维普资讯 http://www.cqvip.com

文章编号:1004-4574(2007)04-0169-05

鄂尔多斯白垩系环河含水岩组中的地球化学反向模拟

栾长青[1],唐益群[1],高文冰[2],夏岩[2],崔振东[1]

(1 同济大学 岩土及地下工程教育部重点实验室,上海 200092 2 长庆油田勘探开发研究院,陕西 西安 710021)

摘要:在了解鄂尔多斯盆地的地形、地势、地貌、新构造运动、岩石类型、岩性构造和其他特征的基础上,运用化学热力学原理、质量作用定律和质量守恒定律,用反向模拟的方法对白垩系环河组地下水进行了水-岩作用的地球化学模拟。对该区地下水的演化过程进行了定量的分析研究,揭示了其水化学场的形成机理,总结了矿物的溶解沉淀规律,为该区水文地质模型的建立、地下水资源的水质水量评价及其合理开发利用和科学管理提供了科学依据,可供该地区水土流失等地质灾害的预防和综合治理参考。

关键词:鄂尔多斯盆地;白垩系;地下水;地球化学模拟;地质灾害

中图分类号:P64 **文献标识码**:A

Geochemical inverse simulation of Huanhe water-bearing layers in Ordos Cretaceous Basin

LUAN Chang-qing[1], TANG Yi-qun[1], GAO Wen-bing[2], XIA Yan[2], CUI Zheng-dong[1]

(1. Key Laboratory of Geotechnical and Underground Engineering of Ministry of Education, Tongji University, Shanghai 200092, China;
2. Exploration & Development Research Institute of Changqing Oilfield, Xi'an 710021, China)

Abstract: Based on the understanding of Ordos Basin's topography, landform, physiognomy, neotectonics, rock type, lithology and other characters, the chemistry, thermodynamics, mass action law and mass conservation law were used to simulate inversely the water-rock interaction of groundwater in Ordos Cretaceous Basin. Quantitative analysis of the local groundwater evolution were carried out, which has disclosed formative mechanism of hydrochemical field and summarized the law of mineral solution/precipitation. And all these give an scientific reference to establishment of hydrological model and quality/quantity evaluation, reasonable development/utilization and scientific management of underground resources.

Keywords: Ordos Basin; Cretaceous system; groundwater; geochemical simulation; geological hazards

鄂尔多斯白垩系地下水盆地位于我国西北地区东部,地跨陕、甘、宁、晋、内蒙五省(区),属黄河中游地区。同时,鄂尔多斯盆地白垩系地下含水系统也是目前世界上仅次于澳大利亚大自流盆地的又一特大型自流水盆地[1],盆地含水岩组的岩性分布规律、水资源量、水化学以及循环运动状态与早白垩系时盆地沉积环境、成岩作用、岩相古地理以及含水岩组岩层的沉积特征密切相关。该区矿产资源丰富、经济发展潜力大,但

收稿日期:2007-04-10; 修订日期:2007-07-11

基金项目:国家自然科学基金项目(01002233)

作者简介:栾长青(1977-),男,博士研究生,主要从事土木工程与水文地质研究. E-mail:kaobo2005@163.com

维普资讯 http://www.cqvip.com

水资源的短缺成为制约当地经济发展的主要因素之一。而鄂尔多斯白垩系地下水水质变化复杂,地下水化学类型多样,各含水岩组的水质、水量差别很大,咸水或微咸水分布面积广泛。开展鄂尔多斯盆地白垩系地下水化学环境演化规律的研究,对于认识白垩系地下水与环境之间的相互作用关系,查明白垩系地下水的赋存特征、地下水的富集规律以及地下水的补给、径流、排泄条件,评价区域地下水远景资源及其开发潜力,促进该地区社会经济发展和生态环境保护以及防止水土流失均具有重要的理论意义与实际意义。

