

Q 型群分析在水化学分类中的应用

范 家 爵

目前广泛使用的地下水水化学分类方法为舒卡列夫、布罗茨基或阿廖金分类。在山区和山前区,使用这些方法所编制的水化学图尚不能很好地反映水化学的成因。我们改用Q型群分析⁽¹⁾进行分类及编图,现介绍如下:

一、方法简述

1. 原始数据: 因水的矿化度、总硬度等与有关的离子含量有关,呈线性相关关系,故不列入项目中去,每个水样仅用 $K^+ + Na^+$ 、 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 、 HCO_3^- 、 SO_4^{2-} 、 Cl^- 等6个项目参加计算。在计算单位方面,为了反映矿化度、总硬度等特征,就应以毫克/升为单位,不宜进行规格化处理或采用毫克当量百分比为单位。

2. 计算公式: 采用距离系数 $d_{ik}(i, k \text{ 为水样号})$ 作为相似性统计量⁽¹⁾。共需计算 $N(N-1)/2$ 个 d_{ik} 值,并形成距离系数矩阵。

3. 群的划分: 采用一次计算成群法。先选 d_{ik} 值最小的一对样品,后选 d_{ik} 值次小的一对样品,依此类推。选出样品对后,再按四条准则进行群的处理(详见“数学地质引论”71页)。并用枝状图来表示这种分类系统。

4. 水化学分类: 一个大群是一个类,其中的小一类的小群是类中的亚类,依此类推。因此可以按照地区特点及样品数量选出一定等级的群作为类,使这种等级的类与水化学类型图上的划分相适应。取群内全部水样分析结果的算术平均值作为相应的类的化学成份。按照每一类的特点(如与岩性、构造、地貌、地球化学的关系等),勾出具体界线,就得到相应的水化学类型分布图。

二、实例

本图幅地处丘陵山区,地下水矿化度多小于0.5克/升,按舒卡列夫分类法编制的水化学图(见图3)。由于不同类型的矿化度和各组份的含量差别不大,本来二个含量相似的水样,由于其中一个某组份达到了大于25毫克当量百分比的标准,另一个虽然接近25毫克当量百分比但未达到,结果划为不同的类型。因此,我们改用群分析进行分类。为能达到平面上均匀控制,每100平方公里选一个样品;为减少人为为污染影响,基岩区尽量选用泉水样品,第四系孔隙水分布区尽量选抽水试验后取的水样。共有 $N=64$ 个水样参加计算,共计算2016个 d_{ik} 值,得到有63行和64列的距离系数矩阵。后按紧邻联接方法进行分群,得出枝状图($d_{ik}>5$ 部份,如图1所示)。

从图上可知,由47、64号等8个水样组成一群(I),从取样点分布图(图2)上看到,它们分布在旋卷构造的震旦系白云岩分布区中。水化学特点为:矿化度多在300毫克/升

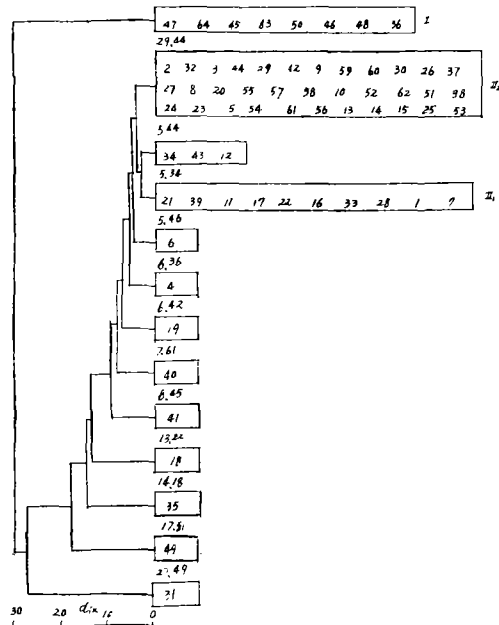


图 1 水化学群分析枝状图($d_{ik}>5$ 部份)

以上, pH 值较大,为 7.5—8.0,总硬度较大,为 11.38—15.01 德度。若按舒卡列夫分类,则包括了重碳酸钙等多种类型(见图3)。

由2号等34个水样组成一群(II₂),其分布范围包括变质岩、混合岩及侵入岩分布区,水化学特点是矿化度很低,为48.38—131.28毫克/升, pH值只有6.28—7.26,总硬度为1.06—3.92 德度,多为极软水,这种类型地下水与基岩风化壳裂隙水的迅速交替、循环路途很短有关。若按舒卡列夫分类,则类型繁多。

由21号等10个水样组成另一群(II₁),它们分布在两种地区,一为孔隙水分布区,一为侵入接触带附近,其水化学特征介于上述两群之间,即矿化度比II₂类大,但小于I类。与风化带裂隙水相比,河谷孔隙潜水与接触蓄水构造中的裂隙水循环路径较远,故矿化度略大。若按舒卡列夫分类,则主要为重碳酸钙镁或重碳酸钠水(镁与钠离子的毫克当量百分数相近)。

