AquaChem 简要使用说明

GAOZANDONG@HOTMAIL.COM

AquaChem 简要使用说明
（编译）

-- **AquaChem** 是用于水溶液地球化学数据的分析、作图和模拟的专业软件，加拿大滑铁卢水文地质有限公司（**Waterloo Hydrogeologic, Inc.**）与 **Lukas Calmbach** 博士合作开发，前者拥有版权。

--本说明为中国西北地下水开发培训班学员专用。是在阅读原版用户手册基础上的摘译，并进行重新编排，在省略很多内容的同时对某些操作步骤进行了更为详细地介绍，目的是让计算机操作不很熟练、英语阅读有一定困难的学员对该软件有一个初步了解并能够实际操作。

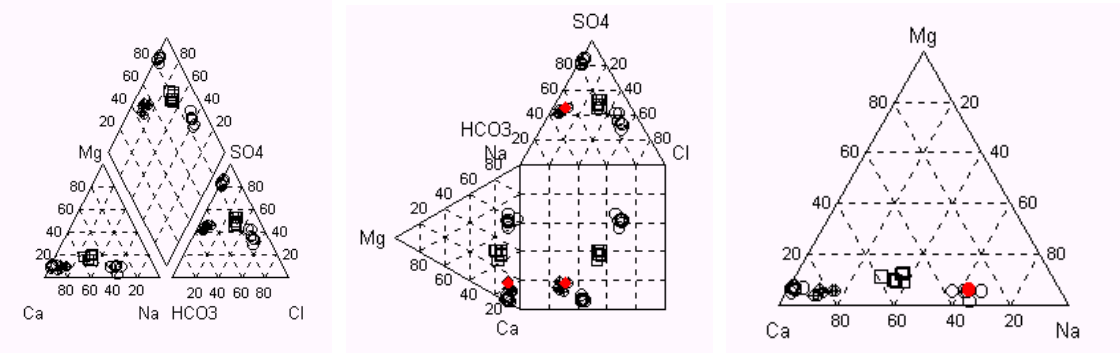
--如果想深入了解和应用 **AquaChem** 软件，请参阅用户手册。该手册以电子文本方式存储在安装目录下的 **Tutorials** 文件夹内，文件名为 **aqcdemo.pdf**。如果计算机内没有安装打开该文件的 **Acrobat** 阅读器，可从互联网上免费下载安装（从任一网站如新浪、搜狐等的搜索引擎上查找以“**acrobat**”为关键词的“软件”）。

1、 简介

AquaChem 是一个专门用于水溶液地球化学数据的图形和数值分析的软件包。它具有完全可以由用户自己定制的地球化学数据和参数数据库系统，并提供水文地球化学领域得到广泛应用的多种数据分析和作图工具。

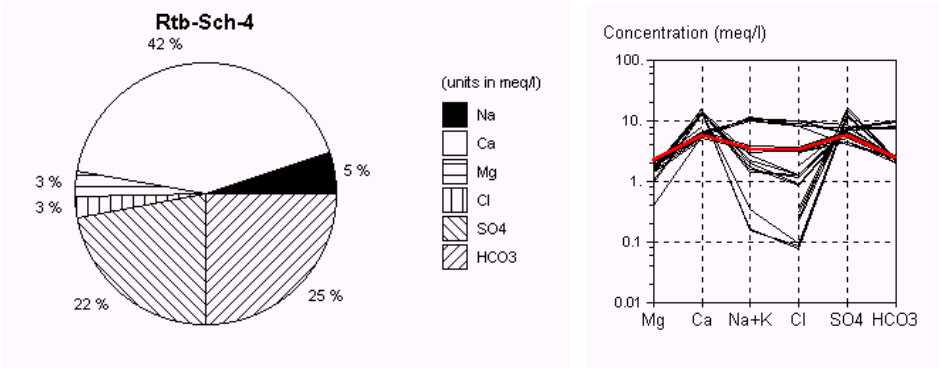
AquaChem 的数据分析功能包括单位转换、电荷平衡、样品混合以及样品相关性分析和地球化学参数计算等，辅之以广泛应用的水化学数据图形工具，可以更清楚地表示水的化学特征和质量。AquaChem 的图形工具包括：

- 三线图，包括 piper（图 1-1a）、Durov（图 1-1b）和简单的三离子三线图（图 1-1c）；



a，Piper 三线图　　b，Durov 三线图　　c，三线图

图 1-1　AquaChem 中的三线图



a，饼图　　b，Schoeller 指印图

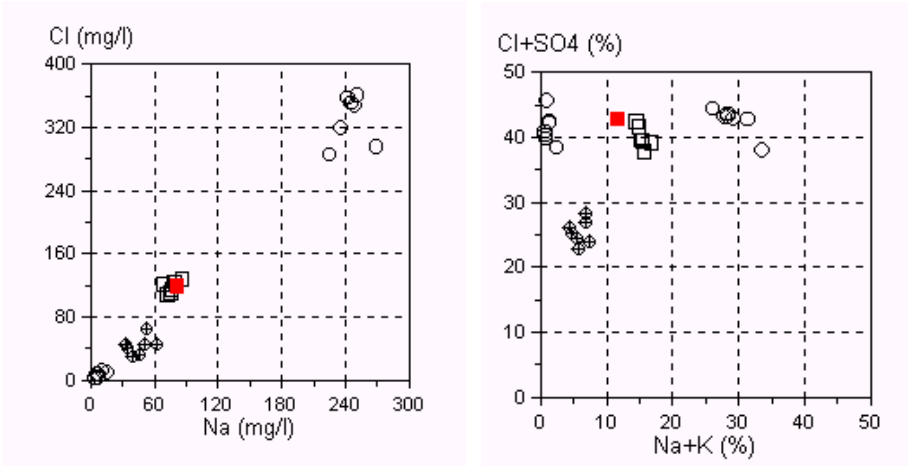
c，Stiff 折线图　　d，放射图

图 1-2　AquaChem 中的饼图、折线图和放射图

- 饼图（图 1-2a）、折线图（Schoeller 指印图，图 1-2b；Stiff 折线图，图 1-2c）和

放射图（图 1-2d）；

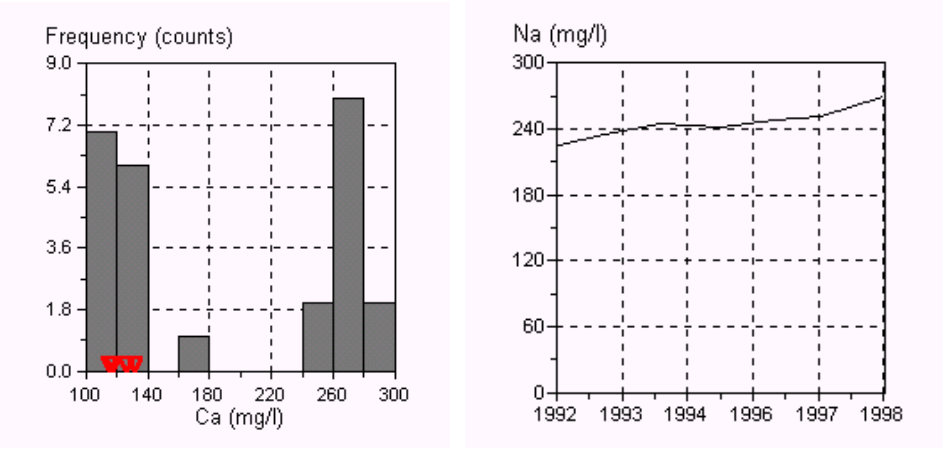
- 散点图，包括一般散点图（图 1-3a）和 Ludwig-Langelier 散点图（图 1-3b）；



a，一般散点图　　b，Ludwig-Langelier 散点图

图 1-3　AquaChem 中的散点图

- 频率柱状图（图 1-4a）和时间序列图（图 1-4b）；



a，频率柱状图　　b，时间序列图

图 1-4　AquaChem 中的频率柱状图和时间序列图

- 地温图（图 1-5）；
- 样品位置图（图 1-6）。

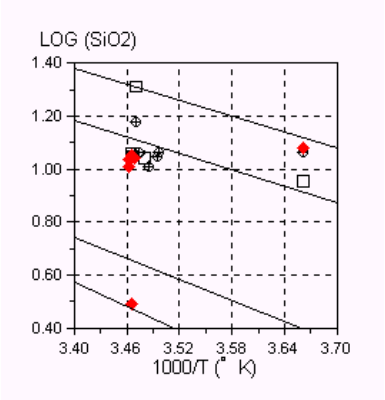


图 1-5　AquaChem 中的地温图

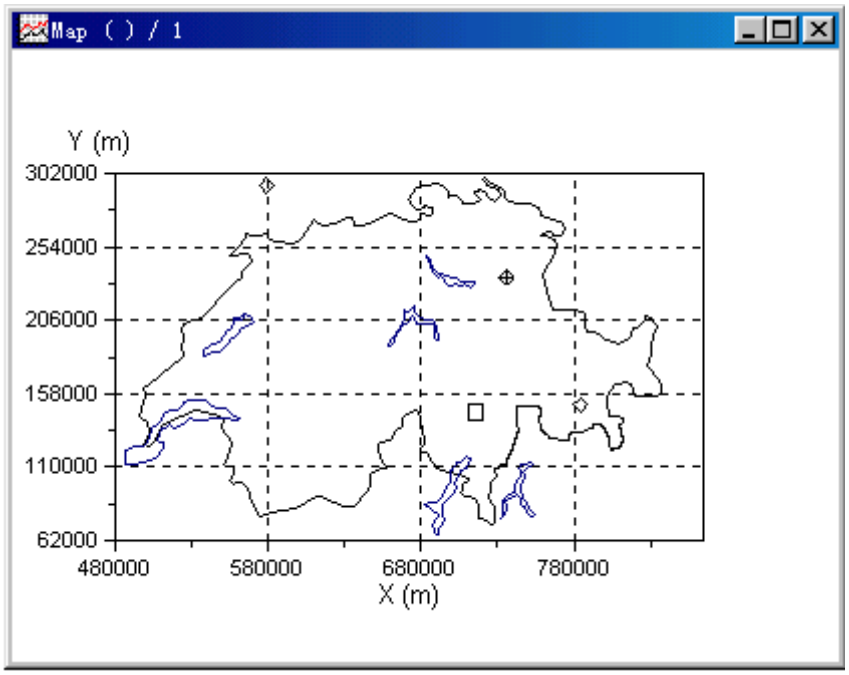


图 1-6　AquaChem 表示的样品位置图

上述水化学数据的各种图示方法均从某一方面提供了对地下水与含水层介质之间复杂作用的解释。

另外，AquaChem 还具有内置了目前特别流行的地球化学模拟软件 PHREEQC 及其窗口界面，用以计算溶液中各种化学组分的平衡浓度（或活度）、化学平衡状态下固相的饱和指数以及进行地球化学过程模拟等。

2、硬件要求及软件安装

2.1 硬件要求

- Windows 95/98 或 Windows NT；
- 奔腾 PC；
- 最少 16M 内存；
- 20M 以上的硬盘空间；
- 鼠标；
- 最低显示器分辨率：800×600，推荐使用 1024×768；
- 计算机字体库中应安装 MS Sans Serif、Arial 和 New Courier 字体。

2.2 软件安装

AquaChem 必须安装到计算机硬盘中才能运行。缺省或默认安装目录为 C:\programs\WHI\AquaChem，也可以自行定制安装目录。

由于内置的 PHREEQC 执行文件时 DOS 应用程序，因而 AquaChem 的目录路径须符合 DOS 操作系统要求，即目录名不能包含空格、句点等，目录名不超过 8 个字母或数字。

从 CD-ROM 安装的步骤：

1） 关闭所有正在应用的程序；

2） 将 CD 插入 CD-ROM 驱动器，安装程序将自动运行；

3） 选择 **AquaChem 3.7 Installation**™（用鼠标左键单击该按钮），出现用户和软件序列号要求对话窗口，输入所需信息，点击 **NEXT** 按钮；

4） 安装程序开始诊断计算机软硬件，以确保能够安装该程序，诊断完成后，安装程序将自动拷贝所需初始化文件至计算机。如果正在执行某些应用程序，安装程序将提醒你关闭他们。

5） 待出现安装目录对话窗口后，从键盘输入安装目录，或使用默认安装目录 **C:\programs\WHI\AquaChem**，然后点击 **NEXT** 按钮，安装程序将拷贝 **AquaChem** 程序文件至计算机；

