

王现国 等编著

断陷盆地地下水环境 演化与水文地球化学模拟

——以三门峡盆地为例



地质出版社

断陷盆地地下水环境演化 与水文地球化学模拟

——以三门峡盆地为例

王现国 赵德山 邓晓颖
彭涛 吴东民 张平辉 编著
翟小洁 张娟娟 龚晓凌

地质出版社

· 北 京 ·

内 容 提 要

本文采用水文地质学、水文地球化学、环境地质学、数学等综合研究方法,对三门峡盆地地下水环境的演化过程进行阐述。全书共分7章。通过对大量的地下水位、水质等长期观测资料的综合分析,研究了三门峡盆地近10年来地下水系统内部及外部因素之间的相互关系。在此基础上对研究区地下水水化学成分的演化进行了研究分析。最后通过构建 DRASTIC 模型对盆地地下水系统脆弱性进行了分区评价,并提出相应的防治措施。

本书可供从事水资源、水文地质、环境地质领域的科研人员、专业技术人员,以及高等院校师生参考使用。

图书在版编目(CIP)数据

断陷盆地地下水环境演化与水文地球化学模拟/王
现国等编著. —北京:地质出版社, 2010. 4

ISBN 978 - 7 - 116 - 06628 - 1

I. ①断… II. ①王… III. ①断陷盆地-地下水-水
环境-研究-三门峡市②断陷盆地-地下水-水文化学:
地球化学-研究-三门峡市 IV. ①P641. 8

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 059106 号

Duanxian Pendi Dixiashui Huanjing Yanhua Yü Shuiwen Diqu Huaxue Moni

责任编辑:王 超 李 莉

责任校对:黄苏晔

出版发行:地质出版社

社址邮编:北京海淀区学院路 31 号, 100083

电 话:(010) 82324508 (邮购部); (010) 82324567 (编辑室)

网 址:<http://www.gph.com.cn>

电子邮箱:zhs@gph.com.cn

传 真:(010) 82310759

印 刷:北京地大彩印厂

开 本:787 mm × 1092 mm¹/₁₆

印 张:6

字 数:100 千字

印 数:1—500 册

版 次:2010 年 4 月北京第 1 版·第 1 次印刷

定 价:18.00 元

书 号:ISBN 978 - 7 - 116 - 06628 - 1

(如对本书有建议或意见,敬请致电本社;如本书有印装问题,本社负责调换)

前 言

地下水是一种有限而又宝贵的自然资源，是生态环境体系中的活跃因素。地下水环境是人类环境的重要组成部分，与人类生存密切相关。世界范围内地下水环境均表现出不断恶化的趋势，其中最为突出的是地下水水量衰竭和地下水污染。不断恶化的地下水环境又反作用于人类本身，不仅严重制约着经济的发展，甚至危及人类的健康和生命。地下水的开发利用曾经作为古代文明的标志，代表着人类发展的技术水平，尤其是在现代，地下水资源已成为制约国民经济发展的基础条件之一。展望地下水开发的历史，凡是科学合理地开发利用地下水，往往会产生良好的经济、社会和环境效益；相反，无序持续超量开采地下水，往往导致地下水水位区域性下降、地下水水质恶化，以及地面变形、地面沉降、地面塌陷等环境问题。大量事实表明，地下水环境所提供的条件，并不为人类为所欲为，而要求人类有意识地与其保持平衡与和谐。当前，整个世界范围内频繁出现的一系列环境水文地质问题，正是人类打破了这种平衡与和谐的必然后果。因此，保护和改善地下水环境，以地下水资源永久持续利用，经济、社会和环境协调发展为原则，实现地下水资源科学有序地开发利用和管理，是 21 世纪我国面临的重要任务。

地下水环境演化是国际水文地质、环境科学研究的前沿和热点领域，主要通过研究地下水化学特性的时空分布规律，刻画地下水化学分区和各种水文地球化学过程，重建和预测地下水系统地球化学演化过程。因此，在大时间尺度上确定地下水化学演化的总体格局，研究处于不同地质条件下的地下水系统地球化学演化规律，进而科学地认识自然过程和人为扰动对地下水环境的影响，合理解释各种水文地球化学现象（包括地下水化学异常、人为活动对水环境的影响等）是地下水环境演化研究的发展趋势。地下水环境演化与人类活动密不可分，尤其近几十年来，从某种意义上说，人类活动的强度决定了地下水环境演化的性质和速度，因此，地下水环境演化与社会、经济的发展存在着有机的联系（沈照理，1993；张宗祜，1992；郭永海，1994）。20 世纪 80 年代以前，地下水水量、水质管理往往忽视了与地下水有关的社

