)2	0.1963E-28	0.00

total		100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1219E-01	100.00

total		100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	-0.225	-0.3685E+01	-61.599	-5.189
o2(aq) /h2o	-0.225	-0.3685E+01	-61.599	-5.189
h2(aq) /h2o	-0.225	-0.3685E+01	-61.599	-5.189
hs- /so4--	-0.225	-0.3685E+01	-61.599	-5.189
fe+++ /fe++	-0.225	-0.3685E+01	-61.599	-5.189

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	3.191	4.493	ssatd	na-montmoril	3.120	4.393	ssatd
mg-chlorite	5.533	7.791	ssatd	pyrite	-16.455	-23.171	ssatd
magnetite	12.182	17.154	ssatd	gypsum	-4.680	-6.590	ssatd
quartz	0.562	0.792	ssatd	low albite	4.231	5.958	ssatd
anorthite	-3.324	-4.681	ssatd	muscovite	9.708	13.671	ssatd
illite	4.697	6.614	ssatd	amorphous si	-0.654	-0.922	ssatd
paragonite	9.625	13.553	ssatd	albite	3.027	4.262	ssatd

laumontite 3.618 5.094 ssatd

0 approx. saturated pure minerals
0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

11 supersaturated pure minerals
0 supersatd. end-members of specified solid solutions
0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.251975E-61	-61.59864
s2(g)	0.210417E-44	-44.67692
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.636022E-09	-9.19653
h2s(g)	0.669314E-19	-19.17437
steam	0.535278E-01	-1.27142

----- end of output -----
----- no pickup file written -----
----- reading the input file -----
----- end of input file -----

start time = 12:25:39
end time = 12:25:46


```

eeee  qqq  33333  n  n  rrrr
e      q  q      3  nn n  r  r
eeee  q  q  q    33  n n n  rrrr
e      q  q  q    3  n  nn  r  r
eeee  qqq  33333  n  n  r  r

```

eg3nr.3245R86
supported by eqlib.3245R106

input file name= hbi01 created= 06/01/91 creator= y.fujiwara
koetoi 04/03/90 -800m sample outside of casing

data file data0.3230u03
1 atm.-steam saturation curve data
last revised 30 apr 1986 by j.a. apps

the activity coefficients of aqueous solute species
and the activity of water are calculated according to
b-dot

temperature= 28.00 degrees celsius
pressure= 1.0134 bars

solution density = 1.00000 g/ml

total dissolved salts = 0.00 mg/kg solution
total dissolved salts = 0.00 mg/l

tolbt = 0.10000E-09 (convergence tolerance on residual functions)
toldl = 0.10000E-09 (convergence tolerance on correction terms)
tolsat = 0.50000E+00 (phase saturation tolerance, does not affect
convergence)

----- input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase	basis species
na+	0.20000E+03	2	tot conc, mg/l		
k+	0.19000E+02	2	tot conc, mg/l		
mg++	0.30800E+01	2	tot conc, mg/l		
ca++	0.36500E+01	2	tot conc, mg/l		
fe++	0.68000E+00	2	tot conc, mg/l		
al+++	0.10000E+00	2	tot conc, mg/l		
hco3-	0.90900E+03	2	tot conc, mg/l		

----- note- co3-- is not in the model -----

```

sio2(aq)  0.65800E+02  2  tot conc, mg/l
so4--    0.10000E+01  2  tot conc, mg/l
f-       0.30000E+00  2  tot conc, mg/l
cl-      0.27000E+02  2  tot conc, mg/l
h+       -0.83300E+01  16  log activity

```

the ion that defines equiv. stoich. ionic strength is na+

----- inactive aqueous species -----

```

clo4-    al13(oh)28(3+)  al(oh)3*  al2(oh)5**
naalo2   kcl          kco3-    fecl+
fecl2    fecl3-       fecl4--  fe(so4)2-
koh      mgcl+

