

<http://www.geojournals.cn/dzxb/ch/index.aspx>

新疆玛纳斯河流域平原地下水水-岩作用模拟

刘志明^{1,2)}, 刘少玉²⁾, 王贵玲²⁾

1) 南京大学地球科学系, 210093; 2) 中国地质科学院水文地质环境地质研究所,
石家庄, 050061

内容提要: 玛纳斯河流域平原区地下水化学演化较为复杂, 从上游至下游的变化特点主要以 Na^+ 、 Ca^{2+} 、 HCO_3^- 、 SO_4^{2-} 含量和 TDS 值的高低相间交替演化为主。本文对此演化机理进行了水-岩作用模拟研究, 模拟结果表明: ① 矿物相的溶解、析出和蒸发作用、稀释作用共同控制着地下水水化学的演化; ② 从研究区上游往下, 由于地层岩性颗粒逐渐变细, 水中矿物相迁入、迁出的数量逐渐增大, 水-岩作用逐渐增强; ③ 研究区上游的水-岩作用主要是地表水或灌溉水入渗补给的影响, 研究区中下游的水-岩作用主要受蒸发作用的影响; ④ 由于地表水或灌溉水的大量混入, 局部的水化学演化往往不符合一般演化规律, 甚至于往相反的方向演化, TDS 呈下降趋势, 产生复杂的过渡水化学类型。

关键词: 玛纳斯河流域平原区; 地下水化学; 演化; 水-岩作用; 新疆

自1967年 Garrels 和 Mackenzie 开展花岗岩风化作用的水-岩作用模拟(王丽等, 2003)以来, 水-岩作用模拟研究得到迅速发展。国际上许多学者对水-岩作用模拟都开展了深入研究, 也发表许多这方面的论文, 至今仍十分活跃。如 Earman 等(2004)进行了美国内华达州某金矿尾矿对地下水水质的影响研究; Toran 等(1999)对美国田纳西州 Oak 山脊印第安保留地沉积岩中 HCO_3^- -Na 型水的形成机制进行了研究, 认为阳离子交换和硅酸盐水解作用都可以解释 HCO_3^- -Na 型水的形成; Abu-Jaber 等(2003)对约旦河河谷北部地区潜水含水层退化和盐化的原因进行了分析, 提出了三个可能的盐分来源并分析了人类活动的影响; Causapé 等(2004)研究了灌溉对西班牙东北部 Arba 河和 Riguel 河河水盐度的影响; 等等……。与此同时, 也出现了许多用于水-岩作用模拟的软件。如 PHREEQE (Parkhurst et al., 1980)、CHILLER (Reed, 1982)、NETPATH (Plummer et al., 1994)和 PHREEQC (Parkhurst et al., 1999)等。水-岩作用模拟技术已基本成熟。

自上世纪九十年代末以来, 我国也深入开展了这方面的研究, 在实际应用和理论上取得了丰硕成果(文冬光等, 1995; 张翠云等, 1996; 郭永海等,

1997; 王东胜等, 1997; 王广才等, 1998; 王焰新等, 1998; Zheng Xilai et al., 2002)。这些研究多集中在我国中东部地区的河北、山东、河南和山西等省, 对于我国西北地区, 尤其是西北干旱内陆地区, 目前尚未见报道。而我国西部地区特有的环境与地下水化学环境演化息息相关, 造就了较为独特的地下水化学环境演化特征, 因此在我国西北干旱内陆地区开展地下水化学环境演化的水-岩作用模拟, 对认识该地区的地下水化学环境演化机制和地下水的形成演化具有一定的意义。

水-岩作用模拟可分为正向模拟和反向模拟两类(文冬光等, 1995)。本文根据已知地下水化学样进行反向模拟来研究水-岩作用。其基本思路是: 通过两个已知水点水化学组分的变化运用质量守恒原理、电子守恒原理和酸碱平衡原理等来揭示在蒸发或稀释条件下地下水流经在这两点之间时与围岩所发生的化学反应和质量迁移(溶解/析出)(王东胜等, 1997; Parkhurst et al., 1999)。

1 研究区概况

玛纳斯河流域平原区位于新疆天山北麓中段, 准噶尔盆地南缘。地理坐标为: $\text{E}85^\circ00'$ — $\text{E}86^\circ30'$,

注: 本文为中国地质调查局项目(编号 200310400034)资助成果。

收稿日期: 2005-11-29; 改回日期: 2006-03-31; 责任编辑: 刘淑春。

作者简介: 刘志明, 男, 1969年生。博士生, 副研究员, 从事水资源研究。Email: liuzhimingpeople@peoplemail.com.cn; 通讯作者: 王贵玲, 男, 1964年生。博士后, 研究员, 从事水资源研究。Email: Wguiling@heinfo.net。

N44°00'—N46°00'。属典型的大陆性气候区。降水量约100~200 mm,雨季为每年的5~9月份。蒸发量约1700 mm。多年平均气温约6.5℃,夏秋温暖,春冬寒冷。

