高放废物处置北山预选区地下水化学形成机制模拟研究

李杰彪[1,2,3]，周志超[1]，郭永海[1]，吉子健[1]，梁修雨[3*]

1. 核工业北京地质研究院国家原子能机构高放废物地质处置创新中心，北京 100029；
2. 哈尔滨工业大学环境学院，哈尔滨 150090；
3. 南方科技大学环境科学与工程学院，广东 深圳 518055

第一作者，E-mail：hgylijiebiao@126.com

* 通信作者，E-mail：liangxy@sustech.edu.cn

2024-04-25 收稿；2024-06-17 修回；2024-06-19 接受

基金项目：中核集团基础研究项目（中核科发 [2022]439 号）；核设施退役及放射性废物治理专项项目（科工二司 [2022]736 号）；国家自然科学基金项目（42172275）

中图分类号：X771；P641.12　　文章编号：2096-8523（2025）04-0340-14　　doi: 10.19509/j.cnki.dzkq.tb20240194

摘　要：研究地下水化学特性对于高放废物处置库选址和长期性能安全评价是十分必要的。采用水文地球化学综合分析和模拟方法，探讨了我国高放废物处置库预选区甘肃北山地区基岩裂隙水的基本化学特征、水平分带性以及不同水文地质区水化学形成机制。结果表明：区内地下水化学类型主要为 Cl·SO_4-Na 型和 SO_4·Cl-Na 型，pH 值多在 7.5 ~ 8.3 之间。基岩裂隙水对岩盐、石膏、萤石、绿泥石以及长石类等矿物多处于未饱和状态，而对黏土类矿物则多处于过饱和状态。从补给区到排泄区，基岩裂隙水化学分布表现出较为明显的水平分带性。马鬃山一带是区域地下水主要补给区，地下水矿化度低，水化学组分形成主要受溶滤作用控制；沉积盆地是地下水主要排泄区，地下水矿化度高，水化学组分形成主要受蒸发作用控制；在径流区，地下水化学形成主要受岩盐、石膏等矿物的溶解控制，而碳酸盐类和硅酸盐类矿物的溶解或沉淀作用微弱。该区基岩裂隙水化学形成主要受蒸发浓缩作用及水−岩相互作用的影响和控制，该结果为高放废物处置库选址提供了地下水化学基础信息和数据。

关键词：水文地球化学模拟；形成机制；地下水化学特征；高放废物处置；北山地区

目前，深地质处置是国际上公认的安全处置高放废物的可行方案[1-2]。在高放废物地质处置库中，地下水的迁移与扩散是有害核素返回到生物圈的主要途径[3]。核素在随地下水迁移过程中，会与地下水、岩石不断发生溶解、沉淀、吸附等化学作用。化学反应类型以及对核素迁移的影响程度，主要取决于地下水的化学特征[4]。因此，在处置库场址长期性能评价中，水文地球化学信息是不可或缺的[5]。

水文地球化学模拟方法能够有效识别地下水运移过程中的水−岩作用类型和质量交换，并能够预测未来不同情景下地下水化学组成的变化，这为揭示基岩地区地下水的形成机制提供了有利途径[6-8]。水文地球化学模拟是定量研究水−岩系统相互作用的主要方法之一，其理论基础是化学热力学和化学动力学水文地球化学，模拟方法主要包括：组分平衡分布计算、质量平衡模拟、反应路径模拟、物质输运模拟等[9]。反应路径模型主要用于确定在化学反应过程中发生的具体反应以及由此产生的水的化学组分，它包含正向模拟和反向模拟 2 种类型[10-11]。对于水文地球化学模拟软件，目前国际上常用的主要有 EQ3/6、PHREEQC、PHT3D、NETPATH、MINTEQ、CRUNCHFLOW、 HYDROGEOCHE、 PICHEM 和

著录信息：李杰彪，周志超，郭永海，等. 高放废物处置北山预选区地下水化学形成机制模拟研究［J］. 地质科技通报，2025，44（4）：340-353.
LI Jiebiao，ZHOU Zhichao，GUO Yonghai，et al. Hydrogeochemical modeling of groundwater formation mechanism at the Beishan preselected site for high-level radioactive waste disposal［J］. Bulletin of Geological Science and Technology，2025，44（4）：340-353.

© Editorial Office of Bulletin of Geological Science and Technology. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license.　https://dzkjtb.cug.edu.cn

TOUGHREACT 等软件[12-13]。PHREEQC 软件是应用最为广泛的地球化学模拟软件，可模拟一维条件下的各种地球化学反应[14]。

水文地球化学模拟已被广泛用于研究基岩地区地下水的形成、演化及运移特征[15-17]。GASTMANS 等[18] 基于反向地球化学模拟分析了巴西圣保罗西北部玄武岩含水层潜在径流路径的地下水演化过程，认为沿径流路径主要溶解矿物为长石和辉石。GÜLER 等[19] 采用反向地球化学模型证明了土耳其阿拉达拉尔山脉蛇绿岩含水层中碱性地下水化学成分的演化过程受原生矿物风化、次生矿物沉淀、大气/人为输入（如石盐）和季节性补给稀释的控制。CHRISTOFI 等[20] 利用 PHREEQC 软件开发了一种综合水文地球化学建模方法，并对塞浦路斯特罗多斯地块内辉长岩含水层地下水演化进行了模拟，确定了地下水与同生水的混合比例。此外，针对高放废物地质处置库场址筛选和性能评价中，国际上也广泛采用了水文地球化学模拟方法。针对瑞典 Forsmark 场址和 Laxemar 场址采用组分平衡分布计算、反应路径模拟等多种模拟方法对地下水的起源和化学场演变过程进行了定量分析，并开发了多元混合和质量平衡计算模型 M3[21-22]。DAVID 等[23] 在场址地下水流模型的基础上，采用离散裂隙网络模型对芬兰 Olkiluoto 场址地下水水化学场演化过程进行了研究。在国内，郭永海等[24] 对北山地区野马泉预选区内地下水与固相间的反应趋势、流动过程中发生的水岩作用机理做了初步分析，但由于获取的地下水样品有限，模拟结果存在一定不确定性。

北山地区是我国高放废物地质处置库首选预选区，该区为典型的低渗透基岩裂隙水文地质区[25]。区内地下水可划分为中低山、沉积盆地、山前倾斜戈壁平原以及沟谷等多个水文地质区，不同水文地质区地下水的形成和运移存在明显的差异[26]。因此，不同水文地质区地下水化学形成机制也应存在较大差异。此外，目前对于北山地区地下水化学特征及其形成机制的认识尚不十分明确，这严重制约了处置库选址和场址评价等工作的开展。

基于此，本研究以我国高放废物处置库预选区甘肃北山地区为研究对象，综合考虑不同水文地质区的影响，通过采用水文地球化学综合分析和模拟相结合的方法，深入分析了地下水主要化学特征、水平分带性以及地下水化学的形成机制，旨在为我国高放废物地质处置场址水文地质适宜性评价提供数据支撑，对干旱地区基岩裂隙水循环演化过程分析提供参考。

1 研究区地质概况

北山地区属于我国典型的干旱荒漠地区，地处河西走廊以北，黑河流域以西。研究区总体地势相对平缓，植被稀少、基岩裸露。区内降水量小、蒸发量大、干燥多风、冬冷夏热。区内多年平均降水量约 70 mm，降水具有明显的季节性特点，降水量主要集中在 6–8 月，且雨季多以暴雨的形式出现[27]。区内年平均蒸发量约为 3 200 mm；年平均气温为 4 ~ 7℃，6–8 月气温一般在 30℃ 以上，日温差很大。研究区内不存在常年流淌的河流，地表水均来源于间歇性洪水形成的季节性沟谷流。该区地表沟谷十分发育，主要呈 E、W 向分布。区内基本上无长住居民，只有少数牧民分散居住。北山地区相继开展了旧井、新场、野马泉、算井子和沙枣园 5 个高放废物处置预选地段的选址和场址评价工作（图 1）。

北山地区地下水的主流向是自西向东流动，排泄区为黑河下游流域，南部靠近河西走廊一侧地下水主流向为自北向南，排泄区为河西走廊地区[28]。根据地形、地貌、岩性结构及地质构造条件等方面的差异，研究区地下水可划分为 4 种类型[29]：松散岩类孔隙水、碎屑岩类裂隙–孔隙水、变质岩类裂隙水、火成岩类裂隙水（图 1b）。

松散岩类孔隙水主要分布于沟谷区、山间洼地和区域南部的河西走廊、东部黑河流域，可进一步划分为沟谷松散岩类孔隙水、洼地松散岩类孔隙水和盆地松散岩类孔隙水。沟谷松散岩类孔隙水具有埋藏浅、含水层厚度小等特点，主要接受大气降水入渗补给，主要排泄方式为蒸发。洼地松散岩类孔隙水呈点状、面状零星分布。盆地松散岩类孔隙水在山前带水量小，含水不均；至盆地内逐渐转化为层间承压水，富水性逐渐变强。

区内丘陵区广泛分布不同时期的碎屑岩，以白垩系、侏罗系为主，是碎屑岩类裂隙–孔隙水的主要分布区。其上部一般分布有风化裂隙水，深部含有裂隙–孔隙潜水，单井涌水量一般小于 10 m^3/d，说明这种类型的地下水含量较小，这也是当地民井很少分布于这类地区的主要原因。北山地区变质岩主要呈 NW–SE 向分布，含水介质主要是风化裂隙和构造裂隙，区内的一些金属矿床多分布于变质岩区，如新场地段北部的金庙沟煤矿等矿点[30]。野外水文地质调查发现，矿区一般都有矿井分布，矿井均揭露了