1 鄂尔多斯白垩系地下水盆地概况

1.1 地形地貌

鄂尔多斯白垩系地下水盆地大致以北纬37°30′的盐池—靖边一线为界分为南北两种地貌类型。北部为鄂尔多斯构造剥蚀高原,地形呈波状起伏,海拔1100~1600m,相对高差30~80m。按形态的特征又可分为四种类型,即丘陵、波状高原、沙漠、河流阶地。总的特点是地形起伏不大,其分布有岛状残山、桌状高台、台间宽谷洼地等,地表水系不发育,高原中部白垩系志丹群砂岩多裸露地表,在高原南、北部风积沙广布,形成毛乌素沙漠和库布齐沙漠。散布于沙漠间的湖盆草滩,水草丰盛,为沙漠中的绿洲。

南部为陕北、陇东构造侵蚀黄土高原,是我国黄土高原的主要组成部分。海拔一般为1100~1500m,地势西北高,东南低,上覆黄土厚度一般为数十米至百余米,其中以陇东的董志塬厚度最大,达200m。由于流水的侵蚀切割,形成沟壑纵横、支离破碎的各种黄土地貌形态,南部多为黄土残塬,北部则以黄土梁峁为主,梁峁及残塬间沟壑十分发育,地貌按成因和形态类型可分为黄土塬、黄土梁、黄土峁、黄土覆盖的基岩山地及河流阶地5种类型。

1.2 地层构造

根据陕西岩石地层划分方案[2]以及近年水文地质研究成果[3],将鄂尔多斯盆地白垩系自下而上划分为洛河组、环河华池组、罗汉洞组和泾川组4个主要岩石地层单位和洛河组、环河华池组、罗汉洞组3个主要含水岩组(表1)。各个岩石地层单元的界限主要依据区域性沉积间断面、沉积相突变面划分,单元内岩性特征及单元之间的界限特征不仅在露头剖面清晰可辨,而且在盆内有明显的测井曲线响应特征和变化标志。

表1 鄂尔多斯盆地下白垩统主要岩石地层单位表

Table 1 Main lithostratigraphical unit of lower Cretaceous series, Ordos Basin

岩层组	含水层段	岩层段	厚度/m	岩石类型	沉积相	二级沉积旋回	一级沉积旋回
泾川组			0~260	杂色沙泥岩	残留湖相	7	
罗汉洞组	3	上段	0~180	中细砂岩	风成沙漠	6	I
		下段	0~35	含砾细砂岩	河流相	5	
环河华池组	2	上段	200~500	粉细砂岩与泥岩	风成三角洲相	4	
		下段	160~460	粉细砂岩与泥岩	风成三角洲相	3	
洛河组	1	上段	110~430	中细砂岩	风成沙漠	2	II
		下段	0~46	砾岩及含砂砾岩	冲积扇相	1	

1.3 水文、地质概况

区内的水系分为外流和内流两部分。前者均属于黄河水系。大致以白于山为界,以北的鄂尔多斯高原水系不发育,水文网稀疏,河流较短小,河床多宽浅,流量小且多为季节性河流,水量一般较小,在地形低洼处有内流河汇集形成众多的湖泊,因蒸发强烈,故多为盐碱湖。白于山以南,水系极为发育,水文网密度大,多呈树枝状展布。其特点是历年径流量变化较大,洪峰流量大,泥沙含量高,多常年流水。各河流一般溯源侵蚀强烈,下切深度较大,多切割至基岩。由于地表水多来源于大气降水,故河流、湖泊水量均受气候控制。枯水季节依赖于地下水补给,流量较小;雨季则受大气降水补给,流量猛增,常形成暴涨暴落、历时很短的洪水。7,8,9三个月各河流量约占全年径流总量的50%~80%,此时携带大量泥沙流出区外,造成严重的水土流失,年侵蚀模数最大可达$10^4 \sim 3 \times 10^4 m^3/(a \cdot km^2)$,是黄河泥沙的主要来源区。

区内黄河水系中,较大的一级支流发育在东部,有窟野河、无定河等,较小的一级支流发育在盆地的西部和北部,有都思兔河(苦水沟)、西柳河、罕台川、哈什拉川、呼斯太沟、母花河等。较大的二级支流发育在盆