6） 根据安装过程中的对话框提示进行选择，选择完成后，点击 **NEXT** 按钮，直至安装完毕，点击 **FINISH** 或 **OK** 按钮。

如果安装程序不能自动运行，在资源管理器选择 CD 中的 INSTALL.EXE，双击该文件，按照步骤 3）-6）进行安装。

安装完毕，自动建立桌面快捷方式图标（图 2-1），双击该图标，既可运行 AquaChem。

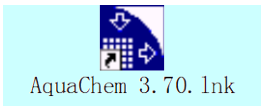


图 2-1　AquaChem 的桌面快捷方式图标

3、 AquaChem 的启动及界面设置

3.1 AquaChem 的启动

有两种方式：

1） 双击 AquaChem 的桌面快捷方式图标（图 2-1）；

2） 从开始菜单启动（图 3-1）。

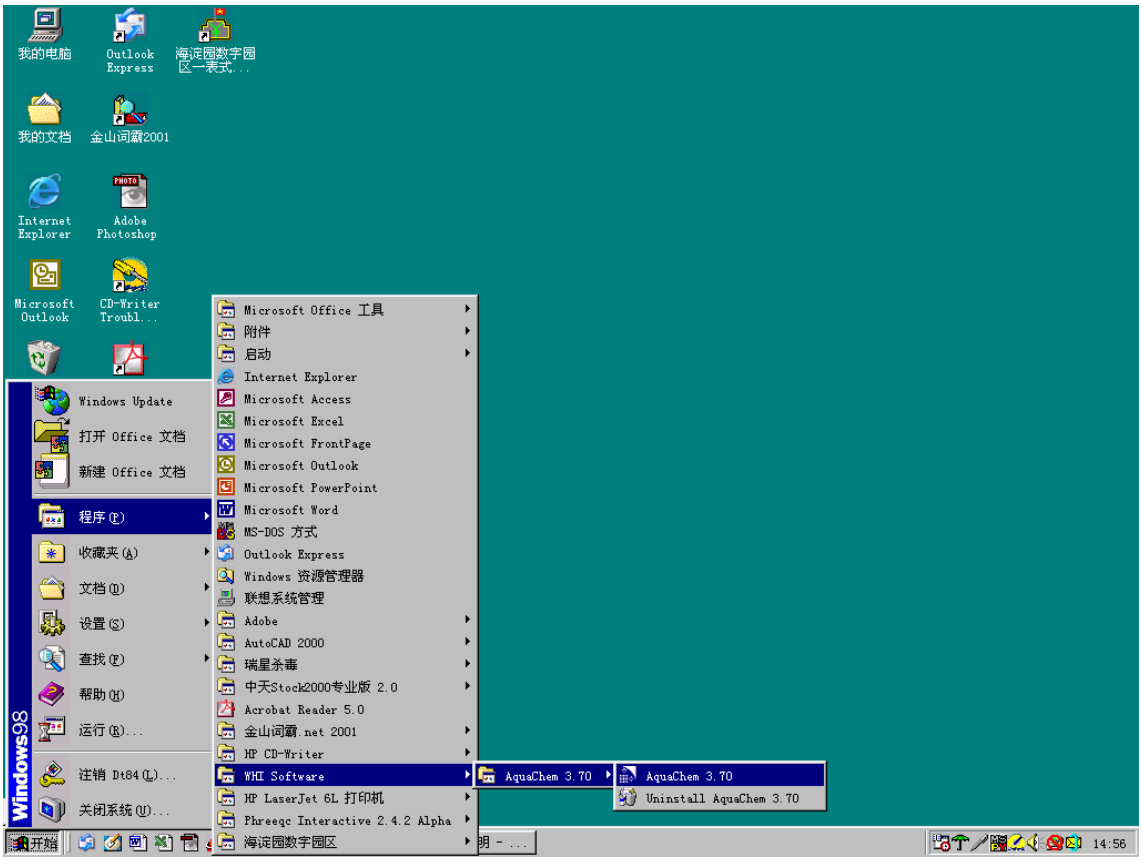


图 3-1　从开始菜单启动 AquaChem 3.7

AquaChem 启动后，首先出现“打开数据库”（**Open Database**）对话窗口（图 3-2），可进行三种选择：

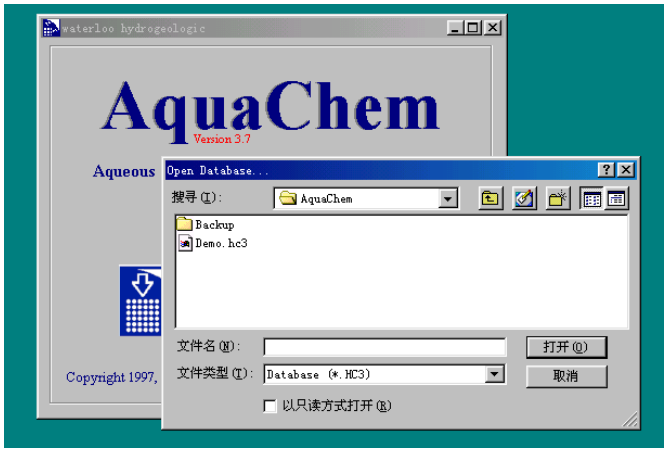


图 3-2　AquaChem 启动时的“打开数据库”（open database）对话框

1） 如果已建立数据库，则可以选择相应目录下的数据库文件（以 **hc3** 为后缀的文件），点击“打开”（open）按钮；

2） 如果刚刚开始使用 AquaChem，可选择安装目录下的演示文件 **demo.hc3**，点击“打开”（open）按钮；

3） 如果想建立新的数据库，直接点击“取消”（concel）按钮。

注意：AquaChem 3.7 兼容以前的版本，但为避免千年问题，该版本中的日期格式仅用数字表示，且年份表示为 4 位（如 yyyy-mm-dd 或 dd-mm-yyyy）。因此，AquaChem 3.7 不能识别已建立的数据库中的无效日期格式或文本形式的日期（如 Jan.13，1997）。

3.2 AquaChem 的界面设置

AquaChem 包括 5 种类型的窗口界面（图 3-3），每一类型窗口具有各自的菜单选项。

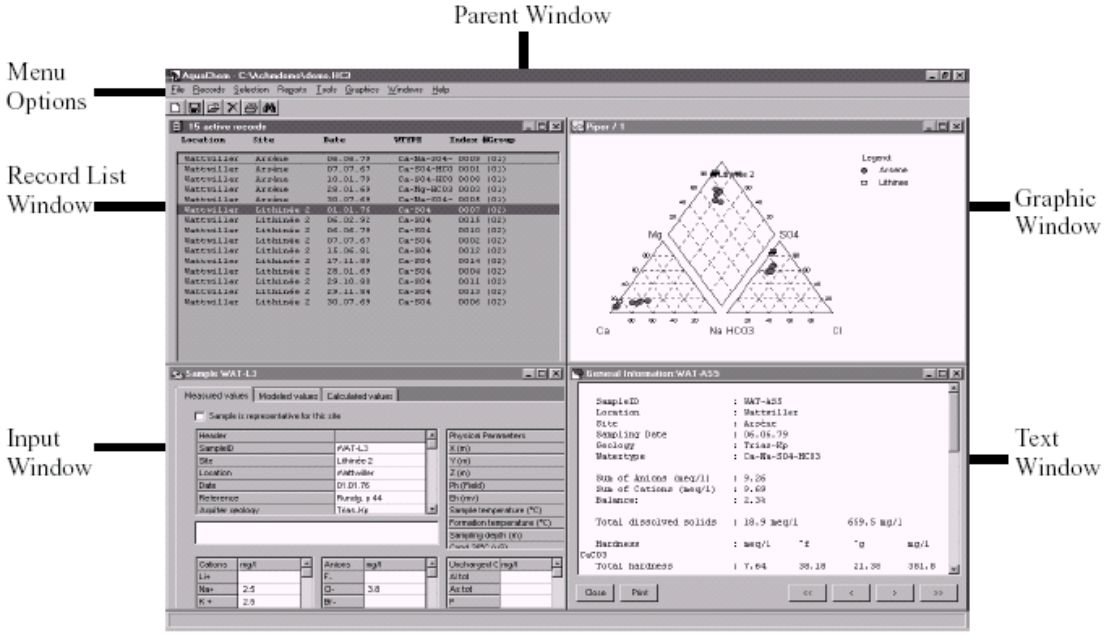


图3-3　AquaChem的界面窗口

Parent Window—主窗口
Record List Window—样品记录列表窗口
Graphic Window—图形窗口
Input Window—输入窗口
Text Window—文本窗口
Menu Options—活动窗口菜单选项

AquaChem 可同时打开多种类型的窗口，也可以同时打开同一类型的多个窗口（如多个图形窗口）。

每一窗口的**菜单选项**均设置在主窗口的顶部，但只有该窗口被激活时（用鼠标单击某一窗口内的任意位置即可激活该窗口），其菜单选项才出现。

样品记录列表窗口（图 3-4）的菜单被看作是主菜单，该窗口内包含打开数据库中的所有活动记录的简要信息。只有关闭项目数据库，才能关闭**样品记录列表窗口**，否则该窗口

将一直保留在屏幕上。

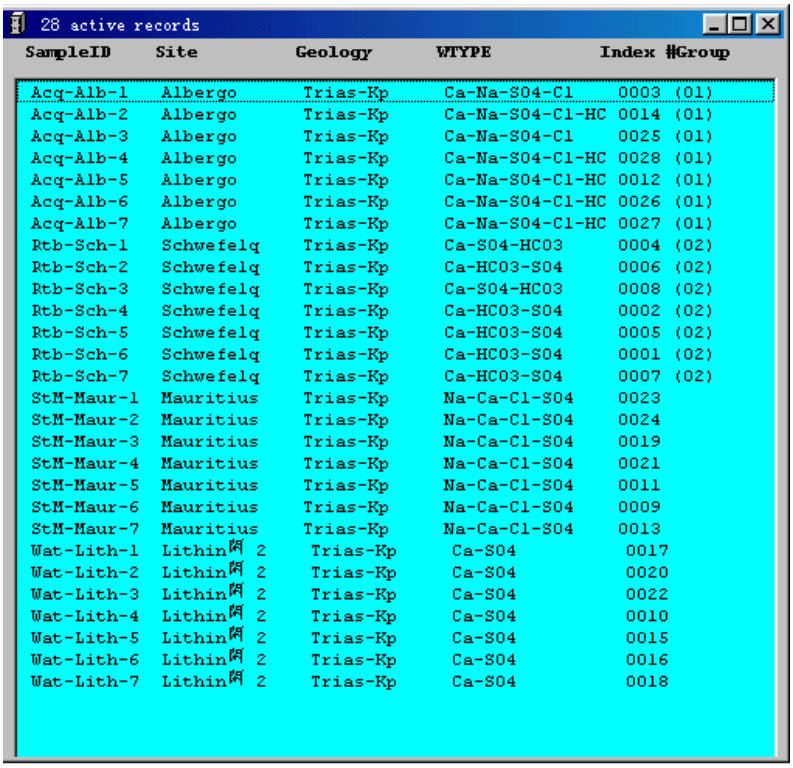


图 3-4 样品记录列表窗口

4、窗口及主要设置简介

本节主要对各类窗口的特点及常用设置进行简要介绍。

4.1 样品记录列表窗口（Record List）

该窗口是 AquaChem 的最基本图形界面，总是处于打开状态，只有关闭项目数据库，或退出该应用程序时才能关闭**样品记录列表窗口**。该窗口的菜单（图 4-1）被看作是主菜单。

样品记录列表窗口内每一列的表头（图 3-4 中每一列的顶部标识）是标识样品特征的参数，他们可以是项目数据库的任意参数，可以自由选取，选取方法为：

1) **File\Preferences** （图 4-1）；

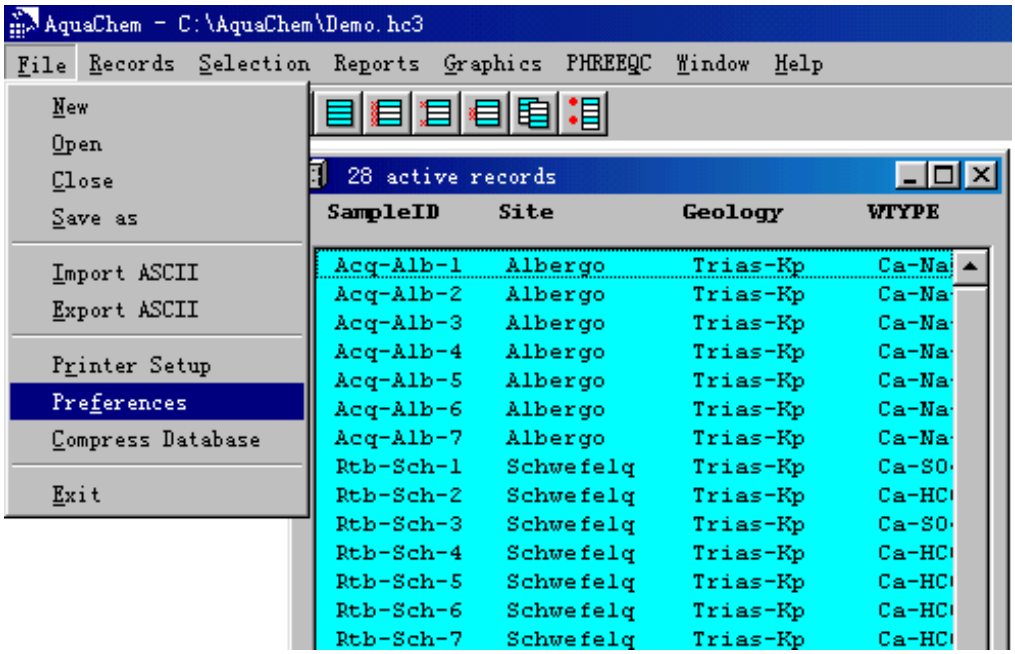


图 4-1 样品记录列表表头设置步骤 1）

2) 弹出设置对话框（图 4-2），点 击 **Startup Defaults** 选项按钮（缺省）；

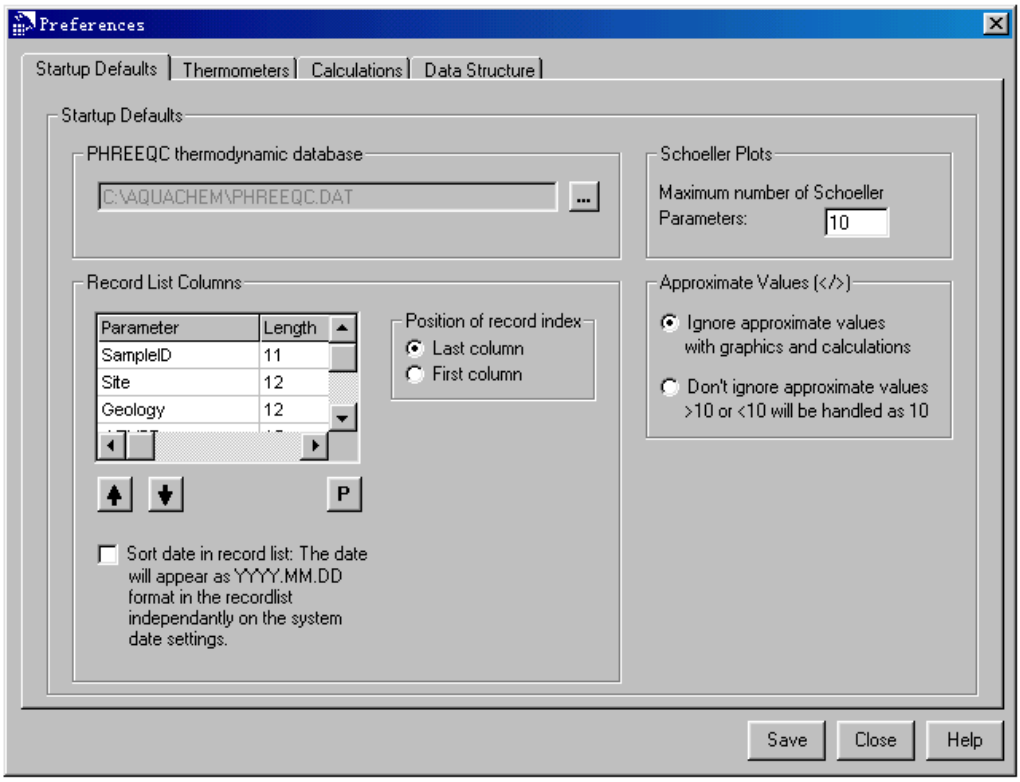


图 4-2　样品记录列表表头设置步骤 2）

3) 如想增加列参数，双击 **Record List Colums** 选取框内 **Parameter** 下方的空白单元格，出现可选参数的下拉列表（图 4-3）按钮，在下拉列表内选取想要增加的参数，然后点击 **Length** 列下对应单元格，输入（定义）字符段长度，按回车键加以确认。最后，点击右下方的 **Save** 按钮，保存该方案。