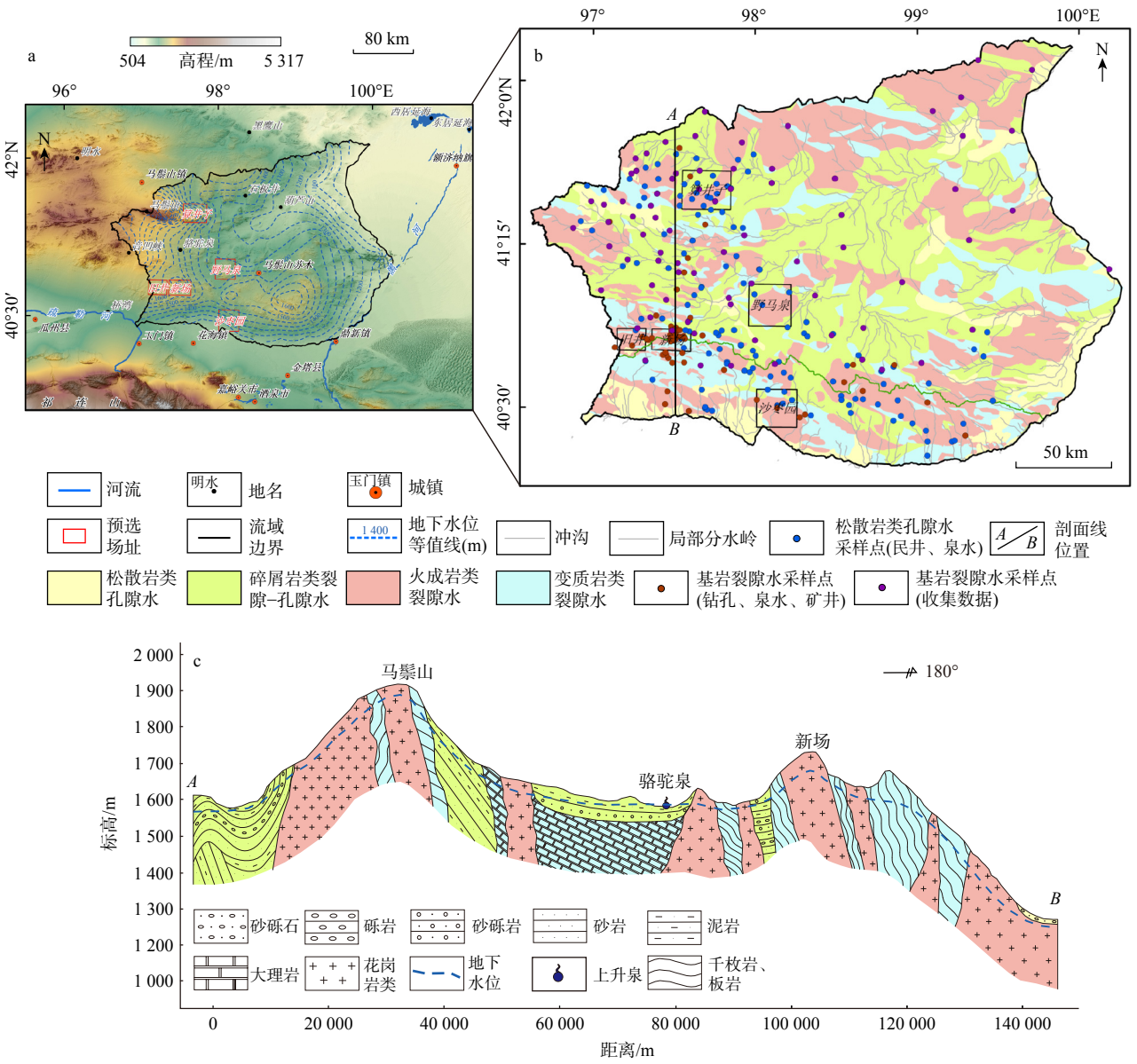


图 1　北山地区 DEM 影像和地下水位等值线图 (a)、区域水文地质简图 (b) 及典型剖面水文地质简图 (c)

Fig. 1　DEM image and groundwater level contour map (a), the regional hydrogeological map (b) and the representative hydrogeological cross-section (c) of the Beishan area

地下水位，其埋深一般在 10 ~ 50 m 之间，地下水的含盐量较高。由于变质岩渗透系数很低，导致变质岩类裂隙水单井涌水量较小，一般小于 10 m^3/d。火成岩类裂隙水以潜水为主，地下水的埋藏深度受地形起伏的影响较大。火成岩裂隙水的含水空间主要是基岩风化裂隙和构造裂隙。根据前期调查资料，火成岩裂隙水单井涌水量多为 10 ~ 100 m^3/d。不同类型的地下水浅部联系密切，可以相互转化。

北山地区最主要的地下水类型为基岩裂隙水，花岗岩、变质岩和部分沉积岩中的裂隙为基岩裂隙水的主要导水和含水空间。调查发现，深度≤100 m 为裂隙密集带，裂隙主要为风化裂隙；深度(100, 300]m 为裂隙中等发育带，裂隙主要为构造裂隙和风化裂隙；深度(300, 600]m 为裂隙弱发育带，裂隙主要为构造裂隙和成岩裂隙。因此，地下水的主要循环深度在 600 m 以上[31-32]。

2　材料与方法

2.1　样品采集与测试

本研究共成功采集地下水样品 227 件，为尽量减少降水引起的不确定性，所有样本均在 2010—2023 年每年 9–11 月期间采集。其中，158 件样品属于松散岩类孔隙水，包括采自民井中的样品和部分

泉水样品。野外调查发现，民井主要位于沟谷洼地和山前斜坡地带松散沉积物中，地下水水位埋深一般在 2 ~ 5 m 之间，井深多小于 10 m。其余 69 件样品均取自基岩含水层，包括取自钻孔、矿井的样品以及部分流经基岩的泉水。此外，还收集汇总了前期 1∶20 万和 1∶50 万水文地质图中 78 口钻孔的水化学数据，钻孔深度为 50 ~ 250 m，样品均取自基岩含水层。

绝大多数民井和矿井在取样前一直被利用，样品代表性好。为确保样品代表性合格，未被利用的民井和矿井在采样前均进行了 0.5 h 以上的抽水。场址内所有已施工的钻孔均采用清水钻进方案，钻孔施工过程中钻井液中添加质量分数 500×10^{-9} 的荧光素钠作为示踪剂，当抽水水样中荧光素钠浓度降为初始浓度的 1% 以下时，方可判定为原状地下水，此时再开始取样，本研究共采集到 23 件钻孔深部地下水样品。采集水样后均用 0.45 μm 的过滤膜过滤，将滤液装入干燥洁净的 HDPE 塑料瓶中，用封口膜密封后置于 4℃ 的环境中冷藏保存，并尽快以冷藏状态运抵测试单位。样品均在核工业北京地质研究院分析测试中心分析，地下水中的 K^+、Na^+、Ca^{2+}、Mg^{2+} 采用 DIONEX ICS-1100 型离子色谱仪测定，F^-、Cl^-、SO_4^{2-} 采用 883Basic IC Plus 离子色谱仪测定，HCO_3^- 采用 AT-510 自动电位滴定仪测定，Si、Al^{3+}采用 ELEMENT XR 电感耦合等离子体质谱仪进行测定。

2.2 水文地球化学模拟

2.2.1 原理介绍

本研究采用美国地质调查局开发的 PHREEQC 3.7.3 程序，数据库选用最为常用的 PHREEQC.dat 数据库。首先计算地下水中主要矿物的饱和指数；在此基础上开展反向水文地球化学模拟研究，以充分了解水流路径地下水的演化过程。

饱和指数可以用于确定地下水中某一矿物组分所处的状态，计算公式为：

$$SI = \lg(IAP/K), \qquad (1)$$

式中：SI 为饱和指数；IAP 为离子活度积；K 为特定温度下矿物的平衡常数。若 $SI<0$，表示矿物趋向于溶解；若 $SI>0$，表示矿物处于过饱和状态；当 $SI=0$ 时，表示矿物处于平衡状态。一般认为 SI 在 ± 0.5 的范围内均为平衡状态。

反向水文地球化学模拟的理论是质量守恒。当地下水由 A 点径流至 B 点时，其化学成分须满足：A 点水化学成分+反应相=B 点水化学成分+生成相，这一关系可用质量平衡方程和电子守恒方程来表示[33]：

$$\sum_{p=1}^{P}\alpha_p\cdot b_{p,K} = m_{T,K}(B) - m_{T,K}(A) = \Delta m_{T,K}, \qquad (2)$$

$$\sum_{p=1}^{P}\alpha_p\cdot u_p = \sum_{i=1}^{I}v_i\cdot m_i(B) - \sum_{i=1}^{I}v_i\cdot m_i(A) = \Delta RS, \qquad (3)$$

式中：P 为矿物相总数目；K 为水中所含元素，K=1，…，L，L 为水中所含元素总数目；α_p 为质量迁移系数；$b_{p,K}$ 为第 p 种矿物相中第 K 种元素的化学计量数；$m_{T,K}$ 为溶液中第 K 种元素总摩尔浓度；u_p 为第 p 种矿物相的作用化合价；I 为溶液中组分存在形式的总数目；v_i 为第 i 种组分形式的作用化合价；m_i 为第 i 种组分形式的摩尔数；RS 为溶液氧化还原态。

方程(2)表示沿水流路径水中第 K 种元素的变化量等于有关矿物通过溶解、沉淀等作用进入或离开溶液的这种元素量的总和；方程(3)代表沿水流路径水中氧化还原态变化等于在 P 种矿物中转移的电子对。联合上述 2 个方程便构成了地下水质量平衡反应模型。

