

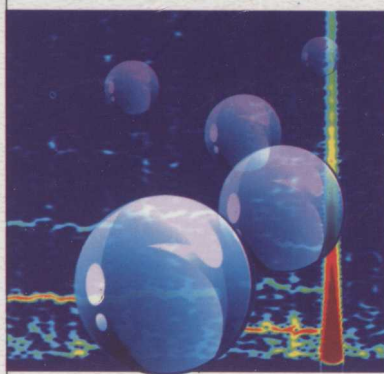


中国地质大学(武汉)实验教学系列教材
教育部“地下水污染与防治”国家精品课程建设项目

地下水污染 模拟指导书

DIXIASHUI WURAN MONI ZHIDAOSHU

高旭波
李义连 ©主 编
马 腾



中国地质大学出版社有限责任公司
ZHONGGUO DIZHI DAXUE CHUBANSHE YOUXIAN ZEREN GONGSI

X523
07

· 014036237

中国地质大学(武汉)实验教材项目
教育部“地下水污染与防治”国家精品课程建设项目

地下水污染模拟指导书

DIXIASHUI WURAN MONI ZHIDAOSHU

主 任 唐辉明

副主任 徐四平 殷坤龙

编委会委员:(以姓氏笔画顺序)

马 高旭波 李义连 马 腾 主编

李鹏飞 吴 昊 杨明星 杨坤光

卓成刚 罗 昊 饶建华 程永进

董元兴 曹 昊 戴光明



主 编 唐文幸 高旭波

主 编 唐文幸 高旭波

责任编辑:张林林

责任编辑:张林林

出版发行:中国地质大学出版社(武汉市洪山区喻家嘴388号) 电话:430074

E-mail: cnp @ cug.edu.cn 邮 政 电 话: (027) 87893280

Http://www.cugp.cug.edu.cn 邮 政 电 话: (027) 87893280

开 本: 787mm×1092mm 1/16 印 张: 10.5

版 次: 2013年12月第1次印刷 印 次: 2013年12月第1次印刷

定 价: 18.00元 每 册 18.00元



中国地质大学出版社有限责任公司
ZHONGGUO DIZHI DAXUE CHUBANSHE YOUXIAN ZEREN GONGSI



北航 C1723410

014038537

中国地质大学(武汉)图书馆

“国家地质图书馆”

图书在版编目(CIP)数据

地下水污染模拟指导书/高旭波,李义连,马腾主编. —武汉:中国地质大学出版社有限责任公司,2013.12

中国地质大学(武汉)实验教学系列教材

ISBN 978-7-5625-3115-9

I. 地…

II. ①高…②李…③马…

III. 地下水污染-模拟-高等学校-教学参考资料

IV. X523.06

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 121038 号

高旭波 李义连 马腾 主编



地下水污染模拟指导书

高旭波 李义连 马腾 主编

责任编辑:王凤林

责任校对:张咏梅

出版发行:中国地质大学出版社有限责任公司(武汉市洪山区鲁磨路388号)

邮编:430074

电话:(027)67883511

传真:(027)67883580

E-mail:cbb@cug.edu.cn

经销:全国新华书店

Http://www.cugp.cug.edu.cn

开本:787毫米×1092毫米 1/16

字数:190千字 印张:7.25

版次:2013年12月第1版

印次:2013年12月第1次印刷

印刷:武汉教文印刷厂

印数:1—1000册

ISBN 978-7-5625-3115-9

定价:18.00元

如有印装质量问题请与印刷厂联系调换

中国地质大学(武汉)实验教学系列教材

编委会名单

主任 唐辉明

副主任 徐四平 殷坤龙

编委会委员:(以姓氏笔画顺序)

马 腾 王 莉 牛瑞卿 石万忠 毕克成

李鹏飞 吴 立 何明中 杨明星 杨坤光

卓成刚 罗忠文 罗新建 饶建华 程永进

董元兴 曾健龙 蓝 翔 戴光明

前 言

地下水地球化学是在水文地质学、化学热力学和地球化学的基础上发展起来的一门学科,它是研究地下水中化学组分的形成原因,化学元素的迁移、转化、富集与分散规律的一门学科。地下水地球化学模型是地下水化学的重要组成部分,它用于模拟地下水系统中的地球化学过程,能反映出地下水系统中所发生的地球化学反应以及各种离子在地下水系统中的存在状态。30多年来得到了迅速的发展,对研究地下水中地球化学过程起了很大的促进作用,在地质学、材料学和环境科学等领域被广泛应用。

地下水化学成分的形成与演化、地下水污染防治与治理,其研究根本点均在于水-岩之间的地下水地球化学作用及其环境效应,即水岩相互作用及其环境效应。计算机仿真模拟技术的引入与应用大大加快了这一领域的研究进程和研究水平。通过对地下水及污染的仿真模拟,可以确定地下水系统中的水化学演化过程,揭示地球深部的水循环机理,也可以较好地优选治理方案,大大节省试验经费和试验时间。近几年中,在放射性废物处置、地下水中有有机污染影响及垃圾填埋场渗滤液迁移方面,水文地球化学模型得到了很好的应用。是研究天然和人为环境中地下水水质和污染防治的一种新方法和技术。

地下水地球化学模拟主要研究地下水、含水介质和污染组分之间的相互作用,可培养学生水环境污染治理的思维能力和创新能力。

本上机指导说明书适用于地下水污染、水文地球化学、水环境化学和环境地球化学等专业课程。

本上机指导说明书包含7个上机实验。使用 Windows 操作系统,使用软件为 Phreeqc Interactive 2.8。

本书由高旭波副教授编写,李义连教授和马腾教授统稿。本书编写过程中得到了王焰新教授的大力指导,在此致以诚挚的敬意!

