

托素湖岩芯 XRF 元素扫描分析及多元统计方法的应用

成艾颖^{1,2}, 余俊清¹, 张丽莎¹, 刘永^{1,2}, 高春亮^{1,2}

(1. 中国科学院青海盐湖研究所, 青海 西宁 810008; 2. 中国科学院研究生院, 北京 100039)

摘 要: 对托素湖沉积岩芯采用高分辨率 XRF 扫描分析法进行地球化学元素测试, 运用多元统计分析法中的相关性分析、聚类分析及因子分析判别出不同沉积组分, 揭示了托素湖沉积物中 Si Al K Ti Ca Sr S Cl B 等元素的地球化学特征及其所指示的环境意义。同属强烈迁移型元素 Ca Sr 在沉积物中主要受托素湖中内生碳酸盐的影响; 而外源碎屑元素 Si Al K Ti 主要受托素湖流域侵蚀的控制, 其变化受托素湖流域降水量的控制, 一定程度上指示了流域的干湿波动和极端气候事件发生的幅度与频率。

关键词: 托素湖; 元素地球化学; 多元统计分析; 环境意义

中图分类号: P595 **文献标识码:** A **文章编号:** 1008-858X(2011)01-0020-06

引 言

湖泊沉积物地球化学元素组成受多种环境因素的综合影响, 一方面与元素的赋存状态、固有的地球化学行为有关, 另一方面又与沉积环境的物理化学条件相关。运用沉积物中的地球化学元素含量的变化特征, 提取有效的气候环境信息, 重建过去沉积环境的变化序列, 是研究地球环境系统的常用方法之一。但仅简单地通过个别元素的变化趋势, 有时很难准确地分析复杂的沉积过程和重建环境变化序列。因此, 利用多元统计方法对数据进行处理, 将庞大的元素地球化学数据按数量、行为、特征上的联系进行归纳, 由果及因地推出比较客观的成因线索, 提供序列变化的趋势, 以导出合理的古环境重建的推论。多元统计分析方法是进行地质数据处理的常用方法, 其中因子分析、相关分析、聚类分析等在地质数据处理与解释时运用很广。这些分析方法可在各种复杂而近似零乱的数据中提取出种种规律, 如因子分析注重于揭

示变量或样品的内在成因联系, 往往指示地学上的某种成因联系, 可以用于解释存在于变量之间的一种基本结合关系; 聚类分析则是根据研究对象的亲疏关系进行定量分类, 可将地球化学特征相近、行为也相近的元素归类, 并可以找出相互聚集比较紧密的元素^[1-4]。

对托素湖钻取的沉积岩芯采用了 XRF 岩芯扫描分析。XRF 岩芯扫描分析法可以直接扫描岩芯的剖面而获得沉积物的元素含量, 具有快速、无破坏性、连续测试元素、对样品制备要求非常低等优势特点。因此, 使用 XRF 岩芯扫描分析能够快速对沉积物进行扫描, 既可以定量又能够达到高分辨率的分析要求^[5]。可以结合多元统计分析对元素数据进行相关元素的相关性分析、聚类分析及因子分析, 对元素亲疏关系进行分类, 辨别出对数据属性之间所存在的有价值的相关联系, 从中发现规律性, 发现有关影响因变量的自变量性质的某些因素等^[1]。其中聚类分析和因子分析都是采用的 SPSS 17.0 软件进行的。分析的结果有着显著的效果, 能有效帮助对托素湖中沉积物元素的地球化学特征的解释, 并

收稿日期: 2010-11-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (40571173 40871008) 与兰州大学西部环境教育部重点实验室共同资助

