

吉林西部水-岩相互作用反向模拟

冯 波¹, 肖长来¹, 梁秀娟¹, 方 樟¹, 李玉秋^{1,2}

(1. 吉林大学环境与资源学院, 吉林 长春 130026; 2. 松原市水政水资源管理办公室, 吉林 松原 138000)

摘要 根据研究区的水文地质条件, 结合热力学原理和化学原理, 确定典型剖面 and 矿物相, 采用反向地球化学模拟软件 NETPATH2.0, 对吉林省西部地区水-岩相互作用进行模拟, 从而对潜水水化学演化进行分析。典型剖面上的模拟结果表明: 第四系孔隙潜水在径流排泄过程中, 主要发生了矿物的溶解和沉淀, 以及 Na^+ 、 Ca^{2+} 之间的离子交换, 使得沿剖面上的水化学类型发生了相应的改变。

关键词 地球化学模拟; 水-岩作用; 反向模拟

中图分类号: P641.3 文献标识码: A 文章编号: 1004-693X(2009)06-0001-03

Inverse geochemical simulation of water-rock reaction in Western Jilin Province

FENG Bo¹, XIAO Chang-lai¹, LIANG Xiu-juan¹, FANG Zhang¹, LI Yu-qiu^{1,2}

(1. College of Environment and Resources, Jilin University, Changchun 130026, China; 2. Songyuan Water Resources Management Office, Songyuan 138000, China)

Abstract According to the hydrogeologic conditions of the study area, and combined with the theory of thermodynamics and the chemistry, a typical cross section and phases of minerals were selected. The inverse geochemical simulation software NETPATH 2.0 was used to simulate the water-rock interaction. Then the hydrochemical evolution of groundwater was analyzed in Western Jilin Province. The simulation results for the selected typical cross section showed that during the drainage of the pore phreatic water of the Quaternary period, the geochemical processes mainly included the deposition and dissolution of certain minerals, and ion exchange between Na^+ and Ca^{2+} . The hydrochemistry of groundwater along the cross section also changed, accordingly.

Key words geochemical simulation; water-rock reaction; inverse simulation

研究区位于松嫩平原南部, 仅西南很小一部分属于辽河平原, 洮南市西部一部分属于丘陵区。区内地势东南与西北高, 西南略高, 中央及东北低。平原区最高点在前郭县王府镇南, 海拔 293.0 m, 最低点为乾安县三王泡, 高程 119.0 m^[1]。

松嫩盆地为一个巨大的含水系统。研究区埋藏有第四系孔隙潜水及多个承压含水层。由于第四系孔隙潜水积极参与水循环, 水质受地形、气象、水文等因素影响较为明显, 并且水质容易受到污染, 掌握其水化学演化规律对于合理控制浅层地下水污染有很重要的现实意义, 因此, 笔者对第四系孔隙潜水水化学演化进行分析与模拟。

1 潜水水化学特征

研究区潜水水化学特征受地质、地貌、地下水的

赋存条件、地下水埋深及循环条件控制, 按阴离子组分, 以 HCO_3^- 型水为主, SO_4^{2-} 型与 Cl^- 型水仅有局部分布; 按阳离子组分, 以 Ca^{2+} 型水为主, 其次为 Na^+ 和 Mg^{2+} 型水(图 1、图 2)。从盆地东西两侧向盆地中心, 区域自然地理条件、地质、水文地质条件以及水文地球化学环境均呈有规律的变化, 地下水水化学形成作用由溶滤作用为主逐渐变为以蒸发浓缩和离子吸附交换作用为主^[2]。2005 年盆地周边水化学类型以 HCO_3^- - CaMg 、 HCO_3^- - Cl - CaMg 为主, 盆地中心则以 ClHCO_3^- - Na 、 ClHCO_3^- - CaMg 、 Cl - CaMg 等为主, 人类活动影响较重的地区出现 ClHCO_3^- - SO_4^{2-} - NaCaMg 型水; 由浅层至深层, 地下水中各种离子浓度及总量、矿化度、含氟量呈减少趋势; 浅层潜水中 Fe 、 Mn 离子浓度、 CaCO_3 总硬度略高。