会、经济、环境等因素,因此大大削弱了地下水资源的实用价值;80年代中期以后,随着人们对环境问题的重视以及受可持续发展思想的影响,在地下水的开发利用过程中越来越多地综合考虑资源、社会、经济、环境等制约因素,地下水水资源管理更多地体现了社会、经济、环境协调发展的原则,但从国内外的文献收集、检索来看,地下水资源的开发利用和管理只是考虑现实的社会、经济、环境条件,没有从历史的角度考虑地下水环境的演化对地下水使用价值的制约作用(曲焕林等,1998;陈崇希等,1996)。

三门峡盆地形成于中生代晚期,在盆地地质演化过程的控制下,区内形成了结构复杂的孔隙地下水系统。在盆地中,孔隙地下水是地质历史时期内多种地质要素综合作用的产物,也是区域地质演化过程中最活跃的因子之一,它不仅可视为地质环境变化的受体和信息载体,而且,作为区域水循环的重要环节,盆地地下水对区域气候变化及区内相关人类活动的规模、强度也有重要的指示意义。

而在三门峡盆地,地下水开发利用与不断加剧的其他人类活动,如城镇化进程、水利工程的兴建、土地利用等,已经深刻地改变了地下水的天然赋存环境和区域水循环条件,引发了一系列相关的水资源-环境问题,如区域地下水位下降、地下水位降落漏斗的形成、地下水污染等。这些环境问题的成因分析均有赖于对盆地地下水动力场及化学场演化规律的研究。因此,对盆地地下水系统在人类活动影响下的演化过程进行探讨,以科学认识区内地下水动力场及化学场演化格局,不但具有深刻的理论意义,也具有重要的实际价值。

近年来,三门峡盆地地下水水动力场发生了显著的变化。地下水位经历了先降低后升高的变化趋势,1995年以前,由于大量、不合理地开发利用地下水,导致地下水位持续下降,出现了地下水位降落漏斗,其中三门峡城区降落漏斗面积达到了 32 km^2 。1995年以后,由于限制地下水的开采以及地表水的联合开发利用,地下水位逐年回升,降落漏斗面积逐渐缩小。地下水位和降落漏斗的变化也导致了地下水径流方向的变化,在未形成降落漏斗之前,地下水的径流方向与地形坡度方向一致,即由黄土塬→二、三级阶地→一级阶地及漫滩,后来由于产生了地下水位降落漏斗,局部地下水的径流是从漏斗的四周向中心方向径流。

地下水水化学场的演化是地下水系统演化的重要内容。盆地内地下水化学成分具有明显的分带性。从盆地边缘到盆地中心由 $\text{HCO}_3 - \text{Na} \cdot \text{Mg} \rightarrow \text{HCO}_3 -$

$\text{Ca} \cdot \text{Mg} \rightarrow \text{HCO}_3 \cdot \text{SO}_4 - \text{Na} \cdot \text{Ca} \cdot \text{Mg} \rightarrow \text{HCO}_3 \cdot \text{SO}_4 \cdot \text{Cl} - \text{Na} \cdot \text{K}$ 水。重碳酸钠水主要分布于丘陵及黄土塬区，盆地中间，由于人类活动剧烈，大量开采地下水，形成了地下水位降落漏斗，成为地下水系统的排泄区，再加上地下水埋深浅，蒸发作用增强，盐分浓缩聚集，形成了矿化度稍高的 $\text{HCO}_3 \cdot \text{SO}_4 \cdot \text{Cl} - \text{Na} \cdot \text{Ca}$ 型水。运用模糊数学的方法对地下水水质进行了评价，对主要的离子成分进行了时空变化分析，结果发现在过去的十几年里，三门峡盆地地下水水质总体上是朝着不断恶化的方向发展，表现在地下水中 TDS，硬度， NO_3^- ，总 Fe， SO_4^{2-} 等化学组分含量呈升高趋势，尤其是 Fe 离子，总硬度， NO_3^- 含量增高幅度较大，相对于国家规定的Ⅲ类水饮用标准，分别超标了 212.84%，20.66% 和 49.62%，严重威胁着人们日常生活和生产用水。地下水水质恶化主要是由地下含水层的环境变化和人类活动引起的，地下水位下降和降落漏斗的形成使含水层由还原状态变为氧化状态，使 Fe 离子和钙镁离子析出，含量升高；人类活动产生的工业废水、生活垃圾，以及污水灌溉又引起了总硬度和 NO_3^- 等含量升高。