以乌伊公路为界,以南的山前平原,为单一潜水含水层。含水层岩性主要为 Q_1 — Q_4 的卵石、卵砾石、砂砾石以及粗至细砂等,富水性和透水性较好。单井涌水量大于 $1000\text{ m}^3/\text{d}\cdot\text{m}$,渗透系数 $80\sim 130\text{ m/d}$ 。地下水埋深较深,大于50 m。以北的低平原区,为多层结构的潜水—承压水含水层。在100 m以内,分布着潜水含水层,潜水在玛纳斯、石河子以北的平原水库和144团附近溢出。以此为界,以南地区为上游,以北地区为中下游。原溢出带在乌伊公路附近,现已下移至目前位置。在溢出带以南含水层岩性与单一潜水含水层的相近,为 Q_3 — Q_4 地层;在溢出带以北主要为 Q_3 — Q_4 亚砂土、粉细砂,部分地段夹有砂砾石、粗中砂薄层。富水性和渗透性中至差,溢出带以南较好,往北较差。单位涌水量 $37\sim 1200\text{ m}^3/\text{d}\cdot\text{m}$,渗透系数 $1\sim 38\text{ m/d}$ 。在100 m以下,为深层承压水含水层,分布着多层承压水,并有自流水分布。含水层岩性主要为 Q_1 — Q_3 的卵砾石、砾石、砂砾石或砂层,越往北、往下岩性颗粒越细。富水性和渗透性中至差。单位涌水量 $200\sim 950\text{ m}^3/\text{d}\cdot\text{m}$,渗透系数 $7\sim 37\text{ m/d}$ 。乌伊公路以北的多层结构潜水—承压水分布区,潜水埋深都较浅,盐渍化土地广为分布。乌伊公路以北为研究主要的地表水和井灌区(图1)。

2 地下水水-岩作用模拟

2.1 剖面选择

在研究区选择沿地下水流动方向从山前补给区至玛纳斯河中游排泄区的I—I'路线做水-岩作用的模拟(图1),这些样点的化学组分以Na、Ca、Mg、K、C、S、Cl、N元素为主(表1)。除67、65号样为深层地下水样品外,其余的为浅层地下水样品。本文主要考虑潜水水化学演化。

潜水水化学组分沿所选剖面从上游至下游的变化特点主要以 Na^+ 、 Ca^{2+} 、 HCO_3^- 、 SO_4^{2-} 、 Cl^- 等含量

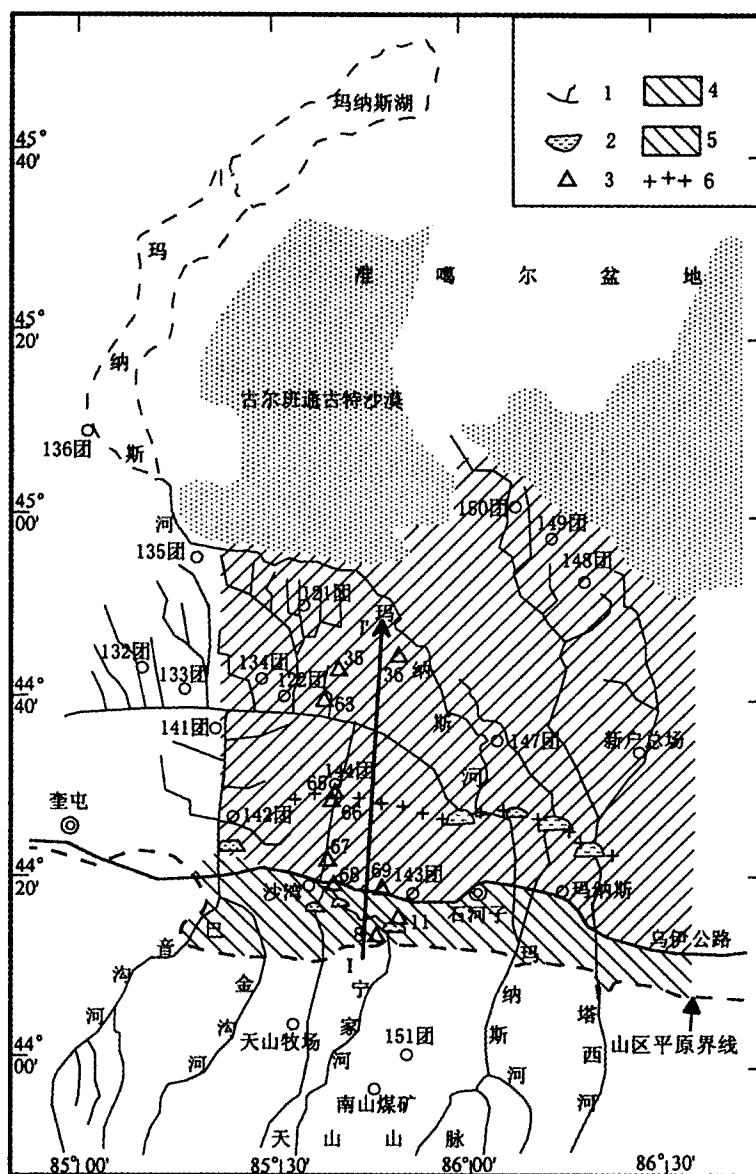


图1 水文地质略图和I—I'路线取样点分布图
Fig. 1 Hydrogeological sketch map and the distribution of samples along the I—I' route
1—河流、渠系;2—水库;3—取样点;4—单一结构潜水;
5—多层结构潜水—承压水;6—潜水溢出带
1—River and ditch; 2—reservoir; 3—sampling well; 4—single layer shallow water; 5—multi-layer shallow and confined water; 6—overflow zone of shallow water