```

----- modified input constraints -----

species	csp	jflag	type of input	uphase
na+	0.86994E-02	0	tot conc, molal	
k+	0.48596E-03	0	tot conc, molal	
ca++	0.91068E-04	0	tot conc, molal	
mg++	0.12672E-03	0	tot conc, molal	
al+++	0.37062E-05	0	tot conc, molal	
sio2(aq)	0.10951E-02	0	tot conc, molal	
h+	-0.83300E+01	16	log activity	
cl-	0.76157E-03	0	tot conc, molal	
so4--	0.10610E-04	0	tot conc, molal	
f-	0.15791E-04	0	tot conc, molal	
fe++	0.12176E-04	0	tot conc, molal	
o2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
h2(aq)	0.00000E+00	27	dependent species	
hs-	0.00000E+00	30	eliminated species	
fe+++	0.00000E+00	30	eliminated species	
hco3-	0.14897E-01	0	tot conc, molal	
clo4-	0.00000E+00	30	eliminated species	
oh-	0.00000E+00	30	eliminated species	
alo2-	0.00000E+00	30	eliminated species	

```

iter = 0  delmax = 0.000E+00  delfnc = 0.000E+00
          del(      ) = 0.000E+00  beta(conc  al+++ ) = 0.582E-01
iter = 1  delmax = 0.239E-01  delfnc = 0.000E+00
          del(conc  al+++ ) = -0.239E-01  beta(conc  al+++ ) = 0.157E-02
iter = 2  delmax = 0.682E-03  delfnc = 0.971E+00
          del(conc  al+++ ) = -0.682E-03  beta(conc  al+++ ) = 0.123E-05
iter = 3  delmax = 0.536E-06  delfnc = 0.999E+00
          del(conc  al+++ ) = -0.536E-06  beta(conc  al+++ ) = 0.758E-12
iter = 4  delmax = 0.329E-12  delfnc = 0.100E+01
          del(conc  al+++ ) = -0.329E-12  beta(conc  al+++ ) = -0.903E-14

```

newton-raphson iteration converged in 4 steps

----- Summary of the Aqueous Phase -----

----- Elemental composition of the aqueous phase -----

element	mg/l	mg/kg	moles/kg
o	888869.4786	888869.4786	0.5555642578E+02
na	199.9980	199.9980	0.8699434537E-02
k	19.0001	19.0001	0.4859583610E-03
ca	3.6500	3.6500	0.9106786427E-04
mg	3.0800	3.0800	0.1267228965E-03
al	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
si	30.7574	30.7574	0.1095133480E-02
h	111910.9300	111910.9300	0.1110337633E+03
c	178.9337	178.9337	0.1489748759E-01
cl	27.0000	27.0000	0.7615716583E-03
s	0.3338	0.3338	0.1041037706E-04
f	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe	0.6800	0.6800	0.1217612405E-04

----- elemental composition as strict basis species -----

species	mg/l	mg/kg	moles/kg
h2o	1000849.0104	1000849.0104	0.5555642578E+02
na+	200.0000	200.0000	0.8699434537E-02
k+	19.0000	19.0000	0.4859583610E-03
ca++	3.6500	3.6500	0.9106786427E-04
mg++	3.0800	3.0800	0.1267228965E-03
al+++	0.1000	0.1000	0.3706174487E-05
sio2(a	65.8000	65.8000	0.1095133480E-02
h+	111922.0334	111922.0334	0.1110337633E+03
co3--	893.9833	893.9833	0.1489748759E-01
cl-	27.0000	27.0000	0.7615716583E-03
so4--	1.0000	1.0000	0.1041037706E-04
f-	0.3000	0.3000	0.1579113591E-04
fe++	0.6800	0.6800	0.1217612405E-04