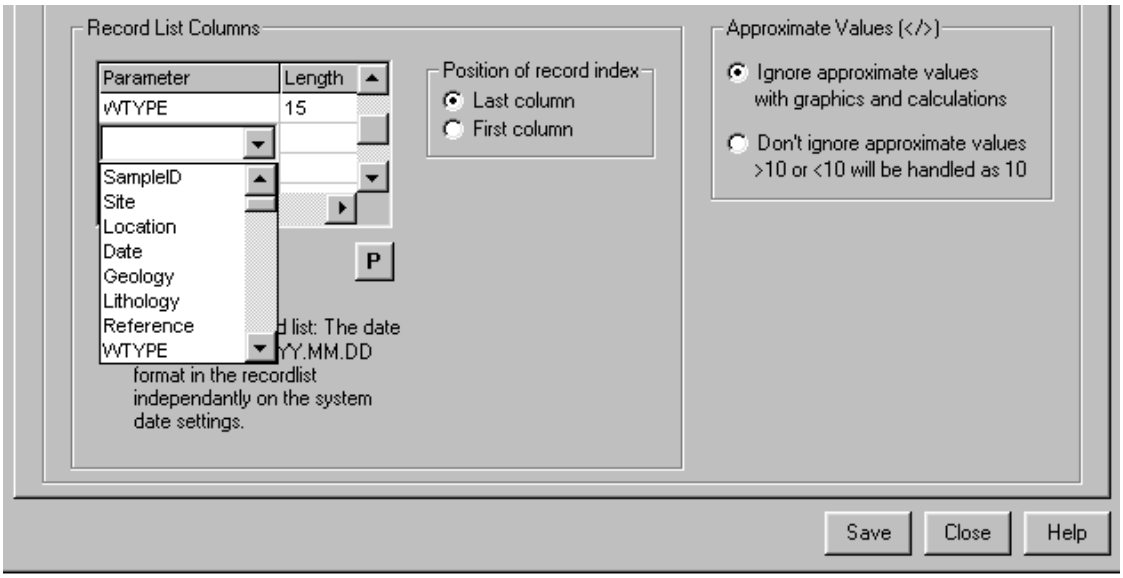


图 4-3 增加样品记录列表参数的下拉列表

4) 如想改变列参数，双击 **Record List Colums** 选取框内 **Parameter** 下方想要改变参数的单元格，其余同步骤 3）。

样品记录列表窗口内所有记录是按照第一列参数进行降序排列的，如想改变列的位置（即改变样品记录的顺序），只需选取该参数（用鼠标点击图 4-2 中 Parameter 下方想要改变的参数），然后点击下方的升降序箭头按钮即可。

4.2 输入窗口

输入窗口（图 4-4）用于新建、编辑或浏览单个样品的数据记录。要打开该窗口，可以：

- 双击**样品记录列表中**（图 3-4）的某一样品；
- 选择**样品记录列表中**（图 3-4）的某一样品，从主菜单中的 **Records** 中选择 **Edit**；
- 选择**样品记录列表中**（图 3-4）的某一样品，单击鼠标右键，选择 **Edit/View**。

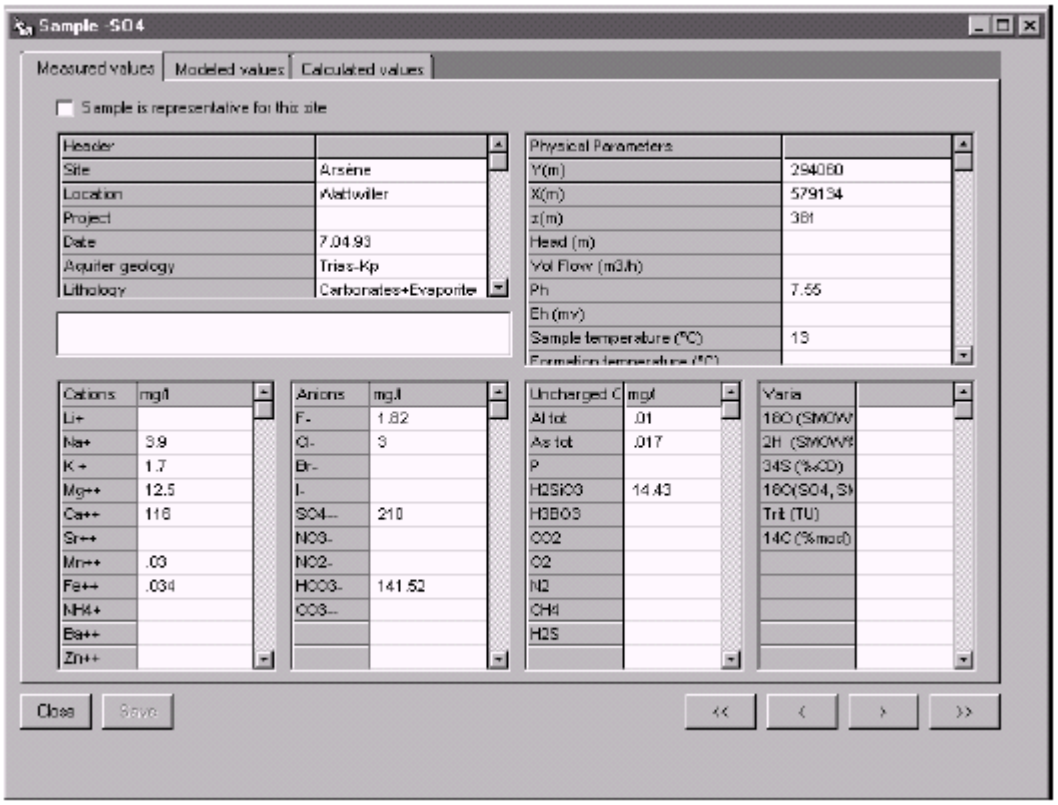


图 4-4 输入窗口

编辑或改变 **Measured Values**（实测数据）窗口内的数值后，点按 **Save** 按钮保存变化结果。该窗口右下角的箭头按钮是前进到下一个记录或后退到前一个记录。

4.3 文本窗口

文本窗口是显示**样品记录列表**中一个样品或一组样品的有关信息和（或）计算结果（图 4-5）。要打开该窗口，可以在样品记录列表窗口中选择一个样品记录，然后从主菜单的 **Reports** 下拉菜单中选择一种类型的文本窗口（图 4-6）。

AquaChem 可以生成 10 种不同类型的样品信息报告。用户可以对这些样品信息报告进行编辑、打印、保存到文件或复制和粘贴到另外的 Windows 窗口中。

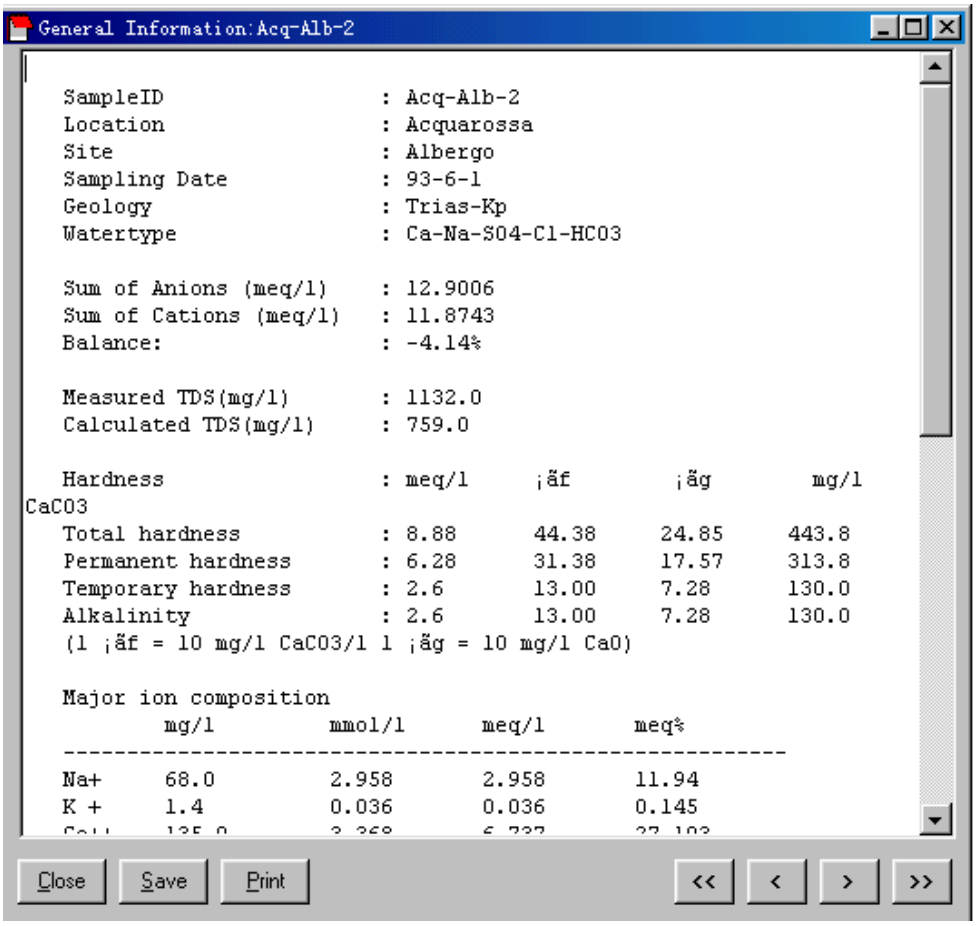


图 4-5　显示样品信息的文本窗口

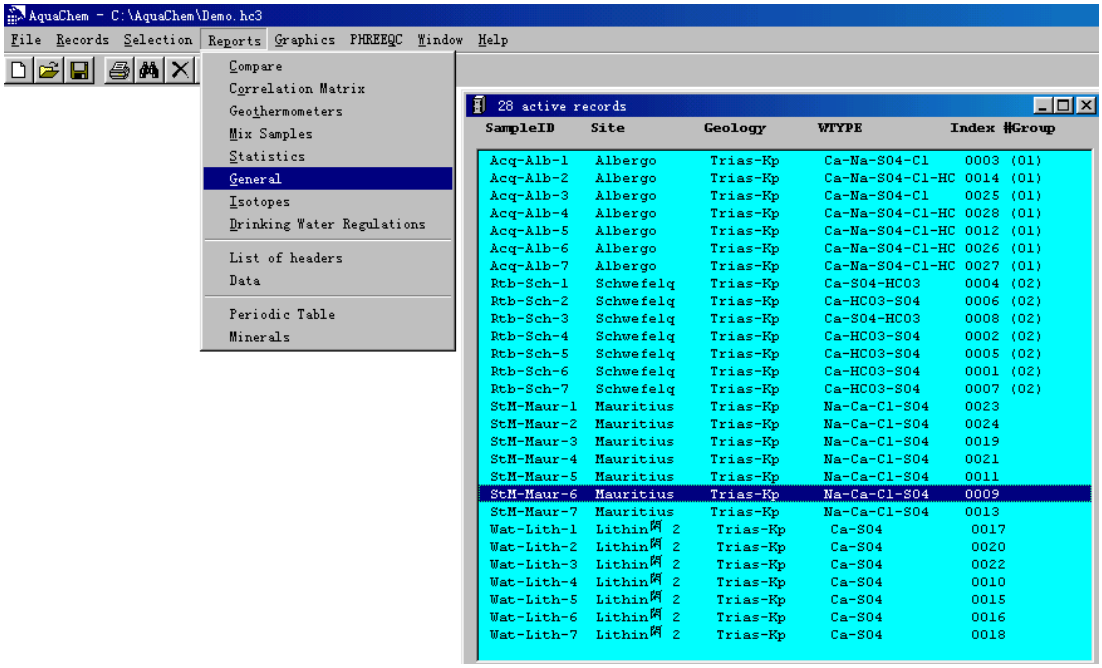


图 4-6 打开文本窗口的方法示例

4.4 图形窗口

利用 AquaChem 可以生成 13 种不同的水化学图件（图 1-1 至图 1-6），显示这些图件的

窗口既是图形窗口。创建一类图件（窗口）的过程如下（以 Piper 三线图为例）：

1） 从主菜单选择：**Graphics\New\Piper**（图 4-7）；

2） 弹出 Piper 图形选项对话窗口（图 4-8），分别在 **parameters** 和 **options** 对话框中选取所需参数（如所要表示的阳离子）或输入其他信息（如图件名称、是否添加图例等 ；