维普资讯 http://www.cqvip.com

地南部,有渭河的支流泾河、洛河等。区内的河流流向以东南为主,外流水系最终汇入黄河。

鄂尔多斯白垩系地下水盆地是中生代大型陆相沉积盆地,其构造形态为东翼宽缓西翼窄陡的不对称向斜,轴部位于天池至环县南北一线。盆地经多旋回阶段的发育过程,具有多旋回的构造层。早白垩纪初期为统一的内陆湖盆地,形成了沿向斜轴部呈串珠状排列的内蒙盐海子、苦水沟、宁夏红柳沟和陇东镇远等四个拗陷中心及第一至第四岩段与第五至第六岩段两个沉积旋回。至晚期,构造运动使本区缓慢上升,中部广大地区隆起,湖盆解体,湖水向北向西退缩,盐海子拗陷即为搬运介质和湖水退缩的通道。盆地经燕山运动使边缘褶皱加剧,并在内部产生了一系列近东西向的断层,使盆地西北部和北部边界更加破碎,形成了缺口,为白垩系地下水(图1)开启了排泄通道。

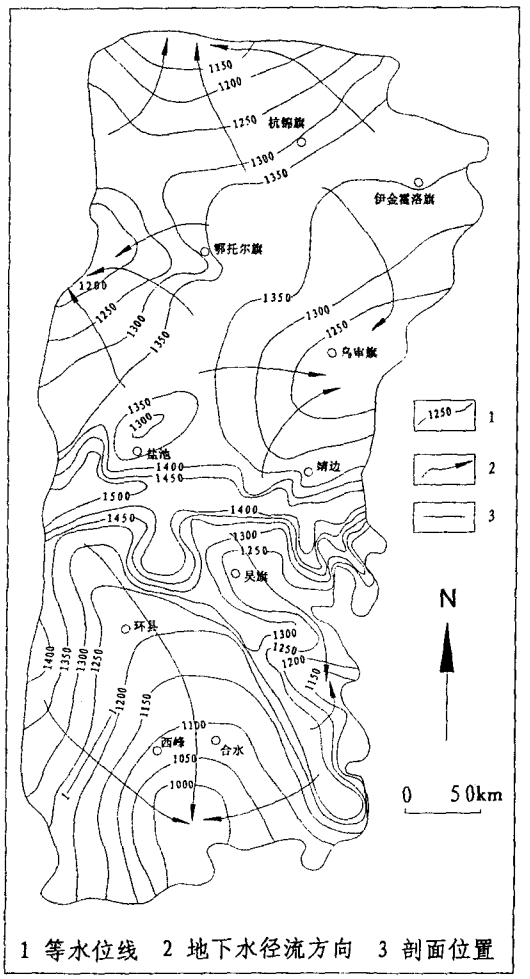


图1　白垩系地下水等水位图

Fig. 1　Contour of groundwater level in Ordos Cretaceous system

2　水文地球化学模拟方法

2.1　反向地球化学模拟原理

反向地球化学模拟就是依据观测到的化学和同位素资料来确定系统中所进行的水-岩反应,也就是对观测到的水化学资料做出解释。这类模拟主要在于解决某一地下水流场中地下水的地球化学演化路径问题,即了解某一水化学系统中发生了哪些水-岩反应,有哪些矿物发生了溶解、沉淀,其量各是多少等问题。反向地球化学模拟是建立在质量守恒模型基础之上的,其形式是初始水和反应物相生成中止水和生成物象。

2.2　反向地球化学模拟的数学模型

反向模拟数学模型是由一系列质量平衡方程组成,元素和价态的摩尔平衡方程:

$$\sum_{q}^{Q} c_q\alpha_q + (T_{m,q} + \delta_{m,q}) + \sum_{q}^{P} c_{m,p}\alpha p + \sum_{r}^{R} c_{m,r}\alpha_r = 0 \tag{1}$$

式中,Q 指参与计算的溶液数,c_q 为溶液 q 中的化学计量数,$T_{m,q}$为元素或价态 m 在溶液 q 中的总摩尔数,$c_{m,r}$为氧化还原反应 r 中主要组分 m 的系数,$c_{m,p}$为 P 相电离反应中主要组分 m 的系数,$\delta_{m,q}$为分析数中说明非确定项的系列未知数。