作者简介: 成艾颖 (1983-) 女, 硕士研究生, 主要研究方向为地球化学。E-mail: chengaiying119@126.com

进一步有效地解释其所指示的环境意义。如杨守业等^[6]用聚类分析与因子分析将长江与黄河表层沉积物区分开, 并表明两者沉积物中化学成分存在显著差异。

1 托素湖区域概况

托素湖位于柴达木盆地东端 (N37°04′~37°13′, E96°50′~97°03′), 距海西蒙古族藏族自治州首府德令哈市约 50 km, 是德令哈盆地内陆流域内的一个中型咸水湖泊。该湖所在区域属荒漠半荒漠大陆性气候, 夏季气候温暖, 干旱少雨。7 月份平均气温 16.7℃左右, 极端最高气温 33.1℃, 平均气温 2.0~4.0℃, 年降水量 50 mm 左右。其入湖河水由克鲁克湖西南部的搭毡河 (约 3 km) 流入托素湖, 而淡水湖泊的克鲁克湖的水源主要来自东北德令哈北部柏树山的巴音河, 流经约 208.06 km 后注入克鲁克湖, 还有湖周山脉渗透的地下水、降雨及一些间歇河流。由于托素湖位于柴达木盆地德令哈次级盆地最低处, 其封闭型、半咸水和适中的面积等项特征决定了该湖对应周围环境及沉积物物理、化学特征的独特性, 研究托素湖沉积物中元素地球化学特征具有重要的指示意义 (图 1)。



图 1 托素湖影像图
Fig. 1 The Image of Toson Lake

2 数据分析

2.1 相关性分析

不同元素间相关性分析有助于揭示元素间的伴生关系, 进而判别各种元素的可能来源。

表 1 元素的相关性分析
Table 1 Correlation analysis of elements

	Al	Si	S	Cl	K	Ca	Ti	Br	Sr
Al									
Si	0.955 527								
S	-0.370 33	-0.403 03							
Cl	-0.718 3	-0.759 96	0.515 709						
K	0.875 739	0.909 061	-0.457 1	-0.756 9					
Ca	0.583 87	0.640 956	-0.511 53	-0.723 12	0.713 758				
Ti	0.793 506	0.837 147	-0.360 13	-0.667 51	0.927 294	0.550 923			
Br	-0.342 87	-0.362 29	0.367 312	0.516 086	-0.475 64	-0.542 69	-0.412 91		
Sr	0.147 669	0.141 663	-0.274 3	-0.346 06	0.237 488	0.670 423	0.071 648	-0.448 17	

沉积剖面中化学元素之间的相关性越高, 相关系数越大, 说明元素来自同一稳定输入的可能性越大, 进而物质分布的类型也可能越相近。在托素湖 XRF 岩芯扫描的沉积物中元素 Si、Al、K、Ti 相关系数较高 (表 1), 丰度呈线性正态分布较好, 故采用简单线性相关分析方法对

其分析, 结果表明它们彼此之间都具有很好的正相关关系。由于元素之间相关性受控于元素在表生环境中的地球化学行为, 反映了托素湖沉积物中物质分布类型相近的 Si、Al、K、Ti 元素来自同一相对稳定外源输入。而沉积物中元素 Ca、S also 具有很强的相关性, 同属于可溶性

盐沉积的沉积元素 Ca S具有相似的化学性质及相近似的元素地球化学行为,在托素湖中极有可能是以相同的碳酸盐赋存状态存在。

2.2 聚类分析

聚类分析可将地球化学特征相近、行为密切的元素归类,并可以找出聚集比较紧密的元素。对托素湖 XRF岩芯扫描的主元素 Si Al K Ti Ca Sr S Cl B进行层次 R型聚类分析,能分别把这些元素具有共同特征的变量组聚集成一类。

不同的元素组合特征反映不同的沉积地球化学特征以及影响它们形式的气候、水文条件或物理化学作用过程等,因此,元素特性和形成时的物理化学及地理条件相似的元素,在沉积物中也具有一定的相似性。马宝林等^[7]通过聚类分析法对青海湖沉积物进行系统研究发现,Al Si K T为陆源碎屑物质相聚一类,而可溶性盐的沉积元素 Ca Sr相聚一类。王国平等^[8]将向海湿地元素聚类为 3 大类,第 1 类为造岩元素 K Rb Na;第 2 类为亲铜与亲铁成矿元素等陆源碎屑 Cu Zn Mn Cr Fe Co V Ti Al Ni Pb Ba;第 3 类为可溶性盐的沉积元素 Ca S和 Mg等。