由于作者本身的学识水平和实践经验有限,书中定有疏漏和不妥之处,敬请有关专家、学者及广大读者不吝赐教,以便进一步改进和提高。

实验四 地下水蒸发浓缩作用

目 录

第 1 章 PHREEQC 安装	(1)
1.1 系统运行环境	(1)
1.2 软件安装及配置	(1)
1.2.1 软件的获取	(1)
1.2.2 软件安装(以 PHREEQCI28 为例)	(1)
1.3 软件运行	(5)
1.4 软件卸载	(6)
第 2 章 程序界面	(7)
2.1 开始页面	(7)
2.2 菜单项	(7)
2.2.1 文件操作	(7)
2.2.2 编辑	(9)
2.2.3 视图界面	(9)
2.2.4 可选项	(10)
2.2.5 窗口	(10)
2.2.6 帮助菜单	(11)
第 3 章 关键词	(12)
3.1 初始溶液	(12)
3.2 正向与反向模拟	(12)
3.3 输出及数值模拟参数设置	(13)
3.4 化学及热力学数据	(13)
第 4 章 实 验	(14)
实验一 地下水中元素形态分布	(14)
4.1.1 案例分析	(14)
4.1.2 习题	(19)
实验二 地下水-矿物溶解实验	(20)
4.2.1 案例分析	(20)
4.2.2 习题	(23)
实验三 地下水混合实验	(24)
4.3.1 案例分析	(24)
4.3.2 习题	(33)
实验四 地下水蒸发浓缩作用	(35)

4.4.1	案例分析	(35)
4.4.2	习题	(44)
实验五	污染元素在矿物表面的络合	(46)
4.5.1	案例分析	(46)
4.5.2	习题	(49)
实验六	对流运移实验	(50)
4.6.1	案例分析	(50)
4.6.2	习题	(51)
实验七	反向模拟实验	(52)
4.7.1	案例分析	(52)
4.7.2	习题	(54)
第5章	习题解答提示	(56)
参考文献		(67)
附录:phreeqc.dat	热力学数据库	(68)

第 1 章 PHREEQC 安装

1.1 系统运行环境

PC 机: 各类 PC 品牌或兼容机, 586/166/32M 内存以上机型; 操作系统: Windows 95/98/ME/2000/xp, Windows NT 及以上。

1.2 软件安装及配置

1.2.1 软件的获取

PHREEQC 及其系列软件可以从 USGS 网站免费获取。其网址链接为:

<ftp://brrftp.cr.usgs.gov/pub/charlton/phreeqi/phreeqi-2.18.0-5314.msi>

1.2.2 软件安装(以 PHREEQI28 为例)

