

艾比湖水化学特征的因子分析研究

陈志军¹, 张晶²

1. 新疆博州水文水资源勘测局, 新疆博乐 833400;
2. 新疆昌吉水文水资源勘测局, 新疆昌吉 831100)

摘要:采用最大方差正交旋转因子分析方法研究艾比湖水化学特征, 结果表明, 艾比湖水化学类型主要为硫酸钠亚型, 盐湖湖水发育程度较深, $\text{Na}^+//\text{SO}_4^{2-}$, $\text{Cl}^- \cdot \text{H}_2\text{O}$ 是艾比湖的主要化学平衡体系等, 这与艾比湖的实际情况完全相符。

关键词:艾比湖; 水化学特征; 因子分析

中图分类号: O661.1

文献标识码: A

文章编号: 1008-858X(2008)02-0019-03

1 引言

因子分析作为新兴的化学计量学方法之一, 是一种从大量观测的高维数据中识别出隐含的不可直接观测到的化学现象本质的科学方法^[1-2]。艾比湖湖水的水化学特征是阐明其形成、演化和成盐规律的基础, 而水化学特征是通过湖水中众多化学元素的化学组成来反映的, 显然采用因子分析可以揭示湖水水化学特征的内在规律。基于以上考虑, 作者采用最大方差正交旋转因子分析(*R*型)研究艾比湖水化学特征, 得出艾比湖水化学类型主要为硫酸钠亚型, 盐湖湖水发育程度较深, $\text{Na}^+//\text{SO}_4^{2-}$, $\text{Cl}^- \cdot \text{H}_2\text{O}$ 是艾比湖湖水的主要化学平衡体系, 没有碳酸盐类型的水化学特征存在等结论, 这与艾比湖的实际情况完全相符。

2 因子分析基本原理^[3]

*R*型因子分析的基本思想是将每个变量 x_i ($i=1, 2, \dots, n$) 表示为 k 个公共因子 F_j ($j=1, 2, \dots, k$) 和特殊因子 e_i 的线性组合, 即数学模型为 $x_i = a_{i1}F_1 + a_{i2}F_2 + \dots + a_{ik}F_k$, 其中 a_{ij} 表

示第 i 个变量在第 j 个公共因子上的载荷。

因子分析就是通过对变量的相关系数矩阵内部结构的分析, 从中找出少数几个能控制原始变量的 k 个主因子, 使其尽可能多地包含原始变量中的信息, 求出 a_{ij} , 继而建立上述数学模型, 以 F_j ($j=1, 2, \dots, k; k < n$) 再现原始变量 x_i ($i=1, 2, \dots, n$) 之间的相关关系, 揭示隐含在众多变量之间的主要化学信息, 从而达到简化变量降低维数解决复杂问题的目的。

3 艾比湖水化学特征因子分析模型的建立

3.1 分析变量的选取和数据来源

研究艾比湖水化学特征建立因子分析模型的分析变量 (x_i), 取自各监测点的主要组分, 即 $\text{Na}^+ + \text{K}^+$ 、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} 、 Cl^- 、 SO_4^{2-} 、 CO_3^{2-} 和 HCO_3^- 等 8 个组分, 这也是前苏联学者瓦里亚什科研究盐湖水化学特征时选取的组分^[4], 数据来源于 8 个水面监测点多年监测的平均值, 见表 1。原始数据中, 湖水化学组成各离子含量数据均为 mg/L。

收稿日期: 2007-11-04

作者简介: 陈志军 (1978-), 男, 江苏江阴人, 助理工程师, 主要从事水环境监测评价工作。

3.2 因子分析计算方法

根据上述因子分析数学模型, 采用通用的

主成分提取、方差最大正交旋转因子分析计算方法, 完成因子分析全部计算。实际数据处理采用 SPSS 多元统计分析软件^[5-6]。

表 1 艾比湖各监测点化学组成

Table 1 Chemical components of the monitoring points in the Ebinur Lake

监测点	离子含量/(mg/L)						
	Na ⁺ +K ⁺	Mg ²⁺	Ca ²⁺	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻
1	33 111	3 323	561	30 771	36 080	198	105
2	36 351	3 487	621	32 384	40 905	198	109
3	32 789	3 542	571	31 267	35 678	195	106
4	33 311	3 031	521	30 398	35 729	193	102
5	30 035	2 758	491	28 289	31 156	189	94.2
6	31 089	3 183	561	27 421	36 181	195	106
7	32 857	3 536	581	29 282	39 892	199	108
8	32 391	3 457	561	28 909	37 739	196	111

4 结果与讨论

见表 4。

4.1 结果

7 个变量 (即各监测点的 8 种化学组成) 的相关矩阵见表 2, 相关矩阵的特征值及方差百分比见表 3, 旋转后的因子载荷矩阵

4.2 主因子的确定

由表 2 的 7 个变量之间的相关系数可以看出, 95% 以上的相关系数大于 0.3, 说明变量之间存在相关关系, 可以用 R 型因子分析来研究这一问题。

表 2 相关矩阵

Table 2 Corelation matrix

	Na ⁺ +K ⁺	Mg ²⁺	Ca ²⁺	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻
Na ⁺ +K ⁺	1.000	0.601	0.772	0.863	0.833	0.649	0.578
Mg ²⁺	0.601	1.000	0.875	0.473	0.801	0.868	0.900
Ca ²⁺	0.772	0.875	1.000	0.539	0.920	0.869	0.843
Cl ⁻	0.863	0.473	0.539	1.000	0.494	0.411	0.283
SO ₄ ²⁻	0.833	0.801	0.920	0.494	1.000	0.882	0.867
HCO ₃ ⁻	0.649	0.868	0.869	0.411	0.882	1.000	0.850
CO ₃ ²⁻	0.578	0.900	0.843	0.283	0.867	0.850	1.000

