

ГИДРОГЕОХИМИЯ

УДК 556.3; 540.4

DOI: 10.54503/0321-1339-2024.124.3-19

А.К. Матевосян

К вопросу информативности комплексных диаграмм гидрохимизма природных вод

(Представлено чл.-кор. НАН РА С.М. Оганесяном 19/VI 2024)

Ключевые слова: природная вода, химический состав, трехкомпонентная система, диаграмма, Piper-plot, классификация.

Введение. В настоящее время придается особо важное значение визуализации и интерпретации многокомпонентных данных (*объективному представлению сложных многофакторных процессов*), в частности, гидрогеохимических исследований природных вод.

К ним относятся широко используемые при представлении основного анион-катионного состава проб вод (*двух независимых трехкомпонентных систем*) – комплексные диаграммы Н.И. Толстихина (1928) [2] и А.М. Piper [5] – *piper-plot*, в виде представления двумя графиками-треугольниками совместно с графиком-квадратом или графиком-ромбом соответственно.

Цель работы – анализ информативности указанных комплексных гидрогеохимических диаграмм.

Визуализация и анализ диаграмм. На рис. 1–3 изображены комплексные диаграммы и соответствующие типовые классификационные таблицы. Допустим, что результат исследуемой пробы № 1 (*условный знак или точка*) на графике-квадрате (рис. 1, а) (*или графике-ромбе*, рис. 2, а) принадлежит определенной четверти (*области*), находясь на пересечении проецируемых прямых 1^+ и 1^- (*согласно методике построения данных двух трехкомпонентных систем*), которые, в свою очередь, параллельны соответствующим сторонам графиков-треугольников и проходят через условные знаки данной пробы на графиках-треугольниках. При этом, прямые 1^+ и 1^- на графиках-треугольниках пересекают секторы B^+ , Z^+ , C^+ и B^- , Z^- , C^- соответственно, следовательно независимо от конкретного месторасположения пробы (*кардинально отличающихся исходных данных*) на графиках-треугольниках, одинаково отображаются на графике-квадрате (*или графике-ромбе*), тем са-

мым полностью игнорируется к какому из указанных секторов графиков-треугольников принадлежат результаты анализа, т.е. не учитывается классификационный тип пробы. Другой пример, результаты условной пробы № 2 принадлежат нижней четверти (области), полученные путем вышеприведенных построений, на пересечении проецируемых прямых 2^+ и 2^- . В этом случае не наблюдается пересечение этими прямыми нескольких секторов на графиках-треугольниках (что говорит об абсолютно конкретной классификационной характеристике типа данной пробы), однако здесь также присутствует неопределенность в отображении (визуализации) отличающихся по величинам компонентов исходных данных в пределах соответствующих секторов графиков-треугольников.