和TDS值的高低相间交替演化为主(图2),水化学类型的变化规律为 $\text{HCO}_3\cdot\text{SO}_4\text{-Ca}\cdot\text{Na}\rightarrow\text{SO}_4\text{-Ca}\cdot\text{Na}\rightarrow\text{HCO}_3\text{-Ca}\rightarrow\text{HCO}_3\text{-Na}\cdot\text{Ca}\rightarrow\text{HCO}_3\cdot\text{SO}_4\text{-Na}$,表现出该地区地下水化学环境演化的复杂性。从上游至原溢出带(69号样处),主要由于混合淋滤作用的影响, Na^+ 、 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 、 K^+ 、 SO_4^{2-} 、 Cl^- 、 NO_3^- 含量和TDS逐渐升高, HCO_3^- 含量下降,水化学类型由 $\text{HCO}_3\cdot$

表 1 I—I' 路线样点水化学组分

Table 1 Chemical compositions of groundwater samples of the I—I' route

样号	井深(m)	K ⁺	Na ⁺	Ca ²⁺	Mg ²⁺	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	NO ₃ ⁻	NO ₂ ⁻	pH	t(°C)	TDS	水化学类型	位置
8	96	1.63	26.35	34.02	6.26	109.6		15.75	47.34	4.8	<0.002	7.95	13.6	300.56	HScn	上游
11	160-180	2.47	33.61	77.92	15.02	132		54.26	125.5	15.48	0.003	7.81	10.3	522.2	HScn	上游
69	57-58	3.83	66.87	135.5	19.38	93		92.77	325.6	34.5	0.008	6.15	12.2	817.9	Scn	上游
68	90	2.06	12.26	35.16	4.85	114.8		10.5	31.13	3.98	<0.002	7.85	16.7	272.13	Hc	上游
67	150	1.96	14.95	72.93	11.51	152.7		36.76	82.84	10.84	0.0128	7.65	15.6	460.85	HSc	上游
66	30-40	0.52	32.95	17.98	2.67	129.2		7	10.06	<0.20	<0.002	8.00	11.5	264.92	Hnc	上游
65	300	1.05	26.42	24.97	3.88	134.3		8.75	15.8	0.24	<0.002	7.65	11.5	282.57	Hcn	上游
63	36	0.24	58.28	5.59	1.58	104.5	12.42	11.55	30.17	<0.20	<0.002	8.95	12	276.54	Hn	中下游
35	45-46	0.28	66.31	6.39	0.61	111.9	5.65	12.25	34.48	<0.20	<0.002	8.84	13.3	293.84	Hn	中下游
36	30	1.6	252.7	33.97	22.78	370.3	8.47	106.8	234.6	0.28	<0.002	8.5	11.3	1217.15	HSn	中下游

注:单位:mg/L。H—HCO₃⁻;S—SO₄²⁻;c—Ca²⁺;n—Na⁺。

SO₄-Ca·Na 变化至 SO₄-Ca·Na;往下游,由于蒸发作用和地表水、灌溉水的影响,各离子的变化趋势有所不同,Na⁺、SO₄²⁻、Cl⁻含量下降后再逐渐升高,Ca²⁺、NO₃⁻含量逐渐下降,HCO₃⁻含量逐渐升高后再下降,TDS 下降后基本不变,水化学类型变化为 HCO₃-Ca、HCO₃-Na·Ca;至河排泄段(36号样处),主要由于蒸发作用影响,各离子含量又升高,水化学类型变化为 HCO₃·SO₄-Na。

2.2 矿物相选择与模型

研究区地层岩性以砂砾石、中—粗砂、粉细砂、亚砂土、亚粘土和粘土为主,含水层岩性以砂砾石、中—粗砂、粉细砂为主,属以铝硅酸盐为主的地层(王东胜等,1997)。其物质来源于南部山区。根据地质研究,南部山区主要分布着古生代至新生代的滨海相、海陆交互相、海相、陆相碎屑岩,火山碎屑岩,中酸性火山岩,碳酸岩以及变质岩,地层中分布的主要矿物有石英、长石类矿物、方解石、云母类矿

物、白云石、石膏和粘土矿物(新疆油气区石油地质志(上册)编写组,1993;成守德,1994;马应贤等,1996;杨天南等,2004;胡玲等,2005)。主要粘土矿物有伊利石、蒙脱石和高岭石(张立强等,2005)。钱亦兵等(2001)的研究证明,在第四系中也主要分布着上述矿物。蒙脱石和伊利石是长石类矿物在碱性条件下水解反应的产物,高岭石是长石类矿物在酸性条件下水解的产物(乐昌硕,1984),而研究区的地下水多偏碱性。需要指出的是岩盐和硝石一般在地层中较为少见,仅林瑞芬等(1998)在玛纳斯湖盆中心取样发现岩盐,但是根据我们表层土壤易溶盐的分析结果可知,浸出液中可以分析出 Cl⁻和 NO₃⁻,说明这两种组分是参与着水-岩作用的。然而 Cl⁻的来源机理尚不明确(王东胜等,1997),NO₃⁻的来源机理较复杂,甚至与有机物的化学过程有密切关系。因而,采用易溶的岩盐和硝石来模拟它们。在含水层中,它们不成矿的原因是由于它们的析出和溶解反复交替发生,并向下游迁移。因此,本次研究选择方解石、白云石、石膏、钠长石、钙长石、Ca-蒙脱石、伊利石、玉髓、岩盐、黑云母(云母)、硝石和阳离子交换剂来模拟地下水的水-岩作用。

I—I' 路线的水-岩作用模拟主要讨论的问题有以下两个方面:① 地下水的混合和稀释;② 地下水化学环境演化。主要有模型1:8,11号样→69号样和模型2:65,66号样→63号样;模型3:69号样→68号样;模型4:68号样→67号样;模型5:68号样→66号样;模型6:67号样→65号样;模型7:63号样→35号样;模型8:35号样→36号样。