碱度摩尔平衡方程:

$$\sum_{q}^{Q} c_q\alpha_q + (T_{\mathrm{alk},q} + \delta_{\mathrm{alk},q}) + \sum_{q}^{P} c_{\mathrm{alk},r}\alpha_r + \sum_{r}^{R} c_{\mathrm{alk},p}\alpha_p = 0 \tag{2}$$

水的摩尔平衡:

$$\sum_{q}^{Q} \frac{\omega_{aq,q}}{GFW_{\mathrm{H_2O}}} c_q\alpha_q + \sum_{q}^{P} c_{\mathrm{H_2O},r}\alpha_r + \sum_{p}^{P} c_{\mathrm{H_2O},p}\alpha_p = 0 \tag{3}$$

式中,$GFW_{\mathrm{H_2O}}$为水的摩尔质量,$\omega_{aq,q}$为溶液相 q 中水的质量,$c_{\mathrm{H_2O},r}$为溶液氧化还原反应中水的化学计量数,$c_{\mathrm{H_2O},p}$为 p 相溶解反应中水的化学计量数。

电子摩尔平衡

$$\sum_{r}^{R} c_{e^-,r}\alpha_r + \sum_{p}^{P} c_{e^-,p}\alpha_p = 0 \tag{4}$$

式中,c_{e^-}表示氧化还原反应、溶解反应中释放或消耗的电子数。

维普资讯 http://www.cqvip.com

电荷摩尔平衡方程;

$$\sum_{m}^{M} Z_m \delta_{m,q} = - T_{z,q} \tag{5}$$

式中，$T_{z,q}$为溶液相 q 中电荷非平衡总和,该总和值包括非零浓度的所有元素及价态。最后运用 Newton – Raphson 优化,加上平衡限制,由式(1)～(5)联立方程求解。

3 工程实例

3.1 剖面选择

水－岩作用的地球化学模拟要求的基本条件是:所模拟的两个或多个点之间必须是地下水径流上下游的关系即要处于同一水流路径上。还要清楚进行模拟的地段在整个含水层系统中是处于补给区、径流区或是排泄区,这些对我们选择正确的"可能矿物相"有重要的意义。本文主要研究鄂尔多斯白垩系南区地下水的演化规律,通过对南区环河含水岩组的流场图分析,选择了位于南区地下水分水岭西侧的位置(图 1)。以 275 和 284 的水样为例,地下水初始数据见表 2。

表 2 水样初始数据

Table 2 Initial data of water samples mg · L^{-1}

水样	PH 值	$Na^+ + K^+$	Ca^{2+}	Mg^{2+}	Cl^-	SO_4^{2-}	HCO_3^-	F^-	可溶性 SiO_2
275	8.5	63.6	38.3	27.5	26.6	54.2	256.3	0.05	11.6
284	7.5	185.2	220.8	167.6	723.2	296.6	332	0.09	0

3.2 数值求解

引入化学计量数,运用水溶组分平衡分布计算的计算通式,最终编程在计算机上求解,即可分别求得主要组分和衍生组分的浓度,本文的具体求解是在 PHREEQC 程序中完成的。计算结果整理见表 3。

表 3 地下水水样分析结果

Table 3 Analytical result of groundwater sampls

编号	主要组分	地下水组分含量/mol · L^{-1}		衍生组分	地下水组分含量/mol · L^{-1}	
		275	284		275	284
1	Na^+	2.204e－003	6.414e－003	$NaSO_4^-$	3.572e－006	3.030e－005
2	K^+	3.247e－004	9.429e－004	$NaHCO_3^0$	4.046e－006	1.193e－005
3	Ca^{2+}	8.380e－004	4.898e－003	$NaCO_3^-$	2.191e－006	7.118e－007
4	Mg^{2+}	1.010e－003	6.050e－003	KSO_4^-	7.358e－007	6.176e－006
5	SO_4^{2-}	4.701e－004	1.941e－003	$CaSO_4^0$	3.718e－005	4.496e－004
6	HCO_3^-	3.945e－003	4.783e－003	$CaHCO_3^+$	2.909e－005	1.477e－004
7	CO_3^{2-}	7.725e－005	1.205e－005	$CaCO_3^0$	5.168e－005	2.393e－005
8	Cl^-	7.506e－004	2.044e－002	CaF^+	1.258e－008	8.099e－008
9	F^-	2.502e－006	3.880e－006	$CaOH^+$	3.338e－008	1.527e－008
10	H^+	3.442e－009	3.674e－008	$MgSO_4^0$	5.292e－005	6.664e－004
11	OH^-	3.489e－006	3.844e－007	$MgHCO_3^+$	3.243e－005	1.723e－004
12				$MgCO_3^0$	3.557e－005	1.715e－005
13				MgF^+	1.156e－007	7.751e－007
14				$MgOH^+$	8.848e－007	4.215e－007
15				HSO_4^-	1.093e－010	3.478e－009
16				$H_2CO_3^0$	2.552e－005	2.825e－004
17				$H_4SiO_4^0$	1.837e－004	0
18				$H_3SiO_4^-$	9.445e－006	0