3） 单击**[Apply]**或**[Ok]**按钮，即可生成 Piper 三线图窗口。

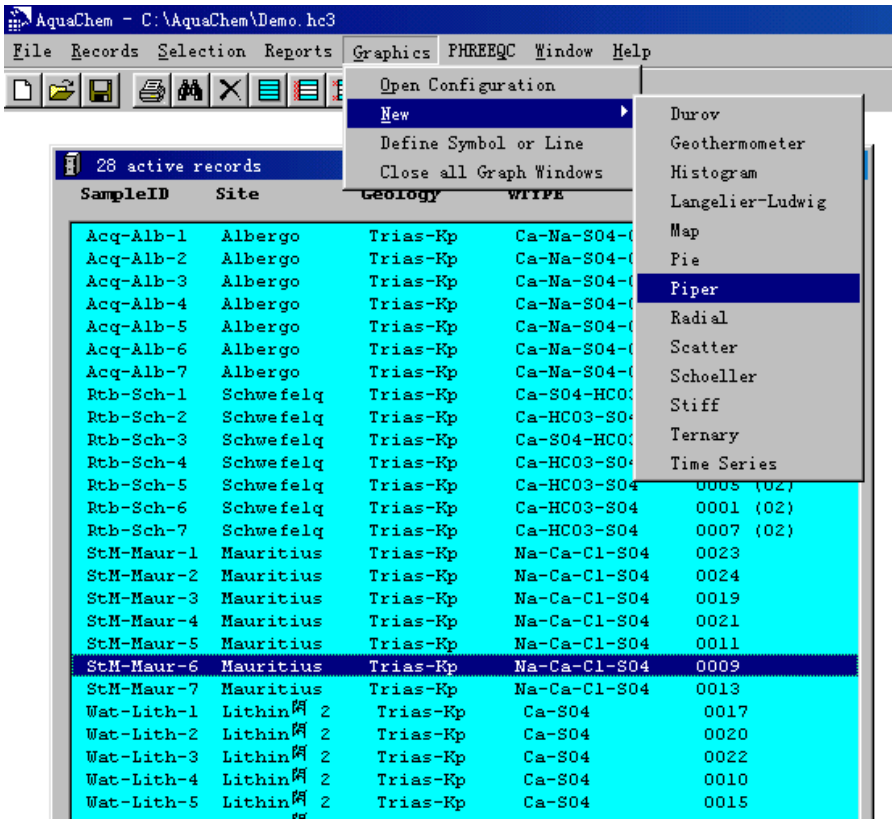


图 4-7　生成图件（图形窗口）的步骤 1）

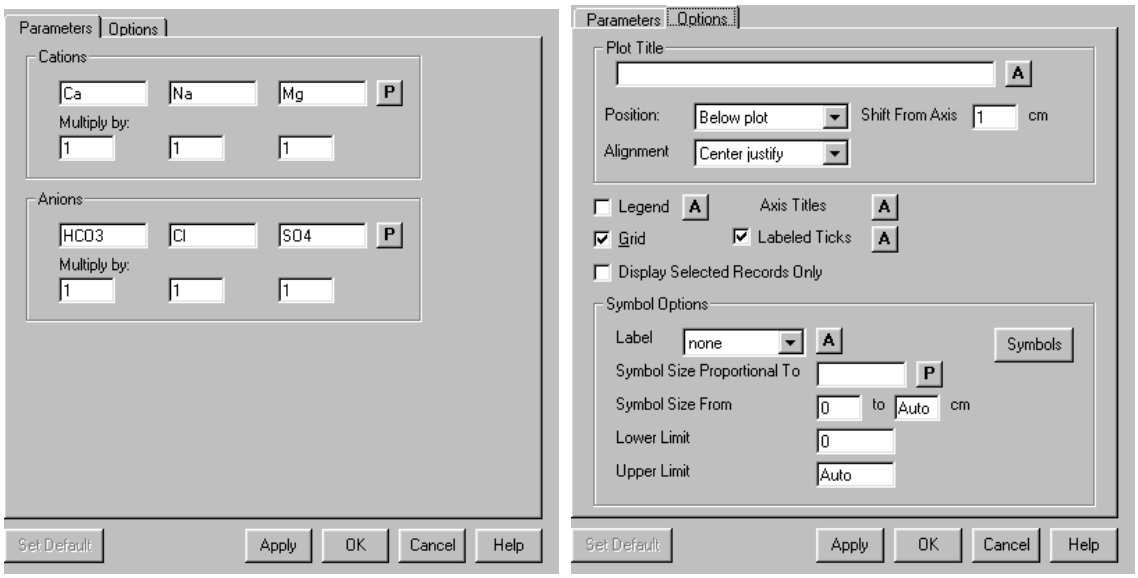


图 4-8　Piper 图形选项对话框窗口

在生成的 Piper 三线图窗口中，样品记录列表窗口中显示的所有记录都将标识出来，而所选取的样品记录被高亮度显示，并可以添加标注（在步骤 2 的 options 对话框中选取标注内容）。如果只想生成部分样品记录的三线图，首先要在样品记录列表窗口进行“**Selection**”（选取）操作。

注意：图形窗口与样品记录列表窗口是链接到一起的，样品记录窗口的任何改变都将在图形窗口中显示出来，同样激活图形窗口中的样点也将在样品记录窗口中高亮度显示该记录。

4.5 工作表窗口

工作表窗口类似于 Excel 的工作薄，是为方便对大量样品进行浏览、编辑和比较等而设置的。按以下步骤打开或创建该窗口：

1） 从主菜单选择：**Record\View as Spreadsheet**（图 4-9）；

2） 弹出 **Spreadsheet settings（工作表设置）**对话框（图 4-10），该对话框是设置各列的显示参数，固定行数和列数（相当于表头），参数的单位等。双击 columns 下的各单元格，会出现列参数的下拉列表按钮，从下拉列表中选择所感兴趣的参数。

3） 单击**[Save]**保存自己的设置，然后按**[Ok]**按钮，生成工作表窗口（图 4-11）。如果不做任何改变直接按**[Ok]**按钮，即接受工作表窗口默认设置。

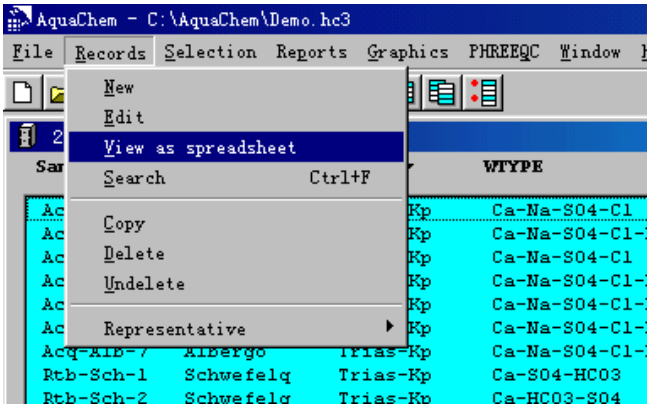


图 4-9 打开工作表窗口步骤 1

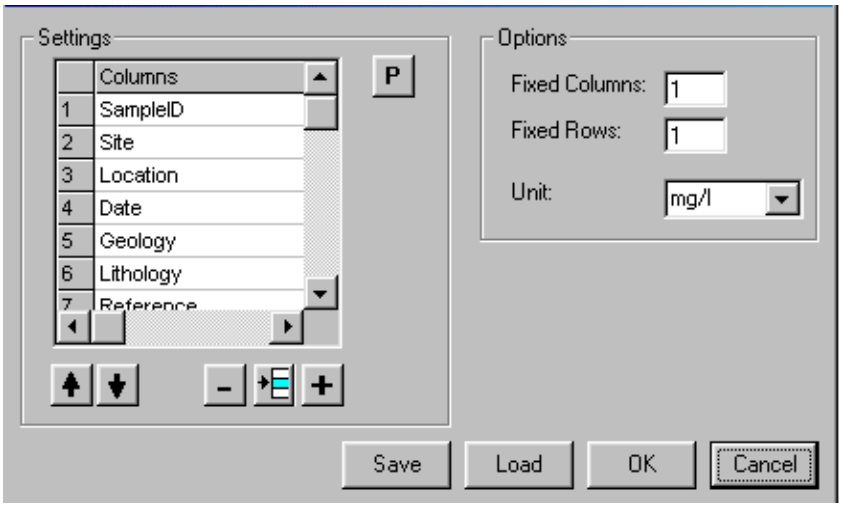


图 4-10　工作表窗口设置对话框

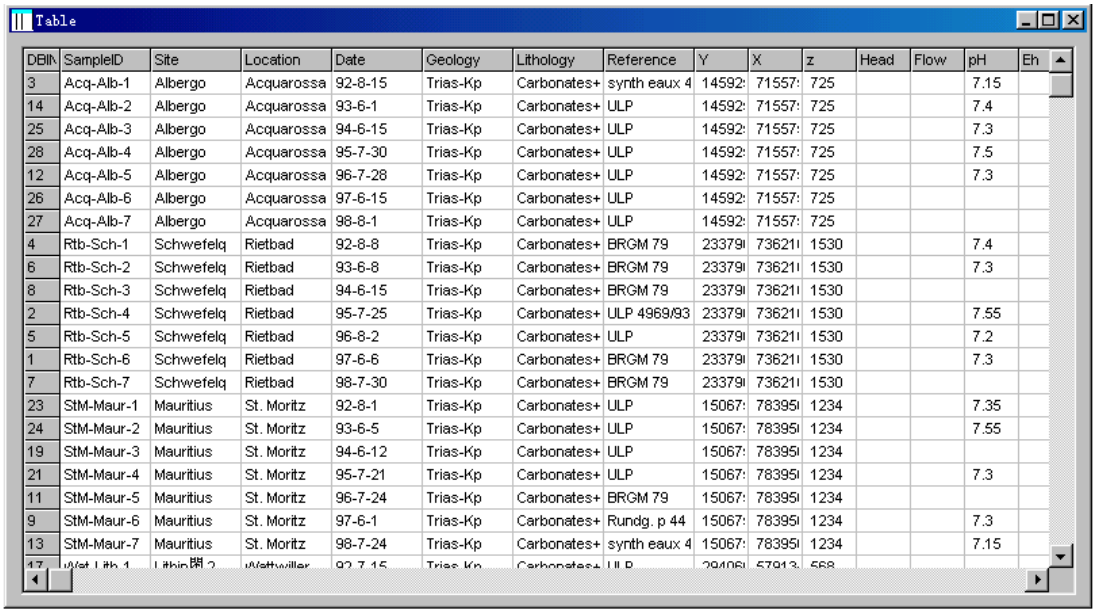


图 4-11　工作表窗口

由于一个样品记录可能有很多参数，要工作表窗口中全部显示会产生很多列，因此，通常只选择感兴趣的项目加以显示。

5、创建新的 AquaChem 数据库

5.1 AquaChem 数据库概况

AquaChem 的数据库文件以“hc3”为扩展名，即具有“文件名.hc3”格式的文件为 AquaChem 的数据库文件。数据库结构由“壳文件”（maskfile）定义，“壳文件”的扩展名为“msk”。

一个 AquaChem 数据库中可以包含无数个样品记录，其数量主要取决于选用参数的个数和计算机内存。但是，一个数据库中包含太多的样品记录会减慢程序的运转速度，比较好的办法是将一个大的数据库分解为几个规模较小的数据库（样品记录少于 1000）。

一个项目的 AquaChem 数据库应该存储在单独的目录中，以免造成混乱。

任一 AquaChem 数据库均包含 10 组特定的参数，其中 9 组需要用户指定，这些参数是：

- **Header Info**（表头信息），如 Project（项目名称）、Location（位置）、Data（日期）、SampleID（样品 ID 号）等；
- **Physical Data**（物理数据），如 Location coordinates（位置坐标）、pH、Conductivity（电导率）等；
- **Cations**（阳离子），如 Na、Ca、Mg 等；
- **Anions**（阴离子），如 Cl、HCO_3、SO_4 等；
- **Uncharged Compounds**（不带电荷的化合物），如 CO_2、O_2、CH_4 等；
- **Variable**（其他参数），如 ^2H、^3H、^{18}O 同位素和细菌等；
- **PHREEQC Description**（PHREEQC 描述信息）；
- **PHREEQC Minerals**（PHREEQC 矿物）；
- **PHREEQC Activities**（PHREEQC 活度）。

另外一组参数是 **Calculated Parameters**（计算参数），如阴、阳离子之和、硬度、碱度、离子平衡等，这些参数由 AquaChem 自动计算，不必用户指定。

AquaChem 数据库的数据格式有两种：字母数字型和纯数字型。表头信息（**Header Info**）为字母数字型，其余参数为纯数字型。纯数字型数据格式中只能用点“.”，不能用“,”。纯数字型数据格式不接受文本数值如“ND”或“NA”（认为其值为零），但可以接受带“大于”或“小于”号的数值（如>0.01 或<0.01）。另外，生成图件时，AquaChem 允许对带“大于”或“小于”号的数值进行设定（省略该数值或忽略大于、小于号）。

注意：虽然用户可以改变数据库参数的标识，但不能随意改变该参数的内部名称，因为这些参数的内部名称是程序内部计算的标识。如不管输入数据代表的是 SiO_2、H_2SiO_3 或 Si，silicon（硅）的内部名称总是 SiO_2。

5.2 创建新的数据库文件

要创建一个项目的新数据库，可进行如下操作：

1） 如果准备启动 AquaChem，在打开数据库窗口对话框时（参见 3.1，图 3-2），直接点击“取消”按钮，弹出**主窗口**（图 5-1）；或关闭已打开的数据库文件（从主菜单中选择：**File\Close**），出现**主窗口**（图 5-1）。

2） 在**主窗口**中选取：**File\New**（图 5-2）。

3） 弹出保存新的数据库文件对话框（图 5-3），在文件名输入框内键入新数据库文件名，点击“保存”（**Save**）按钮，保存新的数据库文件，并出现数据库模板对话框（图 5-4），对话框中有两种选择：

- 利用已有的数据库模板（Copy an existing database template）；或

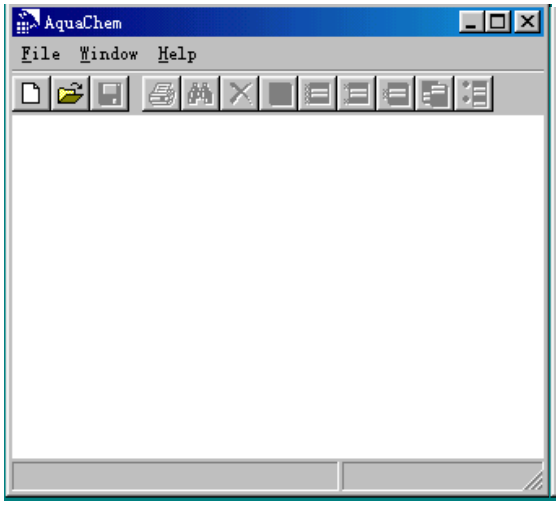


图 5-1 AquaChem 的主窗口

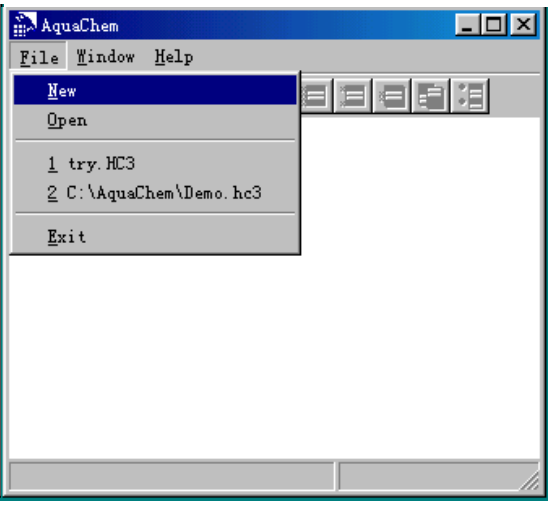


图 5-2 选取建立新数据库文件

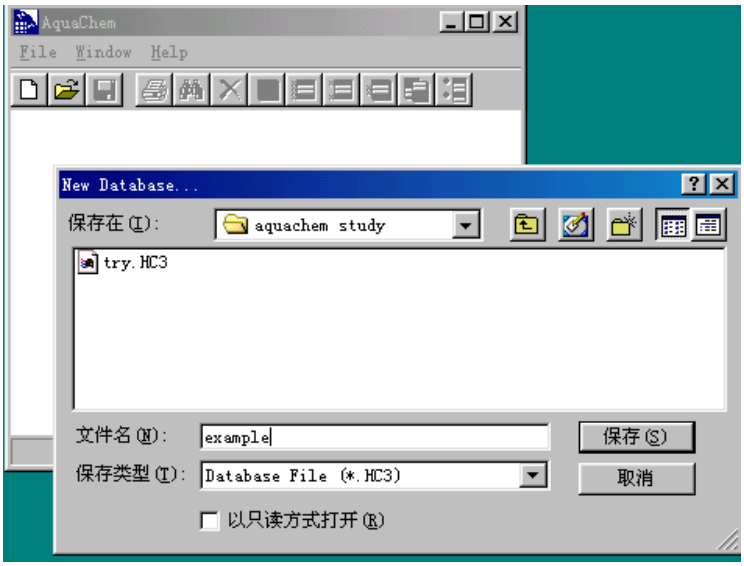


图 5-3 输入并保存新的数据库文件

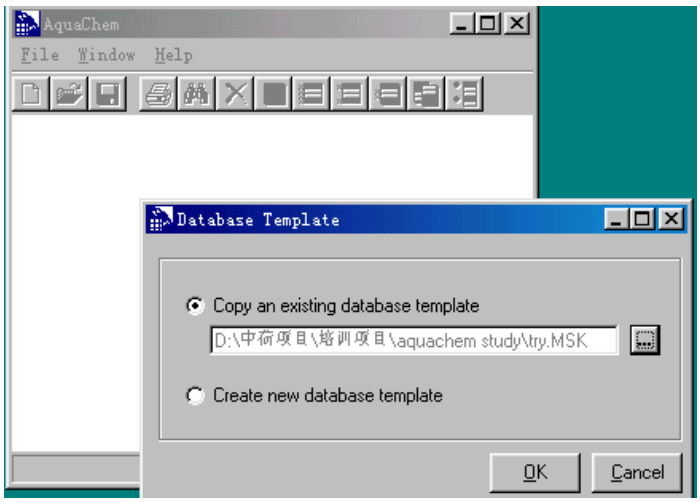


图 5-4 数据库模板对话框

- 创建新的数据库模板（Create a new database template）。

4） 如果要利用已有的数据库模板（对新用户和一般用户来说均可采用此选项，利用 AquaChem 的 demo.msk 模板），点击该选项左侧的选择按钮，然后在下方的输入框内输入选用模板的工作路径，或点击[...]按钮，查找和选用模板。最后点击[**Ok**]，生成空白的样品记录列表窗口（图 5-5）。