本文在水化学分析软件 AQUACHEM 数据库建立和分析的基础上,运用 PHREEQC 软件进行上述模拟计算,其模型数学公式及求解详见文献

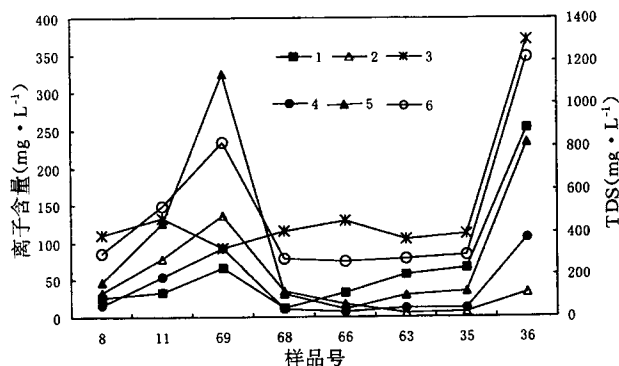


图 2 浅层地下水水化学组分剖面图

Fig. 2 Profile of shallow water chemical compositions

1--Na⁺; 2--Ca²⁺; 3--HCO₃⁻; 4--Cl⁻; 5--SO₄²⁻; 6--TDS

(Parkhurst et al., 1999)。PHREEQC 软件能够描述一维地下水系统中的多种地球化学过程,并可同时计算矿物相的饱和指数。

2.3 模拟结果选择

为了进行水-岩作用模拟的热力学检验,首先需

要计算地下水组分的存在形式,进而确定某些矿物的饱和指数。矿物的饱和指数采用 PHREEQC 软件计算,结果见表2。由此可知,在下列矿物中,仅有方解石会发生沉淀从水溶液中迁出,而其他矿物则发生溶解迁入水溶液。

表 2 水样点相对某些矿物的饱和指数

Table 2 Saturation indices of the groundwater with respect to some minerals

样号	8	11	69	65	66	63	68	67	35	36
无水石膏	-2.36	-1.71	-1.2	-2.92	-3.24	-3.29	-2.51	-1.89	-3.18	-1.92
方解石	-0.08	0.1	-1.53	-0.42	-0.22	0.12	-0.08	0.08	0.10	0.78
lgP _{CO₂}	-2.98	-2.79	-1.28	-2.60	-2.97	-3.99	-2.84	-2.54	-3.86	-3.05
白云石	-0.7	-0.39	-3.73	-1.51	-1.13	-0.14	-0.78	-0.42	-0.64	1.55
石膏	-2.11	-1.46	-0.94	-2.67	-2.99	-3.04	-2.26	-1.64	-2.93	-1.66
岩盐	-6.36	-5.74	-5.23	-6.60	-6.60	-6.14	-6.86	-6.25	-6.06	-4.59
硝石	-7.12	-6.53	-5.9	-8.41			-7.53	-7.03		-7.42

注:表中负数为未饱和状态,正数为饱和状态。P 为 CO₂分压。

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。如何能模拟出唯一解是当前模型面临的最困难的问题,这使模拟者需要做的一项艰巨工作就是从众多的模拟结果中寻找出最恰当的解,这个解首先要符合热力学原理;其次是要符合化学原理,如长石类、黑云母(云母)等的水解反应是不等全溶解反应(沈照理,1986),是不可逆反应;再次是要符合水文地质条件,如蒸发和稀释条件、阳离子交换条件以及氧化还原条件等;最后是模拟结果的数量级要合适。例如,模型2模拟的结果中,典型的水-岩作用模拟结果见表3所列。从65、66号样点流至63号样点,66号样和63号样的取样深度很浅,应受蒸发作用的影响,因而,结果1和2的混合比例和蒸发/稀释比例是不合理的,结果3和4的混合比例较合理。再根据方解石、白云石和二氧化碳的饱和指数,在水-岩作用过程中,应析出方解石、溶解白云石和吸收二氧化碳,因此,只有结果4符合热力学原理。综上所述,模型2最合理的结果是结果4,其水-岩作用过程可表示为:

1. 6500L[66号样组分]+1. 0630mmol[白云石]+0. 1460mmol[石膏]+2. 2710mmol[钙长石]+0. 1676mmol[Na⁺交换剂]+6. 8900mmol[玉髓]+2. 8150mmol[黑云母]→1. 0000L[63号样组分]+3. 8460mmol[方解石]+0. 9169mmol[Ca-蒙脱石]+4. 7180mmol[伊利石]+0. 3352mmol[Ca²⁺交换剂]+0. 6500L[H₂O]。

根据上述依据,按照类似模型2的结果筛选过程,I—I' 路线所选样点的水-岩作用模拟结果如表4

所示。

2.4 模拟结果讨论

从水-岩作用的结果来看,从研究区上游往下,水-岩作用逐渐增强,表现为矿物相迁入、迁出的数量逐渐增大。这是由于越往下游,地层岩性颗粒越细,接触的表面积越大,含易溶性矿物也越多,水在流过程中,与围岩交换的矿物量越大,水-岩作用也就越强烈。