(1) 下载 PHREEQI28.exe 到电脑磁盘(图 1-1), 双击开始安装。

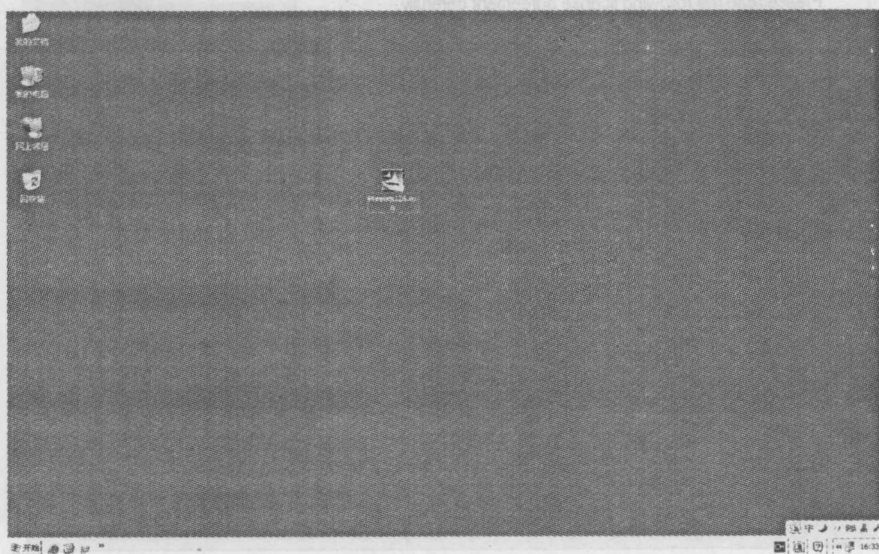


图 1-1 开始菜单

(2)单击下一步(Next),出现图 1-2 所示画面。

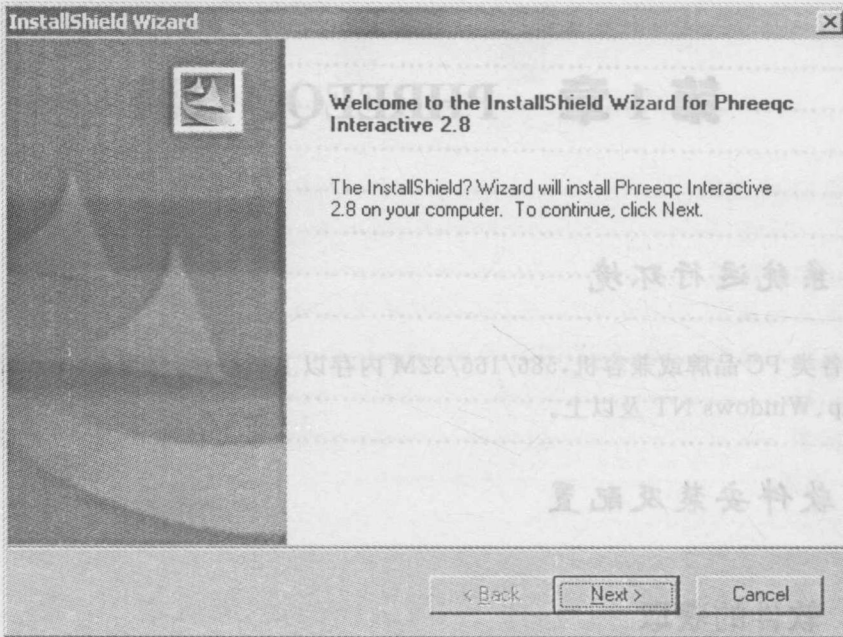


图 1-2 是否确定安装

(3)如图 1-3 所示为版权协议页面,选择“Yes”代表接受该协议,出现图 1-4 所示画面。

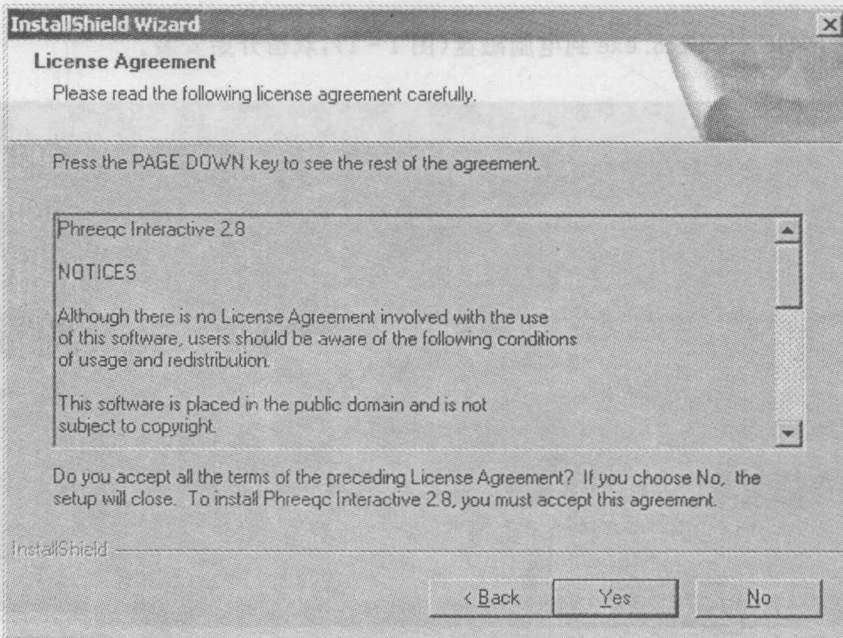