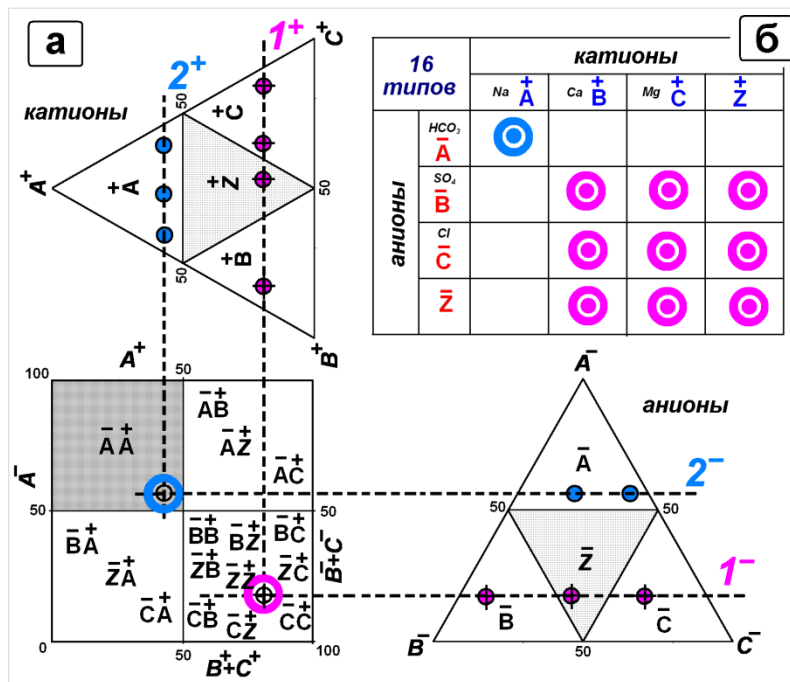


Рис. 1. Графики-треугольники (двух трехкомпонентных систем) при 4-секторной градации и график-квадрат (а) основного анион-катионного состава природных вод (по Толстихину) и 16-типовая классификационная таблица (б), согласно примерам 1 и 2.

Иными словами, результаты множества проб, находящиеся в пределах графиков-треугольников на паре проецируемых прямых (в частности, 1^+ и 1^- или 2^+ и 2^-) на графике-квадрате, рис.1,а (или графике-ромбе, рис. 2, а), характеризующие различные концентрации основных ионных макрокомпонентов, изображаются одинаково \ однозначно – одной и той же точкой. Очевидно, такое некорректное отражение различных исходных данных (представляемых на графиках-треугольниках) на графике-квадрате или графике-ромбе приводит к искажению обобщенной характеристики (классификации – рис. 1, б) двух трехкомпонентных систем, и в результате – к непол-

ноценной трактовке экспериментального материала. Заметим также, что используемый методический подход при интерпретации по сумме двух других компонентов (B^-+C^- и B^++C^+) на графике-квадрате (рис. 1, а) или графике-ромбе (рис. 2, а) уже заведомо приводит к некорректному истолкованию.

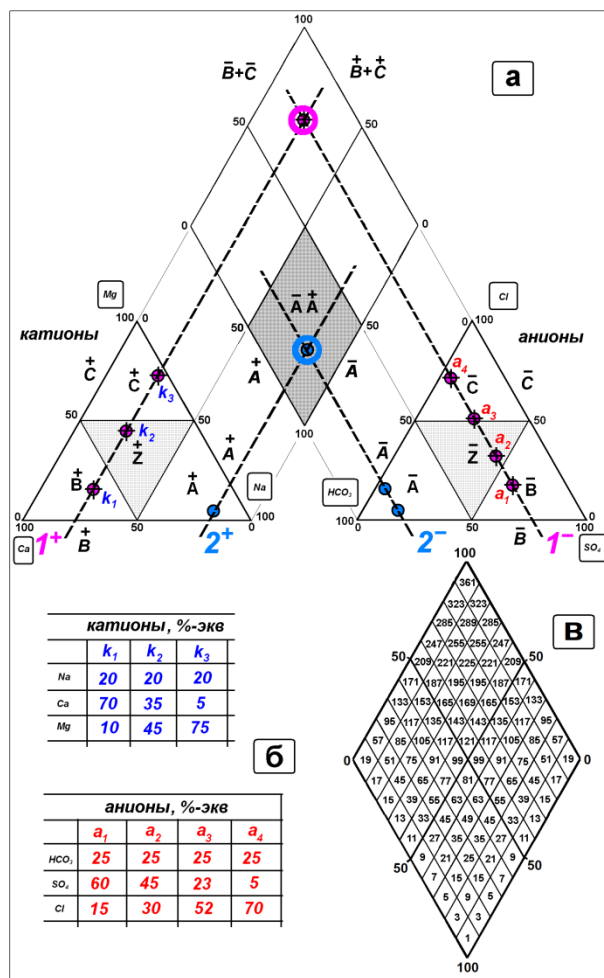


Рис. 2. Графики-треугольники (двух трехкомпонентных систем) при 4-секторной градации и график-ромб основного анион-катионного состава (по Piper) комплексной диаграммы, согласно примерам 1 и 2 (а), с таблицами условных содержаний ионных макрокомпонентов, по примеру 1 (б) и графиком-ромбом, отражающим результаты визуализации 10000 проб при их равномерном распределении на графиках-треугольниках (в).