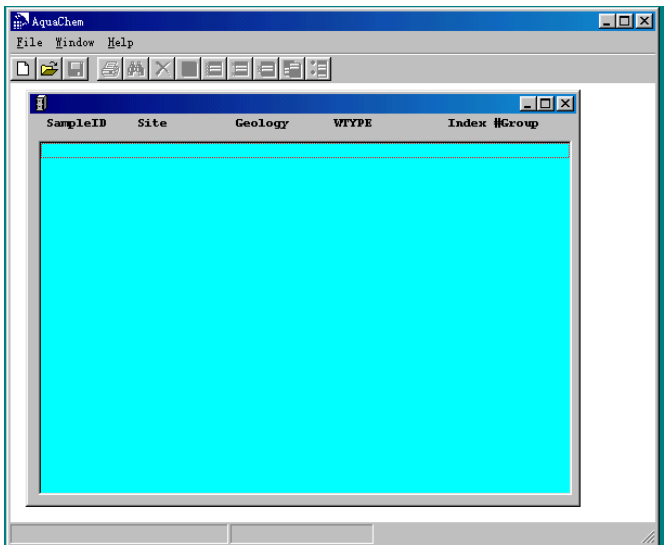


图 5-5 空白样品记录列表窗口

5） 如果要创建新的数据库模板（对熟练用户），点击该选项左侧的选择按钮，点击[**Ok**]后，弹出设置对话框（图 5-6）。全部设置完成后，进行测试，之后保存退出，生成空白的样品记录列表窗口（图 5-5）。

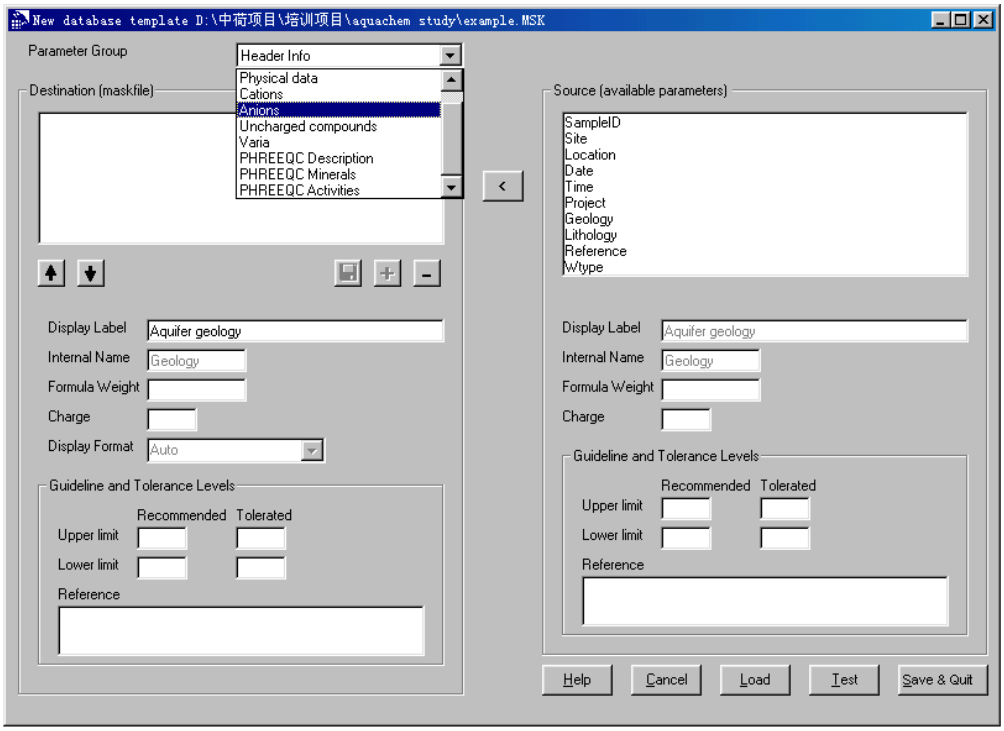


图 5-6 新建数据库模板对话框

6） 在新（空白）的**样品记录列表窗口**中，可以通过三种方式建立数据库：

- 导入以 **tab** 键分隔的纯文本文件；
- 利用**输入窗口**（**Input Window**）输入；
- 利用**工作表窗口**（**Spreadsheet Window**）输入。

下面只对前两种方法予以介绍。

5.2.1 导入以 tab 键分隔的纯文本文件

步骤如下：

1） 选择 **File\Import ASCII**（图 5-7），查找并打开 ASCII（纯文本）目标文件；

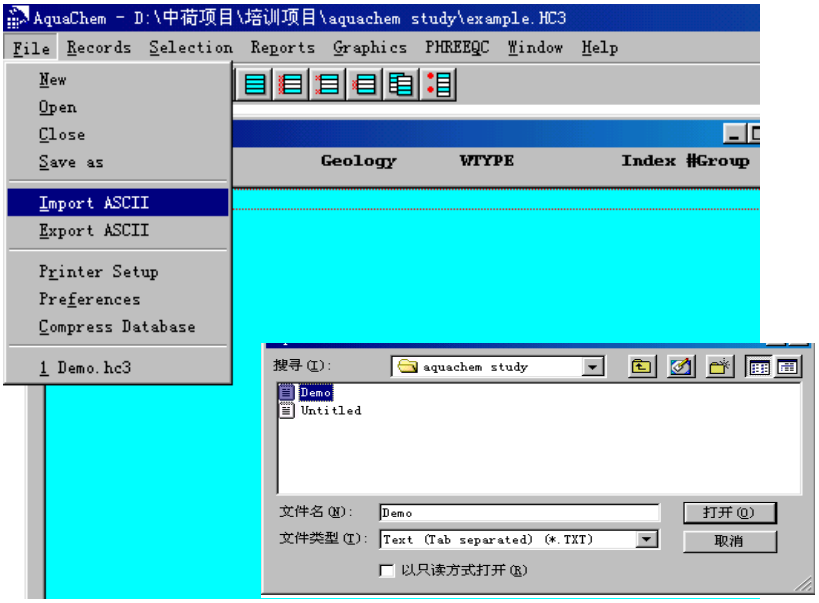


图 5-7 导入纯文本文件

2） 弹出指定对应参数（文本文件的列与 AquaChem 数据库参数）窗口（图 5-8）。双击 **AquaChem** 栏下的单元格，在下拉列表中选择与文本文件对应的参数，双击 Unit 栏下的单元格，在下拉列表中选择对应参数的单位。

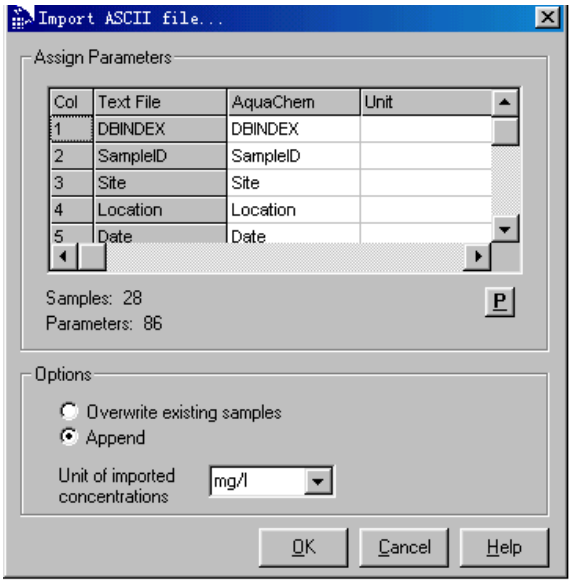


图 5-8 指定文本文件与数据库的对应参数窗口

3） 完成指定对应参数后，点击[Ok]按钮，开始导入，样品记录列表创窗口中显示出导入的记录。

对纯文本文件格式的要求

- 对所有参数，均以 tab 键为分隔符；
- 第一行必须为参数标识行；
- 每行代表一个样品，每列为一个参数；

5.2.2 利用“输入窗口”（Input Window）输入

步骤如下：

1） 在主菜单中选择：**Records\New**（图 5-9）；

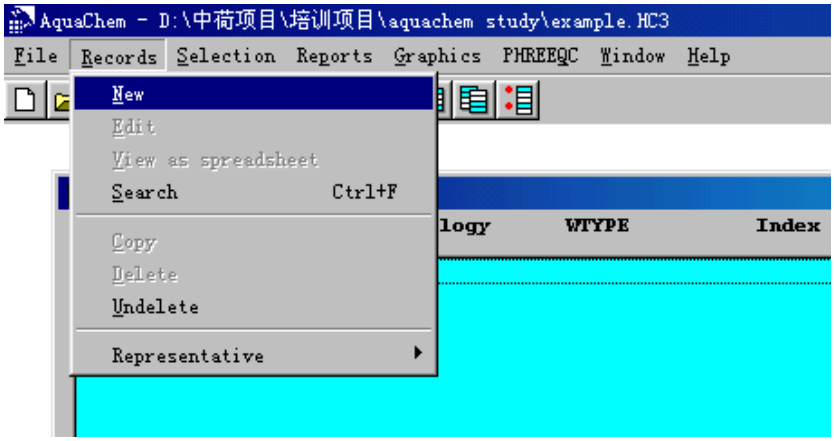


图 5-9 从输入窗口输入的菜单操作

2） 弹出空白输入窗口（图 5-10），双击每个参数右侧的单元格，从键盘输入所需信息，按回车键加以确认；

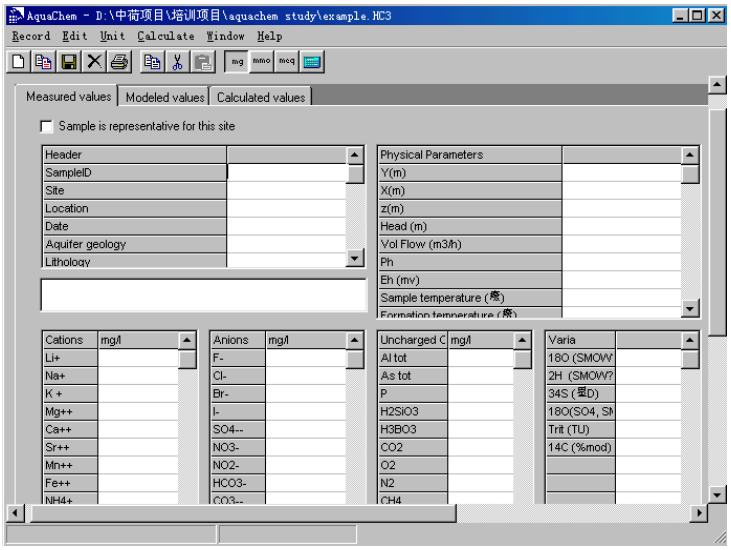


图 5-9 样品记录输入窗口

3) 完成一个记录后，点按右下角的右箭头键，输入下一个记录。

6、数据库查询与样品记录选择

6.1 数据库查询

AquaChem 的数据库查询功能是指查找并列出满足一定查询条件的单个或一组样品记录。其操作如下：

1) 在**样品记录列表**菜单（主菜单）中选择：**Records\Search**（图 6-1），弹出查询对话框（图 6-2）；

2) 点击查询对话框内的 **P** 按钮，弹出选择查询参数窗口（图 6-3），选择要查询的参数（从上部的下拉列表选择查询参数的种类或全部参数，在下部窗口内选择具体参数），用鼠标直接拖至图 6-2 的 Fieldname 框内；

3) 从 Operator 的下拉列表中选择逻辑符号，在 Units 的下拉列表中选择参数单位，在 Value 框内输入条件数值之后(注意日期格式与样品记录列表中的格式一致)，**Add to Critria** 按钮被激活，点击该按钮，上述设置被送入 **Search Criterias**（查询条件）框内，**Logical** 下方的下拉列表按钮菜单被激活。