图 1-3 认证协议书

(4) 如图 1-4 所示,单击下一步(Next)继续安装;单击浏览(Browse)可人工输入或重新选择安装程序所在目录,如图 1-5 所示。

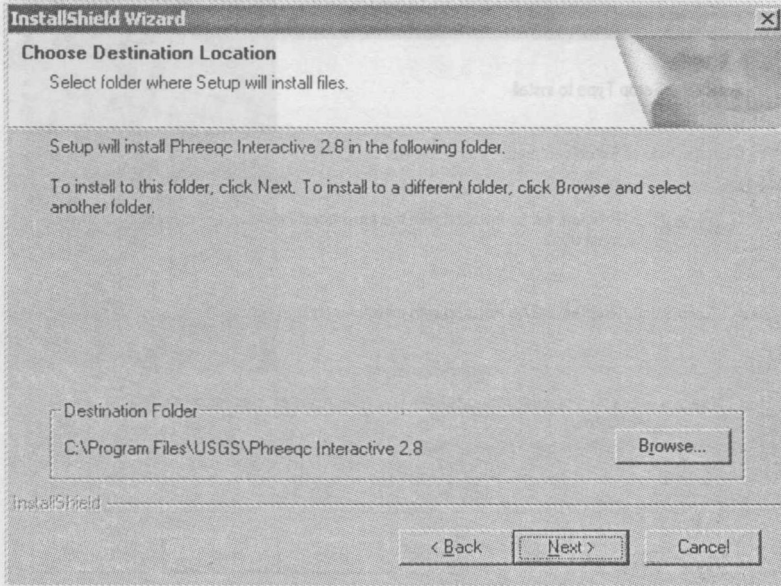


图 1-4 选择安装位置

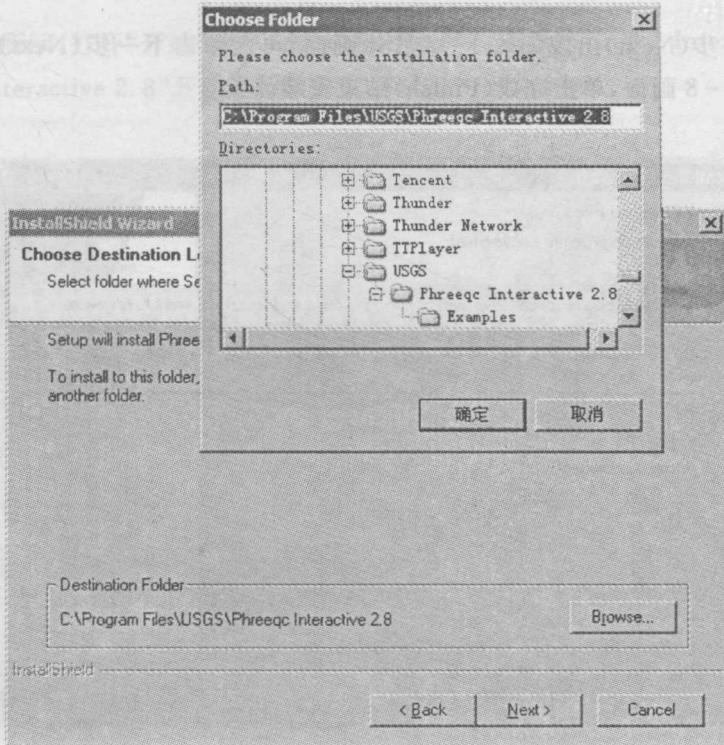


图 1-5 选择文件夹

(5)“确定”安装目录后,单击下一步(Next)出现如图 1-6 所示画面,选择“典型(Typical)”安装(注:Compact 为最小安装,Custom 为手动安装)。