----- equivalent composition of the aqueous phase (cte balances) -----

original basis		existing basis	
species	moles/kg h2o	species	moles/kg h2o
h2o	0.5551173332E+02	h2o	0.5551173332E+02
na+	0.8699434537E-02	na+	0.8699434537E-02
k+	0.4859583610E-03	k+	0.4859583610E-03
ca++	0.9106786427E-04	ca++	0.9106786427E-04
mg++	0.1267228965E-03	mg++	0.1267228965E-03
al+++	0.3706174487E-05	al+++	0.3706174487E-05
sio2(aq)	0.1095133480E-02	sio2(aq)	0.1095133480E-02

h+	0.1110188658E+03	h+	0.1110188658E+03
cl-	0.7615716583E-03	cl-	0.7615716583E-03
so4--	0.1041037706E-04	so4--	0.1041037706E-04
f-	0.1579113591E-04	f-	0.1579113591E-04
fe++	0.1217612405E-04	fe++	0.1217612405E-04
hco3-	0.1489748759E-01	hco3-	0.1489748759E-01

ph =	8.33000
activity of water =	0.99970
log activity of water =	-0.00013
osmotic coefficient =	0.00015
stoichiometric sum of molalities =	111.0450652603552
titration alkalinity =	0.0150345106933 eq/kg h2o
ionic strength =	0.0129290484041
equiv. stoich. ionic strength (na+) =	0.0086994345368

----- electrical balance totals -----

	equiv/kg
sigma(mz) cations =	0.9619626141E-02
sigma(mz) anions =	-0.1578369618E-01
total charge =	0.2540332232E-01
mean charge =	0.1270166116E-01
charge imbalance =	-0.6164070042E-02

total charge = sigma(mz) cations + abs (sigma(mz) anions)
 mean charge = 1/2 total charge

the electrical imbalance is

-24.26 per cent of the total charge
 -48.53 per cent of the mean charge
 -64.08 per cent of sigma(mz) cations
 -39.05 per cent of abs (sigma(mz) anions)

----- activity ratios of ions -----

log (act(na+) / act(h+)xx 1) =	6.2194
log (act(k+) / act(h+)xx 1) =	4.9648
log (act(ca++) / act(h+)xx 2) =	12.4293
log (act(mg++) / act(h+)xx 2) =	12.5834
log (act(al+++) / act(h+)xx 3) =	8.5962
log (act(sio2(aq))) =	-2.9895
log (act(cl-) x act(h+)xx 1) =	-11.5004
log (act(so4--) x act(h+)xx 2) =	-21.8654
log (act(f-) x act(h+)xx 1) =	-13.1857
log (act(fe++) / act(h+)xx 2) =	7.5558
log (act(o2(aq))) =	-30.5512
log (act(h2(aq))) =	-30.3543
log (act(hs-) x act(h+)xx 1) =	-97.5926
log (act(fco++) / act(h+)xx 3) =	8.2340
log (act(hco3-) x act(h+)xx 1) =	-10.2062
log (act(oh-) x act(h+)xx 1) =	-13.8900
log (act(alo2-) x act(h+)xx 1) =	-13.8255