在托素湖沉积物中的元素聚类分析谱系图中(图 2),横坐标代表了不同变量间的距离,距

都密切相关;第 2 类为 Ca S元素,主要为可溶性盐的沉积元素(强烈迁移型元素),它们的化学性质和地球化学特征都相近,在地球化学环境中活动性大,容易迁移,具有相近似的元素地球化学行为,常伴生出现,同属亲石分散元素;第 3 类为 S Cl B元素,都是非金属元素,并且 Cl B元素都是卤族元素,有着相似的化学结构和化学性质。这 3 类聚类既反映了元素间地球化学性质的亲疏和其沉积的特征,更体现了元素迁移和沉积的规律性。

2.3 因子分析

在沉积物中,元素的变化可能与陆源输入、生物成因及自生矿物有关。因此,地球化学研究中因子分析方法被广泛用于判别沉积物中不同组分和来源的贡献^[9-10]。姚政权等^[11]对日本海南部的沉积物中的元素进行因子分析,判别了沉积物中的不同来源,认为元素 Al K Ti 和 Fe主要受陆源碎屑组分的控制,而元素 Ca Sr主要受生物成因的控制。陈敬安等^[12]对洱海沉积物元素进行因子分析后认为, TiO₂、FeO₃、Cu N等受流域侵蚀作用的影响; MnO K₂O和 Rb主要受早期成岩作用;而 CaO S和 Ba与湖泊中的内生碳酸钙沉淀密切相关。张宏亮等^[13]通过对兹格塘错沉积物元素进行因子分析,认为 Al Fe Co Cr Pb Ti V和 Zn主要受外来沉积的影响; Ba Ca Mg和 S受流域径流情况的影响;活性元素 Na和 Si受区域背景作用的影响。对托素湖沉积物元素进行了因子分析,并采用 R型主成份分析,经方差极大正交旋转后提取了最重要的两个公因子。

对托素湖 XRF岩芯扫描的主元素 Si Al K Ti Ca Sr S Cl B进行主成份分析,识别了控制沉积元素组成的两个主因子,并选取公因子载荷绝对值超过 0.7 的变量进行讨论。

1)成份 1 成份 1 的方差贡献占总方差的 48.663%,明显高于成份 2 因而该因子对托素湖沉积元素组成具有重要的影响。它主要包括在表生环境下地球化学性质稳定、赋存在外源碎屑矿物中的元素 Si Al K Ti这 4 种元素的公因子载荷较高,都在 0.9 以上。其中还包括 C元素,但其公因子载荷为负值,表明其含量

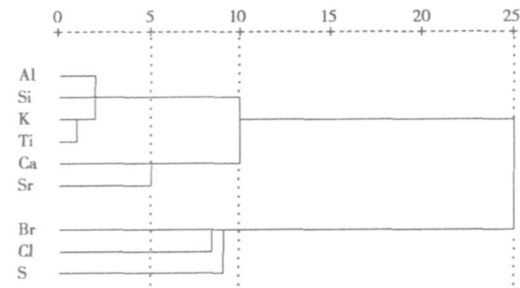


图 2 聚类分析谱系图

Fig 2 The Pedegree chart of cluster analysis

离越近,则变量间的相似性越高。变量 Al Si K Ti Ca Sr S Cl B元素被归为 3 类:第 1 类为 Al Si K T元素,主要为外源碎屑(迁移积累型元素)反映了这些元素在沉积物形成过程中具有相似的特点,元素的来源、迁移及沉积

与前者为反消长关系, 见表 2 图 3。

表 2 因子分析方差极大旋转因子载荷
Table 2 Varimax rotation factor load

元素	成份	
	1	2
Al	0.924	0.176
Si	0.946	0.202
S	-0.355	-0.529
Cl	-0.713	-0.506
K	0.914	0.323
Ca	0.495	0.774
Ti	0.912	0.150
Br	-0.275	-0.694
Sr	-0.085	0.896
方差贡献 /%	48.663	29.075
累积方差贡献 /%	48.663	77.737