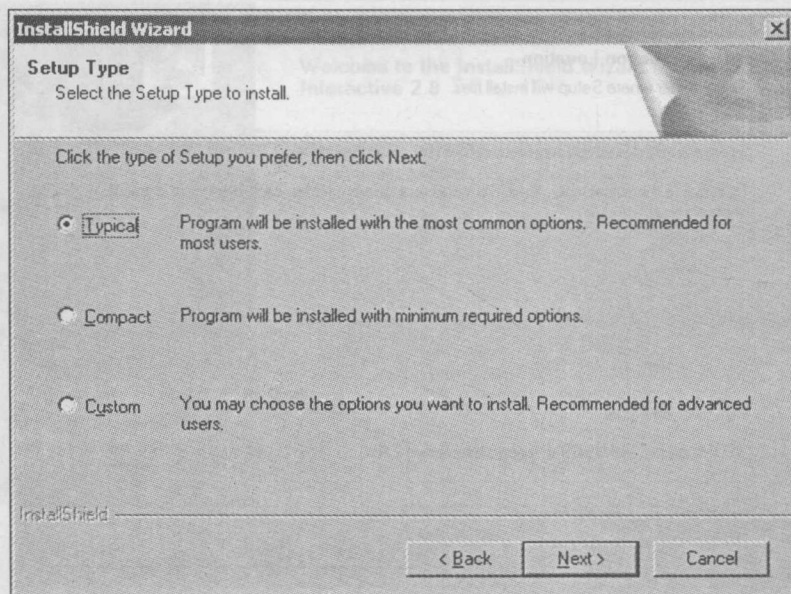


图 1-6 安装类型

(6)单击下一步(Next)出现如图 1-7 所示画面;再次单击下一步(Next),安装文件拷贝完成,出现如图 1-8 画面,单击完成(Finish)结束安装。

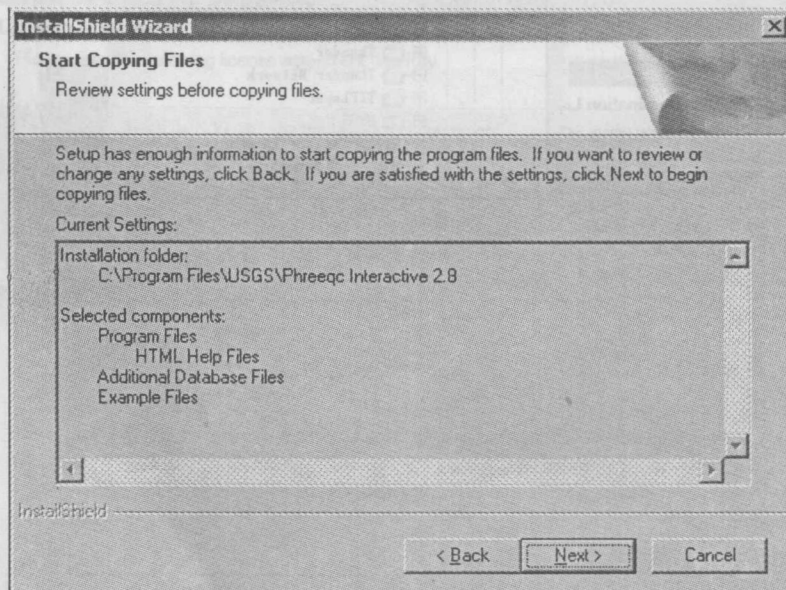


图 1-7 开始复制文件

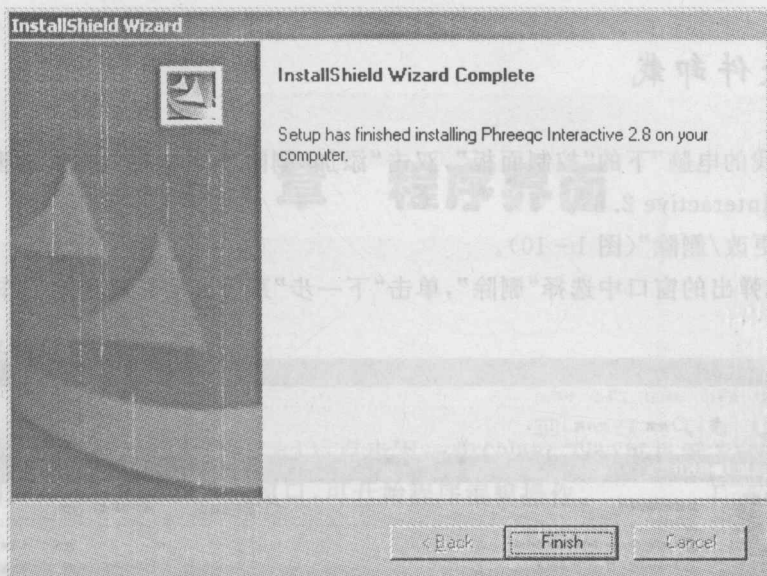


图 1-8 向导完成

1.3 软件运行

如图 1-9 所示,打开“开始”菜单,选择“所有程序”,选择“Phreeqc Interactive 2.8”,单击“Phreeqc Interactive 2.8”开始运行软件。

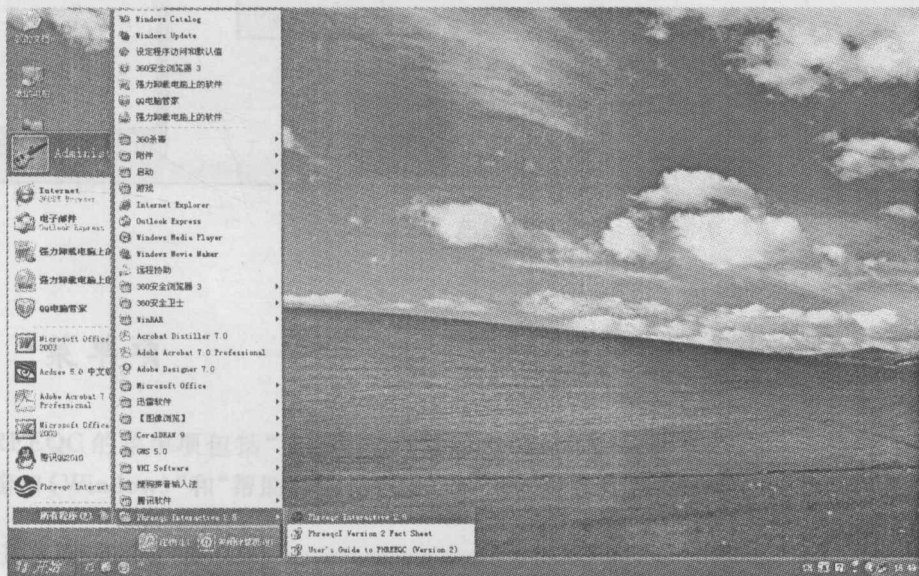


图 1-9 开始菜单

1.4 软件卸载

- (1) 打开“我的电脑”下的“控制面板”，双击“添加/删除程序”，在“添加/删除程序”窗口中找到“Phreeqc Interactive 2.8”。
- (2) 单击“更改/删除”(图 1-10)。
- (3) 在系统弹出的窗口中选择“删除”，单击“下一步”系统自动完成删除工作。

