

Fichier Excel normé
Voir Excel

Lire un fichier de données

Lire uniquement les données

Enregistrer le tableau

Modèle Balance.xls
*.PRN (Cations)

DIONEX remplacer n.a. et ./.

Piper Riverside / Wilcox

Schöeller Berkaloff Statistique

Stiff Simulation pH

graphes binaires XY Phreeq

Korjinski C14

Groupe	Légende	Fond	Bord
1	BIGOLINO		
2	P2		
3	P4		
4	P5		
5	VESTA D		
6	D2 20966		
7	B524		

Approximation

- WATEQ Debye-Hückel
- Debye-Hückel simple
- Debye-Hückel
- Güntelberg
- Davies

Extraire Presse-papier

n	Nom	Libellé	Groupe	Piper	Schoeller	Stiff	XY	Korjinski	Phreeq	Stat	TDS	T°C	pH	c25°C	cCALC	cC±%	Bal=0%	Balance	refaire	Cations	Anions	Ca	Mg	Na	K
26	11	B2	1				oui	oui		oui	267			322	323	+0%	158 / -3%	-	3.24620	3.42360	46.11	9.23	3.73		
27	12	B501	3				oui	oui		oui	99			310	202	-21%	139 / +60%	- anions	3.04620	0.77216	42.32	8.55	4.77		
28	8	B	3				oui	oui		oui	90			293	190	-21%	145 / +65%	- anions	3.00490	0.62934	42.43	8.90	3.07		
29	9	PIAVE Bigolino	3				oui				150	10.8		418	308	-15%	229 / +61%	- anions	4.96150	1.21350	69.95	15.27	4.36		
30	13	P2	2				oui				433	12.8		423	525	+11%	273 / +0%	+	5.69560	5.69260	73.98	22.26	3.55		
31	14	P4	2				oui				468	12.9		515	560	+4%	289 / -1%	-	6.05440	6.18610	77.24	24.77	3.29		
32	20	P5	2				oui				501	12.5		547	596	+4%	316 / +0%	-	6.56350	6.56850	85.27	26.1	3.28		
33	27	14085	2				oui				500	12.3		573	611	+3%	325 / +3%	+	6.91010	6.50130	87.15	28.76	3.89		
34	18	12215												501	559	+5%	303 / -3%	-	5.95420	6.32550	73.69	24.27	5.99		
35	23	12200												434	243	-28%	304 / +96%	- anions	5.06580	0.09161	55.86	20.77	12.37		
36	21	18090												502	316	-23%	340 / +83%	- anions	6.15980	0.58412	66.4	30.72	6.75		
37	19	14643												505	321	-22%	299 / +74%	- anions	5.78010	0.87286	58	30.82	7.39		
38	16	12323	2				oui				435	12.3		452	506	+6%	307 / -2%	-	5.47560	5.73810	57.01	27.95	7.07		
39	4	14308	3				oui				103	16.5		426	260	-24%	187 / +62%	- anions	4.02780	0.95744	26.58	23.2	17.47		
40	5	12132	2				oui				400	16		537	552	+1%	224 / -2%	? Br -	5.59920	5.81270	47.06	32.26	12.8		
41	6	12090	2				oui				326	16		369	401	+4%	219 / -3%	-	4.12850	4.35020	34.44	20.23	16.25		
42	22	9088	3				oui				65	17.7		321	177	-29%	202 / +94%	- anions	3.41050	0.10500	20.9	16.05	23.1		
43	7	6084	3				oui				75	15.1		349	196	-28%	210 / +87%	- anions	3.69640	0.24844	27.72	19.74	15.01		
44	28	20242	2				oui				499	12.5		549	596	+4%	329 / +1%	+	6.61710	6.50060	84	26.41	5.06		
45	15	D VESTA	3				oui				164	12.6		534	349	-21%	303 / +68%	- anions	6.11630	1.14570	76.32	25.65	3.90		
46	25	4919	2				oui				370	13		541	503	-4%	323 / +19%	- anions	6.48590	4.44440	80.62	27.62	3.62		
47	26	20243	2				oui				311	12.2		322	366	+6%	224 / -2%	-	3.88920	4.02950	42.01	17.64	7.15		
48	24	20482	2				oui				292	12.4		317	350	+5%	203 / -2%	-	3.67270	3.81670	41.03	16.96	4.89		
49	17	4401	2				oui				279	13.5		336	346	+1%	223 / +5%	+	3.91640	3.51100	43.25	17.21	7.32		
50	1	20966 D2	2				oui				457	12.8		476	521	+5%	335 / -1%	-	5.78070	5.92040	62.12	29.34	5.44		
51	2	4568	2				oui				449	13.7		477	518	+4%	336 / +0%	-	5.80410	5.80600	60.6	30.43	5.77		
52	3	4132	2				oui				299	17.3		432	398	-4%	296 / +19%	- anions	5.17030	3.49510	48.84	26.38	12.2		
53	10	B524	2				oui				428	13.1		477	506	+3%	275 / -1%	-	5.41100	5.55890	76.82	16.62	4.23		
54	11	B2	2				oui				265	10.3		322	334	+2%	172 / +1%	+	3.49430	3.42550	52.25	8.48	3.80		
55	12	B501	3				oui				99	12.7		310	218	-17%	166 / +65%	- anions	3.45540	0.73963	50.28	8.44	5.25		
56	8	BRENTA	3				oui				88	7.9		293	198	-19%	163 / +69%	- anions	3.25080	0.58550	48.71	8.30	2.71		

1- Ouvrir un fichier de données

(oui) => envoi de l'échantillon vers phreeqc.exe Menu[Edition/Liste des indices...] => export des indices calculés par Phreeqc
DoubleClick pour valider ou dévalider
Click droit => choix multiple F9 => recopie de la valeur courante jusqu'à la fin

Fichier Excel normé
Voir Excel

Lire un fichier de données

Lire uniquement les données

Enregistrer le tableau

Modèle Balance.xls
*.PRN (Cations)
DIONEX remplacer n.a. et ./.