4) 如果还有其他查询条件，从 **Logical** 下方的下拉列表中选择逻辑条件，重复步骤 3)；

5) 查询条件设置完毕，点击 **Ok** 按钮，样品记录列表窗口中满足查询条件的样品记录将高亮度显示。

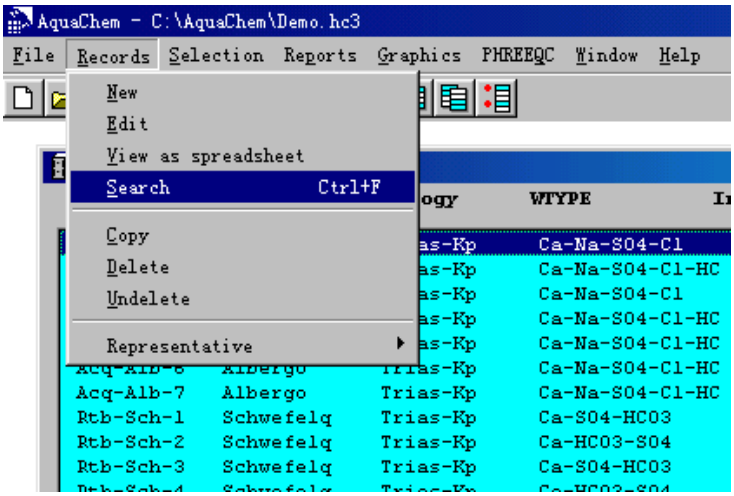


图 6-1 数据库查询菜单操作

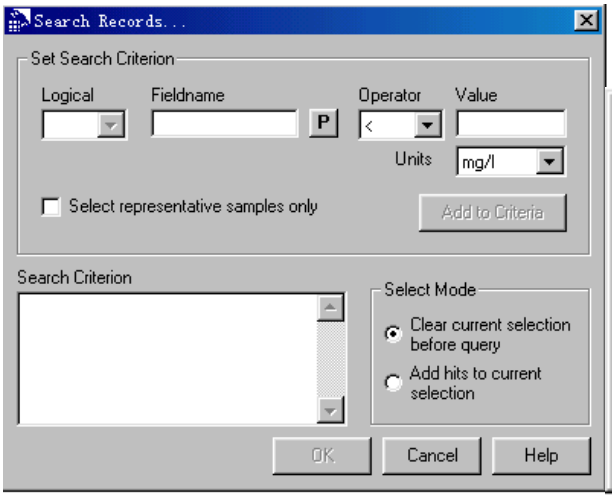


图 6-2 数据库查询对话框

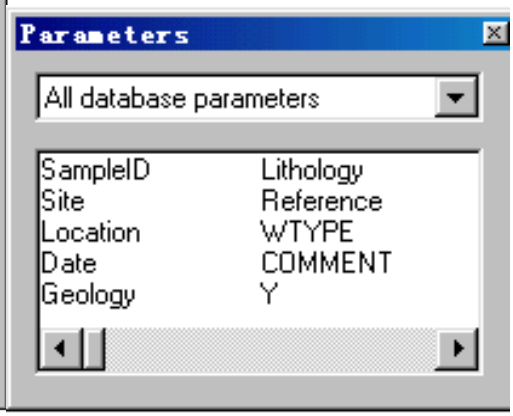


图 6-3 选择查询参数窗口

6.2 样品记录选择

进行样品比较或作图时，有时只想显示部分样品记录，主菜单中的 **Selection**（选择）提供该功能（图 6-4），下面简要介绍该菜单。

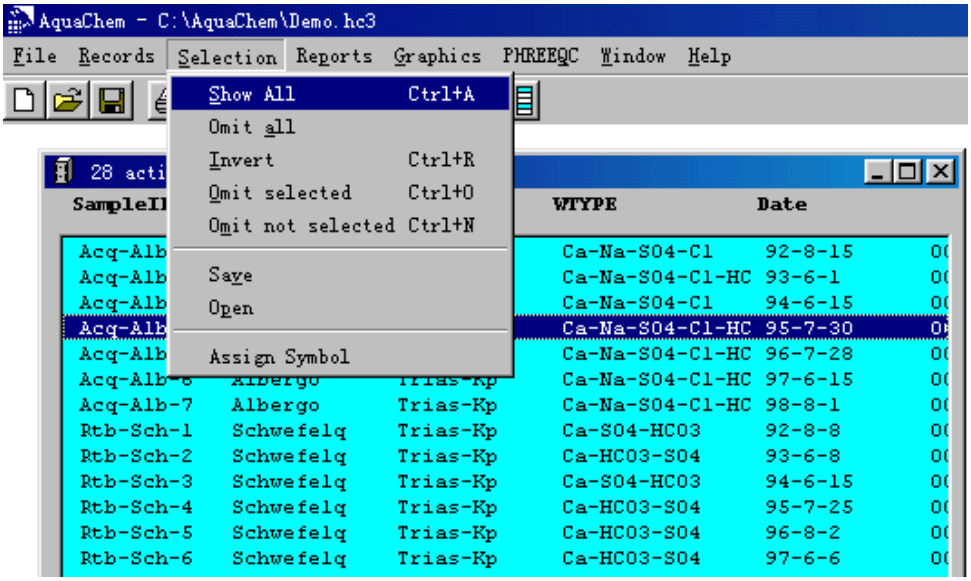


图 6-4 Seletion 菜单

Show all--显示全部样品记录；

Omit all—隐藏全部样品记录；

Invert—反向选择（将已选择的样品记录和为选择的样品记录相互转换）；

Omit selected—隐藏选择的样品记录；

Omit not selected—隐藏未选择的样品记录；

Save—保存选择的样品记录，指定保存位置和文件名（以 sel 为扩展名），以后可以打开该文件；

Open—打开保存过的样品记录选择文件；

Assign Symbol—为选定的样品记录指定图例符号。选择该菜单后，出现择样品记录图例窗口（图 6-5），在上部的图例符号列表窗口内选择一种符号（符号形式显示在下部的 Symbol 框内），然后点按 **Assign** 按钮。为选定样品记录指定图例符号后，**样品记录列表窗口**内的最后一列将注明其图例符号的编号（图 6-5 中图例符号列表窗口内括号内的数字）。

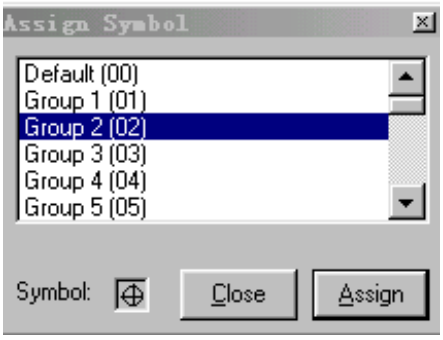


图 6-5 选择样品记录图例窗口

7、打印

7.1 打印文本报告

只需激活生成的文本报告窗口，在该窗口的菜单中选择：**File\Print** 即可。打印机的设置与 Windows 相同。

7.2 打印图形

下面以打印 Piper 三线图和散点图（这两个图件已完成）为例，简要介绍操作步骤：

1) 用鼠标在任一图形窗口范围内点击，激活该图形窗口（图 7-1）；
2) 从图形窗口菜单中选择：**File\Print**（图 7-2），出现打印选项窗口和空白的预览打印结果窗口（图 7-3）；
3) 在打印选项窗口右上角的 **Available Plots**（可供打印图件）窗口内列出了所有可供打印的图件。选择要打印的图件(一页纸内)，点按 < 按钮，将他们添加到 **Selected Plots**（已选打印图件）窗口内，此时，打印预览窗口显示出默认编排效果（图 7-4）；
4) 在打印选项窗口内，可进行图件编排、图例、图名输入、模板设置等，这里不再一一介绍。打印选项设置完毕后，按 **Print** 按钮完成打印。

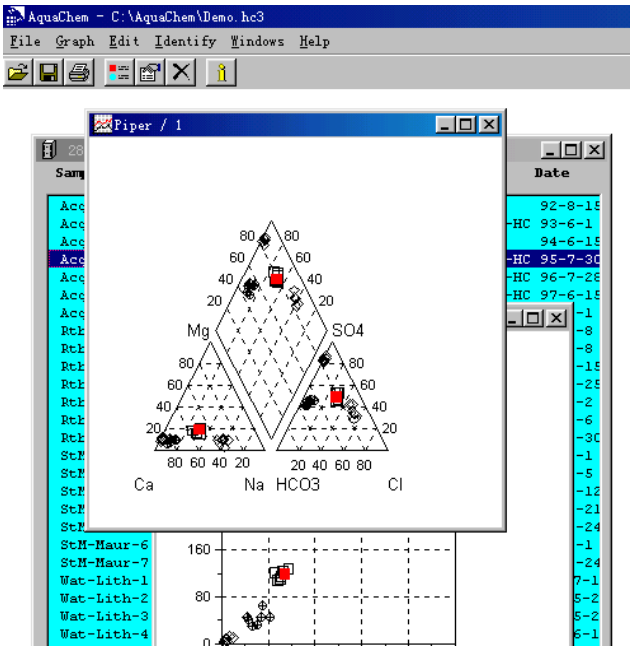


图 7-1 激活图形窗口

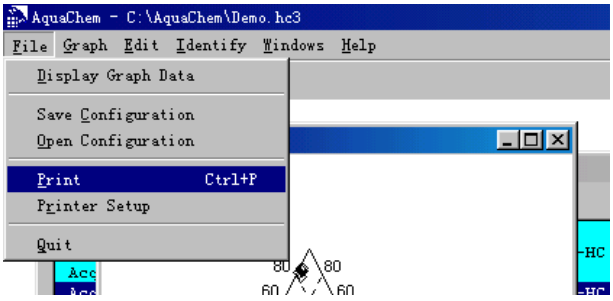


图 7-2 图形打印菜单操作

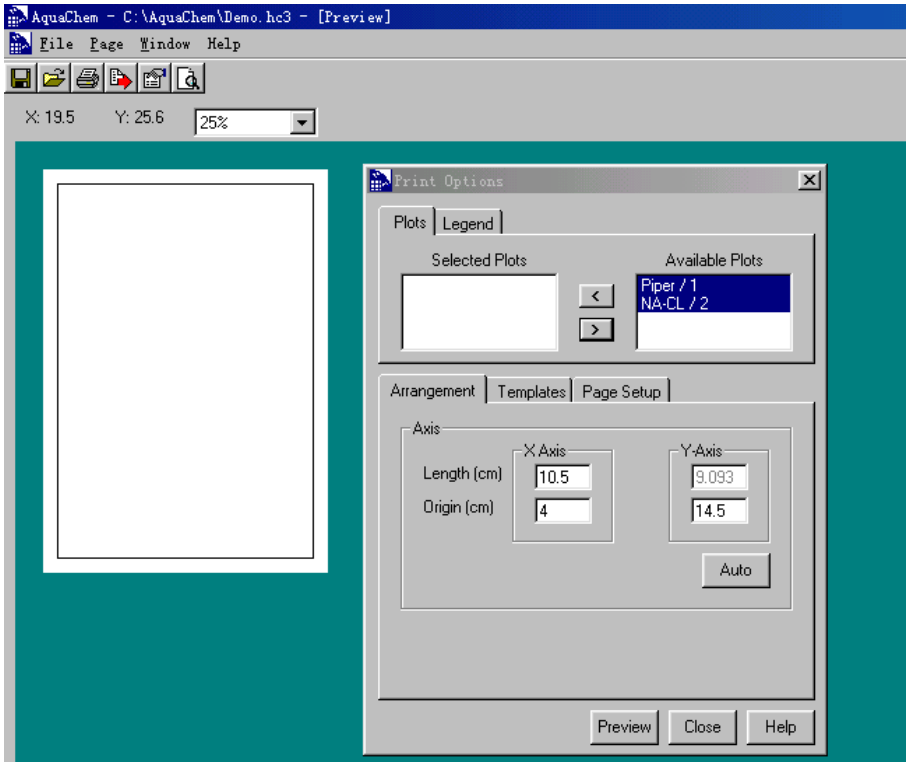


图 7-3 打印选项窗口和预览窗口

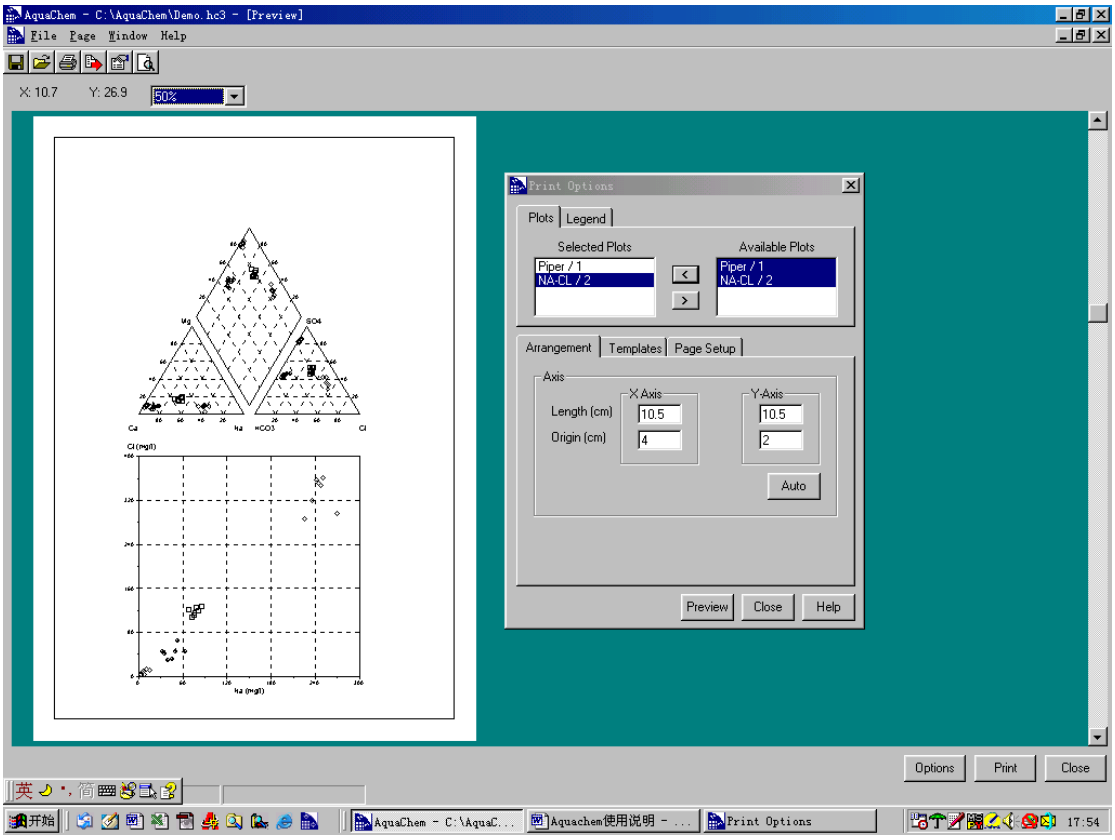


图 7-4 默认的打印编排结果

7.3 打印选项窗口中的几个重要按钮和标识的含义：

Plot：图件设置窗口；

Legend：图例设置窗口；

Arrangement：图件编排选项窗口；

Templates：打印模板设置窗口

Page Setup：页面设置窗口

Length（cm）：左侧位 X 轴方向的图件宽度，右侧为 Y 轴方向的图件宽度；

Origin（cm）：左侧 为 X 轴方向距打印边框左下角的距离，右侧为 Y 轴方向距打印边框左下角的距离。

8. AquaChem 中的 PHREEQC 应用界面简介

PHREEQC是目前广泛应用的水文地球化学模拟软件之一，主要用于模拟天然水和污水体系的化学平衡及其输运过程。由Parkhurst等于1980年用FORTRAN语言编写，1995年后改为C语言，目前最高版本为2.4.2，AquaChem内置的PHREEQC版本为1.6。

