

DOI: 10.3876/j.issn.1000-1980.2011.06.012

关中盆地混合地下热水化学成分随机模拟

马媛^{1,2}, 艾萍¹

(1. 河海大学水文水资源学院, 江苏 南京 210098; 2. 中国科学院地理与资源研究所, 北京 100101)

摘要:以水文地球化学理论和水文随机模拟技术为基础, 利用水文地球化学模拟方法对关中盆地混合地下热水中主要离子与主要离子总含量 TDI 的关系进行分析, 采用最小二乘法及根据残差的偏态系数进行参数估计以确定最适线性方程定量模拟关中盆地水化学场的混合作用对水化学成分的影响。研究表明: 关中盆地地下热水中的主要离子矿化度与 TDI 之间具有良好的相关关系, 不同分区与 TDI 相关程度较高的离子类型有所差异, 地下热水混合作用产生的一系列过渡型地下水的化学成分可以利用线性方程 $y = Ax + B$ 得到较好的模拟结果。

关键词:混合地下水 地下热水 水文随机模拟 最小二乘法 参数估计 关中盆地

中图分类号: P641.12

文献标志码: A

文章编号: 1000-1980(2011)06-0656-05

环境同位素分析作为一种研究地下水的手段, 它将大气降水、地表水、地下常温水及地下热水视为统一的“系统”, 并在此基础上探索地下热水的起源和循环规律, 揭示“四水”转化关系及各含水层之间的水力联系, 估算地下热水的热储温度、深度以及滞留时间, 为解决地下热水合理开发和利用过程中产生的问题提供了经济、快速、精确的解决手段。

地下热水现已成为关中盆地重要的经济资源, 它的合理开发与利用越来越被社会各界所重视。对于关中盆地地下热水的水化学研究已取得一些成果。范基娇^[1]利用环境同位素和水化学相结合的方法对关中盆地地下热水循环模式及可更新能力进行了研究。赵景波等^[2]对陕西秦岭翠花山泉水水化学特点和在一年内的变化进行了研究。贾旭兵^[3]根据关中盆地地下热水的水化学特征分析了关中盆地地下热水的补给来源, 根据水化学横、纵向的分布规律分析了关中盆地不同区域地下热水的赋存环境, 进而说明可更新程度。胡杨等^[4]通过关中盆地地热井中地下热水的同位素和化学成分资料分析, 结合关中盆地的地热地质和水文地质条件, 进行地下热水接受补给时的温度研究, 应用 Na-K-Mg 三角图和水化学平衡温度理论, 估算在平衡条件下关中盆地最大热储温度为 138℃。覃兰丽^[5]系统研究了关中盆地地下热水化学成分特征及其形成机制, 揭示了关中盆地地下热水化学成分的空间变化规律, 从而为关中盆地地热水资源合理开发利用和环境保护提供可靠依据。本文在此基础上, 根据水文地球化学模拟方法对关中盆地地下热水混合作用下七大主要离子与主要离子总含量(total dissolve ion, TDI)的关系进行模拟, 探究关中盆地水化学场中混合作用对水化学成分的影响。

1 研究区概况

关中盆地位于陕西省中部, 西起宝鸡, 东至潼关, 南依秦岭, 北抵北山, 位于东经 107°30′ ~ 35°50′, 北纬 33°39′ ~ 35°50′ 之间, 总体似半个弯月横亘于陕西省中部, 是陕西省政治、经济、文化中心。自南到北依次为山前洪积平原、黄土台塬、冲积平原, 构成阶梯状下降的地貌。关中盆地属温带半干旱半湿润气候, 蒸发量大, 降水量少, 且降水年内分配不均, 集中在 7, 8, 9 月(占全年降水量 45% 左右)。地热井主要集中分布在地热地质条件好的西安、咸阳及其周边地区, 其次分布在旅游资源较好有温泉出露的秦岭山前地带, 如临潼骊山、眉县西汤峪、长安区东大、蓝田东汤峪及渭南市区等。开采深度跨度较大, 浅井在 300 m 左右, 深井可达 4 000 m。较浅的地热井主要分布在盆地南北边缘地带, 在西安及周边地区地热井深度普遍大于 2 000 m。本文地下热水的采样主要集中在西安、咸阳、山前、渭北地区(图 1), 其水样分别代表了新生界砂岩、砂砾岩孔隙裂隙热水、秦岭山前构造断裂地下热水、碳酸盐盐地下热水的水化学特征。数据资料来源于陕西省关中盆地地热资源调查