----- distribution of aqueous species -----

species	molal conc	log conc	log g	activity	log act
hco3-	0.1490E-01	-1.8269	-0.0493	0.1330E-01	-1.8762
na+	0.8699E-02	-2.0606	-0.0501	0.7751E-02	-2.1106
sio2(aq)	0.1024E-02	-2.9895	0.0000	0.1024E-02	-2.9895
cl-	0.7610E-03	-3.1186	-0.0518	0.6754E-03	-3.1704
k+	0.4859E-03	-3.3134	-0.0518	0.4313E-03	-3.3652
mg++	0.1265E-03	-3.8979	-0.1786	0.8383E-04	-4.0766
ca++	0.9097E-04	-4.0411	-0.1896	0.5879E-04	-4.2307
h3sio4-	0.7065E-04	-4.1509	-0.0501	0.6296E-04	-4.2009
f-	0.1568E-04	-4.8048	-0.0509	0.1394E-04	-4.8557
fe(oh)4-	0.1208E-04	-4.9178	-0.0501	0.1077E-04	-4.9679
so4--	0.9921E-05	-5.0034	-0.2019	0.6232E-05	-5.2054
alo2-	0.3586E-05	-5.4454	-0.0501	0.3195E-05	-5.4955
oh-	0.3097E-05	-5.5091	-0.0509	0.2754E-05	-5.5600
nacl	0.6135E-06	-6.2122	0.0000	0.6135E-06	-6.2122
naso4-	0.2895E-06	-6.5383	-0.0496	0.2583E-06	-6.5879
al(oh)3	0.1199E-06	-6.9214	0.0000	0.1199E-06	-6.9214
mgso4	0.1002E-06	-6.9991	0.0000	0.1002E-06	-6.9991
fe(oh)2+	0.9072E-07	-7.0423	-0.0501	0.8084E-07	-7.0924
mgf+	0.8719E-07	-7.0595	-0.0501	0.7769E-07	-7.1096
caso4	0.7718E-07	-7.1125	0.0000	0.7718E-07	-7.1125
mg(oh)+	0.4391E-07	-7.3574	-0.0501	0.3913E-07	-7.4075
kso4-	0.2240E-07	-7.6498	-0.0509	0.1992E-07	-7.7008
na+	0.1518E-07	-7.8188	0.0000	0.1518E-07	-7.8188
caf+	0.1267E-07	-7.8972	-0.0501	0.1129E-07	-7.9473
h+	0.5164E-08	-8.2870	-0.0430	0.4677E-08	-8.3300
ca(oh)+	0.4678E-08	-8.3300	-0.0501	0.4168E-08	-8.3800
naoh	0.4289E-08	-8.3677	0.0000	0.4289E-08	-8.3677
fe++	0.1217E-08	-8.9146	-0.1896	0.7867E-09	-9.1042
fe(oh)+	0.1166E-08	-8.9332	-0.0501	0.1039E-08	-8.9833
al(oh)2+	0.3040E-09	-9.5172	-0.0501	0.2708E-09	-9.5673
hf	0.1016E-09	-9.9932	0.0000	0.1016E-09	-9.9932
fe(oh)++	0.4770E-10	-10.3215	-0.2019	0.2996E-10	-10.5235
hso4-	0.3526E-11	-11.4527	-0.0501	0.3142E-11	-11.5027
feso4	0.9181E-12	-12.0371	0.0000	0.9181E-12	-12.0371
hcl	0.4441E-12	-12.3525	0.0000	0.4441E-12	-12.3525
fef+	0.3651E-12	-12.4376	-0.0501	0.3253E-12	-12.4877
al(oh)++	0.1517E-12	-12.8190	-0.1896	0.9803E-13	-13.0086
alf2+	0.3586E-13	-13.4454	-0.0501	0.3196E-13	-13.4954
alf++	0.8836E-14	-14.0537	-0.1956	0.5632E-14	-14.2493
alf3	0.5617E-14	-14.2505	0.0000	0.5617E-14	-14.2505
hf2-	0.5091E-14	-14.2932	-0.0501	0.4536E-14	-14.3433
fef++	0.4041E-15	-15.3935	-0.1956	0.2576E-15	-15.5891
fe(oh)3-	0.2112E-15	-15.6752	-0.0501	0.1882E-15	-15.7253
fef2+	0.1763E-15	-15.7538	-0.0501	0.1571E-15	-15.8039
alf+++	0.9943E-16	-16.0025	-0.3913	0.4038E-16	-16.3938
fef+++	0.4318E-16	-16.3647	-0.3913	0.1754E-16	-16.7560
alf4-	0.2232E-16	-16.6514	-0.0501	0.1989E-16	-16.7015
fef3	0.3371E-17	-17.4722	0.0000	0.3371E-17	-17.4722
feso4+	0.1086E-17	-17.9642	-0.0501	0.9676E-18	-18.0143
fecl1+	0.4942E-18	-18.3061	-0.2019	0.3104E-18	-18.5080
also4+	0.3072E-18	-18.5126	-0.0501	0.2738E-18	-18.5626
(feoh++)2	0.1646E-18	-18.7836	-0.8094	0.2552E-19	-19.5931
alf5--	0.3192E-19	-19.4959	-0.2019	0.2005E-19	-19.6978
h2f2	0.2486E-19	-19.6045	0.0000	0.2486E-19	-19.6045
fecl2+	0.4039E-22	-22.3938	-0.0501	0.3599E-22	-22.4439
alf6--	0.4212E-24	-24.3755	-0.4551	0.1477E-24	-24.8306