PHREEQC 的基本适用条件是：离子强度较低（稀溶液）的低温水溶液体系，其主要功能包括：

- 计算水溶液体系的化学平衡状态（如各组分的活度、离子强度、可能出现矿物的饱和指数等）；
- 定量体系（已知体系的初始组成）中各种化学反应的计算和一维输运过程模拟。包括的可逆反应有：水溶液、矿物、气体、固溶体、表面络合、离子交换等的平衡；不可逆反应包括：给定反应物摩尔数量的转换反应、动力控制（反应速度）反应、不同组成的溶液混合、体系温度变化的反应等。
- 反向模拟。根据已知端点的水溶液体系组成，反演确定溶液输运过程中产生那些矿物和气体的转化。

本说明仅对 AquaChem 内置的 PHREEQC 的两个最基本功能加以介绍，即计算水溶液体系的化学平衡状态和溶液混合结果。如想进一步了解和应用 PHREEQC，可从美国地质调查局网站下载该软件及使用说明书（免费），网址为：

http://water.usgs.gov/software/phreeqc.html

8.1 AquaChem-PHREEQC 的热力学参数据库选择

在利用 AquaChem 内置的 PHREEQC 进行计算之前，首先要建立 PHREEQC 计算程序与其热力学参数数据库的链接。其步骤如下：

1） 启动 AquaChem，打开所需的样品记录列表（或新建，参见 5.2）；

2） 从主菜单选择：**File\Preferences**（见图 4-1），弹出设置对话框（图 8-1）；

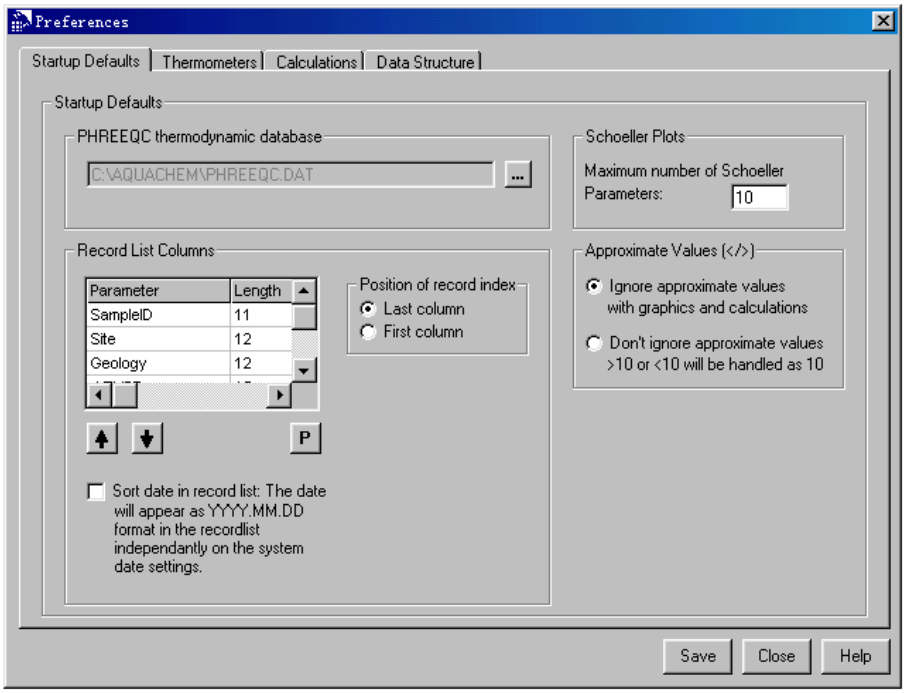


图 8-1 选择 PHREEQC 热力学参数数据库窗口



图 8-2 打开 PHREEQC 热力学参数数据库对话框

3） 点击“**PHREEQC thermodynamic database**”窗口右侧的**[…]**按钮，即弹出打开热力学参数数据库对话框，选择要链接的数据库（在默认安装情况下，PHREEQC 的热力参数数据库与 AquaChem 的安装目录相同），点击“打开”按钮，“**PHREEQC thermodynamic database**”窗口内显示出所选择的热力学参数数据库；

4） 点击“Save”按钮，保存链接设置。最后，点击“Close”按钮，关闭设置对话框。

8.2 AquaChem-PHREEQC 的输入窗口

启动 AquaChem 后，直接从主菜单中选择：**PHREEQC\Creat PHREEQC Input File**（图 8-3），就会弹出 PHREEQC 输入窗口，该窗口内默认的活动窗口为“**Solution**”输入窗口（图 8-4）。

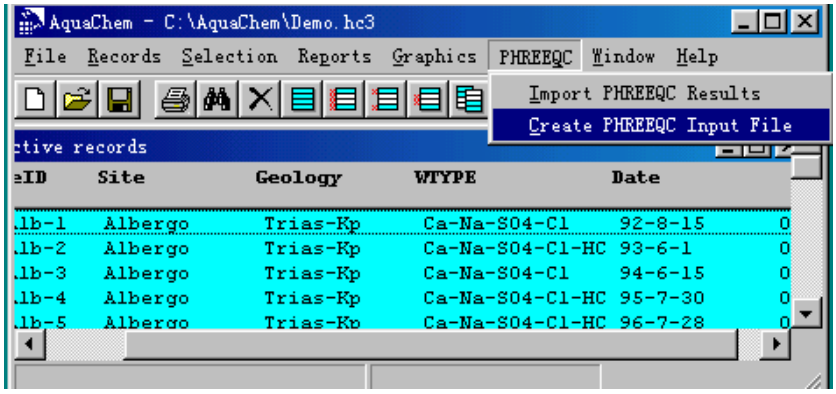


图 8-3 选择创建 PHREEQC 输入窗口

输入窗口的顶部是 AquaChem 内置的所有 PHREEQC 输入功能选项按钮，这些功能（模拟和计算）分别为：

- **Solution**—选择要进行模拟计算的溶液，
- **Reaction**—矿物的定量沉淀和溶解，
- **Phase**—矿物或气体的相平衡，
- **Gas Phase**—有限体积气体与溶液的平衡，
- **Mix**—多种溶液的混合，
- **Exchange**—离子交换，
- **Surface**—表面吸附作用，
- **Transport**—一维对流弥散模拟，

- **Inverse Model**—反演模拟
- **Aquifer**—含水层特性计算，如骨架体积、离子交换能力、表面吸附位置等，
- **Run**—程序运行设置，包括输出结果、保存内容、反应温度等，
- **Summary**—上述部分设置的摘要信息。

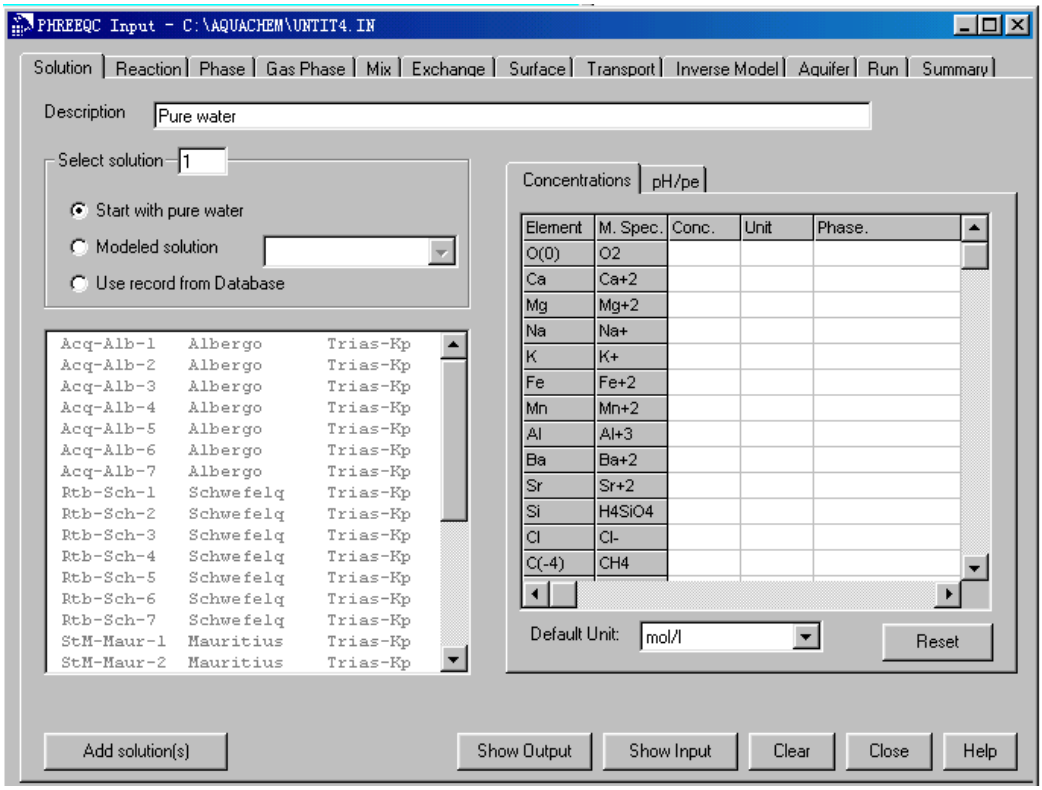


图 8-4　PHREEQC 的输入窗口

PHREEQC 输入窗口右下方的按钮对所有功能都是相同的，其意义如下：
Show Output—显示目前已完成的模拟输出文件内容，
Show Input—显示目前的输入文件内容，
Clear—从目前输入文件中清除所有的模拟步骤，
Close—关闭目前的模拟，
Help—目前功能选项下的帮助信息。

8.3 计算溶液化学平衡状态

计算溶液化学平衡状态是 AquaChem-PHREEQC 的最简单功能，步骤如下：

1） 激活 PHREEQC 输入窗口中的“**Solution**”输入选项窗口（图 8-4，直接用鼠标点击该按钮）；

2） 在该窗口的主菜单中选择：**File\Save as**，弹出保存输入文件的对话框，保存输入文件（“.in”为扩展名）到指定的目录（**注意按照 DOS 格式的路径及文件名**）；

3） 在“**Select solution**”窗口内，选择“**Use record from Database**”（图 8-5，点选左侧的单选按钮），将激活下方的所有样品记录（样品记录列表中的所有样品），从中选择要进行计算的样品；

4） 在“**Description**”窗口内输入所模拟溶液的注释信息或采用默认描述信息，点击“**Add solution(s)**”按钮，将所选择的溶液添加到输入文件中（点击“**Show Input**”

可以浏览输入文件）；

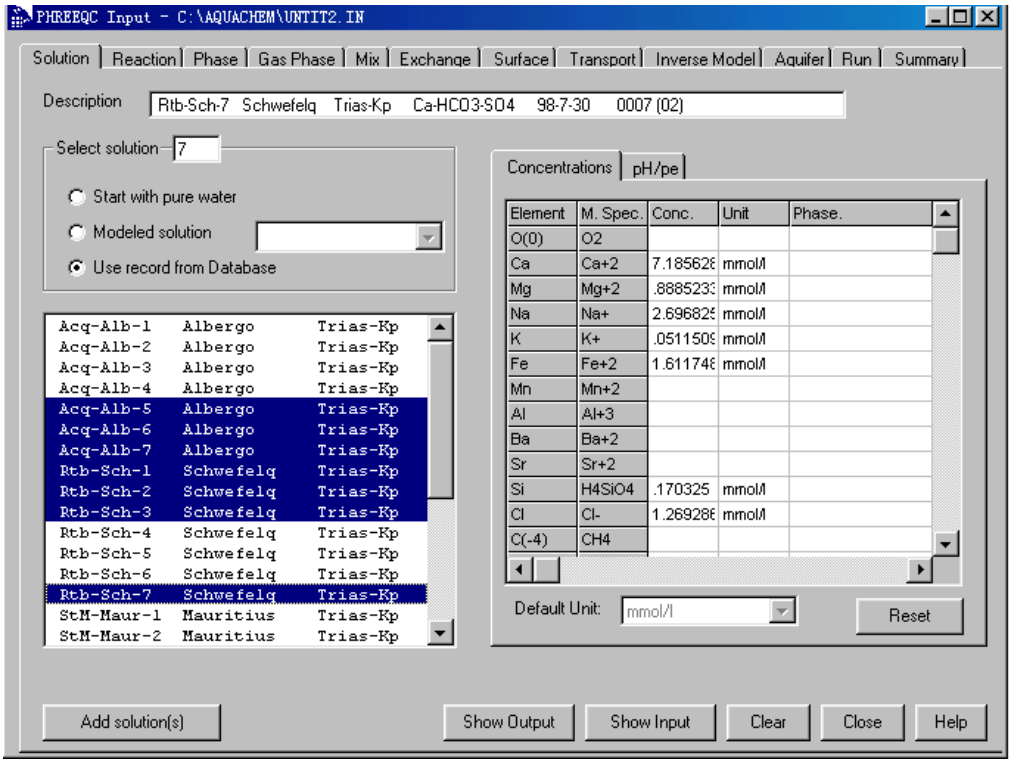


图 8-5　计算溶液化学平衡的“Solution”输入窗口

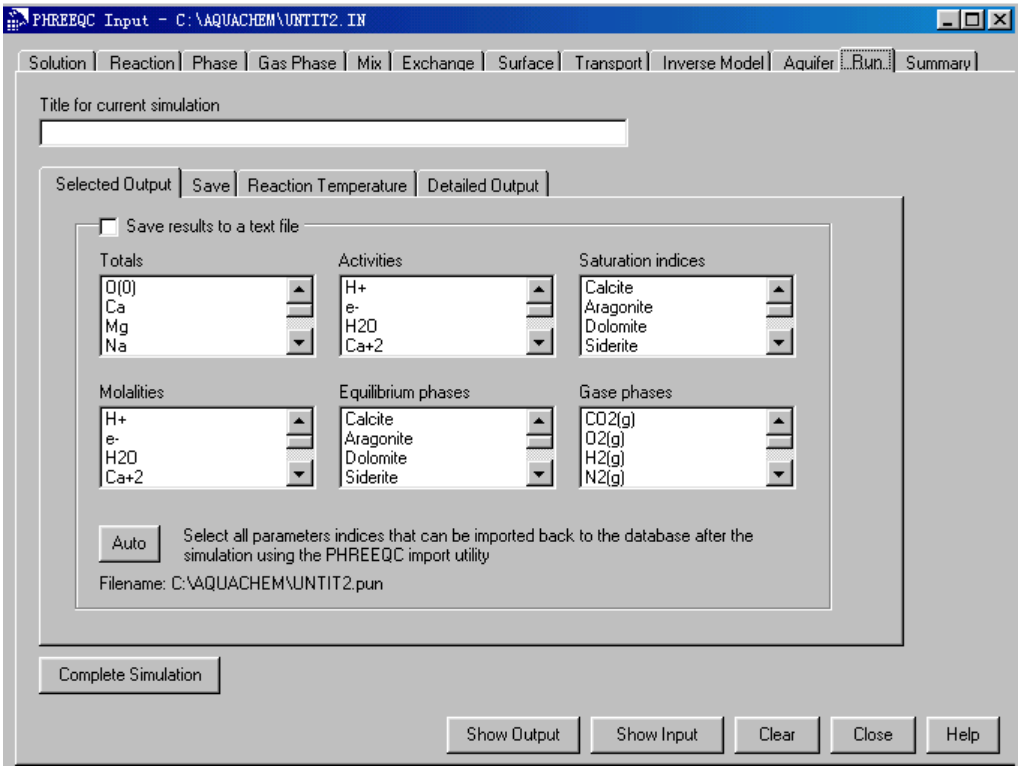


图 8-6　运行条件与输出结果设置

5）　激活“**Run**”窗口（图 8-6），在 “**Title for current simulation**”输入模拟结果的注释信息，然后分别设置 “**Selected Output**”、“**Save**”、“**Reaction Temperature**”