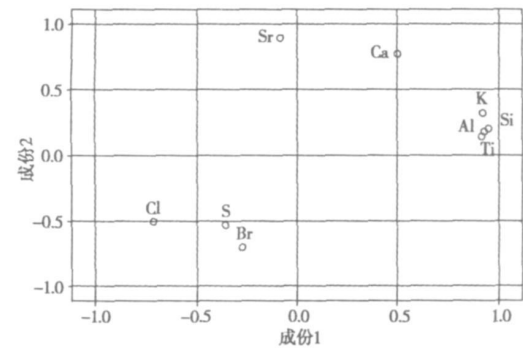


图 3 主因子负荷图
Fig 3 The figure of main factor load

在自然条件下, 湖泊沉积物一般包括两部分物质来源, 一是流域侵蚀带来的外来组分; 二是湖泊水体中各种物理、化学及生物过程所产生的内生沉淀。湖盆流域的岩石与土壤侵蚀作用带给沉积物的直接物质输入主要是以颗粒态存在的碎屑组分, 在很多时候湖泊沉积物中的 Ti、Al 等都是外源碎屑沉积。因此, 认为主成份 1 代表了流域的侵蚀作用, 称之为流域的侵蚀因子。由于流域的侵蚀作用的强弱与流域地表径流发育程度密切联系, 而后者又取决于湖盆流域降雨量的多寡, 也即决定于区域气候的干湿状况, 在一定程度上反映了气候的干湿变化^[12]。

另一方面, 主成份 1 对可溶性盐的沉积元

素 Ca、S 的影响小, 特别是对 Sr (图 3)。这也进一步证明了主成份 1 代表了托素湖的流域侵蚀作用的强弱, 与湖盆流域的降雨量相关。因为, 沉积物中主成份 1 对碳酸盐因子载荷小, 可能是由于托素湖流域降水量增加, 导致流域水量较丰沛, 使得碳酸盐物质不利于沉淀, 而溶解于水体。

2) 成份 2 成份 2 的方差贡献占总方差的 29.075%, 主要为变量 C 和 Sr (表 2)。S 在自然界是一种易迁移的元素, 在风化过程中受到雨水淋滤后 S 易与 Ca 一起进入溶液中。在托素湖沉积物中元素 Ca、S 相关性高, 相关系数达 0.670 423 这与湖底沉积物中碳酸盐作用相关。

目前普遍认为控制湖泊内生碳酸钙沉淀的因素有温度、压力 (水深)、盐度和光照, 其中温度不仅决定着碳酸钙的饱和程度, 而且对生物的繁殖也有着重要意义。而浮游生物光合作用引起二氧化碳同化作用是控制湖泊内生碳酸钙沉淀的重要因素之一。气温高时, 浮游生物光合作用增强, 湖泊水体中的 CO₂ 被大量吸收, 导致碳酸钙沉淀的产生^[14]。另一方面, 由于 Sr 的化学性质与 Ca 相似, 同属碱土金属, S 是 Ca 的类质同像元素, 有相似的环境指示的性质, 因而在湖水中也常常伴随着 CaCO₃ 发生沉淀 SrCO₃。因此, 主成份 2 为湖泊内生碳酸钙沉淀因子。

3 指示的环境意义

运用沉积物中地球化学元素含量波动特征来提取环境变化信息是环境演变研究中另一常用的手段。外源碎屑元素 Si、Al、K、T 在托素湖中的沉积明显受到流域侵蚀因子的影响, 即流域的降水量越大, 地表径流量就越大, 随之带入的外源碎屑元素 Si、Al、K、T 也就越多。图 4 中 4 种元素的含量波动曲线反映了托素湖沉积时的降水量, 整体来看 Si、Al、K、T 元素含量波动极其相似, 并且元素含量在顶部的波动比在底部的波动频繁但波幅小, 指示了托素湖流域降雨量多少的波动。整体曲线从岩芯底部到顶部, Si、Al、K、T 元素变化频率逐渐增大, 阶段性

持续的时间也变长,反映了流域降水量波动的频率增大。元素在岩芯的底部和中部都存在较明显的高低波峰,说明沉积物底部当时降雨量的波动很大,而到岩芯的中部,降雨量的波动相对于底部的波动减小了些。岩芯顶部降雨量波动幅度不明显,但频率明显上升了。另一方面,由于托素湖流域的降雨量多寡相间,也在一定

的程度上反映了当时流域气候干湿波动与程度,从图 4 可以看出,相对于岩芯顶部,其底部所对应的时期,托素湖流域的降雨量偏多且持续时间偏长。Si Al K T 元素含量 3 处明显持续时间短的低峰值,反映了当时极端干的气候特征,间隔上也指示了极端气候事件发生的幅度与频率从岩芯底部到顶部都在相应地减小。