Piper Riverside / Wilcox

Schöeller Berkaloff Statistique

Stiff Simulation pH

graphes binaires XY Phreeq

Korjinski C14

Groupe	Légende	Fond	Bord
1	BIGOLINO	Orange	Marron
2	P2	Vert	Vert foncé
3	P4	Jaune	Olive
4	P5	Bleu	Bleu foncé
5	VESTA D	Rose	Violet
6	D2 20966	Rouge	Rouge foncé
7	B524	Cyan	Vert foncé

Approximation

- WATEQ Debye-Hückel
- Debye-Hückel simple
- Debye-Hückel
- Güntelberg
- Davies

Extraire Presse-papier

56 analyses D:_Chimie Fichiers envoyés par mail et ...\Mayer Venise\Venise+Avignon.dia

n	Nom	Libellé	Groupe	Piper	Schoeller	Stiff	XY	Korjinski	Phreeq	Stat	TDS	T°C	pH	c25°C	cCALC	cC±%	Bal=0%	Balance	refaire	Cations	Anions	Ca	Mg	Na	K
26	11	B2	1				oui	oui	oui	oui	267			322	323	+0%	158 / -3%	-	3.24620	3.42360	46.11	9.23	3.73		
27	12	B501	3				oui	oui	oui	oui	99			310	202	-21%	139 / +60%	- anions	3.04620	0.77216	42.32	8.55	4.77		
28	8	B	3				oui	oui	oui	oui	90			293	190	-21%	145 / +65%	- anions	3.00490	0.62934	42.43	8.90	3.07		
29	9	PIAVE Bigolino	3				oui		oui		150	10.8		418	308	-15%	229 / +61%	- anions	4.96150	1.21350	69.95	15.27	4.36		
30	13	P2	2				oui		oui		433	12.8		423	525	+11%	273 / +0%	+	5.69560	5.69260	73.98	22.26	3.55		
31	14	P4	2				oui				468	12.9		515	560	+4%	289 / -1%	-	6.05440	6.18610	77.24	24.77	3.29		
32	20	P5	2				oui				501	12.5		547	596	+4%	316 / +0%	-	6.56350	6.56850	85.27	26.1	3.28		
33	27	14085	2				oui				500	12.9		572	611	-3%	325 / +3%	+	6.91010	6.50130	87.15	28.76	3.89		
34	18	12215	2				oui										303 / -3%	-	5.95420	6.32550	73.69	24.27	5.99		
35	23	12200	3				oui										304 / +96%	- anions	5.06580	0.09161	55.86	20.77	12.37		
36	21	18090	3				oui										340 / +83%	- anions	6.15980	0.58412	66.4	30.72	6.75		
37	19	14643	3				oui										299 / +74%	- anions	5.78010	0.87286	58	30.82	7.39		
38	16	12323	2				oui										307 / -2%	-	5.47560	5.73810	57.01	27.95	7.07		
39	4	14308	3				oui										187 / +62%	- anions	4.02780	0.95744	26.58	23.2	17.47		
40	5	12132	2				oui										224 / -2%	? Br -	5.59920	5.81270	47.06	32.26	12.8		
41	6	12090	2				oui				326	16		363	401	+4%	219 / -3%	-	4.12850	4.35020	34.44	20.23	16.25		
42	22	9088	3				oui				65	17.7		321	177	-29%	202 / +94%	- anions	3.41050	0.10500	20.9	16.05	23.1		
43	7	6084	3				oui				75	15.1		349	196	-28%	210 / +87%	- anions	3.69640	0.24844	27.72	19.74	15.01		
44	28	20242	2				oui				499	12.5		549	596	+4%	329 / +1%	+	6.61710	6.50060	84	26.41	5.06		
45	15	D VESTA	3				oui				164	12.6		534	349	-21%	303 / +68%	- anions	6.11630	1.14570	76.32	25.65	3.90		
46	25	4919	2				oui				370	13		541	503	-4%	323 / +19%	- anions	6.48590	4.44440	80.62	27.62	3.62		
47	26	20243	2				oui				311	12.2		322	366	+6%	224 / -2%	-	3.88920	4.02950	42.01	17.64	7.15		
48	24	20482	2				oui				292	12.4		317	350	+5%	203 / -2%	-	3.67270	3.81670	41.03	16.96	4.89		
49	17	4401	2				oui				279	13.5		336	346	+1%	223 / +5%	+	3.91640	3.51100	43.25	17.21	7.32		
50	1	20966 D2	2				oui				457	12.8		476	521	+5%	335 / -1%	-	5.78070	5.92040	62.12	29.34	5.44		
51	2	4568	2				oui				449	13.7		477	518	+4%	336 / +0%	-	5.80410	5.80600	60.6	30.43	5.77		
52	3	4132	2				oui				299	17.3		432	398	-4%	296 / +19%	- anions	5.17030	3.49510	48.84	26.38	12.2		
53	10	B524	2				oui				428	13.1		477	506	+3%	275 / -1%	-	5.41100	5.55890	76.82	16.62	4.23		
54	11	B2	2				oui				265	10.3		322	334	+2%	172 / +1%	+	3.49430	3.42550	52.25	8.48	3.80		
55	12	B501	3				oui				99	12.7		310	218	-17%	166 / +65%	- anions	3.45540	0.73963	50.28	8.44	5.25		
56	8	BRENTA	3				oui				88	7.9		293	198	-19%	163 / +69%	- anions	3.25080	0.58550	48.71	8.30	2.71		