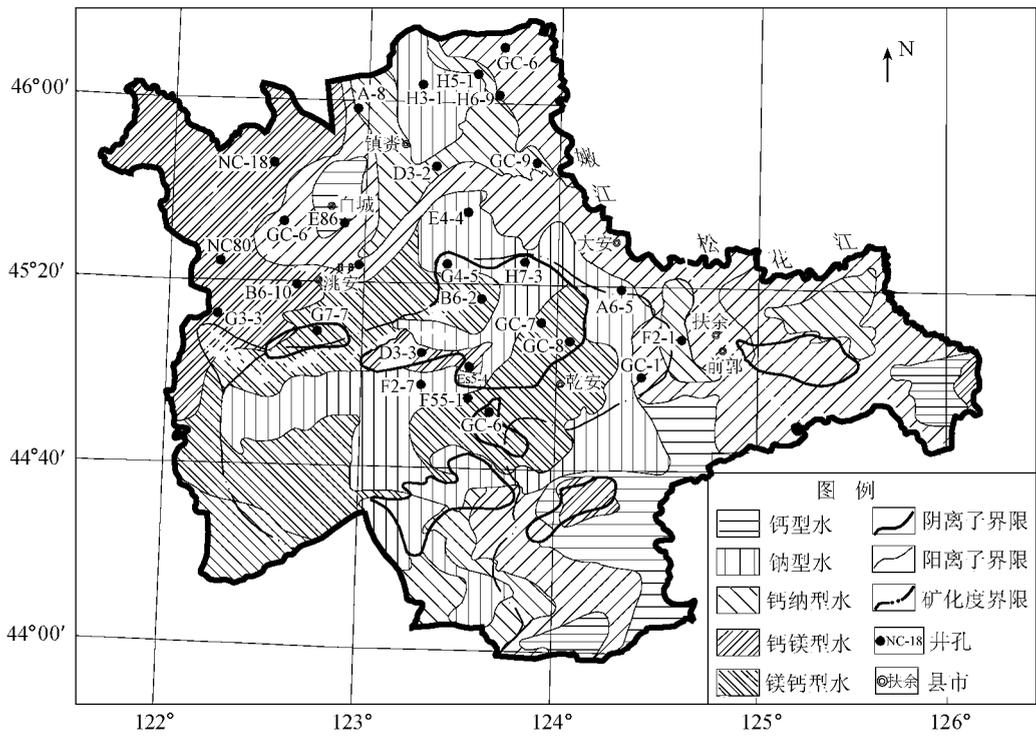


图1 吉林西部 2005 年潜水水化学类型

典型剖面上选择水质资料较全、时间序列连续性较好的井孔的水样作为初、末刻水样,研究潜水流经这些井孔时所发生的水-岩相互作用。

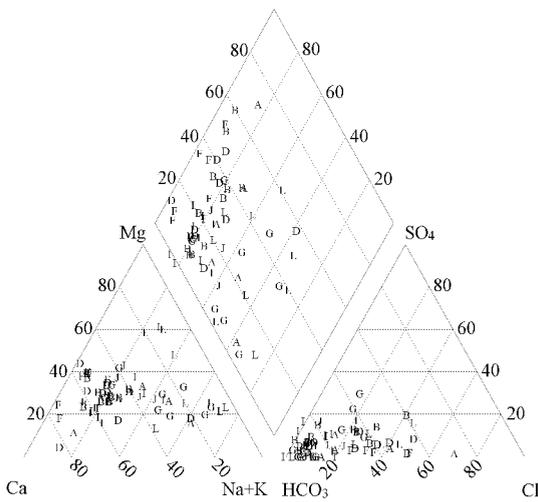


图2 2005 年潜水水化学 Piper 三线图

研究区潜水水化学特征总体上表现为碱土金属离子超过碱金属离子,弱酸根大于强酸根,碳酸盐硬度超过 50% 的特点。局部地区如镇赉、通榆和大安一带表现为碱土金属和碱金属离子浓度比较接近,弱酸根与强酸根比较接近的特点;局部地段强酸根大于弱酸根,碱金属超过碱土金属。

2 反向水文地球化学模拟

2.1 典型模拟剖面的选取

根据研究区 2005 年的潜水等水位线(图 3),可以判断研究区潜水大体流向为自南西向北东;在洮儿河扇形地前缘潜水流向为自西向东。沿潜水流向选择 I—I' 典型剖面(扇形地—大安剖面)(图 3),在