(1) 中国科学院地质研究所编著, 数学地质引论, 地质出版社, 1977

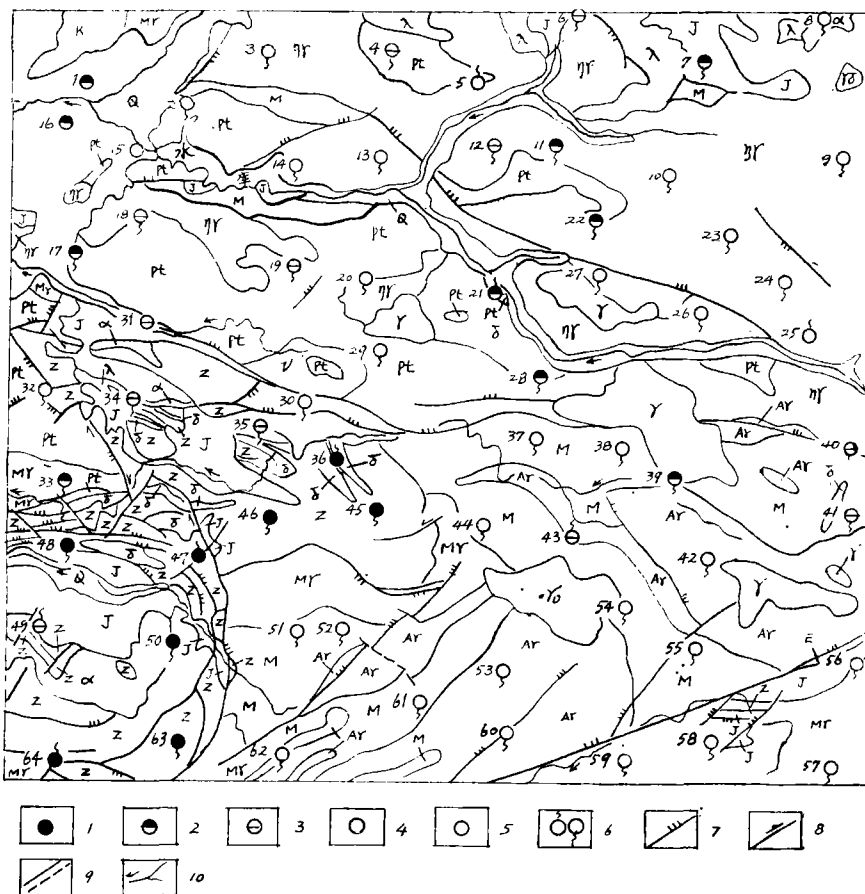


图 2 取样号分布图

1—I类；2—II₁类；3—II类中除II₁、II₂以外的其他亚类；4—II₂类；5—井或钻孔；6—上升泉或下降泉；7—压性断裂；8—扭性断裂；9—性质不明或推测断裂；10—河流；Q—第四系地层；E—第三系碎屑岩；J—侏罗系碎屑岩、火山岩；Z—震旦系白云岩及碎屑岩；Pt—辽河群变质岩；AY—鞍山群变质岩；M—混合岩；MY—混合花岗岩；γ—花岗岩；γγ—二长花岗岩；γ₀—斜长花岗岩；γδ—花岗闪长岩；δ—闪长岩；v—辉长岩；λ—流纹岩；α—安山岩

由34号等3个水样组成一群，但在平面图上不连续。其他群只有一个水样。这些水样零星地分布在上述三群分布区之中。查其原因都是某些特殊因素引起的。

这样就分出两大类（I 和 II），II 类再分出两个亚类（II₁和II₂），作出水化学图（见图3），求出每类样品分析结果的算术平均值如表1。

表 1 各类水化学组份的算术平均值

编 号		离子含量 (毫克/升)						pH	矿化度 (毫克/升)	总硬度 (德度)	游 离 CO ₂ (毫克/升)	类 型	
类	亚类	K ⁺ + Na ⁺	Ca ²⁺	Mg ²⁺	HCO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	Cl ⁻					按舒卡列夫	按硬度
I		8.58	54.10	24.61	278.70	13.55	4.11	7.70	383.65	13.25	13.17	重碳酸钙镁水	微硬水
II	II ₁	12.77	25.13	5.87	105.29	12.48	7.07	7.26	168.61	4.87	9.09	重碳酸钙水	软水
	II ₂	6.62	11.13	2.59	42.27	12.49	3.71	6.89	78.81	2.15	7.00	重碳酸硫酸钙钠水	极软水

(转下第36页)

对地下水进行群分析和判别分析的初步尝试

方宏述 (浙江省地质局系统“七·二一”大学)

