

利用泉群水化学资料对泉进行群分析

宋印胜

(山东省鲁南地质工程勘察院)

提要 岩溶泉泉水的水质,主要受控于地下水化学场经历的地球化学过程,同时也反映了不同水文地质单元地下水径流场的条件。作者利用8个岩溶泉的水化学资料,用灰色关联度作相似性统计量,对岩溶泉群进行聚类分析,其目的是通过泉水水化学微观特征,探讨泉的相似性及差异性,从而提高勘察成果质量。

1 概述

鲁中南地区,碳酸盐岩广布,地表及地下岩溶发育,岩溶地下水多以岩溶泉(或泉群)的方式排泄,其流量 $>1 \times 10^4 \text{m}^3/\text{d}$ 的岩溶大泉达36处^①。由于它具有补给面积大,径流途径远,且有多年调储能力,水质优良,未遭污染,取水经济的特点,是工业、农业及生活供水的理想水源地,对发展旅游业也有重大意义。

泉的出露,反映了不同水文地质单元地下水径流场的条件,全排型泉的流量也代表了所处水文地质单元的天然资源量。因此,查明泉的成因类型及出露区的水文地质条件,是正确评价资源量和开发保护的基础。通过普查、勘探和试验,可查明泉的成因类型及水文地质条件,但一般周期长,费用大,对多泉之间的变化、联系与对比只有一一查明才能定论。笔者力图从泉水水化学组分微观变化,探索泉系统内部条件变化。它作为一种辅助手段,结合普查、勘探资料,可帮助解释、识别成因类型未知泉的联系与差别,从而提高成果的精度。其基本思路为:地下水中化学组分的变化,是地球化学过程作用于地下水化学场的结果,由单一地球化学过程形成的同一水文地质单元内,地下水中化学组分的含量服从正态分布;由数个地球化学过程叠加形成的复合水文地质单元,地下水中组分含量偏离正态分布。因此,成因类型及水文地质条件相似的岩溶泉,其化学组分类型及含量必然相近或相似,这种相似关系的寻找,是通过数学地质方法解决的。

2 统计模式的选取

利用泉的水化学资料,来探索泉与泉之间的相似性属Q型群分析。用泉样品的许多监测数据,研究样品间的亲疏关系,从而达到分门别类的目的。传统的相似性统计量,平方与开方的使用,易使部分信息被掩盖或扩大,使分类结果有时曲解或失真。灰色关联

本文1997—07收到,1997—10改回。

① 山东省环境水文地质总站等,鲁中南岩溶水研究报告,1987年。

度能全面、系统刻划各监测数据的信息,避免重心位移,能把表面复杂、数据离乱,但潜藏整体功能的规律挖掘出来,是分析系统中各因素关联程度的有效方法。

设有 n 个泉样品,每个样品有 m 个分析项目(指标)参加关联度分析,第 i 样品第 k 个分析项目的结果为 $x_i(k)$, i 样品与 j 样品在 k 指标的关联系数表示为:

$$\xi_{ij}(k) = \frac{\min_i \min_k |x_i(k) - x_j(k)| + \rho \max_i \max_k |x_i(k) - x_j(k)|}{|x_i(k) - x_j(k)| + \rho \max_i \max_k |x_i(k) - x_j(k)|} \quad (1)$$

(1)式中 $|x_i(k) - x_j(k)|$ 不同样品间 k 序列差的绝对值, $i, j = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots, m; i \neq j, n$ 为样品数, m 为样品分析项目数。 $\min_i \min_k, \max_i \max_k$ —— k 序列、 i 序列中极小值与极大值。 ρ —— 分辨系数, $\rho \in [0, 1]$, 取值大小整体影响 $\xi_{ij}(k)$, 且整体规律不变; ρ 愈小分辨率愈高, 一般取 0.5。本次为明显分辨样品间亲疏关系, 取 $\rho = 0.3$ 。