图3 2005 年潜水等值线及典型剖面位置

2.2 约束条件、相态、参数的确定

根据现有的井孔水质分析资料(表 1),并结合区域地质条件[3],本次水-岩作用模拟对于 I—I' 剖面约束条件和相态进行了选择,选定 10 种主要矿物作为相态,分别为钠长石、钙长石、钾长石、黑云母、方解石、萤石、石膏、高岭土、岩盐和硅土,其中黑云母和岩盐只发生溶解,约束条件选定为碳、硫、钙、镁、钠、钾、氯、氟、二氧化硅等,共 9 种。

由于研究区地下水位埋深较浅,约 3~4 m,地表水渗漏对潜水的稀释作用具有一定影响,故参数中

表 1 2005 年 5 月剖面钻孔潜水水质分析资料

剖面	井号	位置	pH	$\rho(\text{Ca}^{2+})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{Mg}^{2+})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{K}^{+})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{Na}^{+})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{Cl}^{-})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{SO}_4^{2-})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{HCO}_3^{-})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{NO}_3^{-})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{SiO}_2)$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	$\rho(\text{F}^{-})$ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)
I—I'	4-1	白城	7.4	45.6	24.87	0.88	13.7	11.5	34.5	158	2.90	80.9	0.37
	12	白城	7.4	46.4	27.59	0.65	20.0	13.3	38.3	149	8.18	70.3	0.43
	43	白城	7.2	106.0	64.84	1.88	56.2	71.3	23.2	238	0	122.2	0.41
	160-2	大安	7.8	46.4	38.03	1.19	213.0	55.1	98.8	515	0	65.6	0.98
	154	大安	7.9	29.6	53.28	0.80	73.7	56.3	70.9	284	3.14	38.4	1.23
	157	大安	7.8	76.7	90.66	1.36	119.0	130.0	103.0	487	0.45	46.7	1.61

表 2 I—I' 剖面 NETPATH 部分模拟结果

流径	模型	钠长石	钙长石	钾长石	黑云母	方解石	萤石	石膏	高岭土	岩盐	硅土	离子交换	二氧化碳 (稀释/蒸发)	
1→4	1	1.338	0.296	0.448	0.464	-1.044	0.004	-0.145	-2.839				(4.795)	
	2	1.338	0.296	0.448	0.464	-1.044	0.004	-0.145			-5.678		(4.795)	
1→5	1	0.059	1.119	0.365	0.384	-1.895	0.003	-0.208	-1.788				(4.897)	
	2	0.059	1.119	0.365	0.384	-1.895	0.003	-0.208			-3.577		(4.897)	
1→6	1	0.075	0.390	0.096	0.111	-0.975		-0.113	-1.065	0.518			(4.355)	
	2	0.075	0.390	0.096	0.111	-0.975		-0.113		0.518	-2.130		(4.355)	
2→4	1	-0.906	0.993	0.348	0.352		0.001			0.227		1.701	0.685	(2.581)
	2	0.071	0.280	0.236	0.246	-1.039		-0.141	-0.846	0.180				(2.861)
2→5	1	0.071	0.280	0.236	0.246	-1.039		-0.141		0.180	-1.691			(2.861)
	2	0.311	-0.992	0.489	0.502		0.007	-0.289				-0.326	-1.867	(9.781)
2→6	1	0.110	-0.635	0.085	0.093			-0.112		0.604		-0.101	-0.507	(3.747)
	2	1.378	0.121	1.493	1.534	-2.491	0.005		-3.016	-1.647				(4.26)
3→4	1	1.378	0.121	1.493	1.534	-2.491	0.005			-1.647	-6.032			(4.26)
	2	0.096	0.578	1.259	1.301	-2.983			-1.573	-1.492				(3.056)
3→5	1	0.096	0.578	1.259	1.301	-2.983				-1.492	-3.146			(3.056)
	2	-0.094	0.475	1.179	1.219	-2.689	0.001		-1.204	-1.186				(4.441)
3→6	1	-0.094	0.475	1.179	1.219	-2.689	0.001			-1.186	-2.408			(4.441)
	2	2.946	-4.776	-0.026	0.011		0.008	-0.575				-5.012	-5.265	(2.359)
4→5	1	2.293	-3.617	-1.340	1.343		0.015			1.965		-4.281	-0.843	(1.043)
	2	2.720	-4.376	-0.480	0.471			-0.376		0.678		-4.759	-3.738	(1.643)
4→6	1	2.95	-4.785	-0.015			0.008	-0.579		-0.016		-5.017	-5.301	(2.384)
	2	-0.350	0.467	-0.246	0.250		0.003			0.936		-0.114	0.899	(1.453)
5→6	1	-0.227	0.249				0.007	-0.108		0.567		-0.251	0.067	(1.702)
	2													