fecl3	0.8652E-25	-25.0629	0.0000	0.8652E-25	-25.0629
al3(oh)4(5+)	0.1447E-27	-27.8395	-1.1525	0.1018E-28	-28.9921
fecl4-	0.8531E-30	-30.0690	-0.0501	0.7602E-30	-30.1191
h2(aq)	0.4409E-30	-30.3557	0.0014	0.4423E-30	-30.3543
o2(aq)	0.2801E-30	-30.5526	0.0014	0.2811E-30	-30.5512
sif6--	0.8607E-35	-35.0652	-0.2019	0.5406E-35	-35.2671
al13(oh)34+5	0.6325E-36	-36.1989	-1.4543	0.2222E-37	-37.6532
hs-	0.6142E-89	-89.2117	-0.0509	0.5462E-89	-89.2626
h2s(aq)	0.2226E-90	-90.6526	0.0000	0.2226E-90	-90.6526
s--	0.1733E-97	-97.7611	-0.1956	0.1105E-97	-97.9567

----- mean ionic properties -----

species		log a(+/-)		true (a)		stoichiometric (b)	
species	species	log a(+/-)	a(+/-)	m(+/-)	g(+/-)	m(+/-)	g(+/-)
na+	cl-	-2.64053	2.288E-03	2.573E-03	8.893E-01	2.574E-03	8.889E-01
na+	so4--	-3.14222	7.207E-04	9.088E-04	7.930E-01	9.236E-04	7.804E-01
na+	f-	-3.48316	3.287E-04	3.693E-04	8.902E-01	3.706E-04	8.869E-01
na+	hs-	-45.68663	2.058E-46	2.311E-46	8.902E-01	8.902E-01	8.902E-01
na+	hco3-	-1.99339	1.015E-02	1.138E-02	8.919E-01	1.138E-02	8.919E-01
na+	oh-	-3.83530	1.461E-04	1.641E-04	8.902E-01	4.603E-03	3.174E-02
na+	alo2-	-3.80305	1.574E-04	1.766E-04	8.911E-01	8.911E-01	8.911E-01
k+	cl-	-3.26781	5.397E-04	6.081E-04	8.876E-01	6.084E-04	8.872E-01
k+	so4--	-3.97860	1.051E-04	1.328E-04	7.910E-01	1.350E-04	7.784E-01
k+	f-	-4.11044	7.755E-05	8.728E-05	8.885E-01	8.760E-05	8.852E-01
k+	hs-	-46.31391	4.854E-47	5.463E-47	8.885E-01	8.885E-01	8.885E-01
k+	hco3-	-2.62068	2.395E-03	2.691E-03	8.902E-01	2.691E-03	8.902E-01
k+	oh-	-4.46258	3.447E-05	3.879E-05	8.885E-01	1.088E-03	3.168E-02
k+	alo2-	-4.43033	3.713E-05	4.174E-05	8.893E-01	8.893E-01	8.893E-01
ca++	cl-	-3.52383	2.993E-04	3.749E-04	7.985E-01	3.752E-04	7.978E-01
ca++	so4--	-4.71803	1.914E-05	3.004E-05	6.371E-01	3.079E-05	6.217E-01