2- double-click dans la colonne Phreeq pour mettre la valeur à <oui>

Rechercher dans Nom/Libellé

Valeur courante Nouvelle valeur

Modification par cellule Saisie globale

cCALC=f(Tc) Tc = 25 °C => Recalculer

Quitter

(oui) => envoi de l'échantillon vers phreeqc.exe Menu[Edition/Liste des indices...] => export des indices calculés par Phreeqc
DoubleClick pour valider ou dévalider
Click droit => choix multiple F9 => recopie de la valeur courante jusqu'à la fin

Facteurs correctifs
 Calcul HCO3-
 Calcul de Al 3+

Fichier Excel normé

Voir Excel

Lire un fichier de données

Lire uniquement les données

Enregistrer le tableau

Modèle Balance.xls

*.PRN (Cations)

DIONEX remplacer n.a. et ./.

Piper

Schöeller Berkaloff

Stiff

graphes binaires XY

Korjinski

Riverside / Wilcox

Statistique

Simulation pH

Phreeq

Groupe	Légende	Fond	Bord
1	BIGOLINO		
2	P2		
3	P4		
4	P5		
5	VESTA D		
6	D2 20966		

Approximation

- WATEQ Debye-Hückel
- Debye-Hückel simple
- Debye-Hückel
- Güntelberg
- Davies

Extraire Presse-papier

3- Cliquer sur le bouton Phreeq

n	Nom	Libellé									c25°C	cCALC	cC±%	Bal=0%	Balance	refaire	Cations	Anions	Ca	Mg	Na	K
26	11	B2	1					oui	oui	oui	267		322	323	+0%	158 / -3%	-	3.24620	3.42360	46.11	9.23	3.73
27	12	B501	3					oui	oui	oui	99		310	202	-21%	139 / +60%	- anions	3.04620	0.77216	42.32	8.55	4.77
28	8	B	3					oui	oui	oui	90		293	190	-21%	145 / +65%	- anions	3.00490	0.62934	42.43	8.90	3.07
29	9	PIAVE Bigolino	3					oui		oui	150	10.8	418	308	-15%	229 / +61%	- anions	4.96150	1.21350	69.95	15.27	4.36
30	13	P2	2					oui		oui	433	12.8	423	525	+11%	273 / +0%	+	5.69560	5.69260	73.98	22.26	3.55
31	14	P4	2					oui			468	12.9	515	560	+4%	289 / -1%	-	6.05440	6.18610	77.24	24.77	3.29
32	20	P5	2					oui			501	12.5	547	596	+4%	316 / +0%	-	6.56350	6.56850	85.27	26.1	3.28
33	27	14085	2					oui			500	12.3	573	611	+3%	325 / +3%	+	6.91010	6.50130	87.15	28.76	3.89
34	18	12215	2					oui			471	13.6	501	559	+5%	303 / -3%	-	5.95420	6.32550	73.69	24.27	5.99
35	23	12200	3					oui			94	13.8	434	243	-28%	304 / +96%	- anions	5.06580	0.09161	55.86	20.77	12.37
36	21	18090	3					oui			132	13.3	502	316	-23%	340 / +83%	- anions	6.15980	0.58412	66.4	30.72	6.75
37	19	14643	3					oui			129	13.7	505	321	-22%	299 / +74%	- anions	5.78010	0.87286	58	30.82	7.39
38	16	12323	2					oui			435	12.3	452	506	+6%	307 / -2%	-	5.47560	5.73810	57.01	27.95	7.07
39	4	14308	3					oui			103	16.5	426	260	-24%	187 / +62%	- anions	4.02780	0.95744	26.58	23.2	17.47
40	5	12132	2					oui			400	16	537	552	+1%	224 / -2%	? Br -	5.59920	5.81270	47.06	32.26	12.8
41	6	12090	2					oui			326	16	369	401	+4%	219 / -3%	-	4.12850	4.35020	34.44	20.23	16.25
42	22	9088	3					oui			65	17.7	321	177	-29%	202 / +94%	- anions	3.41050	0.10500	20.9	16.05	23.1
43	7	6084	3					oui			75	15.1	349	196	-28%	210 / +87%	- anions	3.69640	0.24844	27.72	19.74	15.01
44	28	20242	2					oui			499	12.5	549	596	+4%	329 / +1%	+	6.61710	6.50060	84	26.41	5.06
45	15	D VESTA	3					oui			164	12.6	534	349	-21%	303 / +68%	- anions	6.11630	1.14570	76.32	25.65	3.90
46	25	4919	2					oui			370	13	541	503	-4%	323 / +19%	- anions	6.48590	4.44440	80.62	27.62	3.62
47	26	20243	2					oui			311	12.2	322	366	+6%	224 / -2%	-	3.88920	4.02950	42.01	17.64	7.15
48	24	20482	2					oui			292	12.4	317	350	+5%	203 / -2%	-	3.67270	3.81670	41.03	16.96	4.89
49	17	4401	2					oui			279	13.5	336	346	+1%	223 / +5%	+	3.91640	3.51100	43.25	17.21	7.32
50	1	20966 D2	2					oui			457	12.8	476	521	+5%	335 / -1%	-	5.78070	5.92040	62.12	29.34	5.44
51	2	4568	2					oui			449	13.7	477	518	+4%	336 / +0%	-	5.80410	5.80600	60.6	30.43	5.77
52	3	4132	2					oui			299	17.3	432	398	-4%	296 / +19%	- anions	5.17030	3.49510	48.84	26.38	12.2
53	10	B524	2					oui			428	13.1	477	506	+3%	275 / -1%	-	5.41100	5.55890	76.82	16.62	4.23
54	11	B2	2					oui			265	10.3	322	334	+2%	172 / +1%	+	3.49430	3.42550	52.25	8.48	3.80
55	12	B501	3					oui			99	12.7	310	218	-17%	166 / +65%	- anions	3.45540	0.73963	50.28	8.44	5.25
56	8	BRENTA	3					oui			88	7.9	293	198	-19%	163 / +69%	- anions	3.25080	0.58550	48.71	8.30	2.71