选取了稀释参数,该区属于半干旱气候区,蒸发作用比较强烈,故选蒸发为另一参数。此外,离子交换是本区地下水中 Na^{+} 、 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 质量浓度变化的一个影响因素,故也选定为一种相态。在南部广大地区,白土山组含高岭土的砂砾石几乎出露地表,因此,可以将含水层视为开放-半开放体系,将 CO_2 作为一个可用相态。

2.3 模型建立

由于矿物相的选取往往要多于元素的数目,因而就造成了模型的多解性。一般情况下,为选取最恰当的解需要遵循以下原则:①符合热力学原理;②符合化学原理,例如长石类、黑云母(云母)等的水解反应是不全等溶解反应,是不可逆的反应^[4];③符合水文地质条件,例如蒸发和稀释条件、阳离子交换条件以及氧化还原条件等;④模拟结果的数量级要适合。

2.4 模拟结果分析

根据吉林省西部地区的水文地质条件并结合区域地下水的流场特征,笔者对 20 条水流途径进行模

拟计算,部分模拟结果见表 2。除“稀释/蒸发”一栏为系数外,其他各栏中,正值表示迁入溶液,负值表示迁出溶液;对于离子交换,正值表示 Na^{+} 进入溶液(被 Ca^{2+} 置换),负值表示 Na^{+} 迁出溶液(置换 Ca^{2+})。

结果表明,吉林省西部地下水地球化学作用具有如下特点:沿 I—I' 剖面发生的水-岩作用主要是长石类矿物和黑云母的溶解,以及方解石、石膏、高岭土(或硅土)的析出。该剖面前半段(如 2→4、2→5)潜水中 NaCl 浓度较低,岩盐主要呈溶解状态;后半段(如 3→6)随着 NaCl 浓度的升高,岩盐逐渐开始析出。从全程来看,岩盐的总体趋势仍以溶解为主。离子交换作用分析表明,2→4 段主要是土中的 Na^{+} 被 Ca^{2+} 置换进入溶液,后半段(4→5、5→6)水中的 Na^{+} 置换 Ca^{2+} 并迁出溶液。此外,萤石的全程溶解使得沿地下水流动方向上 F^{-} 浓度持续升高,此模拟结果与吉林西部地下水中 F^{-} 浓度普遍较高的现象^[5-6]相符。(下转第 7 页)

率为 86.5% ; 后者的出水浊度为 9.1 ntu , 去除效率为 81.5% , 单从去除率来看 , 前者比后者高 , 但是后者的出水浊度要比前者低且后者的出水浊度达到水厂沉淀池的出水浊度标准 , 这说明当沉淀池进口浊度较大时 , 需增加停留时间以使出水浊度达到要求 , 增加停留时间的同时也降低了产水量 , 这是一对矛盾 , 但最终还是要以出水浊度达到标准作为依据。

从计算结果看 , 水厂可以通过调整产水量 Q 或停留时间 t , 从而有效地影响出水的浊度。例如 , 某天原水浊度较高 , 相应的沉淀池进水浊度较高 , 达到 91 ntu , 在这种情况下 , 可通过降低单池产水量至 8 万 t/d , 即增加停留时间至 2.6 h 使沉淀池出水浊度较低而符合标准 ; 同样 , 某天原水浊度较小 , 相应的沉淀池进水浊度较小 , 只有 46 ntu , 在这种情况下 , 可加大流量至 10 万 t/d , 即减小停留时间至 2.1 h , 出水浊度仍然符合出水标准。通过不同运行工况下沉淀池的进口浊度与出水浊度之间的关系分析 , 可以看出合理调整产水量 Q 或停留时间 t 可一定程度上提高水厂的产水效率。

近年来 , 随着生活用水水质要求的不断提高 , 实际生产过程中沉淀池出水水质通常要求小于 10 ntu , 许多水厂这一标准已经提高到了 8 ntu , 甚至 3 ntu。新建水厂在沉淀池出口设置有仪表进行出水水质的监控 , 一旦发现水质超标 , 所采取的措施主要是增加混凝剂的投放量和增加停留时间。有些情况下 , 增加混凝剂投放量仍达不到处理效果时 , 经验性的人工调整水流停留时间亦是一种补充缓解措施 , 在满足供水