收稿日期: 2010-10-16

作者简介: 马媛(1985—), 女, 陕西西安人, 硕士研究生, 主要从事流域水文模拟研究。E-mail: may@lrreis.ac.cn

评价项目的野外测试结果.

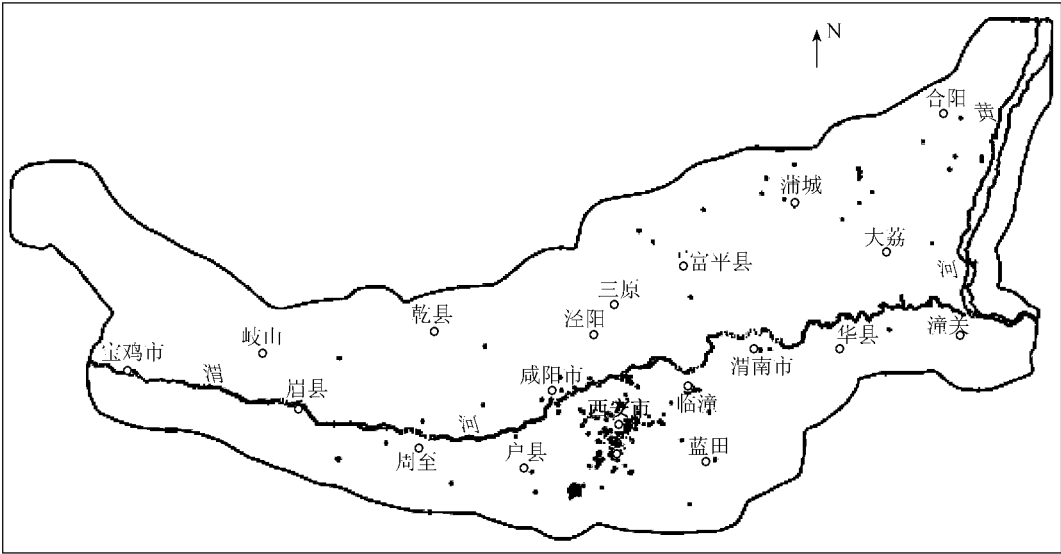


图 1 关中盆地地热井分布^[5]

Fig. 1 Distribution of geothermal wells in Guanzhong Basin^[5]

2 盆地混合地下热水化学成分特征

地下水的水化学成分是地下水与其所处围岩的矿物发生化学反应而形成的结果^[6]. 关中盆地地下热水的水化学成分主要来自流动过程中对流经岩土溶滤,其他条件相同时,地下水在岩层滞留的时间愈长,从周围岩土溶滤获得的组分愈多.局部流动系统的水,流程短,流速快,水化学成分相应的比较简单,矿化度较低.区域流动系统的水,流程长,流速慢,接触的岩层多,成分复杂,矿化度也高.但在补给区局部流动系统的水由于流程短,矿化度并不高,排泄区局部流动系统中的水矿化度最高^[7].盆地水化学场的形成作用中,混合作用较为普遍.地下热水沿断裂上升过程中与流经含水层的常温水不同程度的混合:一方面常温水降低了地下热水的 TDI;另一方面常温水又给地下热水增添了新的化学成分^[8].本文利用 Excel 软件进行数据处理及方差齐性检验和正态分布检验^[9],根据变化趋势绘制盆地地下热水七大离子矿化度与 TDI 的关系如图 2 所示.

3 盆地混合地下热水化学成分随机模拟

3.1 模型的建立

关中盆地不同成分的地下水混合时产生一系列的过渡型地下水,其化学成分可以用线性方程 $y = Ax + B$ 进行近似模拟,其中: y 为混合水中某组分的含量; x 为混合水的 TDI; A 为反映不同离子所占比重的系数; B 为表示不同离子之间相关程度的系数.