Rechercher dans Nom/Libellé

Valeur courante Nouvelle valeur

cCALC=f(Tc) Tc = 25 °C => Recalculer

Modifier par cellule Saisie globale

Envoi vers Phreeq des échantillons dont la valeur est (oui) dans la colonne [Phreeq]
 Dans la colonne [Nom], un clic droit permet d'envoyer le seul échantillon courant

Facteurs correctifs

Calcul HCO3-

Calcul de Al 3+

Fichier Excel normé
Voir Excel

Lire un fichier de données

Lire uniquement les données

Enregistrer le tableau

Modèle Balance.xls
*.PRN (Cations)

DIONEX remplacer n.a. et ./.

Piper Riverside / Wilcox

Schöeller Berkaloff Statistique

Stiff Simulation pH

graphes binaires XY Phreeq

Korjinski C14

Groupe	Légende	Fond	Bord
1	BIGOLINO		
2	P2		
3	P4		
4	P5		
5	VESTA D		
6	D2 20966		
7	B524		

Approximation

- WATEQ Debye-Hückel
- Debye-Hückel simple
- Debye-Hückel
- Güntelberg
- Davies

Extraire Presse-papier

n	Nom	Libellé	Groupe	Piper	Schoeller	Stiff	XY	Korjinski	Phreeq	Stat	TDS	T°C	pH	c25°C	cCALC	cC±%	Bal=0%	Balance	refaire	Cations	Anions	Ca	Mg	Na	K
26	11	B2	1				oui	oui		oui	267			322	323	+0%	158 / -3%	-	3.24620	3.42360	46.11	9.23	3.73		
27	12	B501	3				oui	oui	oui	oui	99			310	202	-21%	139 / +60%	- anions	3.04620	0.77216	42.32	8.55	4.77		
28	8	B	3				oui	oui	oui	oui	90			293	190	-21%	145 / +65%	- anions	3.00490	0.62934	42.43	8.90	3.07		
29	9	PIAVE Bigolino	3				oui		oui		150	10.8		418	308	-15%	229 / +61%	- anions	4.96150	1.21350	69.95	15.27	4.36		
30	13	P2	2				oui		oui		433	12.8		423	525	+11%	273 / +0%	+	5.69560	5.69260	73.98	22.26	3.55		
31	14	P4	2				oui				468	12.9		515	560	+4%	289 / -1%	-	6.05440	6.18610	77.24	24.77	3.29		
32	20	P5	2				oui				501	12.5		547	596	+4%	316 / +0%	-	6.56350	6.56850	85.27	26.1	3.28		
33	27	14085	2				oui				500	12.3		573	611	+3%	325 / +3%	+	6.91010	6.50130	87.15	28.76	3.89		
34	18	12215	2													-5%	303 / -3%	-	5.95420	6.32550	73.69	24.27	5.99		
35	23	12200	3													3%	304 / +96%	- anions	5.06580	0.09161	55.86	20.77	12.37		
36	21	18090	3													3%	340 / +83%	- anions	6.15980	0.58412	66.4	30.72	6.75		
37	19	14643	3													2%	299 / +74%	- anions	5.78010	0.87286	58	30.82	7.39		
38	16	12323	2													2%	307 / -2%	-	5.47560	5.73810	57.01	27.95	7.07		
39	4	14308	3													1%	187 / +62%	- anions	4.02780	0.95744	26.58	23.2	17.47		
40	5	12132	2													2%	224 / -2%	? Br -	5.59920	5.81270	47.06	32.26	12.8		
41	6	12090	2													2%	219 / -3%	-	4.12850	4.35020	34.44	20.23	16.25		
42	22	9088	3													3%	202 / +94%	- anions	3.41050	0.10500	20.9	16.05	23.1		
43	7	6084	3													3%	210 / +87%	- anions	3.69640	0.24844	27.72	19.74	15.01		
44	28	20242	2													2%	329 / +1%	+	6.61710	6.50060	84	26.41	5.06		
45	15	D VESTA	3													2%	303 / +68%	- anions	6.11630	1.14570	76.32	25.65	3.90		
46	25	4919	2				oui									1%	323 / +19%	- anions	6.48590	4.44440	80.62	27.62	3.62		
47	26	20243	2				oui									2%	224 / -2%	-	3.88920	4.02950	42.01	17.64	7.15		
48	24	20482	2				oui									7%	203 / -2%	-	3.67270	3.81670	41.03	16.96	4.89		
49	17	4401	2				oui				275	13.5		336	346	+1%	223 / +5%	+	3.91640	3.51100	43.25	17.21	7.32		
50	1	20966 D2	2				oui				457	12.8		476	521	+5%	335 / -1%	-	5.78070	5.92040	62.12	29.34	5.44		
51	2	4568	2				oui				449	13.7		477	518	+4%	336 / +0%	-	5.80410	5.80600	60.6	30.43	5.77		
52	3	4132	2				oui				299	17.3		432	398	-4%	296 / +19%	- anions	5.17030	3.49510	48.84	26.38	12.2		
53	10	B524	2				oui				428	13.1		477	506	+3%	275 / -1%	-	5.41100	5.55890	76.82	16.62	4.23		
54	11	B2	2				oui				265	10.3		322	334	+2%	172 / +1%	+	3.49430	3.42550	52.25	8.48	3.80		
55	12	B501	3				oui				99	12.7		310	218	-17%	166 / +65%	- anions	3.45540	0.73963	50.28	8.44	5.25		
56	8	BRENTA	3				oui				88	7.9		293	198	-19%	163 / +69%	- anions	3.25080	0.58550	48.71	8.30	2.71		