为深刻揭示 Fe 离子含量升高的根源，追溯到三门峡盆地形成时期，在其沉积过程中沉积了大量的赋含 Fe 元素的矿物。近年来，由于人类剧烈活动的影响，地下水位下降，氧化、还原环境的变化导致含 Fe 元素的矿物析出，使地下水中的 Fe 离子含量升高。运用水文地球化学模拟软件 PHREEQC，对水-岩作用过程进行模拟，结果表明： CO_2 和 O_2 进入含水层以及 pH 值降低是促使含 Fe 元素的矿物析出的原因，其中包括黑云母 ($\text{KFe}_3\text{AlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$)、黄铁矿 (FeS_2)、黄钾铁矾 ($\text{KFe}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$) 等矿物。

总硬度是衡量地下水水质的重要指标之一，分析其升高的原因，对于改善水质、保护水环境具有重要的意义。结果表明：工业污水中的酸以及生活污水有机物的分解，土层中的钙、镁矿物质被溶解带入地下水中，增加了地下水硬度；地下水的大量开采，含水层由还原环境转变成氧化环境，使岩石中原来不溶解或不易溶解的钙镁化合物变得易于溶解，从而使地下水的硬度升高；污水灌溉时，土壤表面一部分的 Ca^{2+} 被置换到水溶液中去，这些被置换到水溶液中的 Ca^{2+} 将随着进入地下水中，也造成地下水硬度升高。而 NO_3^- 含量的升高主要是生活垃圾以及农药、化肥所造成的点源污染引起的。

为有效地保护水环境和改善水质，防止水质进一步的恶化，本书用 DRASTIC 模型对研究区进行了脆弱性评价，以便对于不同区域实施针对性的保护措施。评价过程中分别对地下水埋深、含水层净补给量、含水层介质、

土壤介质、地形、包气带的影响、水力传导系数共 7 个指标进行分区评分,最后利用 GIS 平台进行空间分析,得出地下水脆弱性分区,结果表明:在盆地的黄土塬地区,地下水的脆弱性一般为低或者极低。二、三级阶地脆弱性高于黄土塬地区;一级阶地和黄河漫滩的脆弱性又高于二、三级阶地。此外,在工农业发达以及水库附近的区域地下水的脆弱性也较高。

值此本书出版之际,特别感谢中国地质大学(武汉)靳孟贵教授在研究工作过程中对我们的关心和支持。在收集资料和研究工作期间,河南省水利厅、三门峡市水利局、三门峡市计划节约用水办公室、三门峡市环境保护局、河南省地质矿产勘查开发局第二水文地质工程地质队等单位提供了大量的资料。同时,在撰写过程中引用了国内外有关学者的文献成果,在此一并表示衷心的感谢。

作 者

2010 年 2 月

目 录

前 言

第1章 绪论	(1)
1.1 研究意义	(1)
1.2 国内外研究现状	(2)
1.2.1 地下水系统演化进展	(2)
1.2.2 水文地球化学模拟现状	(5)
1.2.3 地下水脆弱性研究进展	(7)
1.3 主要研究内容与方法	(9)
1.3.1 研究内容	(9)
1.3.2 研究方法	(9)
第2章 研究区概况	(12)
2.1 自然地理概况	(12)
2.1.1 地理位置	(12)
2.1.2 气象	(13)
2.1.3 水文	(13)
2.2 区域地质概况	(15)
2.2.1 地层	(15)
2.2.2 地貌	(17)
2.2.3 构造	(20)
2.3 地下水系统分析	(21)
2.3.1 地下水系统特征	(21)
2.3.2 地下水类型及第四系含水介质特征	(22)