3.2 模型的参数估计

3.2.1 参数 A, B 的估计

根据研究区采样点的观测资料 (m, n) ,利用最小二乘法求出最优配合线性方程的两个待定参数 A, B . 根据观测值 m 通过线性模拟方程 $y = Ax + B$ 计算得到 n' ,设残差为 $\xi, \xi = n - n'$,即 ξ 为实际值与计算值的差值.若使直线达到最优配合,即令残差的平方和 $A = \xi^2 = A^2 m^2 + 2Am(B - n) + n^2 - 2Bn + B^2$ 为极小.由微分学知识可知,当 Δ 取极小值时,它对 A 和 B 的偏导数应同时为零,用行列式解此关于 A, B 的联立方程即可得到 A, B 的值.

3.2.2 残差 ξ 的偏态系数 C_s 的估计

估计出 A, B 后,即可求得样本残差序列 $\xi = n - n' = n - (Am + B)$.按概率权重矩法估算残差的偏态系数 C_s .概率权重矩法是 Greenwood 等于 1979 年提出的,这一方法适用的条件是分布函数的反函数为显式,即若分布函数为 $F(x)$ 则要求其反函数 $x(F)$ 为显式^[10].该法不仅利用样本序列各项大小的信息,而且还利用序位的信息.在估计概率权重矩时,只需 x 值的一次方,避免了高次方引起的较大误差.统计试验结果表明,