灰色关联系数 $\xi_{ij}(k) \in [0, 1]$, 越接近 1 关联性越好。 i 样品与 j 样品之间的平均关联度为:

$$R_{ij} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \xi_{ij}(k) \quad (2)$$

由(2)式形成一个 $n \times n$ 的灰色关联度矩阵(非对称但相对误差很小), 取下三角或上三角矩阵, 按一定联接准则, 便可获得聚类谱系图, 取一定相关(或相似、关联)水平, 亦可把样品分类。

3 计算实例

在泗水单斜盆地水文地质区有 8 个岩溶泉(图 1), 1988 年平水期取样分析测试, 对水化学资料作初值化处理^① 后列表 1, $i = 1$ 时, $j = 2, 3, \dots, 8, k = 1, 2, \dots, 6, k \in [K^+ + Na^+, Ca^{2+}, \dots, HCO_3^-]$ 。

表 1 岩溶泉水质初值化后的数据表 $[x_i(k)]$

Table 1 Datas of water quality of karst springs after initial valuation

样品号 i	分析项目 k	$K^+ + Na^+$	Ca^{2+}	Mg^{2+}	Cl^-	SO_4^{2-}	HCO_3^-
	1	1	4.393	1.063	1.241	0.641	18.029
2	1	7.739	1.378	1.695	2.597	26.414	
3	1	5.562	1.205	1.182	1.500	21.483	
4	1	5.996	0.955	1.039	1.415	21.466	
5	1	10.446	2.736	3.010	2.639	53.665	
6	1	2.674	0.412	0.696	2.898	7.644	
7	1	5.269	1.364	1.622	1.149	20.568	
8	1	4.236	0.788	1.016	0.677	16.396	

① 初值化处理: $x_i(k) = \frac{x_i(k)}{x_i(1)}$ 。

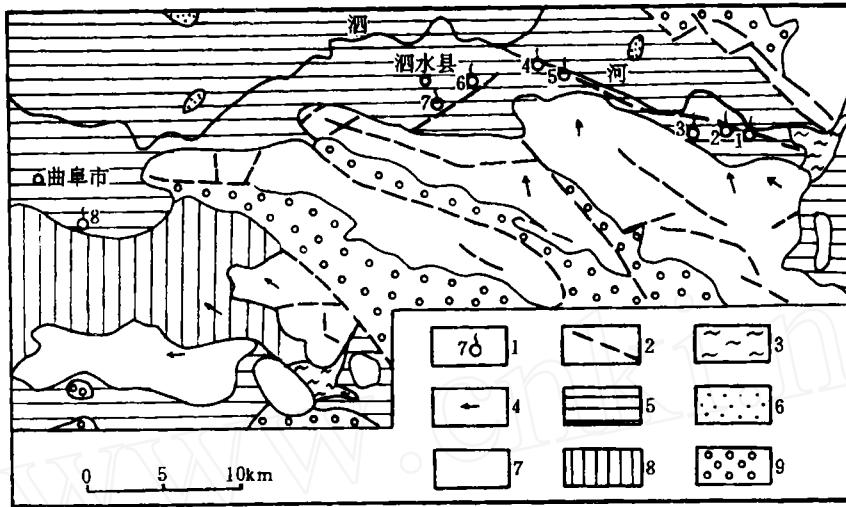


图1 泗水盆地岩溶泉区水文地质略图

Fig.1 Sketch showing the hydrogeology of the karst spring areas in Sishui basin

1—泉位及编号;2—断层线;3—水库;4—地下水流向;5—松散岩类孔隙含水岩组;6—碎屑岩类孔隙、裂隙含水岩组;7—碳酸盐岩类裂隙、岩溶含水岩组;8—碳酸盐岩类裂隙、岩溶含水岩组隐伏区;9—岩浆岩、变质岩类裂隙含水岩组

$$\text{由(1)式得: } \xi_0(k) = \frac{10.691}{|x_i(k) - x_j(k)| + 10.691}$$

由(2)式得 $R_{12} = 0.850$, 仿此便得矩阵 R , 取上三角矩阵按紧邻联接原则, 获得聚类谱系图(图2)。取阈值为 0.95 时, 将中奥陶统 8 个岩溶泉分为 5 个群, 各群岩溶泉集合特征如下。