表 3 特征值及方差百分比

Table 3 Totalvariance explained

因子	特征值	方差百分比/%
1	2.403	34.33
2	2.367	33.82
3	1.939	27.70
4	0.230	3.79
5	0.039	0.557E-02
6	0.014	0.200E-02
7	0.007	0.100E-02

表 4 旋转后的因子载荷矩阵

Table 4 Rotated component matrix

	第一因子	第二因子
Na ⁺ +K ⁺	0.732	0.572
Mg ²⁺	0.254	0.119
Ca ²⁺	0.078	0.026
Cl ⁻	0.679	0.737
SO ₄ ²⁻	0.808	0.610
HCO ₃ ⁻	0.025	0.015
CO ₃ ²⁻	0.014	0.010

从表3可以看出主要成分的方差百分比达到95.85%。由方差百分比确定主因子数为2, 通过因子组合系数可以初步分析出艾比湖水化学的基本特征。

4.3 因子模型

由表4可以方便地写出研究艾比湖水化学特征的因子分析模型。即 $\rho(\text{Na}^+ + \text{K}^+) = 0.732F_1 + 0.572F_2$ 、 $\rho(\text{Mg}^{2+}) = 0.254F_1 + 0.119F_2$ 、 $\rho(\text{Ca}^{2+}) = 0.078F_1 + 0.026F_2$ 、 $\rho(\text{Cl}^-) = 0.679F_1 + 0.737F_2$ 、 $\rho(\text{SO}_4^{2-}) = 0.808F_1 + 0.610F_2$ 、 $\rho(\text{HCO}_3^-) = 0.025F_1 + 0.015F_2$ 、 $\rho(\text{CO}_3^{2-}) = 0.014F_1 + 0.010F_2$

4.4 因子解释

从表4的方差最大正交旋转矩阵可以得出因子解释。第一个因子中的 SO_4^{2-} 载荷最高(0.808), $\text{Na}^+ + \text{K}^+$ 次之(0.732), 它们是形成硫酸钠亚型盐湖的显示和条件; 第二个因子中 Cl^- 载荷最高(0.737), 它是形成氯化钠亚型的显示。

5 结语

由艾比湖水化学特征的因子分析可以得

出, 因子模型中的2个主因子对应两大水化学类型, 其中硫酸钠亚型是艾比湖的主要分布类型, 其次是氯化钠亚型。对于封闭的盐湖而言, 碳酸盐含量指标的气候意义则要区分盐湖所处的沉积阶段。如果盐湖处于硫酸盐或氯化物沉积阶段, 那么碳酸盐含量高指示了湖泊水体淡化, 湖泊处于逆向演化阶段; 含量低则指示了湖泊正向演化, 湖水正不断浓缩^[5]。由于艾比湖发育程度较深, 没有碳酸盐类型的水化学特征存在, 说明艾比湖正处于盐化过程, 这些结论与艾比湖的实际情况完全相符。

参考文献:

- [1] Sharafma, Illmn D L, Kowalski B R. Chemometrics [M]. New York: John & Sons, 1986: 1-90.
- [2] Wu Qixun, Liang Yongxin, LuYong chang. New Trends in chemometrics [M]. Changsha: Hunan University Press, 1997: 167-168.
- [3] Malinowski E R, Howery D G. Factor Analysis in Chemistry [M]. New York: Wiley-Interscience, 1980: 1-130.
- [4] 张彭熹. 柴达木盆地盐湖[M]. 北京: 科学出版社, 1987: 83-89, 180-229.
- [5] 陈忠, 马海洲, 张西营, 等. 尕斯库勒湖 DG03 孔碳酸盐含量及其环境意义[J]. 盐湖研究, 2007, 15(2): 6-7.

Study on Factor Analysis of Hydrochemistry Characteristics of Ebinur Lake

CHEN Zhi-jun¹, ZHANG Jing²

(1. Hydrological and Water Resources Investigation Bureau of Bortala Mongal Autonomous Prefecture, Bole, 833400, China; 2. Hydrological and Water Resources Investigation Bureau of Changji, Changji, 831100, China)

Abstract: Hydrochemistry characteristics of Ebinur Lake are studied by methods of varimax orthogonal rotation factor analysis in this paper. The results shows that a two-factor model interprets the correlation of chemical components in Ebinur Lake. the lake water belongs to sodium sulphate subtype and the degree of water development is relatively deep. $\text{Na}^+ // \text{SO}_4^{2-}$, $\text{Cl}^- - \text{H}_2\text{O}$ are the main chemical equilibrium in the brine of Ebinur Lake.

Key words: Ebinur Lake; Hydrochemistry characteristic; Factor analysis