ca++	f-	-4.64734	2.252E-05	2.817E-05	7.996E-01	2.832E-05	7.954E-01
ca++	hs-	-60.91864	1.206E-61	1.508E-61	7.996E-01	7.996E-01	7.996E-01
ca++	hco3-	-2.66099	2.183E-03	2.725E-03	8.016E-01	2.724E-03	8.013E-01
ca++	oh-	-5.11687	7.641E-06	9.556E-06	7.996E-01	8.144E-04	9.382E-03
ca++	alo2-	-5.07387	8.436E-06	1.054E-05	8.006E-01	8.006E-01	8.006E-01
mg++	cl-	-3.47247	3.369E-04	4.184E-04	8.053E-01	4.189E-04	8.043E-01
mg++	so4--	-4.64098	2.286E-05	3.542E-05	6.452E-01	3.632E-05	6.293E-01
mg++	f-	-4.59598	2.535E-05	3.144E-05	8.063E-01	3.162E-05	8.019E-01
mg++	hs-	-60.86728	1.357E-61	1.683E-61	8.063E-01	8.063E-01	8.063E-01
mg++	hco3-	-2.60963	2.457E-03	3.039E-03	8.084E-01	3.041E-03	8.079E-01
mg++	oh-	-5.06550	8.600E-06	1.067E-05	8.063E-01	9.092E-04	9.458E-03
mg++	alo2-	-5.02250	9.495E-06	1.176E-05	8.074E-01	8.074E-01	8.074E-01
alf+++	cl-	-6.47627	3.340E-07	4.575E-07	7.300E-01	2.011E-04	1.660E-03
alf+++	so4--	-9.68077	2.086E-10	3.953E-10	5.276E-01	6.887E-06	3.028E-05
alf+++	f-	-7.74022	1.819E-08	2.488E-08	7.311E-01	1.099E-05	1.655E-05
alf+++	hs-	-71.04543	9.007E-72	1.232E-71	7.311E-01	7.311E-01	7.311E-01
alf+++	hco3-	-5.05558	3.122E-06	4.258E-06	7.332E-01	1.871E-03	1.669E-03
alf+++	oh-	-8.26844	5.390E-09	7.372E-09	7.311E-01	4.810E-04	1.120E-05
alf+++	alo2-	-8.22006	6.025E-09	8.229E-09	7.322E-01	7.322E-01	7.322E-01
h+	cl-	-5.75021	1.777E-06	1.982E-06	8.966E-01	2.056E-01	8.645E-06
h+	so4--	-7.28846	5.147E-08	6.420E-08	8.017E-01	3.177E-01	1.620E-07
h+	f-	-6.59284	2.554E-07	2.845E-07	8.975E-01	2.961E-02	8.625E-06
h+	hs-	-48.79631	1.598E-49	1.781E-49	8.975E-01	8.975E-01	8.975E-01
h+	hco3-	-7.51308	7.887E-06	8.771E-06	8.992E-01	9.094E-01	8.673E-06
h+	alo2-	-6.91273	1.223E-07	1.361E-07	8.984E-01	8.984E-01	8.984E-01
fe++	cl-	-5.14835	7.106E-06	8.899E-06	7.985E-01	1.919E-04	3.704E-02