На рис. 2, б приведены содержания анионных и катионных макрокомпонентов в соответствии с графиками-треугольниками, которые теоретически могут характеризовать 12 различных проб воды в следующих ионных комбинациях двух трехкомпонентных систем: (a_1k_1) , (a_1k_2) , (a_1k_3) , (a_2k_1) , (a_2k_2) , (a_2k_3) , (a_3k_1) , (a_3k_2) , (a_3k_3) , (a_4k_1) , (a_4k_2) и (a_4k_3) . Нетрудно заметить, что, несмотря на их существенные гидрохимические различия, все они отобра-

жаются на графике-ромбе одной точкой. Здесь же отдельно представлен график-ромб (рис. 2, в): в каждом единичном ромбе (со стороной 10%-экв) числами указано количество проб, отражающих результаты визуализации 10000 анализов при их равномерном распределении на графиках-треугольниках (в): по одному в каждом единичном треугольнике (со стороной 10%-экв).

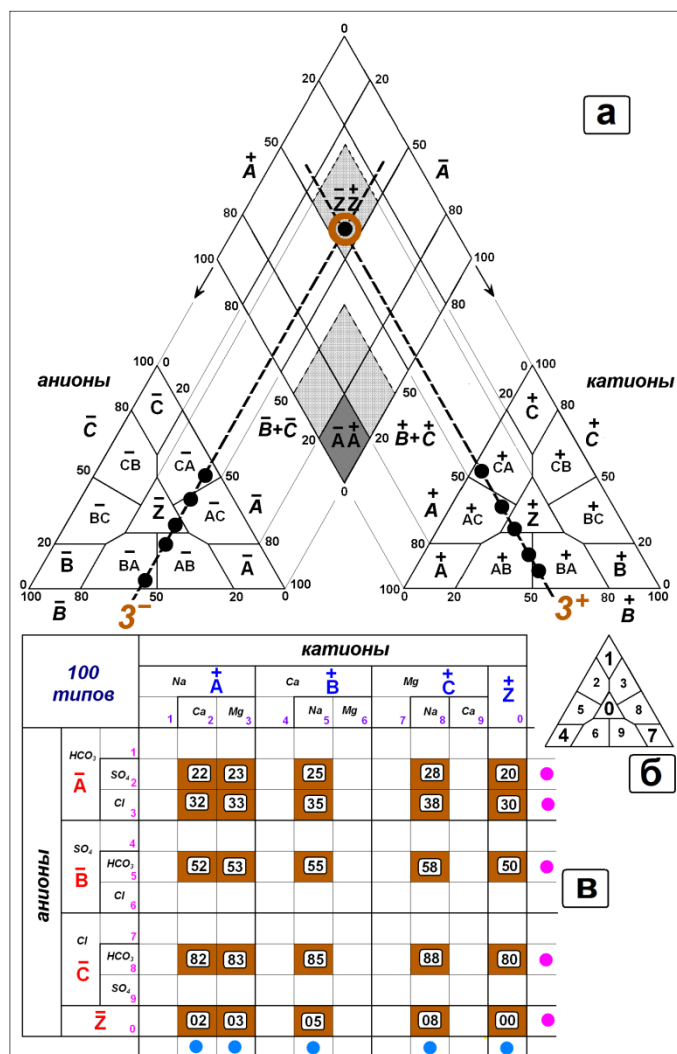


Рис. 3. Графики-треугольники (двух трехкомпонентных систем) и график-ромб (а) основного анион-катионного состава природных вод при 10-секторной градации графика-треугольника (б) и 100-типовая табличная визуализация классификации (в), согласно примеру 3.