水文地质工作中, 地下水的化学分类通常采用舒卡列夫、布罗茨基、阿廖金等分类。另外还有各种图解法, 如三角形坐标图解法。它们大多是利用主要阴、阳离子间的对比关系进行划分的。其优点是简便易行, 基本上可反映地下水的形成过程, 并为广大水文地质工作者所熟悉。但在水文地质普查中, 特别是在基岩山区, 地下水径流交替强烈, 水化学成分差别不大, 上述分类尚欠精细。水质评价以及其他一些水文地质问题, 如泉水的归属, 河谷第四系中的泉水补给来源以及温泉的寻找及其成因探索……等等, 都是水文地质普查中需要解决的问题。本文试图借助数字分类技术, 从地下水水化学的细微变化中, 探索地下水的来龙去脉。由于条件的限制, 本文的数字计算利用了日本 EL-5002 型多函数微型电子计算器来完成的。由于效率有限, 迫使原有的 79 个水质全分析样只利用了 36 个。变量数又减少到最低限度, 只考虑四个阳离子。现将应用情况介绍如下:

一、地下水群分析的步骤及群结构二维谱系图的形成

地下水的群分析是根据水样的多种变量的观测值, 按水样或变量之间的相似程度, 应用群分析方法, 把它们归组分类。本文仅对地下水进行 Q 型群分析。

本文选用距离系数 d 作为样品间相似程度的统计量。

当水样的变量数为 v 时, 则第 i 个与第 k 个水样在 v 维超空间的距离为 (见①、②、③)

$$d_{ik} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^v (X_{ij} - X_{kj})^2}{v}} \quad (1)$$

$i, k = 1, 2, \dots, N; i \neq k$

式中 X_{ij} 为第 i 个水样第 j 个变量的观测值, N 为水样的数目, v 为变量数。

由于水样中各种阳离子变量的变幅较大, 为了给每种变量以同一量度, 首先对各种阳离子的毫克当量百分数进行规格化

$$X'_{ij} = \frac{X_{ij}}{X_{j\max}}, i = 1, 2, \dots, N; \quad (2)$$

式中 $X_{j\max}$ 为 36 个水样的各种变量的最大值。规格化后, 变量在 0—1 之间。

为了使距离系数便于同其它相似系数进行对比, 再按下式计算相似系数

$$d'_{ik} = 1 - d_{ik} \quad (3)$$

式中 X_{ij} 与 X_{kj} 应以规格化数据 X'_{ij} 与 X'_{kj} 代入。

- ① 中国科学院地质研究所, 数学地质引论, 地质出版社, 1977年;
- ② 地质数据统计分析, 科学出版社;
- ③ 电子计算机在地层分析中的应用, 科学出版社

(上接第42页)

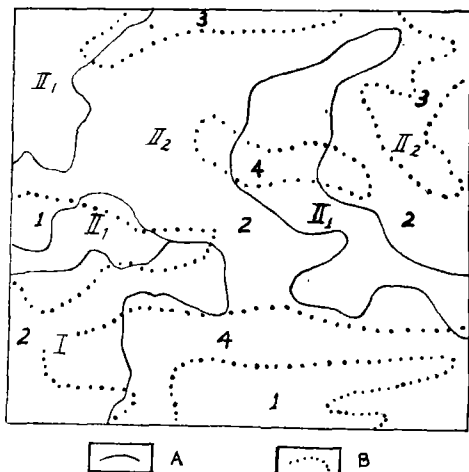


图3 按Q型群分析(紧邻联接)和舒卡列夫分类法编制的水化学略图

图3中A为群分析分区界限; I、II₁、II₂为分类号; B为舒卡列夫法分区界限; 1为HCO₃-Ca型; 2为HCO₃-Ca-Mg和HCO₃-Ca-Na型; 3为HCO₃-SO₄-Ca-Na型; 4为HCO₃-SO₄-Ca-Mg和HCO₃-SO₄-Ca-Na型

上述分类结果反映了水化学与地方病的关系, 如I类为微硬水, 图中所示的地区地方病较少; II类为软水(II₁)或极软水(II₂), 这些地区大骨节病、克汀病、地方甲状腺肿等地方病广泛流行, 其中又以图幅东北部为最重。由一个6号样组成的一群的总硬度比II₂类还低, 只有0.95德度, pH为6.54, 矿化度为77.7毫克/升, 该样品就位于这一重病区。

采用上述方法分类所以会有明显效果, 是因为该方法与传统方法相比, 能够同时考虑主要离子种类、矿化度、总硬度、pH值等多种因素, 而不是只考虑主要离子种类这一种因素; 这一方法克服了传统方法存在的两个分析结果差别很小的水样有时被列入不同类型的缺点。该方法可按情况进行不同等级的分类, 大类内可再分出亚类, 可使分类更加合理。