□西安热水 ○咸阳北部热水 ◆咸阳南部热水 ▬渭北热水 ▲山前热水

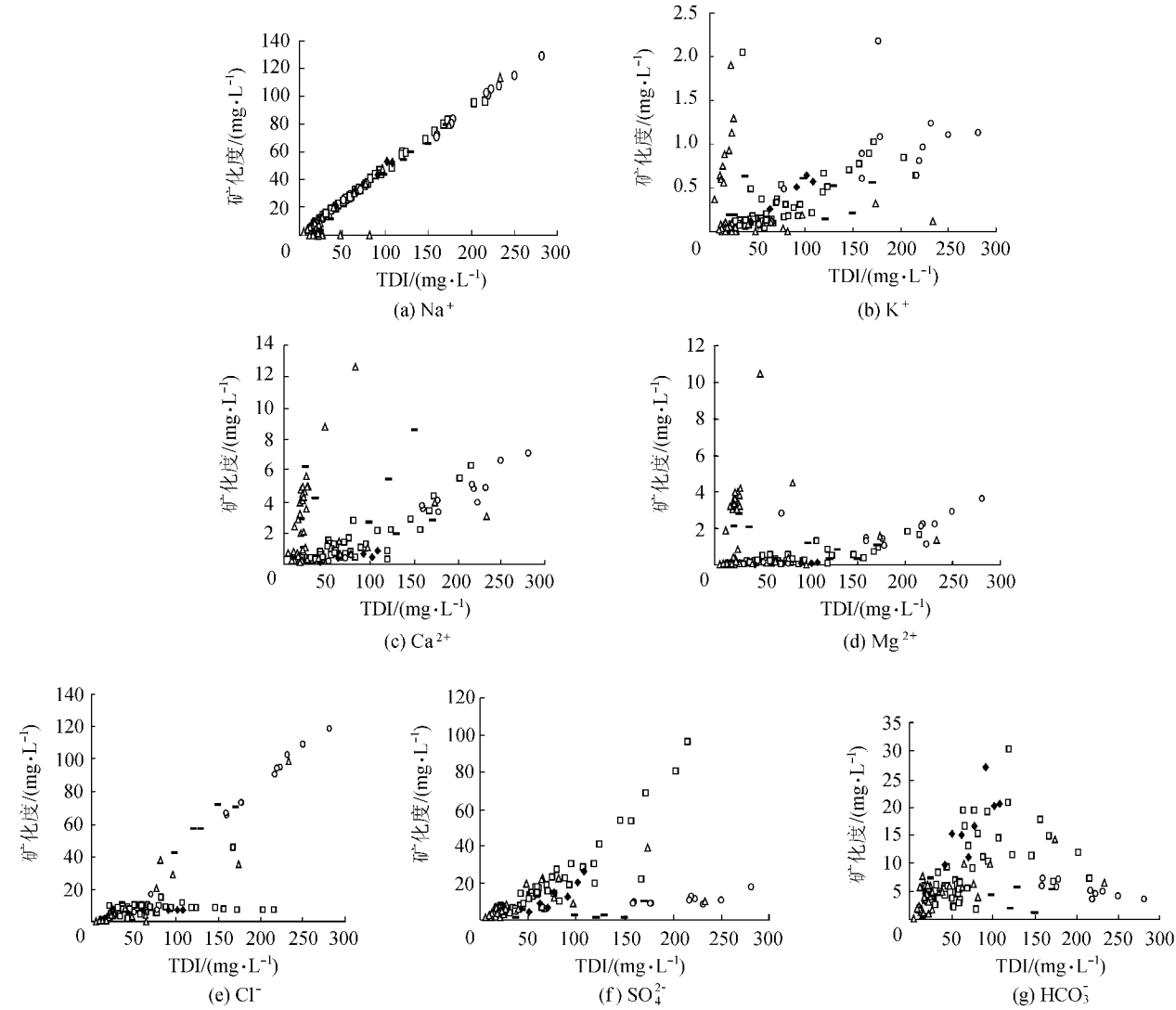


图 2 关中盆地地下热水七大离子矿化度与 TDI 关系

Fig. 2 Relationship between mineralization of seven ions and TDI for underground thermal water in Guanzhong Basin
该法计算简便、客观,估计量具有较好的统计特性.概率权重矩法估算残差的偏态系数 C_s 公式为

$$C_s = C_s(R) \quad R = \frac{M_2 - \frac{1}{3}M_0}{M_1 - \frac{1}{2}M_0}$$

其中 $C_s(R)$ 是 R 的函数, M_0, M_1, M_2 分别是零阶、一阶和二阶概率权重矩.

3.3 结果分析

将盆地不同分区 TDI 和主要离子含量输入数据处理软件 SPSS 中,进行相关分析^[11].表 1 显示盆地不同分区地下热水中与 TDI 相关性最大的阳离子和阴离子分别是 渭北 Ca^{2+} 和 HCO_3^- ,西安 Na^+ 和 SO_4^{2-} ,山前 Na^+ 和 SO_4^{2-} ,咸阳 Na^+ 和 Cl^- .根据相关分析结果筛选与 TDI 相关性最大的主要离子作为变量,TDI 作为因变量建立线性方程.估计各项参数,确定具有显著相关的线性方程,图 3 为咸阳北部热水显著相关的线性方程.利用概率权重矩法进行残差项检验^[12],残差检验

表 1 关中盆地地下热水 TDI 与主要离子矿化度相关分析

Table 1 Correlation analysis of mineralization of main ions and TDI for underground thermal water in Guanzhong Basin

分区	相关系数 R^2						
	K ⁺	Na ⁺	Ca ²⁺	Mg ²⁺	SO ₄ ²⁻	HCO ₃ ⁻	Cl ⁻
渭北	0.741 6	0.877 4	0.948 3	0.349 6	0.505 8	0.571 7	0.437 1
西安	0.667 2	0.992 2	0.673 0	0.607 2	0.839 6	0.697 1	0.543 7
山前	0.299 6	0.876 4	0.541 3	0.576 5	0.440 9	0.301 0	0.422 1
咸阳	0.518 8	0.997 8	0.874 3	0.598 8	0.319 1	0.714 6	0.985 8

结果(表 2)表明方程在各分区具有可适用性.