Представим дополнительно поясняющий пример (рис.3 – условная проба № 3 на графике-ромбе) при десятичной градации графика-треугольника (рис. 3, б), согласно [3]. Площадь сектора А (рис. 3, а) составляет 8%

площади графика-треугольника, следовательно, при равномерном распределении большой совокупности данных типу A^-A^+ соответствуют также 8% данных. При одновременном рассмотрении двух таких совокупностей (в частности, анион-катионного состава вод) – типу A^-A^+ соответствует 0.64% данных. На графике-ромбе (очевидно и на графике-квадрате) площадь однозначно представляемых данных типу A^-A^+ соответствует 4% площади графика-ромба, а неоднозначно представляемых данных – 12% площади (в этой области могут проявляться и данные типов A^- , $(AB)^-$, $(AC)^-$ и A^+ , $(AB)^+$, $(AC)^+$ в разных 8 комбинациях). Таким образом, тип A^-A^+ , составляя всего 0.64% данных двух равномерно распределенных совокупностей, на графике-ромбе изображается как однозначно, так и неоднозначно, и в сумме, занимает (изображается на) 16% площади графика-ромба, тем самым охватывая существенно большую площадь (область A^-A^+), не соразмерную с величиной проявления. Площадь переходного (смешанного) сектора Z (рис. 3, а) при данной градации составляет 6.25% площади графика-треугольника. При одновременном рассмотрении двух равномерно распределенных совокупностей типа Z^-Z^+ соответствует 0.39% данных. На графике-ромбе типу Z^-Z^+ площадь однозначно представляемых данных вообще отсутствует, а неоднозначно представляемых данных равна 4% площади графика-ромба (в этой области могут проявляться и данные типов Z^- , $(AB)^-$, $(AC)^-$, $(BA)^-$, $(CA)^-$ и Z^+ , $(AB)^+$, $(AC)^+$, $(BA)^+$, $(CA)^+$ в разных 24 комбинациях). Иными словами, тип Z^-Z^+ , составляя всего 0.39% данных двух равномерно распределенных совокупностей на графике-ромбе, отражается неоднозначно и изображается на 4% площади графика-ромба (занимая почти на порядок большую площадь – несоразмерную с областью проявления Z^-Z^+). Похожая неадекватная картина наблюдается и при рассмотрении других типов.

Приведенные примеры отчетливо показывают, что совместное рассмотрение (построение) двух независимых трехкомпонентных систем с использованием графика-квадрата (или графика-ромба) комплексной диаграммы приводит к графическому несоответствию (зрительному обману\искаженному восприятию) степени распространенности истинной величины и области представляемой зависимости (в частности, отсутствие\«размывание» четких границ между классификационными типами анион-катионного состава природных вод).

Однако, с другой стороны, при соответствующем представлении компонентов и их направлений изменения (ориентировки осей) на графиках-треугольниках, график-ромб и\или график-квадрат представляет и однозначно характеризует корреляционную зависимость (диаграмму рассеяния) одного или суммы двух компонентов из каждой совокупности и, несмотря на возможность отображения разных компонентов\ параметров, во всех случаях несет одинаковую (абсолютно идентичную) информацию, а именно: более понятную\привычную зависимость компонентов A^- и A^+ друг от друга, и ничего более. Здесь целесообразно поменять местами противоположные оси

(шкалы) графика-ромба, который превращается в косоугольно-построенную диаграмму рассеяния с началом координат в верхней вершине ромба. Эта зависимость практически и является единственным связывающим звеном шестикомпонентной совокупности данных между слагающей ее двумя трехкомпонентными системами с использованием комплексной диаграммы, тем самым, также (как показано на примере графика-квадрата в [3]) устранив неудобства по целостному восприятию данной многокомпонентной графической зависимости.

Кроме этого, следует особо обратить внимание, что по графику-ромбу (рис. 2, а) проводится классификация природных (подземных и наземных) вод, которая заложена во многих используемых зарубежных компьютерных программах по обработке и интерпретации гидрохимических данных (в частности, «GW-Chart»). Однако в этой методике классификации типов присутствует систематическая методологическая ошибка, которая является следствием неоднозначного (и в итоге, неправильного) выделения\отражения совместных областей двух трехкомпонентных систем на графике-ромбе.