envoi vers PHREEQ

Voulez-vous traiter l'ensemble des échantillons marqués par (oui) dans la colonne [Phreeq] ?

Cliquez ici

Rechercher dans Nom/Libellé

Valeur courante Nouvelle valeur

= cCALC=f(Tc) Tc = 25 °C => Recalculer

<< précédent suivant >> Modification par cellule Saisie globale

Envoi vers Phreeq des échantillons dont la valeur est (oui) dans la colonne [Phreeq]
Dans la colonne [Nom], un clic droit permet d'envoyer le seul échantillon courant

Facteurs correctifs Calcul HCO3- Calcul de Al 3+

Fichier Excel normé
Voir Excel
Lire un fichier de données
Lire uniquement les données
Enregistrer le tableau
Modèle Balance.xls
*.PRN (Cations)
DIONEX remplacer n.a. et ./.

Piper
Schöeller Berkaloff
Stiff
graphes binaires XY
Korjinski

Riverside / Wilcox
Statistique
Simulation pH
Phreeq
C14

Phreeq

Indices de saturation directement copiés dans le presse-papier
 Ouverture des trois fichiers

Création de trois fichiers texte
1-fichier de sortie de Phreeq
2-fichier résumé
3-fichier des indices de saturation copié dans le presse-papier

la liste des indices exportés est modifiable dans Menu[Edition/Liste ...]

Traiter

n	Nom	Libellé	Groupe	Piper	Schoeller	Stiff	XY	ons	Anions	Ca	Mg	Na	K						
26	11	B2	1				oui	620	3.42360	46.11	9.23	3.73							
27	12	B501	3				oui	620	0.77216	42.32	8.55	4.77							
28	8	B	3				oui	490	0.62934	42.43	8.90	3.07							
29	9	PIAVE Bigolino	3				oui	150	1.21350	69.95	15.27	4.36							
30	13	P2	2				oui	560	5.69260	73.98	22.26	3.55							
31	14	P4	2				oui	440	6.18610	77.24	24.77	3.29							
32	20	P5	2				oui	350	6.56850	85.27	26.1	3.28							
33	27	14085	2				oui	010	6.50130	87.15	28.76	3.89							
34	18	12215	2				oui	420	6.32550	73.69	24.27	5.99							
35	23	12200	3				oui	300	5.86580	0.09161	55.86	20.77	12.37						
36	21	18090	3				oui	132	13.3	502	316	-23%	340 / +83%	- anions	6.15980	0.58412	66.4	30.72	6.75
37	19	14643	3				oui	129	13.7	505	321	-22%	299 / +74%	- anions	5.78010	0.87286	58	30.82	7.39
38	16	12323	2				oui	435	12.3	452	506	+6%	307 / -2%	-	5.47560	5.73810	57.01	27.95	7.07
39	4	14308	3				oui	103	16.5	426	260	-24%	187 / +62%	- anions	4.02780	0.95744	26.58	23.2	17.47
40	5	12132	2				oui	400	16	537	552	+1%	224 / -2%	? Br -	5.59920	5.81270	47.06	32.26	12.8
41	6	12090	2				oui	326	16	369	401	+4%	219 / -3%	-	4.12850	4.35020	34.44	20.23	16.25
42	22	9088	3				oui	65	17.7	321	177	-29%	202 / +94%	- anions	3.41050	0.10500	20.9	16.05	23.1
43	7	6084	3				oui	75	15.1	349	196	-28%	210 / +87%	- anions	3.69640	0.24844	27.72	19.74	15.01
44	28	20242	2				oui	499	12.5	549	596	+4%	329 / +1%	+	6.61710	6.50060	84	26.41	5.06
45	15	D VESTA	3				oui	164	12.6	534	349	-21%	303 / +68%	- anions	6.11630	1.14570	76.32	25.65	3.90
46	25	4919	2				oui	370	13	541	503	-4%	323 / +19%	- anions	6.48590	4.44440	80.62	27.62	3.62
47	26	20243	2				oui	311	12.2	322	366	+6%	224 / -2%	-	3.88920	4.02950	42.01	17.64	7.15
48	24	20482	2				oui	292	12.4	317	350	+5%	203 / -2%	-	3.67270	3.81670	41.03	16.96	4.89
49	17	4401	2				oui	279	13.5	336	346	+1%	223 / +5%	+	3.91640	3.51100	43.25	17.21	7.32
50	1	20966 D2	2				oui	457	12.8	476	521	+5%	335 / -1%	-	5.78070	5.92040	62.12	29.34	5.44
51	2	4568	2				oui	449	13.7	477	518	+4%	336 / +0%	-	5.80410	5.80600	60.6	30.43	5.77
52	3	4132	2				oui	299	17.3	432	398	-4%	296 / +19%	- anions	5.17030	3.49510	48.84	26.38	12.2
53	10	B524	2				oui	428	13.1	477	506	+3%	275 / -1%	-	5.41100	5.55890	76.82	16.62	4.23
54	11	B2	2				oui	265	10.3	322	334	+2%	172 / +1%	+	3.49430	3.42550	52.25	8.48	3.80
55	12	B501	3				oui	99	12.7	310	218	-17%	166 / +65%	- anions	3.45540	0.73963	50.28	8.44	5.25
56	8	BRENTA	3				oui	88	7.9	293	198	-19%	163 / +69%	- anions	3.25080	0.58550	48.71	8.30	2.71