2.3.3 第四系地下水流动系统	(24)
第3章 地下水动力场的时空演化	(28)
3.1 地下水位的动态变化特征	(28)
3.1.1 地下水位年内动态类型	(28)
3.1.2 地下水位年际动态特征	(30)
3.2 地下水位降落漏斗的形成和演化	(33)
3.2.1 三门峡市区地下水位降落漏斗的形成和发展	(34)
3.2.2 陕县城区和灵宝老城地下水位降落漏斗的形成和发展	(36)
3.3 开采条件下区域地下水动力场的演化	(36)
3.3.1 地下水埋藏条件的演化	(37)
3.3.2 地下水流场的演化	(37)
3.4 影响地下水动力场演化的因素分析	(37)
3.4.1 地下水循环交替条件对演化的控制	(38)
3.4.2 人类活动对地下水动力场演化的影响	(38)
3.4.3 气象因素对地下水动力场演化的影响	(38)
第4章 地下水水化学场的时空演化	(41)
4.1 地下水水化学特征	(41)
4.2 地下水水化学场时空变化特征	(43)
4.2.1 地下水水质评价及其特征	(43)
4.2.2 地下水水化学组分的时空变化特征	(46)
4.2.3 地下水水化学组分演化的原因分析	(50)
第5章 地下水水化学成分演化机理	(54)
5.1 地下水 Fe 离子升高机理研究	(54)
5.1.1 地下水 Fe 离子形成机理	(54)
5.1.2 地下水水文地球化学模拟	(55)
5.2 地下水总硬度升高机理研究	(63)
5.2.1 地下水硬度分布特征	(63)

5.2.2 地下水硬度升高的机理分析	(64)
第6章 地下水系统脆弱性评价	(68)
6.1 评价模型——DRASTIC 模型	(68)
6.2 DRASTIC 模型的评分过程	(69)
6.2.1 地下水埋深 (D)	(69)
6.2.2 含水层净补给量 (R)	(70)
6.2.3 含水层介质 (A)	(72)
6.2.4 土壤介质 (S)	(73)
6.2.5 地形 (T)	(74)
6.2.6 包气带 (I)	(75)
6.2.7 水力传导系数 (C)	(77)
6.3 脆弱性评价结果及其防治措施	(78)
6.3.1 有效控制城市污染	(80)
6.3.2 实施清洁地表水回灌	(80)
6.3.3 开发利用地表水资源, 节约用水, 控制地下水开采	(80)
6.3.4 加强管理	(81)
参考文献	(82)

第1章 绪 论

1.1 研究意义

近十几年来随着不断加剧的人类活动,如城市化进程、水利工程的兴建、土地利用,地下水环境的恶化也不断加剧。如何有效解决地下水位下降、降落漏斗的形成等等这一系列环境水文地质问题,合理利用地下水、改善地下水水质,以及保护水资源环境,我们既要立足现实,又要从长远出发,从根本上把握问题的关键。

三门峡市位于河南省西部,为豫、晋、陕交界地带的经济、文化中心,是承接我国东部和西部的纽带。长期以来,因人们对地下水资源的有限性认识不足,在水资源供需矛盾日益突出的情况下,由于不合理的开发利用,造成的地下水超采问题随之凸显。20世纪90年代以来,随着三门峡市工农业的发展,三门峡盆地内地下水环境条件发生了明显改变。人类大量超采地下水,形成了地下水位降落漏斗,在1995年漏斗区面积最大,达到了32 km²,同时,产生了地下水位持续下降、地面沉降等环境问题。

地下水污染是研究区的又一严重环境问题。随着区内城市规模的不断增加,地下水均已受到不同程度的污染,青龙涧河河水水质已达V类;由于城市工业废水及生活废水的随意排放,第四系孔隙地下水遭受严重污染,第四系孔隙地下水Fe离子,总硬度,NO₃⁻,常量组分,TDS等含量逐年升高,其中主要超标因子总铁、总硬度的超标浓度分别达到111.84%和20.66%。水质的严重污染,直接威胁着人们的正常生产和生活,同时对三门峡市经济社会发展和生态环境构成了极大的危害。地下水超采及其水质污染问题已成为上至政府,下至普通老百姓所共同关注的热点问题。