$$R = \begin{pmatrix} 1.000 & 0.820 & 0.921 & 0.915 & 0.772 & 0.872 & 0.933 & 0.969 \\ 0.850 & 1.000 & 0.855 & 0.882 & 0.832 & 0.834 & 0.881 & 0.839 \\ 0.928 & 0.869 & 1.000 & 0.984 & 0.791 & 0.858 & 0.966 & 0.910 \\ 0.922 & 0.866 & 0.984 & 1.000 & 0.789 & 0.858 & 0.955 & 0.912 \\ 0.740 & 0.783 & 0.749 & 0.747 & 1.000 & 0.761 & 0.755 & 0.738 \\ 0.848 & 0.778 & 0.822 & 0.823 & 0.761 & 1.000 & 0.818 & 0.869 \\ 0.938 & 0.865 & 0.965 & 0.952 & 0.791 & 0.852 & 1.000 & 0.917 \\ 0.968 & 0.803 & 0.900 & 0.902 & 0.764 & 0.887 & 0.909 & 1.000 \end{pmatrix}$$

图2中的3,4,7为断层上升泉。岩溶地下水流向从南至北, 补给面积广, 渗流距离短, 水位年变幅为 0.5~1.0m, 泉流量 $< 2 \times 10^4 \text{m}^3/\text{d}$, 多年最大不稳定系数^① < 4 。

图2中的1,8为接触上升泉。虽然二者相距较远, 但二者地下水流向均从东至西, 上游均有水库渗漏补给, 下游有第三系泥岩、砂砾岩阻挡, 水位变幅 $< 0.2\text{m}$ 。丰水年流量可 $> 20 \times 10^4 \text{m}^3/\text{d}$, 多年不稳定系数最大值为 3。

图2中的2为接触上升泉。距1号泉约 1500m, 地下水从南流向北, 水力坡度小, 距

① 不稳定系数系指一年内泉流量最大值与最小值之比。

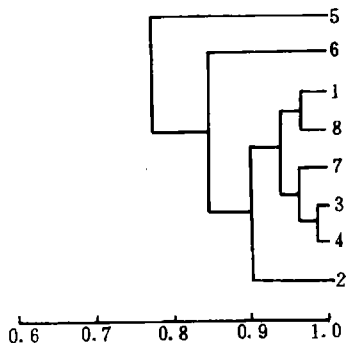


图2 岩溶泉灰色关联度聚类谱系图
Fig. 2 Cluster pedigree map of grey association degree of karst springs

下游阻水断层远,枯水期水位高于丰水期。泉流量最大可达 $10 \times 10^4 \text{m}^3/\text{d}$,多年最大不稳定系数 >10 。

图2中的6为断层上升泉。位于两断层交汇部位,岩溶地下水由东南流向西北,远离补给区,水位变幅 $<0.5\text{m}$ 。最大泉流量接近 $2 \times 10^4 \text{m}^3/\text{d}$,多年不稳定系数最大值为 $7 \pm$ 。

图2中的5为断层上升泉。距阻水断层较近,地下水径流方向为由南到北,枯、丰水期水位基本保持不变。泉流量 $<4 \times 10^3 \text{m}^3/\text{d}$,多年不稳定系数最大值 <5 。

4 方法讨论

应用岩溶泉水化学资料进行Q型群分析,旨在探讨某一区域内的多泉群的相似性特征,特别是在成因类型部分已知、部分未知的条件下,利用该方法可达到了解未知的目的。本文利用8个岩溶泉水的水化学资料,进行成因类型及水文地质特征分群,各群水文地质条件差异明显,吻合于普查、勘探的实际。鉴于岩溶泉样品少,且使用一次的取样分析资料,显得分群规律性不强。若对多样品、多期水质资料的泉群进行分析,效果会更好。