**Choisir éventuellement
-> Indices de saturations directement copiés
dans le presse-papier
Puis cliquer sur <Traiter>**

Rechercher dans Nom/Libellé

Valeur courante Nouvelle valeur

Modification par cellule Saisie globale

cCALC=f(Tc) Tc = 25 °C => Recalculer

Quitter

Fait partie ou non du calcul de corrélation linéaire
DoubleClick : oui ou ()
Click droit => choix multiple F9 => recopie de la valeur courante jusqu'à la fin

Facteurs correctifs
 Calcul HCO3-
 Calcul de Al 3+

Fichier Excel normé
Voir Excel
Lire un fichier de données
Lire uniquement les données
Enregistrer le tableau
Modèle Balance.xls
*.PRN (Cations)
DIONEX remplacer n.a. et ./.

Piper
Schöeller Berkaloff
Stiff
graphes binaires XY
Korjinski

Riverside / Wilcox
Statistique
Simulation pH
Phreeq
C14

Phreeq

Indices de saturation directement copiés dans le presse-papier
 Ouverture des trois fichiers

Création de trois fichiers texte
1-fichier de sortie de Phreeq
2-fichier résumé
3-fichier des indices de saturation copié dans le presse-papier

la liste des indices exportés est modifiable dans Menu[Edition/Liste ...]

Traiter

n	Nom	Libellé	Groupe	Piper	Schoeller
26	11	B2	1		
27	12	B501	3		
28	8	B	3		
29	9	PIAVE Bigolino	3		
30	13	P2	2		
31	14	P4	2		
32	20	P5	2		
33	27	14085	2		
34	18	12215	2		
35	23	12200	3		
36	21	18090	3		
37	19	14643	3		
38	16	12323	2		
39	4	14308	3		
40	5	12132	2		
41	6	12090	2		
42	22	9088	3		
43	7	6084	3		
44	28	20242	2		
45	15	D VESTA	3		
46	25	4919	2		
47	26	20243	2		
48	24	20482	2		
49	17	4401	2		
50	1	20966 D2	2		
51	2	4568	2		
52	3	4132	2		
53	10	B524	2		
54	11	B2	2		
55	12	B501	3		
56	8	BRENTA	3		

Choix de la base de données thermodynamiques

Regarder dans : Diagrammes

- llnl.dat
- minteq.dat
- phreeqc.dat
- Wateq4f.dat

Nom du fichier : **phreeqc.dat** Ouvrir

Fichiers de type : Thermodynamique(*.dat) Annuler

Cliquer sur <Ouvrir> pour valider le choix

Bal=0%	Balance	refaire	Cations	Anions	Ca	Mg	Na	K
158 / -3%	-		3.24620	3.42360	46.11	9.23	3.73	
139 / +60%	- anions		3.04620	0.77216	42.32	8.55	4.77	
145 / +65%	- anions		3.00490	0.62934	42.43	8.90	3.07	
229 / +61%	- anions		4.96150	1.21350	69.95	15.27	4.36	
273 / +0%	+		5.69560	5.69260	73.98	22.26	3.55	
289 / -1%	-		6.05440	6.18610	77.24	24.77	3.29	
316 / +0%	-		6.56350	6.56850	85.27	26.1	3.28	
325 / +3%	+		6.91010	6.50130	87.15	28.76	3.89	
303 / -3%	-		5.95420	6.32550	73.69	24.27	5.99	
304 / +96%	- anions		5.06580	0.09161	55.86	20.77	12.37	
340 / +83%	- anions		6.15980	0.58412	66.4	30.72	6.75	
299 / +74%	- anions		5.78010	0.87286	58	30.82	7.39	
307 / -2%	-		5.47560	5.73810	57.01	27.95	7.07	
187 / +62%	- anions		4.02780	0.95744	26.58	23.2	17.47	
224 / -2%	? Br -		5.59920	5.81270	47.06	32.26	12.8	
219 / -3%	-		4.12850	4.35020	34.44	20.23	16.25	
202 / +94%	- anions		3.41050	0.10500	20.9	16.05	23.1	
210 / +87%	- anions		3.69640	0.24844	27.72	19.74	15.01	
329 / +1%	+		6.61710	6.50060	84	26.41	5.06	
303 / +68%	- anions		6.11630	1.14570	76.32	25.65	3.90	
323 / +19%	- anions		6.48590	4.44440	80.62	27.62	3.62	
224 / -2%	-		3.88920	4.02950	42.01	17.64	7.15	
203 / -2%	-		3.67270	3.81670	41.03	16.96	4.89	
223 / +5%	+		3.91640	3.51100	43.25	17.21	7.32	
335 / -1%	-		5.78070	5.92040	62.12	29.34	5.44	
336 / +0%	-		5.80410	5.80600	60.6	30.43	5.77	
296 / +19%	- anions		5.17030	3.49510	48.84	26.38	12.2	
275 / -1%	-		5.41100	5.55890	76.82	16.62	4.23	
172 / +1%	+		3.49430	3.42550	52.25	8.48	3.80	
166 / +65%	- anions		3.45540	0.73963	50.28	8.44	5.25	
163 / +69%	- anions		3.25080	0.58550	48.71	8.30	2.71	