综上所述,三门峡盆地的地下水开发利用等人类活动已引发了一系列相关的水资源-环境问题。盆地内孔隙水超采区的地下水位大幅度持续下降,降落漏斗范围逐年扩大,造成大批浅井报废;同时,地下水位持续下降使水质

恶化,因子超标率高,远远超过了国家饮用水规定值,长期饮用对人们的生活和身体造成严重的危害。不断加剧的人类活动,如城镇化进程、水利工程的兴建、土地利用等,深刻地改变了地下水的天然赋存环境和区域水循环条件,使区内地下水环境处于不断退化的状态之中。此外,盆地内天然成因与天然-人为成因的地下水环境问题也时见于相关报道与文献。研究区 Fe 离子的含量大幅度升高且分布范围广,以及可能向高 Fe 地下水演化的趋势,成为本书研究的重点问题。

由于地下水是水循环的重要组成部分,被视为研究区环境变化的受体和信息载体,因此,要解决以上地下水环境问题,科学地认识研究区地下水的流动、赋存及水质演化规律是关键所在。因此本书首先重点研究盆地 10 多年来地下水水动力场和地下水水化学场的演化,揭示地下水环境演化与人类活动、水文地质条件等因素的相互关系,并运用模糊数学的方法评价地下水水质状态;其次,运用水文地球化学模型揭示地下水主要超标因子 Fe 离子的形成机理;再次,通过数据分析和理论论证探讨地下水总硬度升高的原因;最后,为有效保护地下水资源,防止盆地内地下水污染区的水质进一步恶化,在研究区开展地下水脆弱性研究,并对盆地进行地下水脆弱性分区,以实现加强地下水资源管理、防治地下水污染的目的,确保当地地下水资源的可持续利用。同时三门峡在我国北方的城市中具有代表性,对其进行地下水环境演化的综合研究,对于其他城市具有重要借鉴价值。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 地下水系统演化进展

华北平原地下水演化研究是我国最早的地下水演化研究项目,1993 年至 1996 年,张宗祜等(2000)以华北平原第四系地下水系统的自然条件为依据,叠加人为影响因素,进而探讨地下水动力场和地下水化学场的演化与发展,为华北平原的资源可持续利用奠定基础。刘文生(1999)对河北平原选择了 7 组水文地球化学参数,探讨了不同水文地球化学作用带水质演化的过程和特点。任增平等(1999)分析了达拉特旗平原区第四系地下水形成的地质、水文地质背景条件,重点研究了潜水和承压水水化学平面分布特征及其形成机制,结果表明:潜水水质主要由溶滤作用和浓缩作用形成。陈京生等(1999)

研究表明天山北麓阜康—准东山前倾斜平原第四纪松散堆积地下孔隙水含水系统水化学成分, 主要受补给水源水化学性质影响, 水中离子含量比例关系受矿化度影响明显, 含水系统水循环交替迅速使排泄区中等矿化水淡化, 地下水中 Sr 含量较高, 普遍达到饮用矿泉水指标。

研究地下水环境演化的方法很多, W M Edmunds 等 (2002) 利用稳定同位素 ^{14}C , 以及一些示踪元素来判定墨西哥城中心地下水的起源和成因。另外, Pucci Jr 等 (1998) 应用环境同位素研究泰国北部 Chiang Mai Basin 的地下水的起源、运移、流速、年龄。Brian G. katz (1997) 用 $\delta^{18}\text{O}$, δD , $\delta^{13}\text{C}$ 示踪法去描述地下水与地表水在 Mantled Karst 区的相互作用。