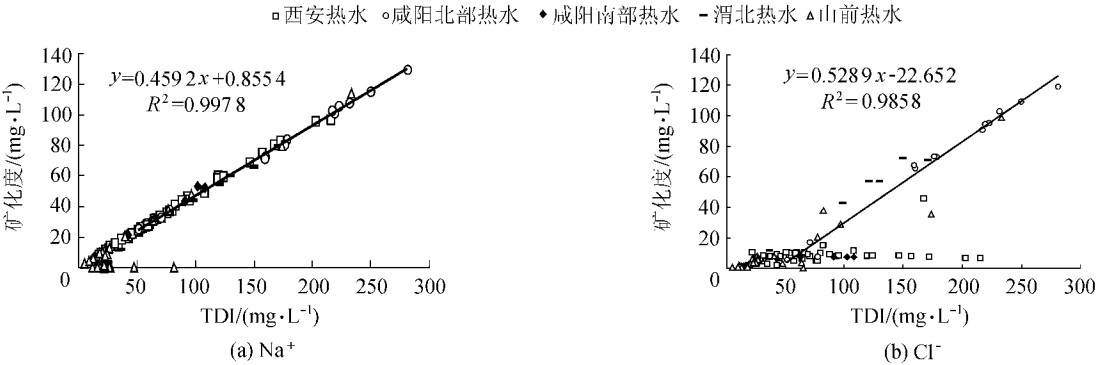


图 3 咸阳北部地下热水主要离子的矿化度与 TDI 相关分析

Fig. 3 Correlative relationship between mineralization of main ions and TDI for underground thermal water in northern part of Xianyang City

表 2 模型参数估计及残差检验

Table 2 Estimation of model parameters and residual test

分区	阳离子参数			阴离子参数			残差 ξ 值	估计标准差
	离子	A_1	B_1	离子	A_2	B_2		
渭北	Ca^{2+}	0.0297	-1.4990	HCO_3^-	0.1808	3.2617	0.0002	0.64491
西安	Na^+	0.4733	0.2516	SO_4^{2-}	0.3824	-8.4993	0.0191	0.74510
山前	Na^+	0.4815	-5.6541	SO_4^{2-}	0.1127	3.1294	0.0001	0.52841
咸阳	Na^+	0.4592	0.8554	Cl^-	0.5289	-22.6520	0.0013	0.69250

4 结 语

地下水化学组分形式的定量研究是水化学作用模拟计算的基础^[13]. 本文所建立的关中盆地不同分区 TDI 与相关性最大的主要离子的相关线性方程能较好地模拟地下热水化学场的混合作用对主要离子矿化度与 TDI 的影响,同时也存在着下列问题:(a)采用地下热水中 TDI 的概念模型进行质量平衡模拟^[14]时,根据初始水的成分及给定的反应途径就能准确预测出终点地下水的成分^[15]. 但实际条件下对可能性和代表性大的反应途径进行选择所需要的化学反应动力学及地下水运动速度的详细资料是非常有限的,因而模拟精度不高.(b)建立的模型参数数目太多,模拟得到的计算值可能不等于观测值,需要对模拟分量进行修正. 在进行检验后,可以用 $y = Ax_1 + Bx_2 + C\xi$ 模型形式^[16]进行模拟,通过生成标准化独立随机变量进行模拟.

参考文献:

[1] 范基娇. 关中盆地地热水循环模式及可更新性研究[D]. 西安: 长安大学, 2006.

[2] 赵景波, 肖军, 李瑜琴, 等. 陕西秦岭翠华山泉水水化学成分研究[J]. 第四纪研究, 2005, 25(5): 568-574. (ZHAO Jing-bo, XIAO Jun, LI Yu-qin, et al. Chemical composition of the Cuihua mountain's spring in the Qinling mountains in Shaanx[J]. Quaternary Sciences, 2005, 25(5): 568-574. (in Chinese))

[3] 贾旭兵. 关中盆地地下热水的可更新性与回灌问题研究[D]. 西安: 长安大学, 2009.

[4] 胡杨, 马致远, 余娟, 等. 关中盆地地下热水接受补给时温度及热储层温度的估算[J]. 地球科学与环境学报, 2009, 31(2): 174-176. (HU Yang, MA Zhi-yuan, YU Juan, et al. Estimation of the making-up temperature of geothermy water and the thermal reservoir temperature in the Guanzhong Basin[J]. Journal of Earth Sciences and Environment, 2009, 31(2): 173-176. (in Chinese))

[5] 覃兰丽. 关中盆地地下热水水化学特征及其形成机制研究[D]. 西安: 长安大学, 2008.