通常情况下，反向水文地球化学模拟会出现多个模拟结果，最优模拟结果的选择可通过增加约束变量、降低模型的不确定度来实现(默认值为 0.05)[34-35]。此外，还应充分考虑实际水文地质条件。比如：当地下水位埋深很大时，模型中应忽略蒸发作用的影响。

2.2.2 水流路径的选择

根据区内基岩裂隙水水位数据，绘制区内浅部基岩裂隙水等水位线(图 1a)。在此基础上，综合分析研究区地形、地貌、水文地质条件等特征，结合地下水流场分布特征，选择 6 种典型水文地质区开展反向地球化学模拟研究(图 2)。本研究的主要对象包括：①典型沟谷内泉水水化学的演化；②中低山区至沉积盆地经过深循环的水化学演化；③小型封闭山间洼地内地下水化学的演化；④沿断层走向地下水化学的演化；⑤半封闭洼地内的地下水化学的演化；⑥山前倾斜戈壁平原地下水的演化。

对于典型沟谷内泉水水化学演化研究，选择区域补给区算井子地段内“1073-2 井→1072 泉→头道泉”(图 2b)作为模拟路径。该类型泉水属于沟谷潜水补给型，形成原因是由于沟谷上部覆盖的砂砾石冲积层和下伏基岩渗透性的强烈差异性造成的，地下水沿沟谷向下游流动过程中遇到下伏基岩突起处，便涌出地表形成泉水，该类型泉水在马鬃山一带山间沟谷内区内广泛分布[36]。

对于中低山区至沉积盆地经过深循环的水化学演化分析，选择区内西北部补给区至中部排泄区小

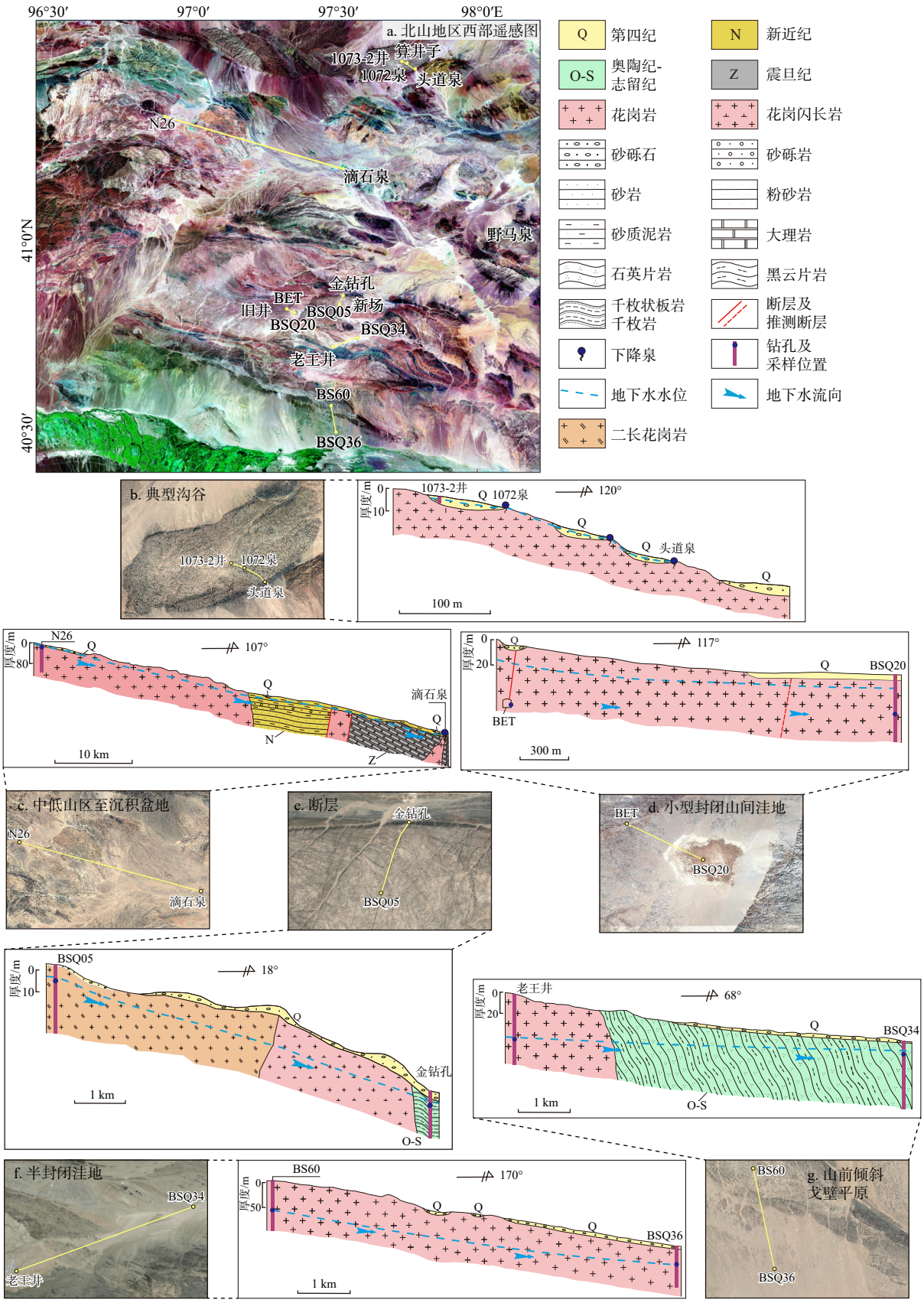


图 2　典型水文地质区位置 (a) 及剖面水文地质简图 (b ~ g)

Fig. 2　Location of typical hydrogeological zones (a) and hydrogeological cross-section maps (b-g)

草湖一带，即“N26→滴石泉”作为模拟路径，径流路径超过 53 km。野外调查发现，中部排泄区有骆驼泉、小草湖、东滴水、白石头泉等一系列泉水和草滩，这些泉水的来源均为盆地西北部低中山地区。位于新近纪砂岩中的地下水在径流过程中，由于受到基底岩石起伏和地形切割的影响，溢出地表而形成泉水(图 2c)。

对于小型封闭山间洼地内地下水化学的演化分析，选择新场地段西部旧井盆地内“BET→BSQ20”(图 2d)作为模拟路径。野外调查发现，旧井盆地周边洼地外周边为剥蚀丘陵，中部地形平坦，四周相对封闭[30]。由于盆地中间上部覆盖层以粉砂、黏土为主，下伏为花岗岩，盆地接受降水和洪流垂向入渗的量极其有限，地下水主要来源为周围基岩裂隙水的侧向补给。

对于沿断层走向地下水化学演化过程分析，选择新场地段 F31 断层内“BSQ05→金钻孔”(图 2e)作为模拟路径。F31 断层为北山实验室场址内的主要断层之一，断层带两侧岩体破碎变形强烈，构造岩为硅化角砾岩、碎斑岩等，原岩为片麻状花岗闪长岩，可见斜长石高岭土化、黏土化等。有钾长花岗岩脉顺断层方向产出，断层东侧有闪斜煌斑岩脉顺断层方向产出。

对于半封闭洼地内的地下水化学演化研究，选择新场地段南部四十里井洼地内“老王井→BSQ34”(图 2f)作为模拟路径。沿地下水径流路径，岩性由花岗岩变为变质岩，变质岩成分主要为石英片岩和黑云片岩。

对于山前倾斜戈壁平原地下水演化研究，选择靠近区域南部排泄区山前地带内“BS60→BSQ36”(图 2g)作为模拟路径。野外调查发现，BS60 钻孔靠近沟谷，地下水与降水关系密切，而 BSQ36 钻孔水位基本不受降雨效应的影响，地下水主要来源为山前地下水侧向补给。沿地下水径流路径，含水层均为花岗岩。

2.2.3 溶解矿物项与约束变量的确定

根据前人[24]研究成果并结合区域地质背景可知，区内主要的潜在溶解矿物包括岩盐、石膏、方解石、白云石、长石、石英、云母、萤石、绿泥石和黏土矿物。阳离子交替吸附作用也是区内普遍存在的水文地球化学作用。此外，由于本次模拟的水流路径均分布在潜水含水层中，地下水还可能受 CO_2 分压的影响。对于部分埋深较浅的水点，还应重点考虑蒸发作用的影响。在构建质量平衡反应模型时，所考虑的化学元素被称为约束变量。基于水化学组分分析结果(表 1)，本研究选择 F、K、Na、Ca、Mg、C、S、Cl 和 Si 9 种主要元素作为约束变量。

3 结果与讨论

3.1 地下水主要化学特征

对于高放废物地质处置库场址而言，瑞典核燃料和废物管理公司(SKB)规定的主要水化学适宜性标准包括：总溶解性固体质量浓度 ρ(TDS)<100 g/L，pH 值在 4 ~ 10 之间，$\rho(Ca^{2+}+Mg^{2+})$>40 mg/L[37]。由表 2 可知，区内基岩裂隙水的 ρ(TDS)分布在 387 ~

表 1 各模拟路径上地下水取样信息和水化学参数分析

Table 1 Groundwater sampling information and hydrogeochemical parameter analysis along the simulation flow path