由于地下水系统结构的复杂性及其影响因素的不确定性, 目前对地下水系统演化的驱动机制尚不完全清楚。因此, 更多的学者通过分析地下水化学特征及发生于地下水系统的各种地球化学过程来研究地下水系统演化, 其研究手段主要包括水文地球化学图解、多元统计分析、水-岩相互作用模拟等。水文地球化学图解在许多文献中均有记述, 不需赘述; 多元统计分析作为一种常见的分析手段, 在地下水演化研究中也常被成功利用。如 B Helena 等 (1999) 利用多元统计方法对西班牙巴利阿多利德一个冲积含水层的水化学数据进行了分析, 进而研究了该区地下水的地球化学演化过程。Sikdar 等 (2001) 利用相关分析与主成分分析方法对印度 Calcutta 与 Howrah 两个城市第四系地下水的水化学组分进行统计分析, 将地下水分为淡水、混合水与咸水三个类别, 并对各类地下水在演化过程中的复杂关系作了详细研究。水-岩相互作用研究及其模拟已成为研究地下水地球化学演化最常用的手段 (Arnorsson, 2000; 沈照理等, 2002), 其发展过程与研究现状将在本书综述。此外, 在地球化学演化研究中, 地下水与围岩的同位素组成分析占到了越来越重的比例 (Varsbnyi, 1997; Taaksoharju, 1999; Rademacher, 2001; W M Edmunds, 2002; Mahara, 2003; Omega-Guerrero, 2003)。值得注意的是, 锶同位素研究正成为地球化学演化研究的一个热点, 如 T D Bullen 等 (1996) 利用地下水中 $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ 的变化研究了美国威斯康星州的一个以硅酸盐矿物为主的含水层的地球化学演化, 并对不同地下水渗流途径的水-岩反应过程进行了对比分析。Oetting 等 (1996) 对美国得克萨斯州的 Edwards 含水层的咸水的地球化学演化进行了研究, 该研究主要是通过对地下水及围岩的锶同位素变化分析完成的。T L Woods 等 (2000) 对美国卡罗莱纳州一个第三系含水层的锶同位素地球化学进行了调查, 发现老水中的 $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ 的比值要低于新水中的 $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ 比

值,这与地下水及围岩的水-岩相互作用有关。利用这一发现,他们对地下水的演化过程作了精细研究。在德国的一个白垩系盆地中, M Grobe 等 (2000) 也利用 O, H, Sr 等稳定同位素对盆地中高咸地下水的起源和演化进行了研究。

随着地下水环境问题研究的逐步深入,近几十年来,环境水文地质学的研究领域亦不断拓宽。诸如因地下水超采引起的区域地下水位下降、地下水水量衰竭、地下水水质恶化,以及地面沉降、地面塌陷等环境地质问题均已成为环境水文地质研究的重点。但环境水文地质的研究范畴目前还未定论,一般的,把地下水水质的恶化、地下水位下降等与水文地质因素及人类活动密切相关的问题作为环境水文地质的重点研究领域已得到多数学者的公认。综合前人的研究成果,可以认为:地下水系统应包括两个方面,即地下水动力场和地下水化学环境。地下水动力场体现了地下水的“量”,受含水系统水文地质结构、地下水补、径、排条件及地下水循环交替条件等控制;地下水化学场反映了地下水的“质”,受含水系统岩土性质、氧化还原条件、酸碱度等控制。从水文地质角度讲,上述概念比较符合地下水系统本身的规律,因为地下水系统的“量”和“质”之间存在密切的有机联系。因此,地下水系统演化也必然包括两个方面,即地下水动力场演化及地下水地球化学演化。地下水系统是地下水水流场和地下水化学环境综合作用的结果。

近年来,人类活动控制下的地下水地球化学演化研究受到了愈来愈多的学者的关注。作为新的强大的地质营力,人类活动已经成为某些地区地下水环境演化的控制性因素(张宗祜,2000)。J Roux 等(1995)调查了近30年来农业、采矿业及生活污水的排放给法国地下水水质演化造成的影响,发现这一影响是惊人的。M Zilberbrand (2001) 等对以色列特拉维夫市在进入城镇化时代后的地球化学演化进行了研究,重点分析了地下水中某些宏量组分(如 Ca)及气体组分的变化,并定量计算了天然水化学过程与人类活动在地下水化学组分变化中的贡献。在德国萨克森地区的一个铀矿附近,下游含水层的地下水化学与采矿活动的进行与终止显著相关,Bain 等(2001)利用多组分反应性迁移软件 MIN3P 对铀矿关闭、地下水位上升后的水化学过程进行了模拟,结果表明采矿活动对地下水地球化学演化有举足轻重的影响。值得提及的是, Ma Teng 等(2004)认为影响地下水系统演化的各驱动因素对地下水系统的作用具有明显的“尺度效应”,即由于研究时间-空间尺度的差异,地下水演化将表现出不同的强度和周期。就研究人类活动对地下水演化的作用而言,选择恰当的时间-空间研究尺度是关键所在。