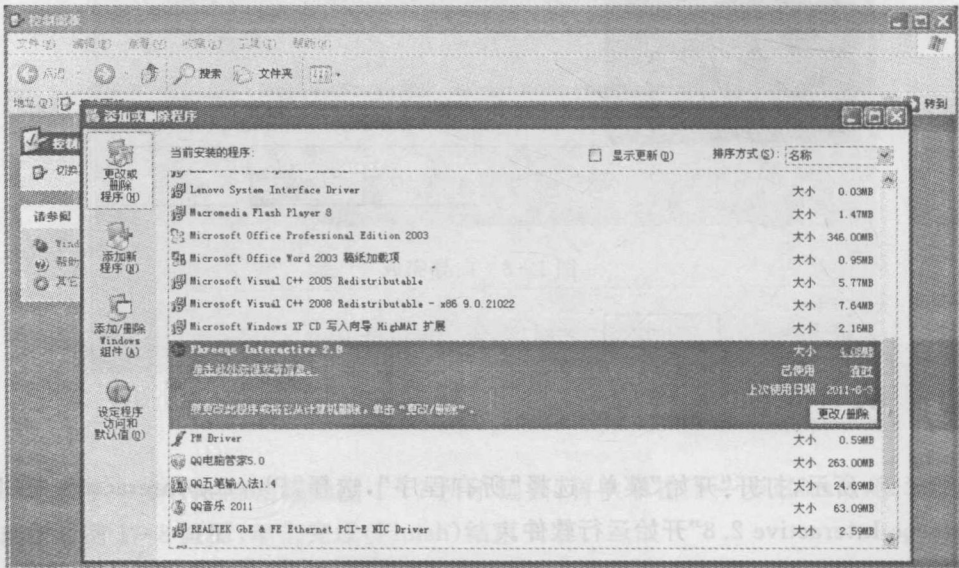


图 1-10 添加或删除程序

第 2 章 程序界面

2.1 开始页面

程序运行后,出现起始界面(图 2-1),点击下一步(Next Tip)可显示 PHREEQC 的每日技巧;点击关闭(Close),关闭该页面窗口,可开始程序编辑操作。

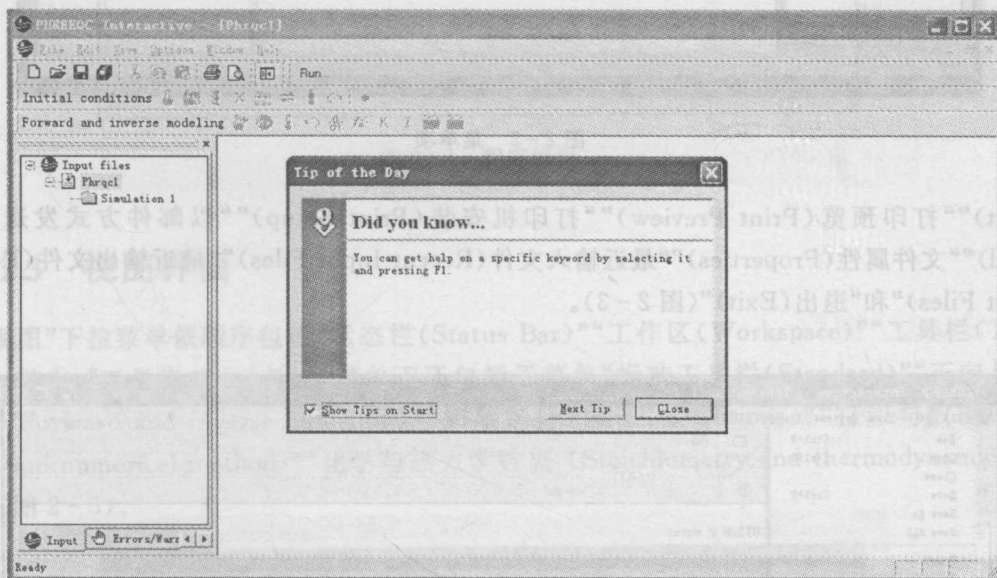


图 2-1 起始界面

2.2 菜单项

PHREEQC 的菜单项包括“文件(File)”“编辑(Edit)”“视图界面(View)”“可选项(Options)”“窗口(Window)”和“帮助(Help)”。

2.2.1 文件操作

“文件”下拉菜单依顺序包括“新建文件(New)”“打开已有文件(Open)”“关闭文件(Close)”“保存文件(Save)”“另存文件(Save As)”“保存全部文件(Save All)”“打印文件