采样点	取样深度/m	F^-	Cl^-	SO_4^{2-}	Na^+	K^+	Mg^{2+}	Ca^{2+}	HCO_3^-	Si	Al^{3+}	pH值	温度/℃	岩性
		质量浓度ρ_B/(mg·L^{-1})												
1073-2井	2.5 ~ 5.0	0.70	179.0	171.0	154	5.79	13.7	80.7	173.0	1.867	0.00289	7.75	13.09	砂砾石
1072泉	0	0.74	236.0	255.0	222	7.65	19.3	112.0	287.0	2.800	0.00365	7.95	13.90	花岗岩
头道泉	0	0.81	480.0	519.0	463	13.50	34.1	120.0	391.0	3.733	0.00416	8.32	13.27	花岗岩
N26	2.6 ~ 30	0.76	95.4	126.3	107	2.68	10.8	52.7	176.3	2.947	0.00368	7.90	12.38	花岗岩
滴石泉	0	1.35	696.0	1291.0	703	11.70	111.0	220.0	164.0	9.671	0.00661	7.53	12.18	变质岩
BET	50	1.90	836.0	828.0	820	7.20	19.6	121.0	226.0	4.542	0.01120	7.58	11.77	花岗岩
BSQ20	10 ~ 30	3.00	1209.0	1048.0	944	12.00	48.6	286.0	109.0	5.347	0.01530	7.68	9.66	花岗岩
BSQ05	6.5 ~ 30	0.82	446.0	401.0	403	8.03	22.4	106.0	236.0	4.309	0.00345	7.83	12.60	花岗岩
金钻孔	3.6 ~ 60	1.39	498.0	539.0	490	9.24	28.5	156.0	383.0	4.395	0.01300	7.80	11.83	变质岩
老王井	65 ~ 100	0.66	386.0	496.0	466	6.48	8.1	51.9	180.0	4.072	0.01070	7.83	10.80	花岗岩
BSQ34	15 ~ 30	1.72	448.0	601.0	496	8.53	18.4	106.0	157.0	5.019	0.02560	7.71	10.42	变质岩
BS60	59 ~ 70	1.04	176.0	170.0	232	2.83	4.3	30.0	169.0	3.875	0.00318	7.98	11.43	花岗岩
BSQ36	37 ~ 60	1.40	867.0	1426.0	884	9.28	57.4	296.0	100.0	10.200	0.00898	7.52	12.81	花岗岩

67 383 mg/L 之间，空间变异性强。地下水 pH 值多为弱碱性，平均值为 7.74，变异系数为 3.88%，空间变异性弱。$\rho(Ca^{2+}+Mg^{2+})$显著大于 40 mg/L。参照 SKB 标准可知，北山地区水化学特征符合高放废物地质处置安全评价相关要求。此外，松散岩类孔隙水水化学指标统计结果与基岩裂隙水类似，多年来的水化学分析结果显示水化学参数随时间基本稳定。

Piper 三线图法是分析水化学特征的最常用方法，其也可用于区分不同来源或不同演化过程水的混合程度[38]。由图 3 可知，松散岩类孔隙水和基岩裂隙水的分布特征十分相似，主要水化学类型均为 Cl·SO_4-Na 型和 SO_4·Cl-Na 型。ρ(TDS)较高的地下水样品主要采自排泄区，靠近 Piper 图中上部菱形区域右下方边界处，相应的水化学类型为 Cl·SO_4-Na 型。

对于这 2 种类型的地下水，TDS 质量浓度与 Cl^-、SO_4^{2-} 、Na^++K^+和 Ca^{2+}质量浓度均呈显著正相关，这说明这些离子对 TDS 质量浓度贡献最大。并且，TDS 质量浓度与 Cl^-、SO_4^{2-} 、Na^++K^+质量浓度之间的相关系数均高于 0.95(图 4)。此外，考虑到研究区的主要溶解矿物，Cl^-质量浓度和 Na^+质量浓度之间以及 SO_4^{2-} 质量浓度和 Na^++K^+、Ca^{2+}质量浓度之间存在显著的正相关，所有这些都与蒸发盐矿物的溶解有关。然而，HCO_3^- 质量浓度与 Mg^{2+}、Ca^{2+}质量浓度之间不存在相关性，表明碳酸盐矿物的溶解并不显著。

Gibbs 图常用来定性判断影响水化学组分的主要控制因素[39]。Gibbs 图最初由地表水化学数据统计而来，若用于分析地下水，应重新考虑 Gibbs 图中各部分的轮廓。由于地下水经历的水−岩相互作用时间远远大于地表水，使得其“岩石风化”范围扩大[40]。由图 5 可知，区内水点均远离降水控制区域，说明大气降水对地下水离子质量浓度影响非控制因素，这与西北内陆降水稀少、蒸发量大的气候条件相一致。松散岩类孔隙水与基岩裂隙水均主要位于蒸发−浓缩区域，充分说明控制场址内地下水化学特征的最主要机制是蒸发−浓缩作用，这也是导致 2 种类型的地下水化学类型基本一致的最主要因素。

3.2　矿物饱和指数

饱和指数是确定水与矿物所处状态的参数，根据区内基岩裂隙水的化学组分(不包括收集数据)计算了主要溶解矿物的饱和指数(图 6)。其中，岩盐、石膏、绿泥石、萤石、钾长石、钠长石等矿物平均饱和指数小于 0，岩盐、绿泥石 2 种矿物饱和指数最小，平均值甚至小于 5，说明地下水将继续溶解含水层中所含有的这些矿物。而高岭石、伊利石和钙蒙脱石等矿物饱和指数平均值均大于 0.5，说明这 3 种矿物在地下水中为过饱和状态，趋向于从地下水中沉淀析出。而方解石、白云石和石英 3 种矿物，其 *SI* 值均值在 0 ± 0.5 的范围附近，说明这 3 种矿物基本属于平衡状态。

表 2　北山地区水化学指标统计

Table 2　Statistical summary of hydrogeochemical indicators in the Beishan area

地下水类型	水质指标	最大值	最小值	平均值	标准差	偏度	变异系数/%
基岩裂隙水(样品数*N*=147)	$\rho(Na^+ + K^+)$/(mg·L^{-1})	19 870.50	61.62	1 785.27	2 811.68	4.02	157.49
	$\rho(Ca^{2+})$/(mg·L^{-1})	3 002.00	29.50	315.64	366.06	3.65	115.97
	$\rho(Mg^{2+})$/(mg·L^{-1})	1 952.90	5.40	126.59	227.10	4.77	179.40
	$\rho(Cl^-)$/(mg·L^{-1})	39 175.60	65.50	2 319.26	4 586.38	5.08	197.75
	$\rho(SO_4^{2-})$/(mg·L^{-1})	10 213.80	84.50	1 635.30	1 670.44	2.19	102.15
	$\rho(HCO_3^-)$/(mg·L^{-1})	1 428.40	37.60	227.94	197.52	3.30	86.65
	$\rho(NO_3^-)$/(mg·L^{-1})	250.00	< 0.08	15.02	26.30	5.56	175.10
	pH值	8.35	6.80	7.74	0.30	−0.63	3.88
	ρ(TDS)/(mg·L^{-1})	67 383.45	387.11	6 312.65	9 075.08	3.81	143.76
松散岩类孔隙水(样品数*N*=158)	$\rho(Na^+ + K^+)$/(mg·L^{-1})	36 467.00	22.26	1 734.24	4 406.60	6.11	254.09
	$\rho(Ca^{2+})$/(mg·L^{-1})	1 040.00	16.70	210.74	199.02	2.13	94.44
	$\rho(Mg^{2+})$/(mg·L^{-1})	490.00	2.50	41.20	48.71	5.59	118.23
	$\rho(Cl^-)$/(mg·L^{-1})	25 667.00	41.20	1 025.09	2 188.66	9.28	213.51
	$\rho(SO_4^{2-})$/(mg·L^{-1})	7 192.00	43.50	1 045.87	946.63	2.79	90.51
	$\rho(HCO_3^-)$/(mg·L^{-1})	859.00	11.30	224.68	122.61	2.31	54.57
	$\rho(NO_3^-)$/(mg·L^{-1})	138.00	< 0.08	19.18	21.84	2.10	113.87
	pH值	8.58	6.71	7.76	0.30	−0.17	3.87
	ρ(TDS)/(mg·L^{-1})	53 343.52	370.02	3 408.98	4 724.61	7.75	138.59

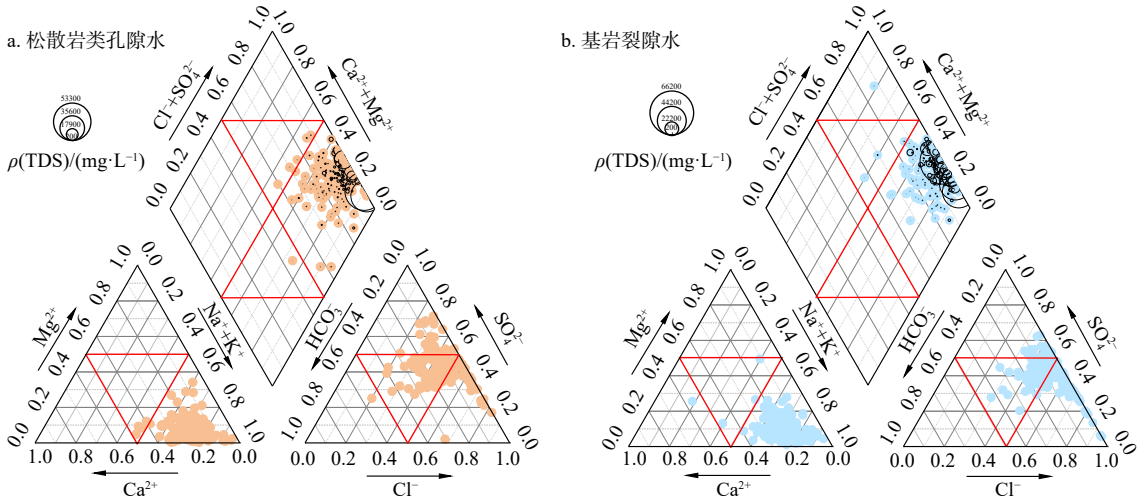
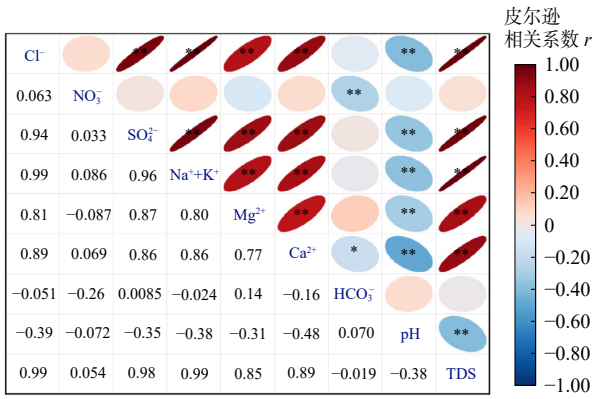