fe++	so4--	-7.15480	7.002E-08	1.099E-07	6.371E-01	1.126E-05	6.219E-03
fe++	f-	-6.27186	5.347E-07	6.688E-07	7.996E-01	1.448E-05	3.693E-02
fe++	hs-	-62.54316	2.863E-63	3.581E-63	7.996E-01		
fe++	hco3-	-4.28551	5.182E-05	6.464E-05	8.016E-01	1.393E-03	3.720E-02
fe++	oh-	-6.74138	1.814E-07	2.269E-07	7.996E-01	4.165E-04	4.356E-04
fe++	alo2-	-6.69838	2.003E-07	2.501E-07	8.006E-01		
fe+++	cl-	-6.56682	2.711E-07	3.714E-07	7.300E-01		
fe+++	so4--	-9.82565	1.494E-10	2.832E-10	5.276E-01		
fe+++	f-	-7.83077	1.476E-08	2.020E-08	7.311E-01		
fe+++	hs-	-71.13598	7.312E-72	1.000E-71	7.311E-01		
fe+++	hco3-	-5.59612	2.534E-06	3.457E-06	7.332E-01		
fe+++	oh-	-8.35898	4.375E-09	5.985E-09	7.311E-01		
fe+++	alo2-	-8.31061	4.891E-09	6.680E-09	7.322E-01		

- (a) true quantities consistent with the speciation model
 (b) stoichiometric quantities consistent with the cte mass balance lumpings, except that
 1. effective cte(h+) = cte(h+) - conc(h2o)
 2. effective cte(oh-) = cte(h2o) - conc(h2o)

----- aqueous species by contribution to mass balances -----

aqueous species accounting for na+

species	molal conc	per cent
na+	0.8699E-02	99.99
nacl	0.6135E-06	0.01
na2so4-	0.2895E-06	0.00
naf	0.1518E-07	0.00
naoh	0.4289E-08	0.00
na2co3-	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for k+

species	molal conc	per cent
k+	0.4859E-03	100.00
k2so4-	0.2240E-07	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for ca++

species	molal conc	per cent
ca++	0.9097E-04	99.90
caso4	0.7718E-07	0.08
caf+	0.1267E-07	0.01
ca(oh)+	0.4678E-08	0.01
caco3	0.0000E+00	0.00
cahco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

total 100.00

aqueous species accounting for mg++

species	molal conc	per cent
mg++	0.1265E-03	99.82
mgso4	0.1002E-06	0.08
mgf+	0.8719E-07	0.07
mg(oh)+	0.4391E-07	0.03
mgco3	0.0000E+00	0.00
mghco3+	0.0000E+00	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for al+++

species	molal conc	per cent
alo2-	0.3586E-05	96.76
al(oh)3	0.1199E-06	3.23
al(oh)2+	0.3040E-09	0.01
al(oh)++	0.1517E-12	0.00
alf2+	0.3586E-13	0.00
alf++	0.8836E-14	0.00
alf3	0.5617E-14	0.00
al+++	0.9943E-16	0.00
alf4-	0.2232E-16	0.00
also4+	0.3072E-18	0.00
alf5--	0.3192E-19	0.00
alf6---	0.4212E-24	0.00
al3(oh)4(5+)	0.1447E-27	0.00
al13(oh)34+5	0.6325E-36	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for sio2(aq)

species	molal conc	per cent
sio2(aq)	0.1024E-02	93.55
h3sio4-	0.7065E-04	6.45
sif6--	0.8607E-35	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for cl-

species	molal conc	per cent
cl-	0.7610E-03	99.92
nacl	0.6135E-06	0.08
hcl	0.4441E-12	0.00
fecl1+	0.4942E-18	0.00
fecl2+	0.4039E-22	0.00
fecl3	0.8652E-25	0.00

fecl4-	0.8531E-30	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for so4--

species	molal conc	per cent
so4--	0.9921E-05	95.30
nao4-	0.2895E-06	2.78
mgso4	0.1002E-06	0.96
caso4	0.7718E-07	0.74
kso4-	0.2240E-07	0.22
hso4-	0.3526E-11	0.00
feso4	0.9181E-12	0.00
feso4+	0.1086E-17	0.00
also4+	0.3072E-18	0.00
hs-	0.6142E-89	0.00
h2s(aq)	0.2226E-90	0.00
s--	0.1733E-97	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for f-