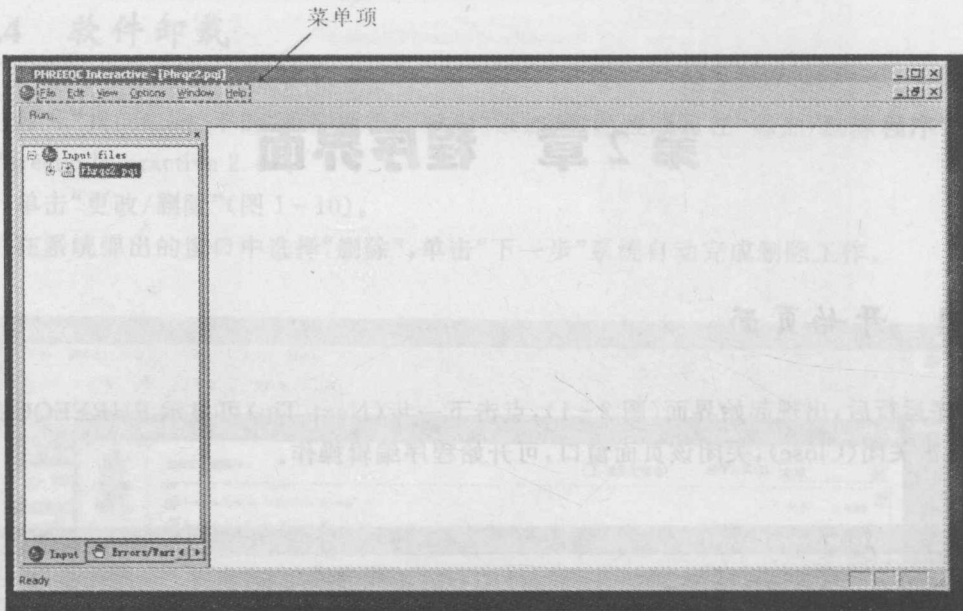


图 2-2 菜单项

(Print)”“打印预览 (Print Preview)”“打印机安装 (Print Setup)”“以邮件方式发送文件 (Send)”“文件属性 (Properties)”“最近输入文件 (Recent Input Files)”“最近输出文件 (Recent Output Files)”和“退出 (Exit)” (图 2-3)。

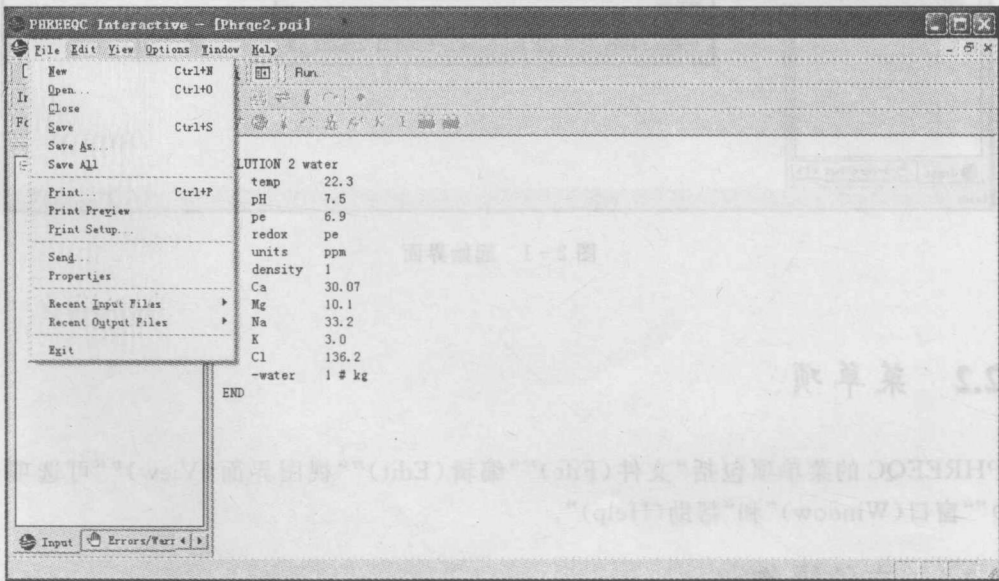


图 2-3 文件菜单

2.2.2 编辑

“编辑”下拉菜单依顺序包括“撤销(Undo)”“剪切(Cut)”“拷贝(Copy)”“粘贴(Paste)”“选择全部(Select All)”“查找(Find)”“查找下一处(Find Next)”和“替换(Replace)”(图 2-4)。

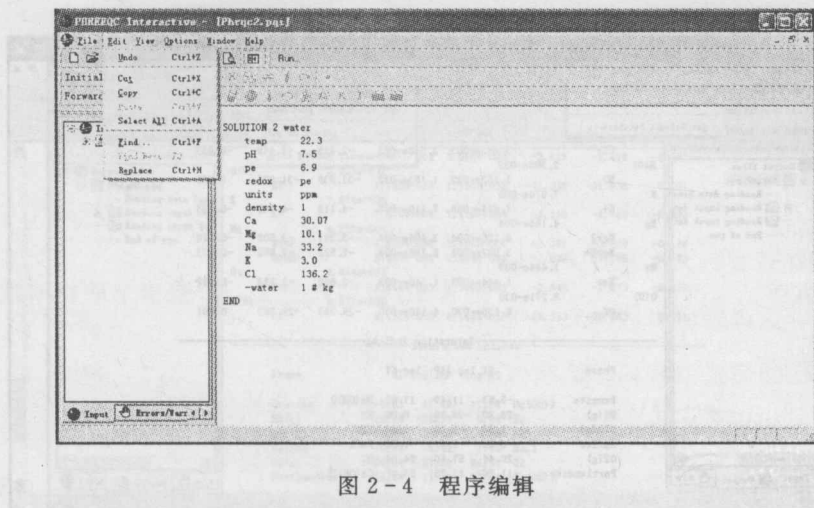


图 2-4 程序编辑

2.2.3 视图界面

“视图”下拉菜单依顺序包括“状态栏(Status Bar)”“工作区(Workspace)”“工具栏(Tool Bar)”。其中，“工具栏(Tool Bar)”菜单下还包括子菜单“标准工具栏(Standard)”“正向与反向模拟(Forward and inverse modeling)”“初始条件(Initial conditions)”“打印与数据输出(Print and numerical method)”“化学与热力学数据(Stoichiometry and thermodynamic data)”等(图 2-5)。