图 3　研究区不同类型地下水 Piper 三线图

Fig. 3　Piper diagrams of different groundwater types in the study area



*p≤0.05, **p≤0.01; p 值为观察到当前样本数据比当前数据更极端数据的概率

图 4　北山地区基岩裂隙水主要化学指标相关性矩阵图

Fig. 4　Correlation coefficients of the main parameters of fractured bedrock groundwater in the Beishan area

3.3　水化学形成、演化的反向地球化学模拟

典型沟谷内泉水模拟结果见图 7a, b, 可知地下水沿沟谷向下游流动过程中, 发生了一定程度的蒸发作用(H_2O(g)负值表示蒸发作用), 蒸发体积分数分别为 4.72%(水流路径: 1073-2 井→1072 泉)和 9.56%(水流路径: 1072 泉→头道泉)。据此可知, 蒸发作用对于水化学组分的贡献并不大。这主要是由于该区地下水径流条件较好所致。2 条水流路径中, 岩盐和石膏均是最主要的溶解矿物, 白云石、萤石、钙长石、钾长石等矿物也有少量的溶解, CO_2(g)也不断地溶解进入地下水中。此外, 沿径流路径地下水发生了明显的正向离子交换作用, 使得地下水中 Na^+和 K^+浓度增大, Ca^{2+}和 Mg^{2+}浓度减小。而方解石、钙蒙脱石 2 种矿物则沉淀析出。根据这 3 个水点饱和指数计算结果可知, 它们均对方解石、钙蒙脱石呈过饱和状态, 2 种矿物趋向于从水中析出。

地下水由中低山补给区向下游沉积盆地流动过程中, 发生了显著的蒸发作用, 蒸发体积分数高达 78.08%, 蒸发作用对于水化学组分的贡献很大(图 7c)。这与野外调查认识一致, 沿水流路径地下水埋深浅(多<3 m), 且地表可见明显的盐渍[26]。沿水流路径, 岩盐和石膏均是最主要的溶解矿物, 2 种溶解矿物的摩尔转移量均超过 10 mmol/Kg, 而绿泥石、黑云母等矿物仅有少量溶解。CO_2(g)的溶解量也占有一定比值, 说明地下水与大气接触密切, 包气带中的 CO_2 不断溶解。此外, 沿水流路径地下水发生了明显的正向的离子交换作用。而方解石、白云石、钙蒙脱石、SiO_2(a)(地下水中 Si 以胶体状态析出)2 种矿物则不断沉淀析出。

小型封闭山间洼地内基岩裂隙水由上游向下游流动过程中, 岩盐矿物的摩尔转移量显著高于其他矿物, 超过 10 mmol/Kg, 石膏也占有一定比重, 而绿泥石、黑云母和萤石仅有少量溶解(图 7d)。CO_2(g)溶解量不大, 这主要是因为沿径流路径地下水埋深大、包气带渗透性低, 从而导致地下水与大气联系差。此外, 离子交换也占有相当的比重, 为−7.915 mmol/Kg, 说明沿径流路径地下水发生了反向的离子交换作用, 使地下水中 Ca^{2+}和 Mg^{2+}浓度升高, 而 Na^+和 K^+浓度减小。析出矿物中, 方解石的摩尔转移量最大。SiO_2(a)、高岭土析出量则不大。

在新场地段内的主要断层, 地下水沿断层走向向下游流动过程中, 岩盐、石膏的摩尔转移量最大, 均超过 2 mmol/Kg, NaX(可交换钠)也占有相当的比重, 为 0.611 mmol/Kg, 说明沿径流路径地下水发生

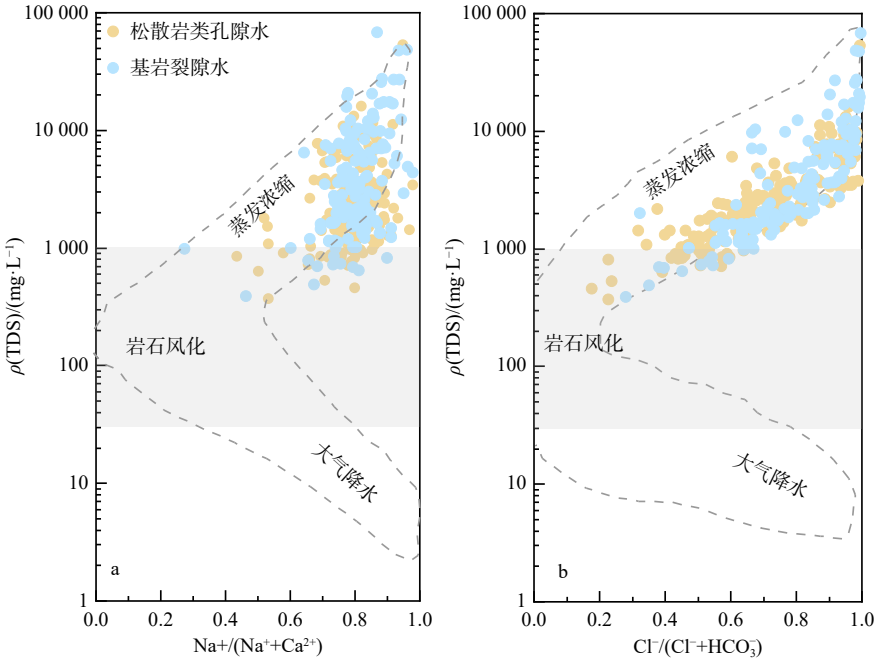


图 5　北山地区地下水 Gibbs 图

Fig. 5　Gibbs diagram of groundwater in the Beishan area

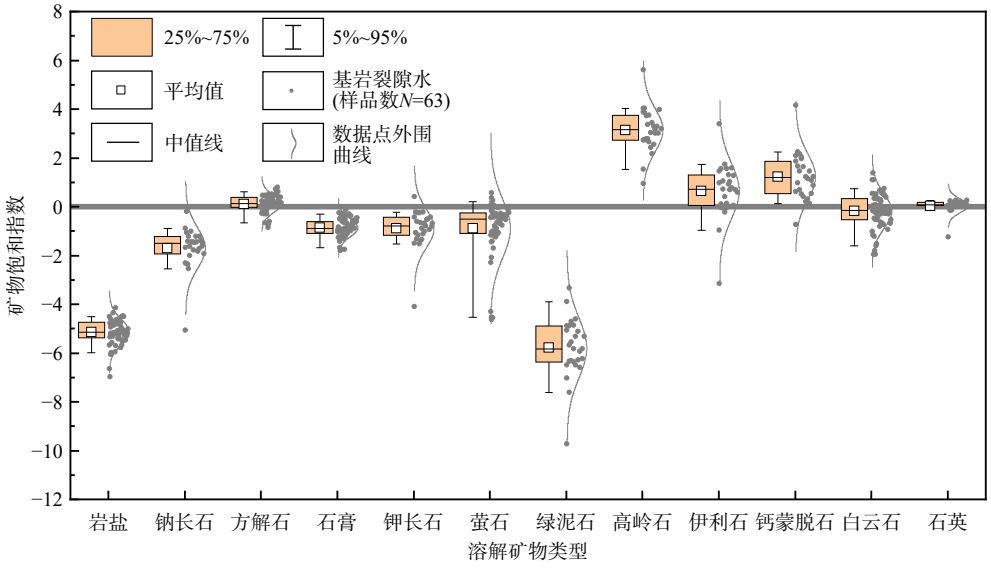


图 6　基岩裂隙水中主要矿物饱和指数计算结果

Fig. 6　Calculated saturation indices of major minerals in fractured bedrock groundwater

了正向的离子交换作用(图 7e)。黑云母、萤石、钾长石和钠长石也有少量的溶解,但摩尔转移量不大。而钙蒙脱石、石英和方解石则沉淀析出。其中,方解石析出量最大,为 0.622 mmol/Kg。

半封闭洼地内的浅部基岩裂隙水向下游流动过程中,岩盐和石膏 2 种矿物的摩尔转移量显著高于其他矿物(图 7f)。而黑云母、绿泥石、萤石、CO_2(g)仅有少量的溶解。此外,也发生了微弱的正向离子交换作用。析出矿物中,方解石的摩尔转移量最大,高岭土也有少量析出。

区域南部山前地带,浅部基岩裂隙水由上游中低山向下游倾斜戈壁平原流动过程中,岩盐和石膏为最主要的溶解矿物,2 种矿物的摩尔转移量显著高于其他矿物(图 7g)。而 CO_2(g)、绿泥石、黑云母、钾云母、萤石的溶解量并不大。此外,径流过程中发生了显著的正向离子交换作用,摩尔转移量超过 7 mmol/kg。而方解石、钙蒙脱石则沉淀析出。