[6] 李义连, 王焰新, 周来茹, 等. 地下水矿物饱和度的水文地球化学模拟分析: 以娘子关泉域岩溶水为例[J]. 地质科技情报, 2002, 21(1): 32-36. (LI Yi-lian, WANG Yan-xin, ZHOU Lai-ru, et al. Hydrogeochemical modeling on saturation of minerals in groundwater: a case study at Niangziguan, northern China[J]. Geological Science and Technology Information, 2002, 21(1): 32-36. (in Chinese))

[7] 王大纯, 张人权. 水文地质学基础[M]. 北京: 地质出版社, 1995: 90-92.

- [8] 钱会,马致远.水文地球化学[M].北京 地质出版社,2006 30-88.
- [9] 林诈顶.水文现代化与水文新技术[M].北京 中国水利水电出版社,2008 518-530.
- [10] 叶守泽,詹道江.工程水文学[M].北京 中国水利水电出版社,2000 185-188.
- [11] 陈志军,朱健,张晶.新疆博州地区地下水水化学成分特征灰关联分析[J].盐湖研究,2009,17(1) 27-30. (CHEN Zhi-jun, ZHU Jian,ZHANG Jing.The properties of groundwater chemical composition by gray relevancy analysis in Boertala,Xinjiang[J]. Journal of Salt Lake Research,2009,17(1) 27-30. (in Chinese))
- [12] 罗纯,王筑娟.Gumbel 分布参数估计及在水位资料分析中应用[J].应用概率统计,2005,21(2) 169-175. (LUO Chun,WANG Zhu-juan.The estimates of the parameters of gumbel distribution and their application to the analysis of the water level data[J]. Chinese Journal of Applied Probability and Statistics,2005,21(2) 169-175. (in Chinese))
- [13] 王东胜,曾溅辉.地下水化学组分存在形式的计算及其意义[J].水文地质工程地质,1999(6) 48-51. (WANG Dong-sheng, ZENG Jian-hui.The hydrogeochemical significance in evaluating composition of groundwater[J]. Hydrogeology And Engineering Geology, 1999(6) 48-51. (in Chinese))
- [14] 徐中华,李云峰,侯光才,等.鄂尔多斯盆地洛河组地下水地球化学模拟[J].干旱区资源与环境,2009,23(10) 143-148. (XU Zhong-hua,LI Yun-feng,HOU Guang-cai,et al.Geochemical modeling of Luohe water-bearing layers in Ordos Basin-in Changwu-Bin county area[J]. Journal of Arid Land Resources and Environment,2009,23(10) 143-148. (in Chinese))
- [15] 马致远,钱会.环境同位素地下水文学[M].西安 陕西科学技术出版社,2004 90-92.
- [16] 王文圣,丁晶,金菊良.水文水资源随机模拟技术[M].成都 四川大学出版社,2007 84-87.

Stochastic simulation of chemical composition of mixed underground thermal water in Guanzhong Basin

MA Yuan^{1,2}, AI Ping¹

(1. College of Hydrology and Water Resources, Hohai University, Nanjing 210098, China ;

2. Institute of Geographic Sciences and Natural Resources Research, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China)

Abstract : Based on the hydrogeochemical theory and stochastic simulation technology, a quantitative analysis of the relationship between TDI and the main ionic mineralization of the underground thermal water in the Guanzhong Basin was conducted through hydrogeochemical simulation. According to the residual skewness coefficient and the least square method, the most suitable linear equation was determined for simulating the mixed effect on the chemical composition of the underground thermal water in the basin. The results show that there is a good correlative relationship between the mineralization of the main ions and TDI, that in different areas the ions with close correlation with TDI are different, and that the chemical composition of a series of transitional groundwater can be well simulated through the linear simulation equation $y = Ax + B$.

Key words : mixed groundwater ; underground thermal water ; hydrological stochastic simulation ; least square method ; parameter estimation ; Guanzhong Basin