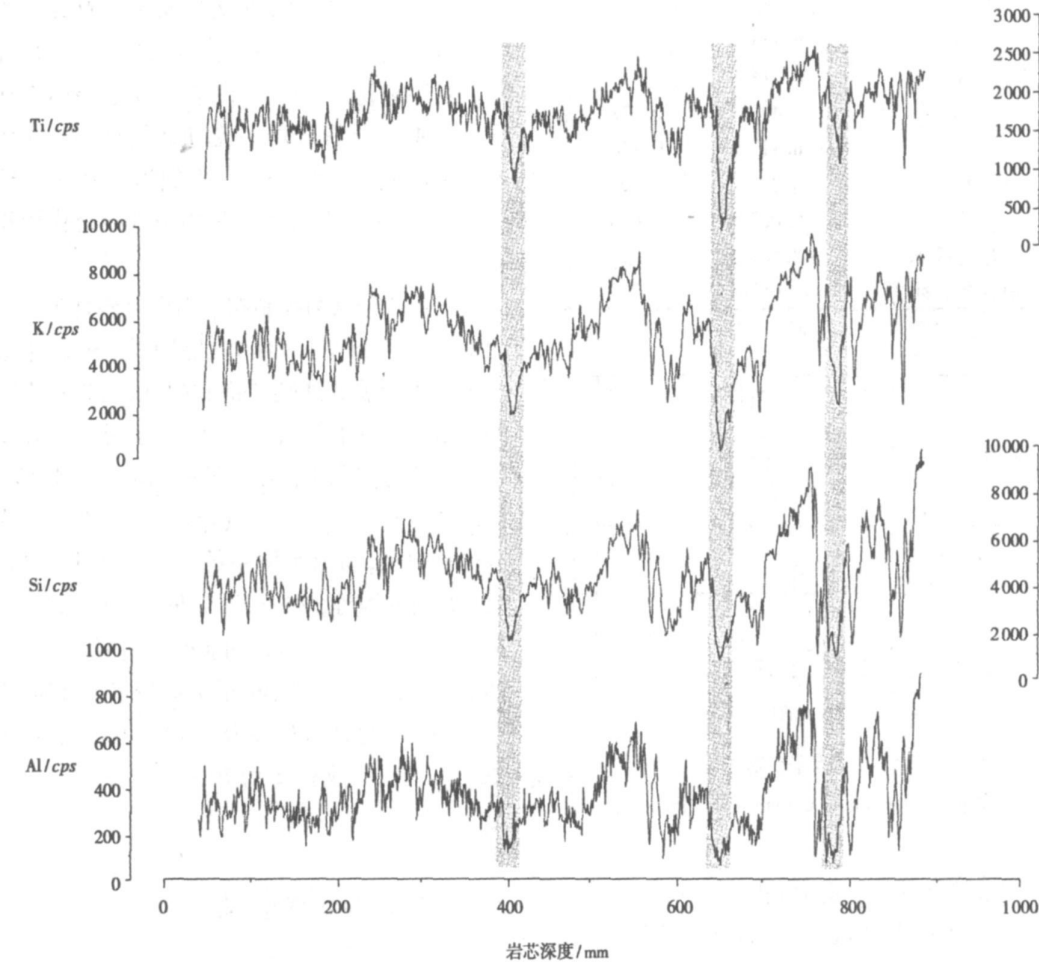


图 4 Si Al K T 元素曲线图
Fig 4 The elemental Variations of Si Al K Ti

4 结 论

通过对托素湖 XRF 岩芯扫面的沉积元素进行多元统计方法分析,外源碎屑元素 Si Al K T 相关性明显,相关系数高,在聚类分析中首先聚为同一类,反映了这些元素在沉积物形成过程中具有相似的特点。并在因子分析中主

成份 1 对 Si Al K T 元素的公因子载荷非常高(绝对值 > 0.9),这 4 种元素的沉积主要受托素湖流域的侵蚀因子的影响,托素湖流域侵蚀强弱取决于流域降水量多少的程度。因此, Si Al K T 元素含量的波动曲线指示了托素湖流域的降水量从岩芯底部到顶部波动频率增大,降雨量多寡相间,底部流域的降雨量波动较明显,降雨量多的时段持续的时间比顶部长,在