Rechercher dans Nom/Libellé

Valeur courante Nouvelle valeur

cCALC=f(Tc) Tc = 25 °C => Recalculer Quitter

<< précédent suivant >>

Modification par cellule Saisie globale

Copie tout le tableau dans le presse-papier
Pour ne copier qu'une partie, sélectionnez les cellules puis Menu/Edition/Copier... ou [Ctrl+C]
les entêtes de colonnes ainsi que n* et Nom seront également copiés pour s'y retrouver'

Facteurs correctifs
Calcul HCO3-
Calcul de Al 3+

Fichier Excel normé	Piper	Riverside / Wilcox	Groupe	Légende	Fond	Bord
Voir Excel	Schöeller Berkaloff	Statistique	1	BIGOLINO		
Lire un fichier de données	Stiff	Simulation pH	2	P2		
Lire uniquement les données	graphes binaires XY	Phreeq	3	P4		
Enregistrer le tableau	Korjinski	C14	4	P5		
Modèle Balance.xls			5	VESTA D		
			6	D2 20966		
			7	B524		



- Approximation
- WATEQ Debye-Hückel
 - Debye-Hückel simple
 - Debye-Hückel
 - Güntelberg
 - Davies

```

F      3.502e-006  3.502e-006
K      1.773e-005  1.773e-005
Mg     9.160e-004  9.160e-004
N(5)   2.232e-004  2.232e-004
Na     1.545e-004  1.545e-004
S(6)   4.172e-004  4.172e-004

30.  13-----Description of solution-----
                                pH = 7.000
                                pe = 4.000
                                Activity of water = 1.000
                                Ionic strength = 8.403e-003
                                Mass of water (kg) = 1.000e+000
                                Total carbon (mol/kg) = 5.565e-003
                                Total CO2 (mol/kg) = 5.565e-003
                                Temperature (deg C) = 12.800
                                Electrical balance (eq) = 2.698e-006
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.02
                                Iterations = 9
                                Total H = 1.110169e+0
                                Total O = 5.552416e+0

30.  13-----Saturation indic
Phase      SI log IAP  log KT
Anhydrite  -2.21  -6.54  -4.33  CaSO4
Aragonite  -0.50  -8.77  -8.27  CaCO3
Calcite     -0.35  -8.77  -8.42  CaCO3
CO2(g)     -1.65  -19.85 -18.20  CO2
Dolomite   -1.05  -17.84 -16.79  CaMg(CO3
Fluorite   -3.19  -13.95 -10.76  CaF2
Gypsum     -1.96  -6.54  -4.59  CaSO4:2
H2(g)     -22.00 -22.00  0.00  H2
H2O(g)    -1.84  -0.00  1.84  H2O
Halite     -9.25  -7.70  1.55  NaCl
O2(g)    -43.39  44.00  87.39  O2

30.  13-----
End of simulation.
30.  13-----

30.  13-----
Reading input data for simulation 2.
30.  13-----

30.  13-----
End of run.
30.  13-----

```

Si des fluorures existent dans l'analyse, alors Phreeq calcule notamment IS de la Fluorite.

Il s'agit donc de récupérer automatiquement cette valeur

Groupe	Libellé	Fond	Bord
1	BIGOLINO	orange	orange
2	P2	vert	vert

Si DIAGRAMMES n'extrait pas cette valeur de fluorite, il faut modifier un fichier texte particulier :

Pour cela, cliquer sur <Liste des indices...>

Modèle Balance.xls Korjinski C14

*.PRN (Cations)

DIONEX remplacer n.a. et ./.

<< Début Balance Cations Anions TAC Fin >> Insérer une a

Approximation

ATEQ Debye-Hückel

Debye-Hückel simple

Debye-Hückel

Intelberg

ovies

Presse-papier

gnon.dia

Colonnes supplémentaires

n	Nom	Libellé	Groupe	Piper	Sc	Ca	Mg	Na	K
26	11	B2	1						
27	12	B501	3						
28	8	B	3						
29	9	PIAVE Bigolino	3						
30	13	P2	2			433	12.8	423	525
31	14	P4	2			468	12.9	515	560
32	20	P5	2			501	12.5	547	596
33	27	14085	2			500	12.3	573	611
34	18	12215	2			471	13.6	501	559
35	23	12200	3			94	13.8	434	243
36	21	18090	3			132	13.3	502	316
37	19	14643	3			129	13.7	505	321
38	16	12323	2			435	12.3	452	506
39	4	14308	3			103	16.5	426	260
40	5	12132	2			400	16	537	552
41	6	12090	2			326	16	369	401
42	22	9088	3			65	17.7	321	177
43	7	6084	3			75	15.1	349	196
44	28	20242	2			499	12.5	549	596
45	15	D VESTA	3			164	12.6	534	349
46	25	4919	2			370	13	541	503
47	26	20243	2			311	12.2	322	366
48	24	20482	2			292	12.4	317	350
49	17	4401	2			279	13.5	336	346
50	1	20966 D2	2			457	12.8	476	521
51	2	4568	2			449	13.7	477	518
52	3	4132	2			299	17.3	432	398
53	10	B524	2			428	13.1	477	506
54	11	B2	2			265	10.3	322	334
55	12	B501	3			99	12.7	310	218
56	8	BRENTA	3			88	7.9	293	198