需求产水量的同时 , 本研究结论为水厂提高产水效率和控制沉淀池出水水质提供了一些参考依据。

参考文献 :

- [1] 何国建 , 汪德 . 矩形沉淀池内悬浮物沉降模拟 [J]. 清华大学学报 : 自然科学版 , 2005 , 45(12) : 1617-1620.
- [2] 蔡金榜 , 段宝祥 , 朱亮 . 沉淀池水流数值模拟 [J]. 重庆建筑大学学报 , 2003 , 25(4) : 64-69.
- [3] ZHOU S , Mc CORQUODALE J A . Modeling of rectangular settling tanks [J]. Journal of Hydraulic Engineering , 1992 , 118(10) : 1391-1405
- [4] TAKACS I , PATRY G , NOLASCO D . Dynamic model of clarifier thickening process [J]. Journal of Water Research , 1991 , 25(10) : 1263-1271.
- [5] TAKAMATSU T , NATIO M , SHIBA S , et al . Effect of deposit resuspension on settling basins [J]. Journal of Environmental Engineering Division , 1974 , 100(4) : 883-903.
- [6] IMAM E , Mc CORQUODALE J A , BOWTRA J K . Numerical modeling of sedimentation tanks [J]. Journal of Hydraulic Engineering , 1983 , 109(12) : 1740-1754.
- [7] 王志东 , 汪德 , 赖锡军 . 非正交同位网格中的 SIMPLE 算法 [J]. 河海大学学报 : 自然科学版 , 2003 , 31(5) : 509-512.
- [8] 翟世奎 , 张怀静 , 范德江 , 等 . 长江口及其邻近海域悬浮物浓度和浊度的对应关系 [J]. 环境科学学报 , 2005 , 25(5) : 693-699.
- [9] 王勤华 , 贺俊兰 . 净水厂产泥量的确定和相关参数的选择 [J]. 中国给水排水 , 2002 , 18(8) : 64-66.

(收稿日期 2009-05-27 编辑 徐娟)

(上接第 3 页)

3 结论及建议

进行水-岩作用的反向地球化学模拟能够定量研究潜水的化学演化规律 , 有助于更深入地认识吉林西部第四系孔隙潜水与环境之间的相互作用关系。研究结果表明 , 在吉林西部洮儿河扇形地第四系孔隙潜水向东部大安径流排泄过程中 , 主要发生了方解石、石膏、高岭土 (或硅土) 的沉淀和钠长石、钾长石、岩盐、萤石的溶解 , 以及 Na^+ 、 Ca^{2+} 之间的离子交换 , 地下水类型从 SO_4^{2-} 型水演化为 $\text{SO}_4^{2-} + \text{Cl}^-$ 型水。

目前有关水质组分存在形式及其浓度分布的计算模型 , 只可以确定地下水中一些主要的无机络合物的形式及数量 , 对于有机络合物需进一步深入研究^[7] , 此外 , 长期动态观测数据中水样分析项目较简单 , 这对于水-岩作用的地球化学模拟有一定影响 , 随着科技的进步和研究的深入 , 这类问题将得到解决。

参考文献 :

- [1] 肖长来 . 吉林省西部地下水资源评价与水资源可持续开发利用研究 [D]. 长春 : 吉林大学 , 2001.
- [2] 苑丽华 . 松嫩平原地下水化学特征 [J]. 地质与资源 , 2006 , 15(2) : 122-124 , 132.
- [3] 王凤生 . 吉林地下水 [M]. 长春 : 吉林科学技术出版社 , 1998.
- [4] PLUMMER L N . Geochemical modeling of water rock interaction : past , present , future [C] / YOUSIF K K , ANN S M . Proceedings of the 7th International Symposium on Water-Rock Interaction . Rotterdam : Balkema , 1992 : 23-33.
- [5] 曹玉清 , 王占新 , 陈鸿雁 . 白城地区开采含水层水的化学成分及其形成问题的探讨 [C] / 地质矿产部水文地质工程地质研究所 . 水文地球化学理论与方法的研究 . 北京 : 地质出版社 , 1985 : 42-49.
- [6] 梁秀娟 . 吉林西部洋沙泡水库水土环境中氟的迁移转化机理研究 [D]. 长春 : 吉林大学 , 2008 : 59-142.
- [7] 沈照理 , 王焰新 . 水-岩相互作用研究的回顾与展望 [J]. 地球科学 , 2002 , 27(2) : 127-134.

(收稿日期 2008-12-05 编辑 徐娟)