species	molal conc	per cent
f-	0.1568E-04	99.27
mgf+	0.8719E-07	0.55
naf	0.1518E-07	0.10
caf+	0.1267E-07	0.08
hf	0.1016E-09	0.00
fef+	0.3651E-12	0.00
alf2+	0.3586E-13	0.00
alf++	0.8836E-14	0.00
alf3	0.5617E-14	0.00
hf2-	0.5091E-14	0.00
fef++	0.4041E-15	0.00
fef2+	0.1763E-15	0.00
alf4-	0.2232E-16	0.00
fef3	0.3371E-17	0.00
alf5--	0.3192E-19	0.00
h2f2	0.2486E-19	0.00
alf6---	0.4212E-24	0.00
sif6--	0.8607E-35	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for fe++

species	molal conc	per cent
fe(oh)4-	0.1208E-04	99.23
fe(oh)2+	0.9072E-07	0.75
fe++	0.1217E-08	0.01
fe(oh)+	0.1166E-08	0.01
fe(oh)++	0.4770E-10	0.00

feso4	0.9181E-12	0.00
fef+	0.3651E-12	0.00
fef++	0.4041E-15	0.00
fe(oh)3-	0.2112E-15	0.00
fef2+	0.1763E-15	0.00
fe+++	0.4318E-16	0.00
fef3	0.3371E-17	0.00
feso4+	0.1086E-17	0.00
fecl++	0.4942E-18	0.00
(feoh++)2	0.1646E-18	0.00
fecl2+	0.4039E-22	0.00
fecl3	0.8652E-25	0.00
fecl4-	0.8531E-30	0.00
total		100.00

aqueous species accounting for hco3-

species	molal conc	per cent
hco3-	0.1490E-01	100.00
total		100.00

----- summary of aqueous redox reactions -----

couple	eh, volts	pe-	log fo2	ah, kcal
default	0.318	0.5322E+01	-27.632	7.334
o2(aq) /h2o	0.318	0.5322E+01	-27.632	7.334
h2(aq) /h2o	0.318	0.5322E+01	-27.632	7.334
hs- /so4--	0.318	0.5322E+01	-27.632	7.334
fe+++ /fe++	0.318	0.5322E+01	-27.632	7.334

----- summary of aqueous non-equilibrium non-redox reactions -----

couple	affinity, kcal
--------	----------------

----- summary of stoichiometric mineral saturation states -----

mineral	log q/k	aff, kcal	state	mineral	log q/k	aff, kcal	state
ca-montmoril	5.217	7.189	ssatd	na-montmoril	4.947	6.817	ssatd
mg-chlorite	-0.587	-0.809		pyrite	-142.002	-195.680	
magnetite	20.565	28.339	ssatd	gypsum	-4.586	-6.319	
quartz	0.959	1.321	ssatd	low albite	4.065	5.601	ssatd
anorthite	-2.905	-4.003		muscovite	10.994	15.150	ssatd
illite	5.923	8.163	ssatd	amorphous si	-0.304	-0.419	satd
paragonite	10.402	14.334	ssatd	albite	2.848	3.924	ssatd
laumontite	5.046	6.953	ssatd				

1 approx. saturated pure minerals

0 approx. saturated end-members of specified solid solutions
0 saturated end-members of hypothetical solid solutions

10 supersaturated pure minerals
0 supersatd. end-members of specified solid solutions
0 supersatd. hypothetical solid solution phases

----- summary of gases -----

gas	fugacity	log fugacity
co2(g)	0.000000E+00	-999.00000
o2(g)	0.233450E-27	-27.63181
s2(g)	0.789622-150	-150.10258
ch4(g)	0.000000E+00	-999.00000
h2(g)	0.580879E-27	-27.23591
h2s(g)	0.244995E-89	-89.61084
steam	0.373622E-01	-1.42757

end of output -----
no pickup file written -----
reading the input file -----
end of input file -----

start time = 12:26:38
end time = 12:26:44