在国内,核工业北京地质研究院与中国地质大学合作,应用水文地球化学模拟方法,研究了河北平原地下水化学环境在人类活动影响下的演化问题,定量确定了同时期沿水流路径上及咸淡水混合过程中的水-岩相互作用及质量交换,从而揭示了地下水化学环境的演化机制(郭永海等,1997)。2002年,郭占荣等通过地下水水质分析数据分析了三屯河流域平原地下水系统中主要离子、TDS和水化学类型的特征及其变化。张宗祜等(1997)研究了华北平原地下水系统通过包气带与外部环境要素间物质与能量的传输,进行地下水地球化学环境演化规律和地下水的环境预测。毕二平等(2000)通过对地下水硬度升高的原因的分析,论述了人类活动影响下地下水水质演化的基本机理。蔡绪贻等(1995)运用 PHREEQC 软件,应用反应路径模拟的方法研究了洛阳市某地硫酸盐污染区地下水的水质变化过程,应用该方法研究地下水水质变化的报道较少。

1.2.2 水文地球化学模拟现状

水-岩相互作用(Water-Rock Interaction,缩写为WRI)这个术语,是水文地球化学学科的奠基人之一——苏联A.M.奥弗琴尼柯夫在20世纪50年代末提出的。水-岩相互作用即水与岩石之间的物理、化学作用。

在地下水地球化学演化由定性研究到定量研究的发展过程中,水文地球化学模拟起到了重要的推动作用。水文地球化学模拟的研究对象为水-岩之间相互作用的地球化学过程,目前主要以化学、热力学为理论基础。它可以定量模拟各种天然过程和人类活动影响下的水-岩相互作用,研究地下水系统在不同时间尺度上的演化过程;也可以模拟地下水中污染物的运移过程,分析地下水污染产生的原因与发展趋势(陈宗宇,1995)。水文地球化学模拟方法可分为物理模拟与计算机模拟两大类。其中物理模拟通过实验条件来恢复现实水-岩反应系统中化学组分的迁移和转化,并可在不同的模拟条件下实现一系列特定的水-岩反应,以分析实际地下水化学组分的形成机理。近几十年来,人类活动强烈介入地下水化学组分的形成过程,地下水地球化学环境的研究渐趋复杂化,控制水-岩相互作用的因素也趋于多样化,物理模拟已经难于再现复杂的水-岩反应,于是基于计算机数值模型的水文地球化学模拟应运而生。自1962年Garrets等建立海水的离子缔合模型以来,水-岩相互作用的计算机模拟技术得到了迅速发展,已经先后出现了几十种模拟软件。

迄今,地球化学模拟模型的发展经历了离子缔合模型与水相化学平衡模

型两个阶段。上述两种模型的支撑理论尚不完善,因而它们各自有其局限性。离子缔合模型假定地下水中的各种组分以自由离子、配阴离子、配合物等形式存在,并根据配合离子的质量作用方程与平衡常数对每种元素均建立其物质平衡方程,进而求解各元素的不同存在形式及含量。离子缔合模型是其他所有水化学模型的基础,它考虑了多种地下水组分,并建立了改进的、大温度范围的热力学数据库,但由于许多微量元素、稀土元素的离子缔合模型数量有限,该模型仍有待进一步完善。水相化学平衡模型又称为质量平衡模型,用于模拟天然水溶液体系中的化学平衡,最早于20世纪80年代在Pitzer电解质理论的基础上引入地下水化学系统。该模型考虑水组分平衡、碱度平衡、元素及其价态的摩尔平衡、摩尔电子与电荷平衡、同位素平衡等,包括如下反应类型:液相离子配合反应、固相表面的吸附反应、固相的溶解和沉淀反应。目前,该模型广泛用于地下水系统中水-岩相互作用的研究,在使用该模型前,需对地下水系统水化学场的地球化学条件进行详细分析,以确定模型中参加反应的物相。