2.4.1 地下水的混合和稀释

模型1:首先是在平原区上游,取样井较深,较难发生蒸发,地下水以混合为主,而8号样和11号样无

表 3 模型2的水-岩相互作用模拟典型结果

Table 3 Typical results of water-rock interaction simulation of model 2

结果编号	1	2	3	4
方解石	-0.9630	0.3058	-0.8077	-3.8460
白云石	0.4260	-0.8428	0.0023	1.0630
石膏	0.2141	0.2141	0.1460	0.1460
钙长石(钠长石)	0.0137	0.0137	(0.2846)	2.2710
Mg ²⁺ /Na ⁺ 交换	0.9572	0.9572		
Ca-蒙脱石				-0.9169
伊利石	-0.0119	-0.0119	-0.4743	-4.7180
Ca ²⁺ /Na ⁺ 交换			-0.1170	0.1676
玉髓		-1.6920		6.8900
岩盐	0.1284	0.1284		
黑云母(云母)	(0.0036)	(0.4265)	0.2688	2.8150
CO ₂ (g)	-0.1926	1.0760	-0.9169	
混合比例	0:1.0000	0:1.0000	0:1.6500	0:1.6500
蒸发/稀释比例			-0.6500	-0.6500

注:表中单位:mmol/L。正数表示迁入,负数表示迁出。离子交换:正数表示 Mg²⁺或 Ca⁺迁出,Na⁺迁入;负数则反之;数量以 Na⁺来计量。蒸发/稀释比例:正数表示稀释,负数表示蒸发。

表 4 I—I' 路线水样点的水-岩作用模拟结果

Table 4 The water-rock interaction simulation results of groundwater samples of the I—I' route

模型	方解石	白云石	石膏	钠长石	钙长石	Ca 蒙脱石	伊利石	Ca ²⁺ / Na ⁺ 交换	玉髓	岩盐	黑云母 (云母)	CO ₂ (g)	硝石	混合 比例	蒸发/稀 释比例
1	-0.7299	0.1942	2.0710	0.0432		-0.0645				1.1160	0.0357	2.2330	0.3139	0.03978:0.9602	
2	-3.8460	1.0630	0.1460		2.2710	-0.9169	-4.7180	0.1676	6.8900		2.8150			0:1.6500	-0.6500
3	0.4806	0.1286		0.2135		-0.1478			-0.2291	0.0530	0.0436	0.7547	0.0125	0.0929	0.9071
4	-0.2736	0.2947	0.5347	0.0459			-0.0765	-0.7794		0.7302	0.0433	0.3868	0.1107	1.0000	
5	0.7203	0.0595	0.0229					1.1710		0.1227		0.8701	-0.0162	0.2520	0.7480
6	-1.7560	2.0090	0.1457	0.9279		1.1650	-7.4410		5.5120	0.2242	4.4900			0.0220	0.9780
7	-0.9979	0.4079	0.0218	1.1680		-0.1102	-1.8230	-1.1700			1.0940	0.0592		1.1600	-0.1600
8	-4.1910	-0.3913	0.3603		1.3750	-1.1800		-5.9830		0.9501	(0.3953)		0.0045	5.7190	-4.7190

注:表中单位:mmol/L。正数表示迁入,负数表示迁出。离子交换:正数表示 Ca²⁺ 迁出,Na⁺ 迁入;负数则反之;数量以 Na⁺ 来计量。蒸发/稀释比例:正数表示稀释,负数表示蒸发。

论怎样混合,其 Cl⁻ 含量都要小于 69 号样的 Cl⁻,因而在混合过程中,发生复杂的水-岩作用。其次是从样点分布图来看,69 号样的地下水主要来源于上游水库的渗漏补给,而 11 号样位于水库的下游附近,8 号样位于水库的上游,正说明 11 号样的地下水是 69 号样的主要补给来源。再从 Cl⁻ 含量来看,Cl⁻ 含量与 69 号样接近的 11 号样的混合比例比较高,说明模型的混合比例较合理。

模型 2: 从水文地质条件分析,66 号样和 63 号样均为浅层地下水样,65 号样为深层地下水样,其水化学特征与附近的 66 号样有较大差别,65、66 号样流至 63 号样的区域为平原区中下游,是冲洪积扇以下的细土带平原,深、浅层地下水之间发育着较稳定的相对隔水层,65 号样地下水很难与 66 号样混合形成 63 号样地下水,即使发生混合,其混合比例也要比 66 号样的小数量级。而且,66 号样和 63 号样的取样井深很浅,地下水应受蒸发作用影响。在模拟结果中,符合条件的 65 号样混合比例都约等于 0。再从 Cl⁻ 来分析,63 号样的 Cl⁻ 含量/66 号样的 Cl⁻ 含量=1.65。说明模型的混合比例和蒸发比例较为合理。

模型 3、5、6 的稀释比例较高,应有其他水源的混入。从水文地质条件分析,主要是地表水或灌溉水的入渗补给。

2.4.2 地下水化学环境演化

地下水中的 Ca²⁺ 主要由长石类矿物、方解石、白云石、石膏、钙蒙脱石和阳离子交换吸附作用等控制;地下水中的 Na⁺ 主要由长石类矿物、氯化物、硝石和阳离子交换吸附作用等控制;地下水中的 Mg²⁺ 主要由白云石、黑云母(云母)和伊利石等控制;地下水中的 HCO₃⁻ 主要由方解石、白云石和二氧化碳气体等控制;地下水中的 SO₄²⁻、C⁻ 和 NO₃⁻ 分别由石