3.4　地下水化学分带性分析

一个地区地下水的化学特征是该地区地下水演化历史的综合体现。分析地下水化学成分特征,对

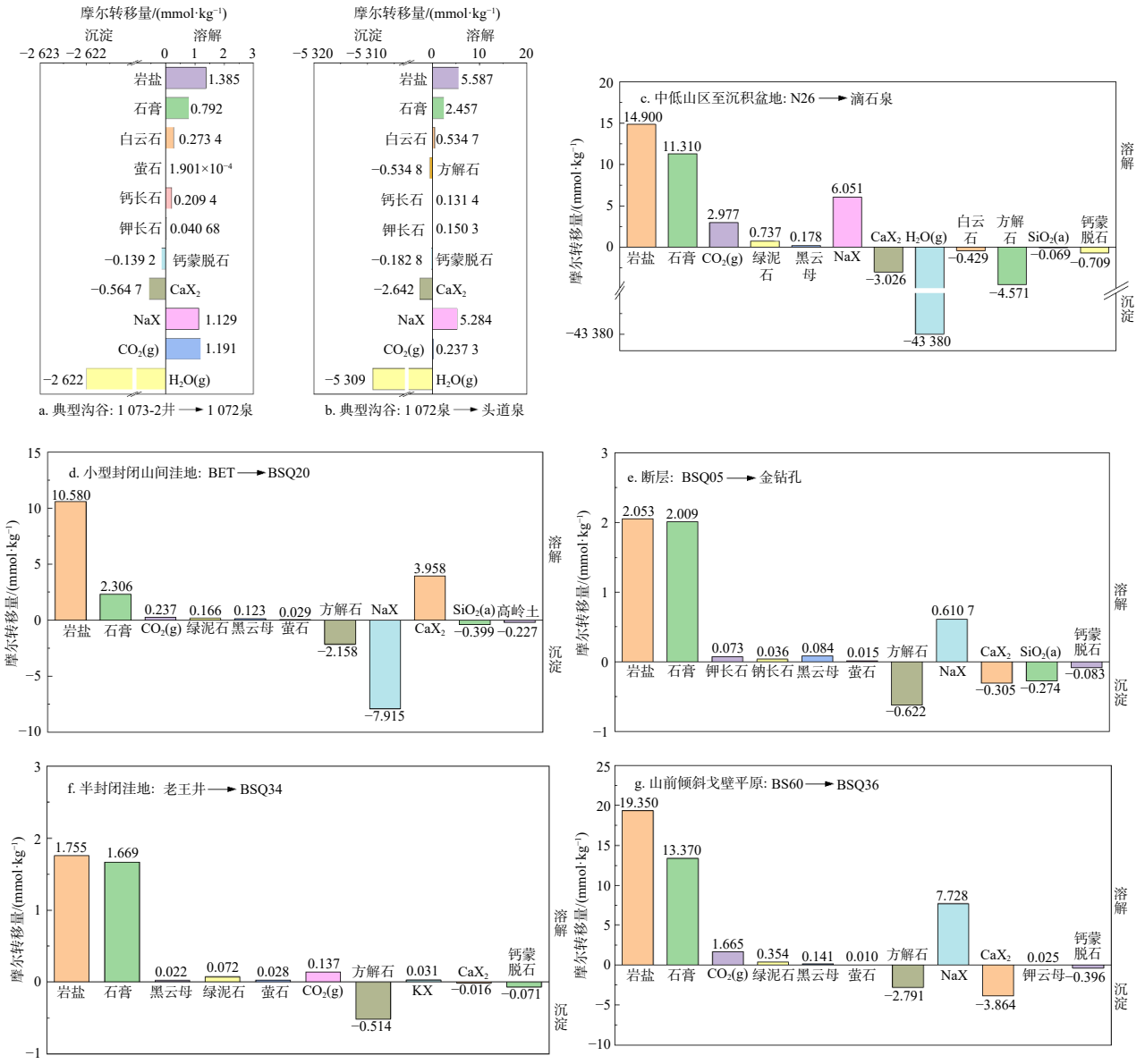


图 7　北山地区不同水文地质区典型剖面反向地球化学模拟结果

Fig. 7　Inverse hydrogeochemical simulation results for representative cross-sections in different hydrogeological zones of the Beishan area

于深入理解地下水的形成机制及其循环规律具有重要意义[41-43]。为进一步识别地下水的循环交替过程，笔者以区域 SN 向剖面 *A*−*B*(图 1c)为例，绘制了剖面地下水化学分带特征及演化示意图(图 8)。

区域北部低中山区马鬃山一带为区域地下水补给区，该区地下水矿化度多小于 1 g/L，水化学类型主要为 Cl·SO_4·HCO_3-Na 型。这主要是由于该区降水量相对较多、地形起伏较大、径流条件好，地下水循环交替频繁，有利于形成矿化度低的地下水。并且，该地沟谷发育，沟谷潜水与风化裂隙水常构成统一含水层，在与基岩接触带上常有泉水出露，如马鬃山一带分布有头道泉、二道泉、向阳泉等多处泉点。模拟结果表明，该地区地下水化学组分主要控制因素为溶滤作用，进一步反映了补给区的特点。

靠近马鬃山南北两侧的山前倾斜平原为地下水径流区，地下水矿化度一般为 1 ~ 3 g/L，地下水化学类型主要是 SO_4·Cl-Na 型。区域中部存在多个沉积盆地，主要包括后红泉盆地、骆驼泉盆地等。盆地中部受地形切割和构造作用影响，常有泉水出露。该地区基岩裂隙水矿化度多在 3 g/L 以上，尤其是骆驼泉附近，地下水矿化度最高达 67 g/L，水化学类型主要为 Cl·SO_4-Na 型，充分体现出排泄区的特点。该地区的显著特点是地形平坦、降雨量小，地下水循环交替缓慢且径流路径长，易形成高矿化度地下水。模拟结果表明，地下水由中低山径流至盆地过程中，发生了显著的蒸发作用。盆地内的沟谷，地下水矿

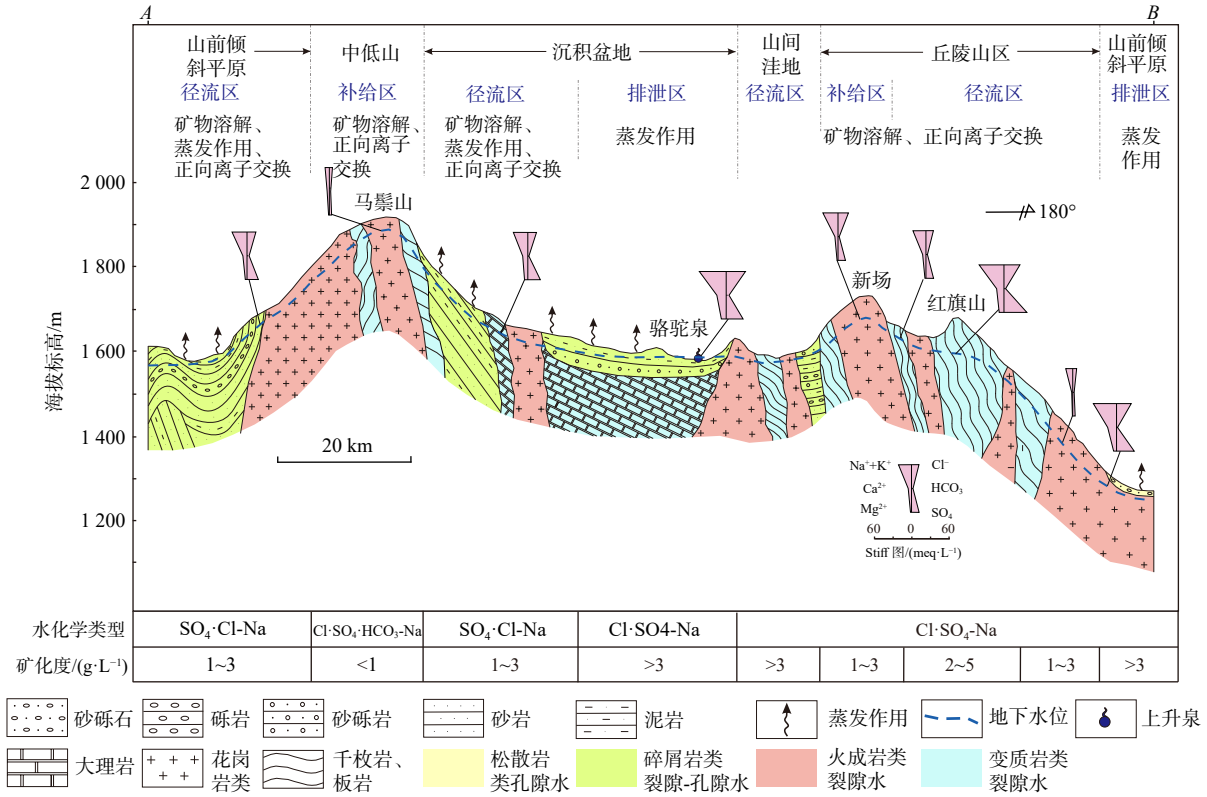


图 8　北山地区地下水化学分带特征及演化示意图（*A*–*B* 剖面位置见图 1b；meq/L=mmol/L×原子价）

Fig. 8　Schematic of hydrogeochemical zoning characteristics and evolution of groundwater in the Beishan area

化度在 2 ~ 4 g/L 之间，沟谷内地下水矿化度自上游到下游具有增大的趋势。

新场地段至南部山前地带为丘陵山区，该区地下水化学组分受岩性、降雨和地形的综合影响，变化较为复杂，但水化学类型均主要为 Cl·SO_4-Na 型。新场地段为局部地下水补给区，地下水矿化度在 1 ~ 3 g/L 之间。现场调查发现，取自新场地段靠近沟谷钻孔的地下水矿化度较小，多小于 2 g/L；而取自相对完整基岩内钻孔的地下水矿化度较大。此外，区内沟谷较为发育，沟谷内民井地下水矿化度均小于 2 g/L，且小于附近钻孔中地下水的矿化度，从侧面反映出地下水由沟谷向两侧补给的特点。模拟结果表明，岩盐、石膏的溶解对于区内地下水化学组分的贡献最大。此外，正向离子交换作用也较为显著。