经历了几十年的发展后,水文地球化学模拟的几个研究方向如正向地球化学模拟、反向地球化学模拟已经日臻完善。正向地球化学模拟是研究水-岩相互作用的一种有效方法,其理论框架于1968年由Helgeson提出,它依据假定的水-岩反应来计算水溶液的化学组分和质量迁移,可用于分析地下水溶液中离子、分子及配合物的物质分配形式,矿物相-地下水之间反应的质量迁移等。反向地球化学模拟则根据已有的水化学和同位素资料来确定地下水系统中所进行的水-岩反应,用以解决地下水流场中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,其理论基础由Garrels等(1962)奠定。水文地球化学模拟的另一个前沿发展方向为反应性溶质运移模拟,它把地球化学过程的研究与流体溶质迁移过程的研究相结合,可视作地球化学模拟与水文迁移模拟的耦合。反应性溶质运移模型所考虑的因素比正向与反向地球化学模拟模型更接近于实际情况,将成为水文地球化学模拟中最有前景的模型。

水文地球化学模拟软件在几十年来已经得到了长足的发展,其中用于正向地球化学模拟的典型软件为EQ3/6 (Wolery, 1992), SOLMINEQ.88, SOLCHEM等;反向地球化学模拟的典型软件为BALANCE, NETPATH等;反应性溶质运移模拟的典型软件则为MT3DMS, RT3D, SEAM3D与PHAST等。而若论正向与反向地球化学模拟最有代表性的软件,则非PHREEQC莫属。

PHREEQC 是 PHREEQE 的 C 语言版本, 现已兼容了 PHREEQE 和 NETPATH 的全部功能, 既可进行反向模拟, 也可用于正向模拟, 还可应用于反应性溶质运移研究。该模型中加入了离子交换、表面络合、定压气相平衡、对流运移等模块, 其最新功能还包括动力学控制反应模拟、固液相平衡模拟、定体积气相平衡模拟、一维耦合运移模拟, 以及同位素在反向模拟中的平衡等。

水文地球化学模拟一般通过对地下水水化学组分总量及常量组分进行分析而完成。如 Sasamoto 等 (2004) 对日本 Tono 铀矿的矿物相组成与水文地球化学概况进行了研究, 并利用 PHREEQE 软件模拟了地下水中的 HCO_3^- , SO_4^{2-} , Na^+ , Ca^{2+} , K^+ , Si 等组分的形成过程, 取得了令人满意的结果。近年来, 对微量元素的水化学模拟也逐步发展起来。Igarashi 等 (1999) 对日本中部 Kanto 区北部的一个水库进行了研究, 并对水库水中铝元素的地球化学成因进行了模拟。Geelhoed 等 (2002) 研究了苏格兰格拉斯哥的一个铬渣堆, 对其中 Cr (Ⅲ) 与 Cr (Ⅵ) 向地下水系统的淋滤过程进行了实验研究与水文地球化学模拟, 两者的结果拟合得很好。Tempel 等 (2000) 利用 EQ6 软件对美国 Humboldt 县一个由矿坑形成的湖的砷浓度进行了预测。O Sracek 等 (2004) 则对近年来学者们关于微量元素砷开展的水文地球化学模拟工作进行了总结。同位素在水文地球化学模拟方面的应用也时见于文献。如 L N Plummer (1990) 曾利用稳定同位素分析判断地下水循环年龄及流动速率, 并模拟水-岩相互作用的质量迁移情况。E M Murphy 等 (1998) 在美国东南部的 Middendorf 含水层利用 NETPATH 软件对稳定碳、硫同位素 (^{14}C , ^{34}S) 地球化学进行了模拟, 并由此评价地下水系统中微生物的呼吸作用。

1.2.3 地下水脆弱性研究进展

1968 年, 法国人 Margat 首次提出了地下水脆弱性这一概念。他认为地下水脆弱性是水文地质条件的函数, 可以用图示的方法表示地下水脆弱性程度; 而脆弱性图可以反映含水层不同位置的天然环境保护能力, 也可以用于地下水污染防治带的区划 (Margat, 1968)。此后, 地下水脆弱性的概念处于不断发展之中, 有关学者从不同角度丰富了它的内涵。

地下水脆弱性研究在国外开展得较早, 其中农药污染对地下水系统的脆弱性研究成为主流。Meinardi 等 (1995) 在欧洲对土壤与地下水中的硝酸盐污染进行了研究, 认为农药使用与大气降水是污染的主导因素; 他们进一步把农药污染影响地下水的脆弱性的因素总结为土地覆盖程度、表层土壤特征、