膏、氯化物和硝石控制。从研究区上游往下,方解石除个别样点外,始终处于析出状态,且析出量逐渐增大;白云石、硝石除个别样点外,始终处于溶解状态;长石类矿物、石膏、黑云母(云母)、氯化物始终处于溶解状态;钙蒙脱石和伊利石多数处于析出状态;部分样点的演化吸收二氧化碳气体。越往下游,地层岩性颗粒越细,阳离子交换吸附作用越容易发生,阳离子交换吸附量也越大,模拟结果主要发生 Ca²⁺、Na⁺ 的阳离子交换吸附作用,在实际中,是否发生这样的阳离子交换吸附作用有待于进一步验证。从研究区上游往下,由主要以发生地下水、地表水(灌溉水)的混合作用为主逐渐转换为主要以发生蒸发作用为主。

与地下水化学类型演化规律对应,其水-岩作用的特点也有所不同。

模型 1 中,地下水化学类型从 HCO₃-SO₄-Ca-Na 水演化成 SO₄-Ca-Na 水,水化学组分除 HCO₃⁻ 含量降低外,其他离子含量和 TDS 均升高。水-岩作用以吸收二氧化碳,溶解石膏和氯化物,析出方解石为主要特征。

模型 2 中,地下水化学类型从 HCO₃-Na-Ca 水演化成 HCO₃-Na 水,水化学组分 Na⁺、SO₄²⁻、Cl⁻ 含量升高,其他主要阳离子和 HCO₃⁻ 含量降低,TDS 略有上升。水-岩作用以溶解黑云母、钙长石、石英(玉髓),析出伊利石、方解石,发生 Na⁺、Ca²⁺ 阳离子交换吸附作用,发生蒸发作用为主要特征。

模型 4 中,地下水化学类型从 HCO₃-Ca 水演化成 HCO₃-SO₄-Ca 水,水化学组分除 K⁺ 含量有所降低外,其余主要离子含量和 TDS 均升高。水-岩作用以吸收二氧化碳,溶解石膏、氯化物,析出方解石,发生 Na⁺、Ca²⁺ 阳离子交换吸附作用为主要特征。

模型5中,地下水化学类型从 $\text{HCO}_3\text{-Ca}$ 水演化成 $\text{HCO}_3\text{-Na-Ca}$ 水,水化学组分除 Na^+ 、 HCO_3^- 含量升高外,其他主要离子含量均降低,TDS 也有所降低。水-岩作用以吸收二氧化碳,发生 Na^+ 、 Ca^{2+} 阳离子交换吸附作用,发生地表水或灌溉水混入为主要特征。

模型7中,地下水化学类型均为 $\text{HCO}_3\text{-Na}$ 水,水化学组分除 Mg^{2+} 含量降低外,其他主要离子含量和 TDS 均有所升高。水-岩作用以吸收二氧化碳,溶解钠长石、黑云母,析出伊利石、方解石,发生 Na^+ 、 Ca^{2+} 阳离子交换吸附作用,发生蒸发作用为主要特征。

模型8中,地下水化学类型从 $\text{HCO}_3\text{-Na}$ 水演化成 $\text{HCO}_3\text{-SO}_4\text{-Na}$ 水,水化学组分含量和 TDS 均升高。水-岩作用以溶解钙长石、氯化物,析出方解石、Ca 蒙脱石,发生 Na^+ 、 Ca^{2+} 阳离子交换吸附作用,蒸发大量水分为主要特征。

模型3、6中,由于地表水或灌溉水的大量混入,水化学演化往往不符合一般演化规律,甚至于往相反的方向演化,TDS 由大变小。如模型3中,水化学类型就从 $\text{SO}_4\text{-Ca-Na}$ 水演化成 $\text{HCO}_3\text{-Ca}$ 水;模型6中,水化学类型从 $\text{HCO}_3\text{-SO}_4\text{-Ca}$ 水演化成 $\text{HCO}_3\text{-Ca-Na}$ 水,其阳离子符合一般的演化规律,而其阴离子则往相反的方向演化,产生复杂的过渡水化学类型。

从原溢出带至中下游的35号样,TDS 呈现出总体下降的趋势,主要是由于地表水或灌溉水的大量混入造成的。在模型3、5、6中,稀释比例都比较高。但从现溢出带至35号样,蒸发作用又占了主导地位。模型2、7,出现蒸发作用,只是由于地表水或灌溉水的渗入,使蒸发作用不如模型8的强烈。

3 结语

通过上述水-岩作用模拟,主要取得以下几点认识。

(1) 从研究区上游往下,由于地层岩性颗粒逐渐变细,接触的面积越大,含易溶性矿物也越多,水中矿物相迁入、迁出的数量逐渐增大,水-岩作用逐渐增强。

(2) 从研究区上游往下,方解石除个别样点外,始终处于析出状态,且析出量逐渐增大;白云石、硝石除个别样点外,始终处于溶解状态;长石类矿物、石膏、黑云母(云母)、氯化物始终处于溶解状态;钙蒙脱石和伊利石多数处于析出状态;部分样点的演

化吸收二氧化碳气体。越往下游,地层岩性颗粒越细,阳离子交换吸附作用越容易发生,阳离子交换吸附量也越大,模拟结果主要发生 Ca^{2+} 、 Na^+ 的阳离子交换吸附作用。这些矿物相的溶解、析出和蒸发作用、稀释作用共同控制着地下水水化学的演化。

(3) 研究区上游模型1、3、5、6的水-岩作用主要受地表水或灌溉水入渗补给的影响,研究区中下游模型2、7、8的水-岩作用主要受蒸发作用的影响。

(4) 模型3、6中,由于地表水灌溉水的大量混入,水化学演化往往不符合一般演化规律,甚至于往相反的方向演化,产生复杂的过渡水化学类型,TDS 呈下降趋势。

值得注意的是,在既有蒸发作用又有稀释作用的地段,模型中只考虑了其综合后的情况,而没有分别考虑这两种作用,模拟结果和实际情况有一定的出入。这有待于今后进一步深入研究和完善。

注 释

- ① 中国地质大学(北京). 1998. 水资源开发利用条件下的地下水系统水循环以及与地表水转化关系研究. 国家“九五”科技攻关项目科研报告,5~47.