群分析常用距离系数 d 、相关系数 γ 和相似系数 $\cos\theta$ 确定相似性统计量,相关系数还可转化为不相似系数 q ,其各统计模式用(3)、(4)、(5)、(6)式表示。若用(3)、(4)式对表1再进行统计分析,便可得到相应的聚类谱系图3、图4。从图中可以看出,距离系数与灰色关联度谱系图形式接近,但系数很大。相关系数则出现群结构变化,而且系数都接近1,相似及不相似系数亦如此。

$$d_{ij} = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (x_{ik} - x_{jk})^2} \quad (3)$$

$$\gamma_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^m (x_{ki} - \bar{x}_i)(x_{kj} - \bar{x}_j)}{\sqrt{\sum_{k=1}^m (x_{ki} - \bar{x}_i)^2 \sum_{k=1}^m (x_{kj} - \bar{x}_j)^2}} \quad (4)$$

$$\cos\theta = \frac{\sum_{k=1}^m (x_{ik})(x_{jk})}{\sqrt{\sum_{k=1}^m (x_{ik})^2 \sum_{k=1}^m (x_{jk})^2}} \quad (5)$$

$$q = \arccos \gamma_{ij} \quad (6)$$

(3)~(6)式中, $i, j = 1, 2, \dots, n; i \neq j, n$ 为样品数; $k = 1, 2, \dots, m; m$ 为样品分析项目数, \bar{x} 为 x 的算术平均值。

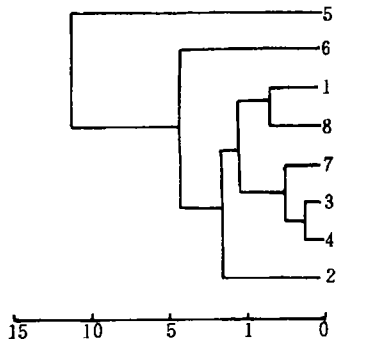


图3 岩溶泉距离系数聚类谱系图
Fig. 3 Cluster lineage map of coefficient of karst springs distance

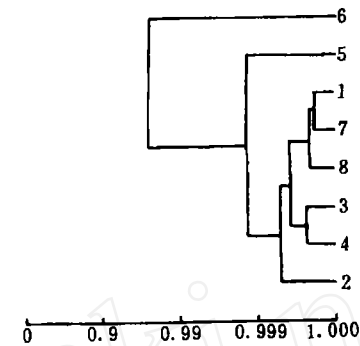


图4 岩溶泉相关系数聚类谱系图
Fig. 4 Lineage map of connection coefficient of karst spring

用灰色关联度作Q型群分析的相似性统计量,可避免相关系数都很接近,难于分群;距离系数变化很大,谱系发散等弱点。灰色关联度可通过调节 ρ 值来完成,比用其它相似性统计量有明显的灵活性,可使谱系既能反映出客观规律,又能限制谱系发展,也可在谱系内作相对比较,对各种群分析均有借鉴和指导作用。

参 考 文 献

- 1 中国科学院地质研究所. 数学地质引论. 北京:地质出版社,1977. 64~109
- 2 沙桂芝. 用系统聚类分析方法进行水质评价. 水文地质工程地质,1987(6):10~13
- 3 邓聚龙. 灰色控制系统. 武汉:华中工学院出版社,1985. 348~374
- 4 邓聚龙. 灰色系统基本方法. 武汉:华中工学院出版社,1987. 17~40

ANALYSIS OF SPRING GROUPS ON THE BASIS OF HYDROCHEMICAL INFORMATION

Song Yinsheng

(Lunan Geologic—engineering Institute)

Abstract

Water quality from karst springs are influenced by the geochemical process of chemical fields of underground water, and it also reflects the conditions of underground runoff fields in different geological units. The hydrochemical information from eight karst springs has been applied to do cluster analysis on the karst spring group, where the statistics of similarities obtained by using gray association ratio. According to the hydrochemical micro-characteristic of springs, the similarities and differences of karst springs can be distinguished and which can be applied to enhance the quality of the water exploration project.