维普资讯 http://www.cqvip.com

3.3 矿物相的确定

沿水流途径发生的化学反应的确定取决于"可能矿物相"的选取。根据鄂尔多斯白垩系含水层中的矿物测定结果、地下水的化学成分及地下水的赋存条件等,含水层所含的主要矿物成分应当优先考虑,所选取的"可能矿物相"所含的主要化学元素与地下水中监测出来的成分应该保持一致,当地下水处于开放条件时,可要选择 CO_2和 O_2。再结合鄂尔多斯白垩系盆地构造以及形成条件,对环河含水岩组的岩层岩性、矿物研究资料以及岩相古地理条件分析。可以大致判断环河含水岩组的主要矿物有方解石、白云石、石膏、岩盐等。相对剖面,通过上下游水样的比较可以发现,地下水中的钾元素发生了变化,故把钾盐作为"可能矿物相"的一种。通过对上下游水样和剖面地区岩性、岩相古地理条件和已有矿物资料分析,最终选取的"可能矿物相"以及各矿物相的分子式见表4。

表4 "可能矿物相"的分析指标

Table 4 Analytical index of "possible mineral phase"

可能矿物相		"可能矿物相"的饱和指数		溶解沉淀量/(mg·L^{-1})
矿物名称	分子式	275	258	
方解石	$CaCO_3$	0.97	0.64	-293.848
白云石	$CaMg(CO_3)_2$	2.15	1.51	424.872
石膏	$CaSO_4:2H_2O$	-2.15	-1.06	1 138.995
岩盐	NaCl	-7.45	-5.63	364.8
钾盐	KCl	-6.70	-4.88	46.466
萤石	CaF_2	-3.93	-3.01	0.082
海泡石	$Mg_2Si_3O_{7.5}OH:3H_2O$	0.73	1.56	-20.795
CO_2	CO_2	-3.12	-2.08	25.771
离子交换	NaX			-347.76
	MgX_2			181.392

4 结论

在鄂尔多斯白垩系南区中部,地下水在向南东径流过程中,主要发生了白云石与海泡石的沉淀和方解石、石膏、钾盐、岩盐和萤石的溶解,以及 Na^+,Mg^{2+}离子之间发生的离子交换作用。地下水类型从SO_4^{2-}盐类型水演化为 $SO_4^{2-}+Cl^-$型水。

通过对该地区的模拟发现,在对鄂尔多斯白垩系地区进行水-岩作用的地球化学模拟能够定量化的研究地下水的演化规律,有助于更深入的认识白垩系地下水与环境之间的相互作用关系,为合理开发水资源和保护生态环境提供科学依据。并为鄂尔多斯盆地这样一个特殊的地质、地球化学景观区,研究基底断裂与水土流失、自然灾害的关系,对指导相关问题的研究、预测具有重要意义。

参考文献:

[1] 侯光才,张茂生.鄂尔多斯盆地地下水资源与可持续利用[M].西安:陕西科技出版社,2004.

[2] 陕西省地质矿产局.陕西省岩石地层[M].武汉:中国地质大学出版社,1998:253-260.

[3] 侯光才,张茂生.鄂尔多斯盆地地下水资源与可持续利用[M].西安:陕西科技出版社,2004:52-71.