和“**Detailed Output**”对话框内的内容（后面将加以说明），设置完成后，点击左下角的“**Complete Simulation**”按钮，确认设置选项并激活“**Run PHREEQC**”按钮，点按该按钮，完成模拟计算，其输出文件名与输入文件名相同，只是扩展名为“.out”。如果输入文件或保存位置有误，将弹出错误对话框。模拟计算完成后，点按“**Show Output**”可以浏览输出结果（也可打印）。

程序运行设置对话框的含义

- **Selected Output—**该对话框（见图 8-6）是设定输出文件内容，如果不选择“**Save results to a text file**”，输出文件中将包含所有计算结果。如果应用该选项，有两种选择，一是点按左下角的“Auto”按钮，输出文件中只包含创建该数据库时设置的要模拟的参数；二是在中部的 6 个参数列表中选择要输出的内容。无论进行何种选择，都将产生一个输出文件格式文件，该文件的文件名与输入文件相同，扩展名为“.pun”。
- **Save—**该对话框（图 8-7）是指定模拟计算结果的信息标识，以便用它作为后继模拟的输入参数。

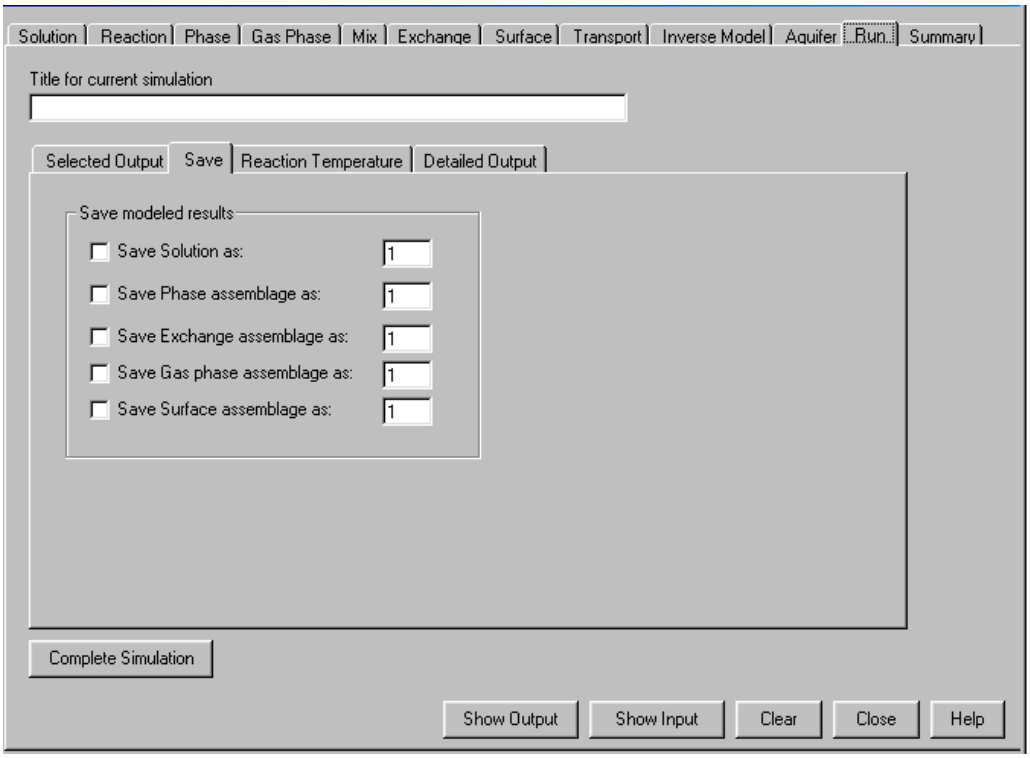


图 8-7　PHREEQC 的“Save”对话框

- **Reaction Temperature—**该对话框（图 8-8）是指定模拟的温度变化特点，有三个选项：恒温、均匀线性变化和指定每一步的温度。默认为恒温。
- **Detailed Output—**该对话框（图 8-9）是选择输出文件中包括对话框内所列的各种更为详细的输出信息。

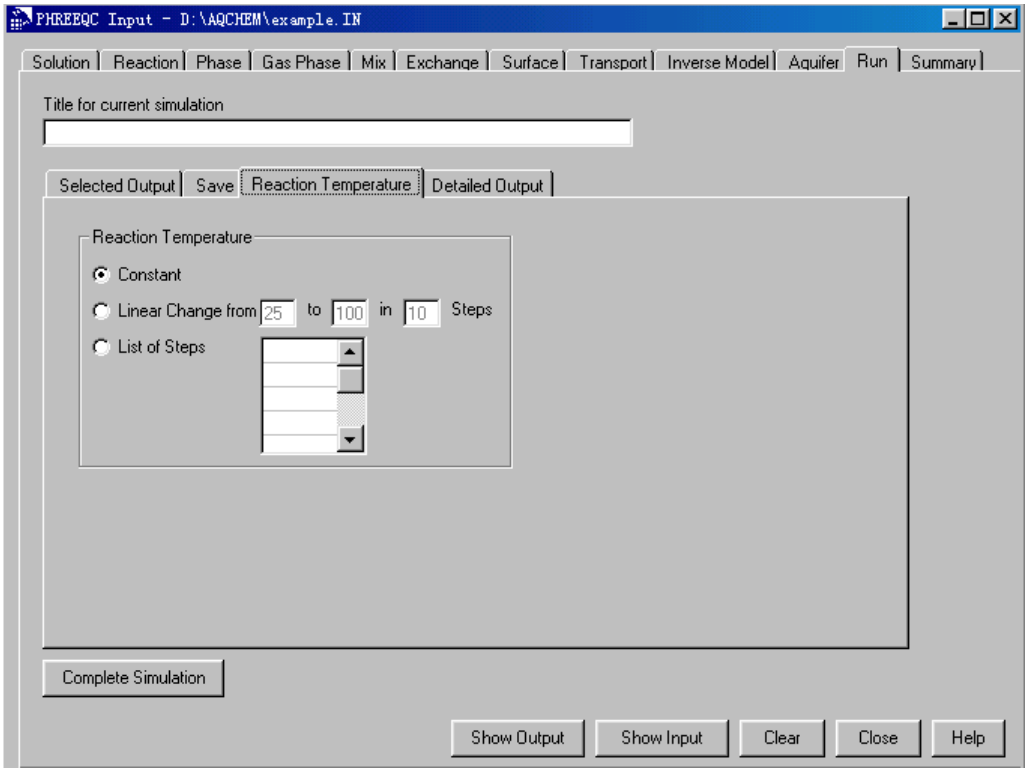


图 8-8　PHREEQC 的“Reaction Temperature”对话框

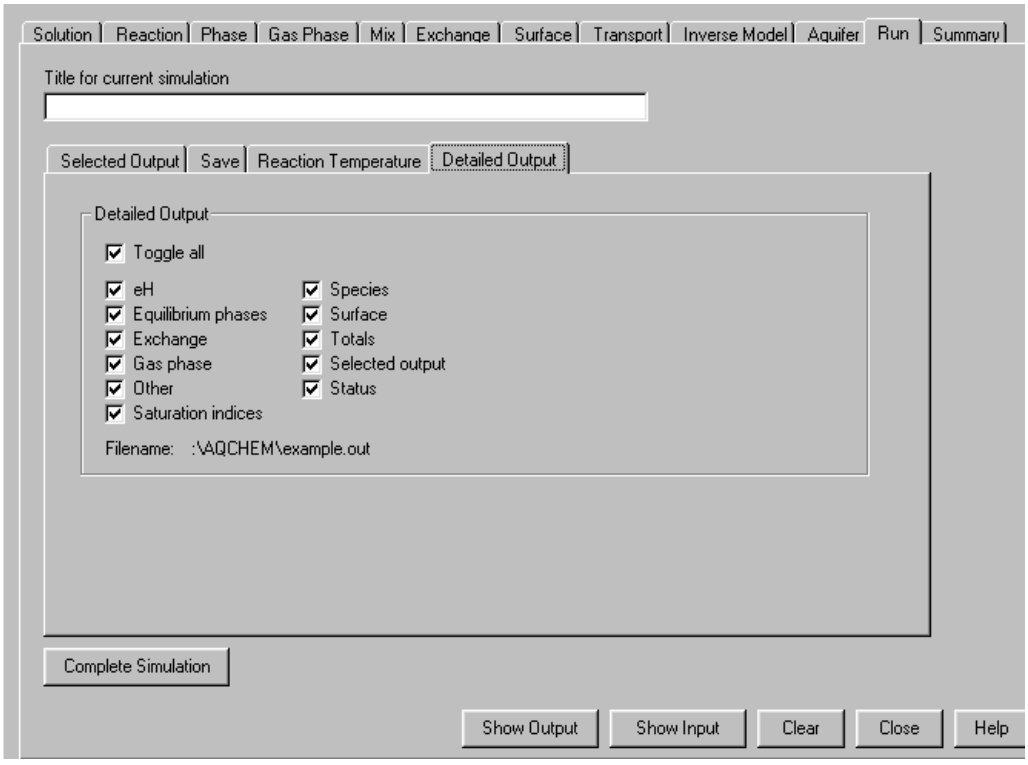


图 8-9　PHREEQC 的“Detailed Output”对话框

8.4 溶液混合计算

“混合计算”可用于模拟计算多种溶液混合后的化学组成及其平衡状态，其步骤如下：

1） 在 PHREEQC 的“**输入窗口**”（图 8-4）中激活“**Solution**”窗口（用鼠标点击该按

钮），在主菜单中选择：**File\Save as**，存储混合模拟计算的输入文件。

2） 在“**Solution**”窗口内 的“**Select Solution**”子窗口内，选择“**Use record from Database**”选项，激活下面窗口中的样品记录列表，在样品记录列表中选取想要混合的溶液（至少两个），然后点击左下角的“**Add solution(s)**”按钮（其功能是将要模拟计算的溶液添加到输入文件中）。

3） 激活“**Mix**”窗口（图 8-10），双击“**Mix**”窗口内“**Solution**”下方的第一个单元格，出现下拉列表按钮，点击该按钮显示出备选溶液列表，选择其中之一，然后点击（或双击）该单元格右侧“**Part**”下方的对应单元格，从键盘输入混合比例份数（**注意按回车键确认**）。按照该方法依次选择和输入其它要进行混合的溶液及其比例分数。在“**Description**”窗口内可以输入说明信息或为空白。

4） 所有溶液选择完成后，点按左下角的“**Add Mix**”按钮，确认混合输入设置。

5） 激活“**Run**”窗口，进行运行和输出设置（参见 8.3 节及图 8-6 至图 8-9），然后点击左下角的“**Complete Simulation**”按钮，确认设置选项并激活“**Run PHREEQC**”按钮，点按该按钮，完成模拟计算，显示出模拟计算结果。模拟结果的输出文件名与输入文件名相同，只是扩展名为“.out”，由程序自动完成。

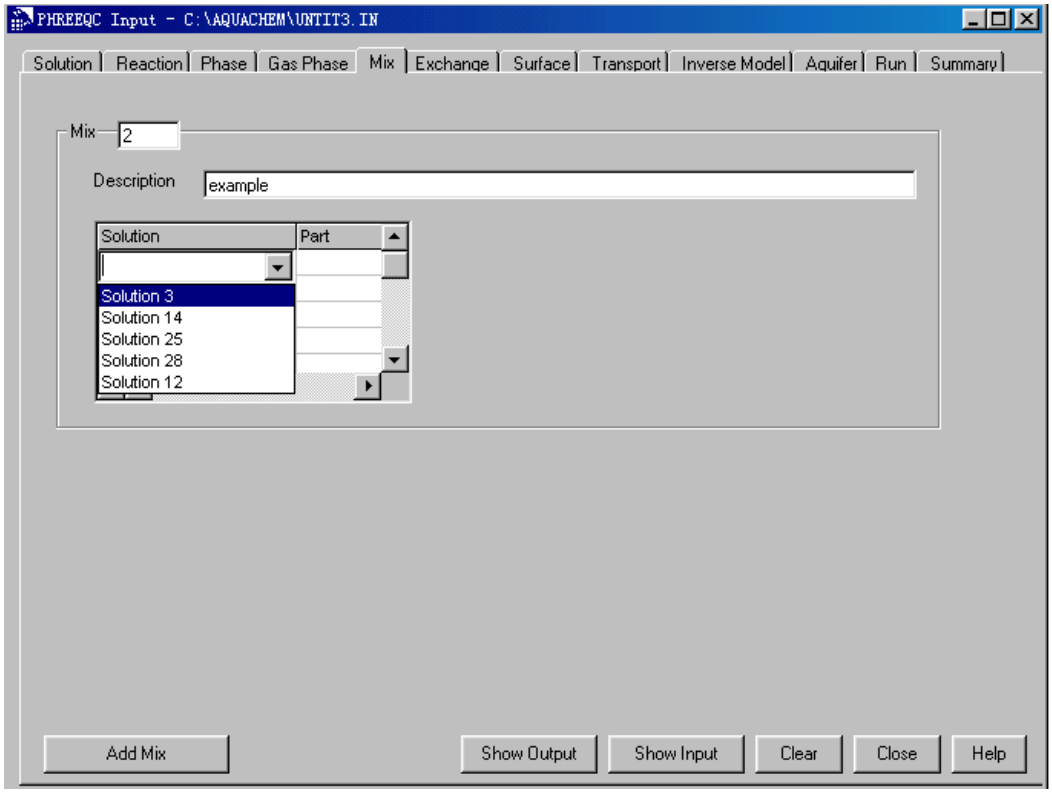


图 8-10　PHREEQC 的“Mix”输入窗口