参 考 文 献

- 成守德. 1994. 新疆北部地层、岩相古地理特征及成矿作用的关系. 新疆地质,12(1):40~47.
- 郭永海,沈照理,钟佐森. 1997. 河北平原地下水化学环境演化的地球化学模拟. 中国科学(D辑),27(4):360~365.
- 胡玲,何登发,胡道功. 2005. 准噶尔盆地南缘霍尔果斯—玛纳斯—吐谷鲁断裂晚新生代构造变形的 ESR 测年证据. 地球学报,26(2):121~126.
- 乐昌硕. 1984. 岩石学. 北京:地质出版社,57~60.
- 林瑞芬,卫克勤. 1998. 新疆玛纳斯湖沉积物氧同位素记录的古气候信息探讨——与青海湖和色林错比较. 第四纪研究,(4):308~316.
- 马应贤,汪海清,胡泽万. 1996. 新疆·地学·研究. 乌鲁木齐:新疆人民出版社,29~36.
- 钱亦兵,周兴佳,李崇舜,等. 2001. 准噶尔盆地沙漠沙矿物组成的多源性. 中国沙漠,21(2):182~186.
- 沈照理. 1986. 水文地球化学基础. 北京:地质出版社,60~62.
- 王丽,王金生,林学钰. 2003. 水文地球化学模型研究进展. 水文地质工程地质,(6):105~109.
- 王东胜,沈照理,钟佐森,等. 1997. 石家庄平原地下水化学演化的质量平衡模拟. 地质论评,43(4):432~440.
- 王广才,陶涛,沈照理,等. 1998. 平顶山矿区岩溶水文地球化学模拟及其应用. 中国科学(D辑),28(3):245~246.
- 王焰新,马腾,罗朝晖,等. 1998. 山西柳林泉域水——岩相互作用地球化学模拟. 地球科学—中国地质大学学报,23(5):519~522.
- 文冬光,沈照理,钟佐森. 1995. 地球化学模拟及其在水文地质中的应用. 地质科技情报,(1):99~104.
- 新疆油气区石油地质志(上册)编写组. 1993. 新疆油气区(上册)——准噶尔盆地. 见:中国石油地质志编写组. 中国石油地质志,第十