而红旗山一带为局部低山，处于地下水径流区，该区采集的地下水矿化度大于 3 g/L。这主要是由于该区岩性为变质岩，含水层渗透性极低、径流条件差、地下水循环交替极其缓慢。^{14}C 测年结果表明，该地段浅部变质岩内基岩裂隙水表观年龄在 25 ka 以上。因此，长时间的水–岩相互作用有利于形成高矿化度的地下水。而位于新场地段以南红旗山的四十里井洼地，地下水矿化度多在 2 ~ 4 g/L 之间。红旗山断裂带以南至山前，地下水矿化度为 1 ~ 3 g/L。这主要是由于该区岩性主要为花岗岩，渗透性相对较好。红旗山南北两侧水化学特征的非连续性也反映出南北地下水水力联系差的特征。

靠近南部排泄区北石河附近的山前倾斜平原区地下水矿化度大于 3 g/L，水化学类型也主要为 Cl·SO_4-Na 型。这主要是由于该区靠近区域地下水排泄区，地势相对平坦、降雨量小，地下水循环交替缓慢且径流路径也较长。模拟结果表明，该区地下水化学组分主要受岩盐、石膏矿物的溶解和正向离子交换作用的影响。

由此可知，从补给区到排泄区，北山地区地下水化学分布不仅表现出明显的水平分带性，同时也具有明显的连续性。矿化度低的低中山区（马鬃山一带）为区域地下水的主要补给区，溶滤作用是水化学组分的主要控制因素；而矿化度很高的沉积盆地是区域地下水主要排泄区之一，地下水化学组分主要受蒸发作用控制；矿化度介于补给区和排泄区之间的为丘陵区及山前地带，为地下水径流区。此外，模拟结果还表明径流区内水化学演化过程基本类似。此外，区内不同水文地质区主要溶解矿物基本一致，均主要为岩盐、石膏矿物的溶解以及黏土矿物的沉淀，而碳酸盐类和硅酸盐类矿物的溶解及沉淀极其有限。

本研究揭示了不同水文地质区地下水化学的循环演化规律，这为开展处置库场址筛选提供了信息和数据。然而，受钻孔水化学资料丰富程度的限制，现阶段研究工作主要针对浅部基岩裂隙水展开，对于深部基岩裂隙水化学形成机制的研究还不够深入。而对于处置库场址而言，仍需关注深部基岩裂隙水化学演化形成机制，这也是开展场址长期性能安全评价的基础和前提。目前，北山新场地段正在开展地下实验室工程建设，可充分利用这一契机获取更多水化学资料。此外，对于高放废物处置库而言，其关注的时间尺度长达上万 a。在未来的极端事件下，如极端气候条件、构造运动和大规模人类活动等，均会使区内地下水化学特征发生重大变化，这也是今后研究工作应予以关注的情况。

4 结 论

（1）研究区地下水以高矿度为主要特征，地下水化学类型主要为 Cl·SO_4-Na 型和 SO_4·Cl-Na 型，pH 值多在 7.5 ~ 8.3 之间，呈弱碱性。在补给区，ρ(TDS) 一般小于 1 g/L；在径流区，ρ(TDS) 多在 1 ~ 3 g/L 之间；在排泄区，ρ(TDS) 大于 3 g/L。从补给区到排泄区，地下水化学分布表现出较为明显的水平分带性。

（2）饱和指数计算结果表明，区内基岩裂隙水对岩盐、绿泥石、钠长石、石膏、钾长石、萤石等矿物呈现未饱和状态，而对高岭石、伊利石和钙蒙脱石等矿物呈现过饱和状态。

（3）反向水文地球化学模拟结果表明，位于区域地下水主要补给区的马鬃山一带地下水化学形成主要受岩盐、石膏、碳酸盐等矿物的溶解以及正向离子交换作用的控制；在径流区，地下水化学形成主要受岩盐、石膏等矿物的溶解以及蒸发作用的控制，而碳酸盐类和硅酸盐类矿物的溶解或沉淀作用微弱；在排泄区，水化学形成主要受蒸发作用的控制。

所有作者声明不存在利益冲突。

The authors declare that no competing interests exist.

参考文献：

[1] WANG J, CHEN L, SU R, et al. The Beishan underground research laboratory for geological disposal of high-level radioactive waste in China: Planning, site selection, site characterization and in situ tests[J]. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 2018, 10(3): 411-435.

[2] BIANCHI M, LIU H H, BIRKHOLZER J T. Radionuclide transport behavior in a generic geological radioactive waste repository[J]. Groundwater, 2015, 53(3): 440-451.

[3] 郭永海，王驹. 高放废物地质处置中的地质、水文地质、地球化学关键科学问题 [J]. 岩石力学与工程学报，2007, 26(增刊 2)：3926-3931.
GUO Y H, WANG J. Key scientific issues of geology, hydrogeology and geochemistry in high-level radioactive waste geological disposal[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2007, 26(S2): 3926-3931. (in Chinese with English abstract)

[4] TSANG C F, NERETNIEKS I, TSANG Y. Hydrologic issues associated with nuclear waste repositories[J]. Water Resources Research, 2015, 51(9): 6923-6972.

[5] 王驹，陈伟明，苏锐，等. 高放废物地质处置及其若干关键科学问题 [J]. 岩石力学与工程学报，2006, 25(4)：801-812.
WANG J, CHEN W M, SU R, et al. Geological disposal of high-level radioactive waste and its key scientific issues[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2006, 25(4): 801-812. (in Chinese with English abstract)

[6] ZHANG H T, XU G Q, ZHAN H B, et al. Identification of hydrogeochemical processes and transport paths of a multi-aquifer system in closed mining regions[J]. Journal of Hydrology, 2020, 589: 125344.

[7] SHARIF M U, DAVIS R K, STEELE K F, et al. Inverse geochemical modeling of groundwater evolution with emphasis on arsenic in the Mississippi River Valley alluvial aquifer, Arkansas (USA) [J]. Journal of Hydrology, 2008, 350(1/2): 41-55.

[8] LIU P, HOTH N, DREBENSTEDT C, et al. Hydro-geochemical paths of multi-layer groundwater system in coal mining regions: Using multivariate statistics and geochemical modeling approaches[J]. Science of The Total Environment, 2017, 601: 1-14.

[9] DOMENICO P A, SCHWARTZ F W. Physical and chemical hydrogeology[M]. 2nd ed. [S. l.]: John Wiley & Sons, 1997.

[10] 王丽，王金生，林学钰. 水文地球化学模型研究进展 [J]. 水文地质工程地质，2003, 30(6)：105-109.
WANG L, WANG J S, LIN X Y. A review of hydrogeochemical modeling[J]. Hydrogeology and Engineering Geology, 2003, 30(6): 105-109. (in Chinese with English abstract)

[11] SUNG K Y, YUN S T, PARK M E, et al. Reaction path modeling of hydrogeochemical evolution of groundwater in granitic bedrocks, South Korea[J]. Journal of Geochemical Exploration, 2012, 118: 90-97.

[12] 范芷若. 再生水灌溉条件下的地下水水质分析及水文地球化学模拟 [D]. 西安：长安大学，2024.
FAN Z R. Groundwater quality analysis and hydrogeochemical simulation under reclaimed water irrigation[J]. Xi'an: Chang'an University, 2024. (in Chinese with English abstract)

[13] 袁昊辰，张幼宽，梁修雨. 广州某地下水污染场地监控自然衰减修复模拟 [J]. 地质科技通报，2023, 42(4)：268-278.
YUAN H C, ZHANG Y K, LIANG X Y. Modelling of groundwater remediation using monitored natural attenuation at a contamination site in Guangzhou[J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2023, 42(4): 268-278. (in Chinese with English abstract)

[14] LIPSON D S, MCCRAY J E, THYNE G D. Using PHREEQC to simulate solute transport in fractured bedrock[J]. Groundwater,

2007, 45(4): 468-472.

[15] 李杰彪, 梁修雨, 周志超, 等. 某地下核设施场址地下水化学特征及其对水循环的指示意义 [J]. 地球科学, 2024, 49(3): 965-977.
LI J B, LIANG X Y, ZHOU Z C, et al. Hydrochemical characteristics and its significance to groundwater flow system at an underground nuclear facility site[J]. Earth Science, 2024, 49(3): 965-977. (in Chinese with English abstract)

[16] CHAE G T, YUN S T, KIM K, et al. Hydrogeochemistry of sodium-bicarbonate type bedrock groundwater in the Pocheon spa area, South Korea: Water-rock interaction and hydrologic mixing[J]. Journal of Hydrology, 2006, 321(1/2/3/4): 326-343.

[17] MORÁN-RAMÍREZ J, LEDESMA-RUIZ R, MAHLKNECHT J, et al. Rock-water interactions and pollution processes in the volcanic aquifer system of Guadalajara, Mexico, using inverse geochemical modeling[J]. Applied Geochemistry, 2016, 68: 79-94.

[18] GASTMANS D, HUTCHEON I, MENEGÁRIO A A, et al. Geochemical evolution of groundwater in a basaltic aquifer based on chemical and stable isotopic data: Case study from the northeastern portion of Serra Geral Aquifer, São Paulo state (Brazil)[J]. Journal of Hydrology, 2016, 535: 598-611.

[19] GÜLER C, THYNE G D, TAĞA H, et al. Processes governing alkaline groundwater chemistry within a fractured rock (ophiolitic mélange) aquifer underlying a seasonally inhabited headwater area in the aladağlar range (Adana, Turkey)[J]. Geofluids, 2017, 2017: 3153924.