Rechercher dans Nom/Libellé

Valeur courante: 12.3

Nouvelle valeur: =

cCALC=f(Tc) Tc = 25 °C => Recalculer

Modifier par cellule

Saisie globale

Quitter

Le fichier excel à traiter doit comporter la colonne <Nom> et éventuellement dans n'importe quel ordre

Groupe Libellé Ca Mg Na K HCO3 CO3 Cl SO4 PO4 NO3 NO2 F Br SiO2 18O 13C 2H T°C pH c25°C eH O2 Fe(III)

équivalence des titres de colonne : CA = Ca++ = CA++ = Ca ; CL = Cl- = Cl, SO4 = SO4-- = SO4 etc...

Facteurs correctifs

Calcul HCO3-

Calcul de Al 3+

Traiter des fichiers Excel en mg/L mg/L meq/L mmol/L 20 groupes Nom/Libellé => Légende => Groupe => 1..20 Roland SIMLER Laboratoire d'Hydrogéologie d'Avignon

Fichier Excel normé	Piper	Riverside / Wilcox	Groupe	Légende	Fond	Bord
Voir Excel	Schöeller Berkaloff	Statistique	1	BIGOLINO	Orange	Brown
Lire un fichier de données	Stiff	Simulation pH	2	P2	Green	Dark Green
Lire uniquement les données	graphes binaires XY	Phreeq	3	P4	Yellow	Olive
Enregistrer le tableau	Korjinski	C14	4	P5	Blue	Dark Blue
Modèle Balance.xls			5	VESTA D	Pink	Purple
			6	D2 20966	Red	Dark Red
			7	B524	Cyan	Dark Cyan

Approximation
 WATEQ Debye-Hückel
 Debye-Hückel simple
 Debye-Hückel
 Güntelberg
 Davies



phreeqc_indices.txt - Bloc-notes

Fichier Edition Format Affichage ?

1	Anhydrite
2	Aragonite
3	Calcite
4	'CO2(g)
5	chalcedony
6	Chrysotile
7	Dolomite
8	Gypsum
9	H2(g)
10	H2O(g)
11	O2(g)
12	quartz
13	sepiolite
14	sepiolite(d)
15	SiO2(a)
16	Talc
17	'CO2(g)
18	Halite
19	Mirabilite
20	Natron
21	CO2(g)
22	Fluorite

Ajouter la ligne Fluorite et enregistrer ce fichier.

Il faut que l'écriture corresponde exactement à celle du fichier Phreeq !

Fichier Excel normé	Piper	Riverside / Wilcox	Groupe	Légende	Fond	Bord
Voir Excel	Schöeller Berkaloff	Statistique	1	BIGOLINO	Orange	Brown
Lire un fichier de données	Stiff	Simulation pH	2	P2	Green	Dark Green
Lire uniquement les données	graphes binaires XY	Phreeq	3	P4	Yellow	Olive
Enregistrer le tableau	Korjinski	C14	4	P5	Blue	Dark Blue
Modèle Balance.xls			5	VESTA D	Pink	Purple
			6	D2 20966	Red	Dark Red
			7	B524	Cyan	Dark Cyan



- Approximation
- WATEQ Debye-Hückel
 - Debye-Hückel simple
 - Debye-Hückel
 - Güntelberg
 - Davies

phreeqc_indices.txt - Bloc-notes

Fichier Edition Format Affichage ?

- Nouveau Ctrl+N
- Ouvrir... Ctrl+O
- Enregistrer Ctrl+S
- Enregistrer sous...
- Mise en page...
- Imprimer... Ctrl+P
- Quitter

Quartz
 sepiolite
 sepiolite(d)
 SiO2(a)
 Talc
 'CO2(g)
 Halite
 Mirabilite
 Natron
 CO2(g)
 Fluorite

Fichier Excel normé	Piper	Riverside / Wilcox	Groupe	Légende	Fond	Bord
Voir Excel	Schöeller Berkaloff	Statistique	1	BIGOLINO	Orange	Brown
Lire un fichier de données	Stiff	Simulation pH	2	P2	Green	Dark Green
Lire uniquement les données	graphes binaires XY	Phreeq	3	P4	Yellow	Olive
Enregistrer le tableau	Korjinski	C14	4	P5	Blue	Dark Blue
Modèle Balance.xls			5	VESTA D	Pink	Purple
			6	D2 20966	Red	Dark Red
			7	B524	Cyan	Teal



- Approximation
- WATEQ Debye-Hückel
 - Debye-Hückel simple
 - Debye-Hückel
 - Güntelberg
 - Davies

indices.txt - Bloc-notes

Fichier Edition Format Affichage ?

	Gypsum	H2(g)	H2O(g)	O2(g)	quartz	sepiolite	sepiolite(d)	siO2(a)	Talc	Halite	Mirabilite	Natron	CO2(g)	Fluorite
0.34	-1.47	-6.83	-9.00											
0.61	-1.57	-7.19	-9.42											
			-9.14											
			-9.25			-1.65	-3.07							
							-3.19							

Ainsi on récupère dans un fichier et/ou dans le presse-papier les valeurs de Fluorite entre autres.

On peut directement coller dans Excel ou OpenOffice

Le séparateur est une tabulation

< fin du tutoriel >