С другой стороны, представление шестикомпонентной классификационной таблицы (рис.3,б) менее «визуально эффектно», хотя табличный формат корректен и однозначен [1], чем иллюстрация условно шестикомпонентных комплексных диаграмм (формально объединенных двух трехкомпонентных систем) с использованием графика-квадрата.

Здесь следует добавить, что при построении и совершенствовании используемых классификационных таблиц, основанных на общепринятой формуле Курлова, особенно важен не только правильный выбор типовой градации графиков-треугольников основного анион-катионного состава [3], но и учет нормированных показателей суммарного массового содержания основных ионных макрокомпонентов и частных критериев по оценке дисбаланса химической электронейтральности природной воды [4].

Выводы. Таким образом, резюмируя вышеизложенное, можно заключить:

- информативность графика-квадрата или графика-ромба комплексных гидрогеохимических диаграмм одинакова, различие – только в конфигурации представления;
- на графике-квадрате и графике-ромбе неоднозначно\искажено отражается единообобщающая (объединенная) классификация типов двух трехкомпонентных систем (анион-катионного состава природных вод);
- и такая дополнительная визуализация данных практически не содержит информацию, более чем обычная статистическая диаграмма рассеяния, построенная по одному взятому (произвольному) компоненту из каждой трехкомпонентной системы.

В процессе исследований разработаны эффективные алгоритмы и программное обеспечение, позволяющие выполнять ввод, предварительную об-

работку и визуализацию данных с построением анион-катионных гидрогеохимических диаграмм и статистических зависимостей, цифровую классификационную систематизацию данных\проб с представлением в табличном формате.

Институт геологических наук НАН РА
e-mail: arshak.matevosyan@yandex.com

А.К. Матевосян

К вопросу информативности комплексных диаграмм гидрохимизма природных вод

Представлен анализ информативности комплексных гидрогеохимических диаграмм, в настоящее время широко используемых при представлении основного анион-катионного состава природных вод. Показано, что информативность графика-квадрата и графика-ромба комплексных диаграмм одинакова и они неоднозначно представляют объединенную (обобщенную) классификацию типов двух трехкомпонентных систем.

Ա.Կ. Մաթևոսյան

Բնական ջրերի հիդրոքիմիական համալիր դիագրամների տեղեկատվության վերաբերյալ

Ներկայացված է հիդրոերկրաքիմիական համալիր դիագրամների տեղեկատվական բովանդակության վերլուծությունը, որոնք ներկայումս լայնորեն կիրառվում են բնական ջրերի հիմնական անիոն-կատիոնային կազմի ներկայացման ժամանակ:

Ցույց է տրվում, որ համալիր դիագրամների քառակուսի-գրաֆիկի ու ռոմբ-գրաֆիկի տեղեկատվական բովանդակությունը նույնն է, և դրանք ոչ միանշանակ են ներկայացնում երկու եռաբաղադրիչ համակարգերի տեսակների ընդհանրացված դասակարգումը:

A.K. Matevosyan

About Informativity of the Natural Water Complex Hydrogeochemical Diagrams

An informative analysis of complex hydrogeochemical diagrams, currently widely used in the presentation of the main anion-cationic composition of natural

waters is presented. It is shown that the information content of a square-graph or a diamond-graph of complex diagrams is the same and they ambiguously represent the combined (generalized) classification of the types of two three-component systems.

Литература

1. *Геология Армянской ССР*. 1969, том IX. Минеральные воды. Ереван, изд. АН АрмССР, 524 с.
2. *Ланге О.К.* 1969. Гидрогеология. М.: Высшая школа, 368 с.
3. *Матевосян А.К.* 2020. К вопросу визуализации данных трехкомпонентных систем. Изв. НАН Армении, Науки о Земле, 73, № 2, с. 44–56.
4. *Матевосян А.К.* 2021. Дополнительные информативные параметры к формуле Курлова. Доклады НАН Армении, 121, № 3, с. 208–218.
5. *Piper A.M.* 1944. A graphic procedure in the geochemical interpretation of water-analyses. Eos, Transactions American Geophysical Union, v. 25, 6, p. 914–928.