一定程度上反映了托素湖沉积时的气候也为干湿波动相间, 从岩芯底部到顶部存在幅度与频率都相应减小的极端干气候。

另一方面, 属于强烈迁移型元素的 Ca Sr 它们的化学性质和地球化学特征都相近, 在地球化学环境中活性性大, 容易迁移, 具有相近似的元素地球化学行为, 常伴生出现, 在聚类分析中有明显的聚类, 并在因子分析中元素 Ca Sr 主要受湖中内生碳酸钙沉淀成分的影响。

参考文献:

[1] 阳正熙, 吴堃虹, 彭直兴, 等. 地学数据分析教程 [M]. 北京: 科学出版社, 2008.

[2] Lawley D N, Maxwell A E. Factor Analysis as a Statistical Method [J]. Journal of the Royal Statistical Society Series D (The Statistical), 1962, 12 (3): 209—229.

[3] Reimann C, Filzmoser P, Garrett R G. Factor analysis applied to regional geochemical data: Problems and possibilities [J]. Applied Geochemistry, 2002, 17 (3): 185—206.

[4] 林琳, 吴敬禄. 太湖梅梁湾沉积岩芯元素地球化学记录的多元统计分析 [J]. 湖泊科学, 2008, 20 (1): 76—82.

[5] 成艾颖, 余俊清, 张丽莎, 等. XRF 岩芯扫描分析方法及其在湖泊沉积研究中的应用 [J]. 盐湖研究, 2010, 18 (2): 7—13.

[6] 杨守业, 李从先. 元素地球化学特征的多元统计方法研究—长江与黄河沉积物元素地球化学研究 [J]. 矿物岩石, 1999, 19 (1): 63—67.

[7] 马宝林, 王琪. 青海湖现代沉积物的元素分布特征 [J]. 沉积学报, 1997, 15 (3): 120—125.

[8] 王国平, 刘景双. 向海湿地元素地球化学特征与高分辨沉积记录 [J]. 地理科学, 2003, 23 (2): 208—211.

[9] Loring D H, Asmund G. Geochemical factors controlling accumulation of major and trace elements in Greenland coastal and fjord sediments [J]. Environmental Geology, 1996, 28 (1): 2—11.

[10] Lawrence F W, Upchurch S B. Identification of recharge areas using geochemical factor analysis [J]. Ground Water, 1982, 20 (6): 680—687.

[11] 姚政权, 刘焱光, 王昆山, 等. 日本海末次冰期千年尺度古环境变化的地球化学记录 [J]. 矿物岩石地球化学通报, 2010, 29 (2): 191—126.

[12] 陈敬安, 万国江, 陈振楼, 等. 洱海沉积物化学元素与古气候演化 [J]. 地球化学, 1999, 28 (6): 562—570.

[13] 张宏亮, 李世杰, 于守兵, 等. 青藏高原全新世环境变化的兹格塘错元素地球化学沉积记录 [J]. 山地学报, 2009, 27 (2): 248—256.

[14] 罗超, 彭子成. 新仙女木事件在罗布泊湖相沉积物中的记录 [J]. 地球科学—中国地质大学学报, 2008, 33 (2): 190—196.

Analysis of Toson Lake XRF Core Scanning and Application of Multivariate Statistical Methods

CHENG Ai-yi^{1,2}, YU Jun-qing², ZHANG Li-sha¹, LIU Yong², GAO Chun-liang²
(1. Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xining 810008, China;
2. Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract: The geochemical elements of Toson lake sediment core is tested by high-resolution XRF scanning method. Jointly using the correlation analysis of multivariate statistical analysis, cluster analysis and factor analysis, the different sedimentary components were distinguished, and the geochemical and environmental significance indicated by elements Si, Al, K, Ti, Ca, Sr, S, Cl, Br in Toson lake sediments revealed. The same type of a strong migration of Ca, Sr elements are mainly effected by the endogenous calcium carbonate in the Toson lake sediments. While exogenous detrital elements Si, Al, K, Ti are mainly controlled by lake watershed erosion, the element contents to further reflect the prime precipitation to some extent indicate the fluctuating characteristics of dry/wet climate, and the amplitude and frequency of extreme weather events happened in Toson lake region.

Key words: Toson Lake; Element geochemical; Multivariate statistical method; Environmental significance