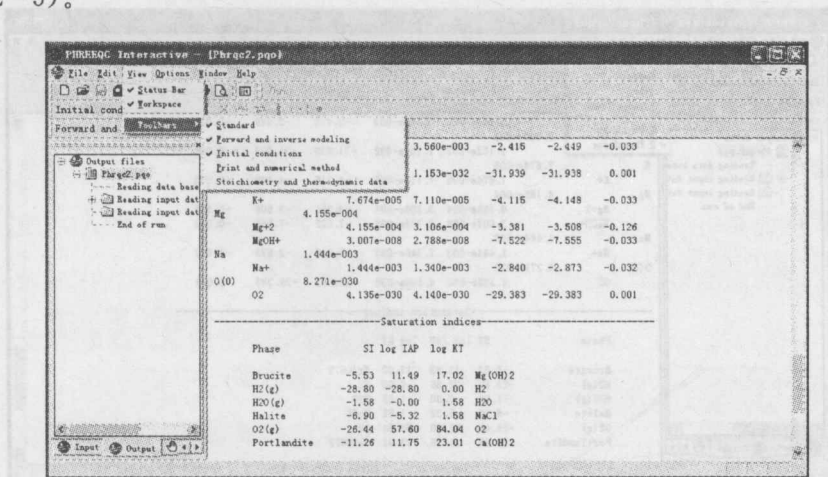


图 2-5 视图界面

2.2.4 可选项

“可选项”菜单包括“输入文件覆盖警告(Warn Overwrite Input)”“输出文件覆盖警告(Warn Overwrite Output)”和“设置内置数据库(Set Default Database, 默认为 PHREEQC.DAT)”三个选项(图 2-6)。

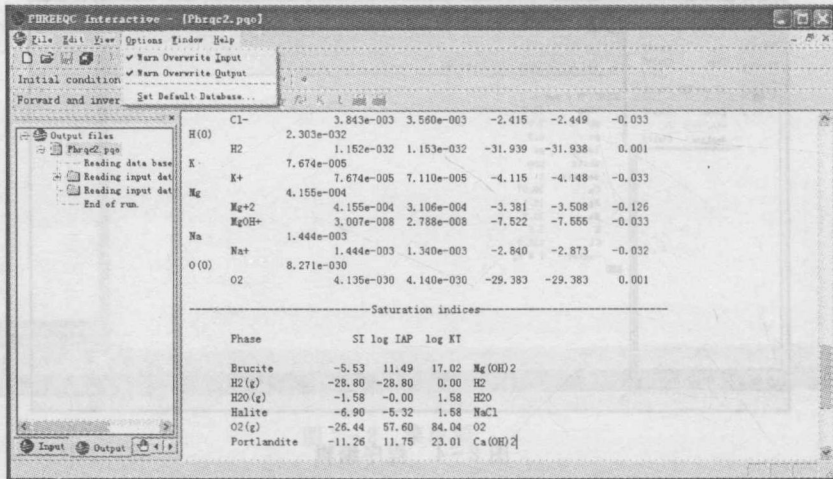


图 2-6 可选项

2.2.5 窗口

“窗口”菜单包括“新建窗口(New Window)”“层叠窗口(Cascade)”“并排窗口(Tile)”和“排列图标(Arrange Icons)”。该菜单最后为当前窗口打开的文件名列表(图 2-7)。

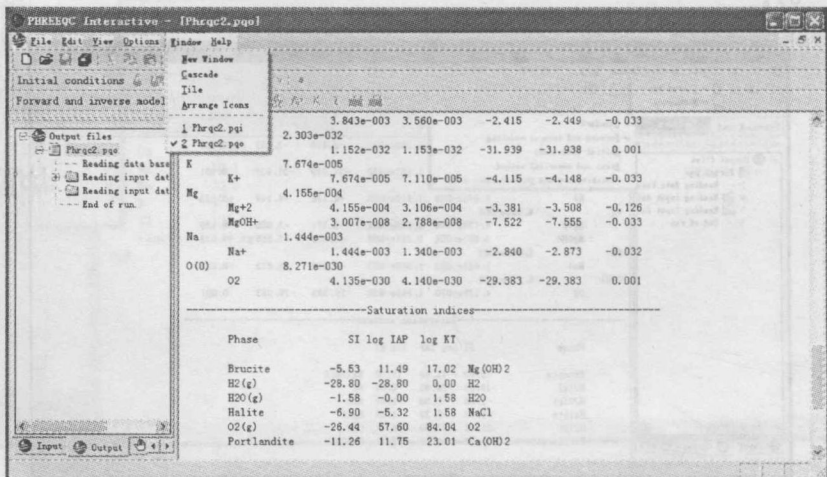


图 2-7 程序窗口