[20] CHRISTOFI C, BRUGGEMAN A, KUELLS C, et al. Hydrochemical evolution of groundwater in gabbro of the Troodos Fractured Aquifer: A comprehensive approach[J]. Applied Geochemistry, 2020, 114: 104524.

[21] LAAKSOHARJU M, GASCOYNE M, GURBAN I. Understanding groundwater chemistry using mixing models[J]. Applied Geochemistry, 2008, 23(7): 1921-1940.

[22] GIMENO M J, AUQUÉ L F, ACERO P, et al. Hydrogeochemical characterisation and modelling of groundwaters in a potential geological repository for spent nuclear fuel in crystalline rocks (Laxemar, Sweden)[J]. Applied Geochemistry, 2014, 45: 50-71.

[23] DAVID A, PETE A, STEVEN J. Modelling solute transport and water–rock interactions in discrete fracture networks [R]. Working Report 2020-01, Finland. Posiva Oy, 2020.

[24] 郭永海, 王驹, 吕川河, 等. 高放废物处置库甘肃北山野马泉预选区地下水化学特征及水−岩作用模拟 [J]. 地学前缘, 2005, 12(增刊1): 117-123.
GUO Y H, WANG J, LU C H et al. Chemical characteristics of groundwater and water-rock interaction: Modeling of the Yemaquan preselected area for China's high level radioactive waste repository[J]. Earth Science Frontiers, 2005, 12(S1): 117-123. (in Chinese with English abstract)

[25] 王驹. 中国高放废物地质处置21世纪进展 [J]. 原子能科学技术, 2019, 53(10): 2072-2082.
WANG J. Progress of geological disposal of high-level radioactive waste in China in the 21st century[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2019, 53(10): 2072-2082. (in Chinese with English abstract)

[26] 郭永海, 王驹, 肖丰, 等. 高放废物处置库甘肃北山预选区地下水的形成 [J]. 高校地质学报, 2010, 16(1): 13-18.
GUO Y H, WANG J, XIAO F, et al. Groundwater formation in Beishan (Gansu) preselected area of high-level radioactive waste disposal repository[J]. Geological Journal of China Universities, 2010, 16(1): 13-18. (in Chinese with English abstract)

[27] 李杰彪, 周志超, 云龙, 等. 基于土壤氡气测量识别甘肃北山南缘隐伏断裂 [J]. 地质学报, 2022, 96(6): 2240-2250.
LI J B, ZHOU Z C, YUN L, et al. Identification of hidden faults based on soil radon measurement in thesouthern margin of the Beishan area, Gansu Province[J]. Acta Geologica Sinica, 2022, 96(6): 2240-2250. (in Chinese with English abstract)

[28] 李仁海. 甘肃北山钻孔地下水流速流向测定及地下水流数值模拟 [D]. 成都: 成都理工大学, 2020.
LI R H. Measuring velocity and direction of groundwater in borehole and numerical simulation of groundwater in Beishan area, Gansu Province[D]. Chengdu: Chengdu University of Technology, 2020. (in Chinese with English abstract)

[29] LI J B, ZHANG Y K, ZHOU Z C, et al. Using multiple isotopes to determine groundwater source, age, and renewal rate in the Beishan preselected area for geological disposal of high-level radioactive waste in China[J]. Journal of Hydrology, 2024, 629: 130592.

[30] 郭永海, 王海龙, 董建楠, 等. 高放废物处置库芨芨槽预选场址深部地下水同位素研究 [J]. 地质学报, 2013, 87(9): 1477-1485.
GUO Y H, WANG H L, DONG J N, et al. Isotopic study of deep groundwater in Jijicao preselected site for China's high level radioactive waste disposal repository[J]. Acta Geologica Sinica, 2013, 87(9): 1477-1485. (in Chinese with English abstract)

[31] FU Y M, DONG Y H, WANG L H, et al. Characteristics of hydraulic conductivity in mountain block systems and its effects on mountain block recharge: Insights from field investigation and numerical modeling[J]. Journal of Hydrology, 2022, 612: 128184.

[32] LI L L, ZHANG Q L, ZHOU Z C, et al. Groundwater circulation patterns in bedrock aquifers from a pre-selected area of high-level radioactive waste repository based on two-dimensional numerical simulation[J]. Journal of Hydrology, 2022, 610: 127849.

[33] 郭永海, 沈照理, 钟佐燊. 河北平原地下水化学环境演化的地球化学模拟 [J]. 中国科学(D辑: 地球科学), 1997, 27(4): 360-365.
GUO Y H, SHEN Z L, ZHONG Z S. Geochemical simulation of groundwater chemical environment evolution in Hebei Plain[J]. Science in China, Ser D, 1997, 27(4): 360-365. (in Chinese).

[34] WANG Z J, GUO X L, KUANG Y, et al. Recharge sources and hydrogeochemical evolution of groundwater in a heterogeneous karst water system in Hubei Province, Central China[J]. Applied Geochemistry, 2022, 136: 105165.

[35] JU Q D, HU Y B, LIU Q M, et al. Key hydrological process of a multiple aquifer flow system in the mining area of Huaibei Plain, Eastern China[J]. Applied Geochemistry, 2022, 140: 105270.

[36] 郭永海, 王驹, 萧丰, 等. 高放废物处置库北山预选区地下水同位素组成特征及其意义 [J]. 地球学报, 2008, 29(6): 735-739.
GUO Y H, WANG J, XIAO F, et al. Groundwater isotope characteristics of the pre-selected site of a high level radioactive waste repository in the Beishan area, Gansu Province and their implications[J]. Acta Geoscientica Sinica, 2008, 29(6): 735-739. (in Chinese with English abstract)

[37] LAAKSOHARJU M, SMELLIE J, TULLBORG E L, et al. Hydrogeochemical evaluation and modelling performed within the Swedish site investigation programme[J]. Applied Geochemistry, 2008, 23(7): 1761-1795.

[38] GÜLER C, THYNE G D, MCCRAY J E, et al. Evaluation of graphical and multivariate statistical methods for classification of water chemistry data[J]. Hydrogeology Journal, 2002, 10(4): 455-474.

[39] GIBBS R J. Mechanisms controlling world water chemistry[J]. Science, 1970, 170: 1088-1090.

[40] MARANDI A, SHAND P. Groundwater chemistry and the Gibbs diagram[J]. Applied Geochemistry, 2018, 97: 209-212.

[41] TÓTH J. Groundwater as a geologic agent: An overview of the causes, processes, and manifestations[J]. Hydrogeology Journal, 1999, 7(1): 1-14.

[42] 马文静, 王文科, 侯昕悦, 等. 玛纳斯河流域河水−地下水转化驱动下的水文地球化学空间演化 [J]. 地质科技通报, 2025, 44(2): 378-388.
MA W J, WANG W K, HOU X Y, et al. Spatial evolution of hydrogeochemistry driven by river water-groundwater transformations in the Manas River Basin[J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2025, 44(2): 378-388. (in Chinese with English abstract)

[43] GLYNN P D, PLUMMER L N. Geochemistry and the understanding of ground-water systems[J]. Hydrogeology Journal, 2005, 13(1): 263-287.

Summary for “高放废物处置北山预选区地下水化学形成机制模拟研究”

Hydrogeochemical modeling of groundwater formation mechanism at the Beishan preselected site for high-level radioactive waste disposal

LI Jiebiao[1,2,3], ZHOU Zhichao[1], GUO Yonghai[1], JI Zijian[1], LIANG Xiuyu[3*]

1. CAEA Innovation Center for Geological Disposal of High-Level Radioactive Waste, Beijing Research Institute of Uranium Geology, Beijing 100029, China;
2. School of Environment, Harbin Institute of Technology, Harbin 150090, China;
3. School of Environmental Science and Engineering, Southern University of Science and Technology, Shenzhen Guangdong 518055, China

First author, E-mail: hgylijiebiao@126.com

* Corresponding author, E-mail: liangxy@sustech.edu.cn

Abstract: [**Objective**] Hydrogeochemical characteristics play a pivotal role in site selection and long-term safety assessment for high-level radioactive waste (HLW) disposal repositories. [**Methods**] This study employs integrated hydrogeochemical analysis and modeling to investigate the basic hydrogeochemical characteristics, horizontal zoning, and formation mechanisms in different hydrogeological zones of the Beishan preselected site for HLW disposal in Gansu Province, China. [**Results**] The results show that the predominant hydrogeochemical types were Cl·SO_4-Na and SO_4·Cl-Na, Province with pH values generally ranging from 7.5 to 8.3. Fractured bedrock groundwater is typically undersaturated with respect to halite, gypsum, fluorite, glauconite, and feldspar, and oversaturated with respect to clay minerals. A distinct horizontal zonation is observed in the hydrogeochemical composition from the recharge area to the discharge area. The Mazongshan region serves as the primary recharge zone, characterized by low mineralization, where hydrogeochemical composition is mainly controlled by leaching processes. The sedimentary basins act as the main discharge areas with high mineralization, where evaporation processes dominate. The water-rock interaction processes along the flow path are primarily driven by the dissolution of halite and gypsum, while the effect of carbonate and silicate dissolution or precipitation remains relatively weak. [**Conclusion**] Overall, the hydrogeochemical formation of fractured bedrock groundwater in the Beishan area is predominantly governed by evaporation and water-rock interaction processes. This study provides fundamental hydrogeochemical data and insights to support the site selection of the HLW disposal repository.

Key words: hydrogeochemical modeling; formation mechanism; groundwater hydrogeochemical characteristics; high-level radioactive waste dispoal; Beishan site

Received: 2024-04-25; Revised: 2024-06-17; Accepted: 2024-06-19

doi: 10.19509/j.cnki.dzkq.tb20240194