- 五卷. 北京:石油工业出版社, 57~88.
- 杨天南, 李锦轶, 文中田, 等. 2004. 中天山地块南北两缘的韧性剪切带. 地质学报, 78(3): 310~318.
- 张翠云, 刘文生. 1996. 河北平原浅层地下水地球化学演化模拟. 地学前缘, 3(1~2): 245~248.
- 张立强, 罗晓容, 刘楼军, 等. 2005. 准噶尔盆地南缘新生界粘土矿物分布及影响因素. 地质科学, 40(3): 363~375.
- Abu-Jaber N, Ismail M. 2003. Hydrogeochemical modeling of the shallow groundwater in the northern Jordan Valley. *Environmental Geology*, 44: 391~399.
- Causapé J, Auqué L, Gimeno M J, et al. 2004. Irrigation effects on the salinity of the Arba and Riguel Rivers (Spain): present diagnosis and expected evolution using geochemical models. *Environmental Geology*, 45: 703~715.
- Cheng Shoude. 1994. Characters of stratum, sedimentary facies and palaeogeography and its relationship with mineral deposits in north of Xinjiang. *Xinjiang Geology*, 12(1): 40~47 (in Chinese).
- Earman S, Hershey R L. 2004. Water quality impacts from waste rock at a Carlin-type gold mine, Elko County, Nevada. *Environmental Geology*, 45: 1043~1053.
- Editorial Committee of "Petroleum Geology of Xinjiang Oil and Gas Bearing Areas (First Part)". 1993. Xinjiang Oil and Gas Bearing Areas (First Part): Jungger Basin. In: Editorial Committee of "Petroleum Geology of China". *Petroleum Geology of China*, Vol. 15. Beijing: Petroleum Industry Press, 57~88 (in Chinese).
- Guo Yonghai, Shen Zhaoli, Zhong Zuoshen. 1997. Hydrogeochemical modeling of groundwater chemical environmental evolution in Hebei Plain. *Science in China (series D)*, 27(4): 360~365 (in Chinese).
- Hu Ling, He Dengfa, Hu Daogong. 2005. Electron Spin Resonance dating of the late Cenozoic deformation of the Huoerguosi-Manas-Tugulu reverse faults along southern edge of Junggar Basin. *Acta Geoscientica Sinica*, 26(2): 121~126 (in Chinese with English abstract).
- Le Changshuo. 1984. *Petrology*. Beijing: Geological Publishing House, 57~60 (in Chinese).
- Lin Ruifen, Wei Keqin. 1998. Palaeoclimate implications of oxygen isotope record from lacustrine sediments of Manas Lake, Xinjiang: A comparison with those from Qinghai Lake and Sling Lake. *Quaternary Sciences*, (4): 308~316 (in Chinese with English abstract).
- Ma Yingxian, Wang Haiqing, Hu Zewan. 1996. Xinjiang geology and geography research. Urumchi: Xinjiang people publishing House, 29~36 (in Chinese).
- Plummer L N, Prestemon E C, Parkhurst D L. 1994. An interactive code (NETPATH) for modelling NET geochemical reactions along a flow PATH-version 2.0. *USGS Report*, 95~4169.
- Parkhurst D L, Appelo C A J. 1999. User's guide to PHREEQC (version2)-a computer program for speciation, batch-reaction, one dimensional transport, and inverse geochemical calculations. *USGS Water Resour Invest Rep*, 99~4259.
- Parkhurst D L, Thorstenson D C, Plummer L N. 1980. PHREEQE-A computer program for geochemical calculations. *USGS Water Resour Invest Rep*, 80~96.
- Qian Yibing, Zhou Xingjia, Li Chongshun, et al. 2001. Multi-sources of sand minerals for the deserts in the Jungger Basin. *Journal of Desert Research*, 21(2): 182~186 (in Chinese with English abstract).
- Reed M H. 1982. Calculation of multicomponent chemical equilibria and reaction processes in systems involving minerals, gases, and an aqueous phase. *Geochim Cosmochim Acta*, 46: 513~528.
- Shen Zhaoli. 1986. Basic hydrogeochemistry. Beijing: Geological Publishing House, 60~62 (in Chinese).
- Toran L E, Saunders J A. 1999. Modeling alternative paths of chemical evolution of Na-HCO₃ type groundwater near Oak Ridge, Tennessee, USA. *Hydrogeology Journal*, 7: 355~364.
- Wang Dongsheng, Shen Zhaoli, Zhong Zuoshen, et al. 1997. Mass balance modeling of the evolution of groundwater chemistry in the Shijiazhuang Plain. *Geological Review*, 43(4): 432~440 (in Chinese with English abstract).
- Wang Guangcai, Tao Shu, Shen Zhaoli, et al. 1998. Hydrogeochemical modeling and its application in karstological water: A case study from the Pingdingshan Coalfield, Henan. *Science in China (series D)*, 28(3): 245~246 (in Chinese).
- Wang Li, Wang Jinsheng, Lin Xueyu. 2003. A review of hydrogeochemical modeling. *Hydrogeology and Engineering Geology*, (6): 105~109 (in Chinese with English abstract).
- Wang Yanxin, Ma Teng, Luo Zhaohui, et al. 1998. Geochemical modeling of water-rock interactions in the Liulin karst system, Shanxi Province. *Earth Science—Journal of China University of Geosciences*, 23(5): 519~522 (in Chinese with English abstract).
- Wen Dongguang, Shen Zhaoli, Zhong Zuoshen. 1995. Geochemical modeling and its applications in hydrogeology. *Geological Science and Technology Information*, (1): 99~104 (in Chinese with English abstract).
- Zhang Cuiyun, Liu Wensheng. 1996. Geochemical evolution simulation of shallow groundwater in Hebei Plain. *Earth Science Frontiers (China university of Geosciences, Beijing)*, 3(1~2): 245~248 (in Chinese with English abstract).
- Zhang Liqiang, Luo Xiaorong, Liu Loujun, et al. 2005. Controls on clay mineral distribution in the Cenozoic sediments of the southern Jungger Basin, NW China. *Chinese Journal of Geology*, 40(3): 363~375 (in Chinese with English abstract).
- Zheng Xilai, Balke K D, Armannsson H, et al. 2002. A developed technique for calculating the mass transfer between contaminated groundwater and porous media. *Environmental Geology*, 42: 982~988.
- Yang Tiannan, Li Jinyi, Wen Zhongtian, et al. 2004. Ductile shearing zones occurring along the northern and southern boundary of the Central Tianshan Block. *Acta Geological Sinica*, 78(3): 310~318 (in Chinese with English abstract).

Water-rock Interaction Simulation of Groundwater in the Plain of Manasi River Basin, Xinjiang

LIU Zhiming^{1,2)}, LIU Shaoyu²⁾, WANG Guiling²⁾

1) *Department of Earth Sciences, Nanjing University, Jiangsu, Nanjing, 210093*

2) *Institute of Hydrogeology
and Environmental Geology, CAGS, Hebei, Shijiazhuang, 050061*

Abstract

In the plain of Manasi River Basin, chemical evolution is complex comparatively. From upstream to downstream area, the variation characteristics are mainly that the content of Na^+ , Ca^{2+} , HCO_3^- , SO_4^{2-} and the value of TDS change between high and low by turns. The water-rock interaction simulation has been applied to study the mechanism of it, the simulation results indicate as follows: (1) Dissolution/precipitation of minerals, evaporation and dilution control the chemical evolution of groundwater jointly; (2) In study area, from upstream area to downstream area, because lithology granularity becomes fine gradually, the dissolution/precipitation amount of minerals in groundwater increases gently, the water-rock interaction becomes intense accordingly; (3) The water-rock interaction in upstream area undergoes the influence of surface water or irrigation water recharge chiefly, and in middle reaches and downstream area undergoes the influence of evaporation mainly; (4) Because of the large recharge of surface water or irrigation water, the chemical evolution in some areas sometimes doesn't accord with general orderliness, even changes into reverse direction, TDS Value becomes lower, and produces complex middle chemical types.

Key words: the plain of Manasi River Basin; groundwater chemistry; evolution; water-rock interaction; Xinjiang