

空间因子分析与沉积地球化学旋回 元素组合的确定*

孟宪伟 吴世迎 韩贻兵

(国家海洋局第一海洋研究所 青岛 266003)

摘要 1995年5月,引用地矿部“七五”东北太平洋 CCA121 柱状沉积物的8个元素地球化学分析数据,利用空间因子分析方法确定两种周期尺度($D_1 = 65\text{cm}$, $D_2 = 105\text{cm}$)内的沉积地球化学旋回元素组合,并据此探讨多金属结核成矿与物源环境的关系。研究表明,与小尺度周期($D_1 = 65\text{cm}$)对应的元素组合为: U_{d_1} (Mn, Co, Cu, Al_2O_3 , SiO_2)和 U_{d_2} (Fe, Ca, Co, Cu)。与大尺度周期对应的元素组合为: U_{d_1} (Co)和 U_{d_2} (Mn, Fe, Al_2O_3)。小尺度的周期性环境变化伴随着陆源、自生源和生物源物质的旋回变化,并诱发成矿元素 Mn, Co, Cu 和 Fe 的振荡式活化、迁移和沉淀,参与多金属结核成矿;大尺度的周期性环境变化伴随着自生源和火山(热液)源物质的旋回变化,并诱发 Co, Fe 和 Mn 元素发生振荡式活化、迁移和沉淀,参与多金属结核成矿。多金属结核的各成矿元素受沉积物中呈不同尺度周期性变化的物源组成的制约。

关键词 空间因子分析 地球化学旋回 元素组合 尺度

学科分类号 P 736.4

地球化学地层分析中的一个重要事实是地球化学元素的丰度或元素组合具有周期性变化特征。不同级别的周期相互嵌套、叠加形成具有多级层次结构的地球化学旋回。

在地球化学旋回中,地球化学元素自身或元素之间存在着自相关和互相关。在不同的空间或时间尺度范围内这种自相关/互相关关系并不相同。因此,以统计相关系数为基础的R型因子分析方法不适于确定元素组合。本文提出用 Grunsky(1988,1991a,1991b)给出的一种多元时间序列谱分解方法——空间因子分析方法来确定沉积地球化学旋回元素组合,并利用地矿部“七五”东北太平洋 CCA121 孔柱状沉积物中8个元素 Ca, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, SiO_2 和 Al_2O_3 的原始分析数据(李扬,1993),详细叙述空间因子分析方法在确定地球化学旋回元素组合中的应用效果。

1 空间因子分析方法简介

1.1 空间因子分析方法的基本思想

空间因子分析建立在地球化学变量在给定的空间或时间尺度范围内相关关系基础上。它不同于传统的以相关系数为基础的多元统计分析方法,应属于多元地质统计学的

*国家海洋局青年基金资助项目,95204号。孟宪伟,男,出生于1963年8月,博士,研究员, Fax:0086-0532-2879562

收稿日期:1996-06-05,收修改稿日期:1997-08-15

范畴。在沉积地球化学旋回分析中,某一时间或空间尺度内,具有相同结构变差函数的元素(或变量)形成一组共生的元素组合,在空间或时间上形成了不同的元素组合分带。空间因子分析就是要确定一系列空间或时间尺度内元素组合的旋回变化。在本文的例子中,与不同的环境变化尺度相对应的元素组合不尽相同,反映了环境周期变化尺度对元素活化、迁移和沉淀机制的制约。利用空间因子分析方法就是要提取与成矿作用密切相关的环境变化尺度和与该尺度对应的环境因子。

1.2 空间因子分析的关键参数及其意义

空间因子分析方法中涉及了许多参数,而这些参数代表的物理意义是进行空间因子分析结果解释的关键。

1.2.1 邻域半径或周期 D_i (i 代表周期级次) 变量空间自相关和互相关的相关范围。邻域半径的选择是进行自相关和互相关计算的关键。一般地, D_i 是通过变量间的交叉变差函数结构分析得到(孟宪伟, 1993)。

1.2.2 自相关 / 互相关矩阵 R_o 和 R_d R_o 矩阵是在空间尺度 D_i 内, 当空间步长 $h = 0$ 时的变量间的自相关 / 互相关系数矩阵; R_d 是在空间尺度 D_i 内, 当步长 $h = d (d = \frac{1}{2} D_i)$ 时变量间的自相关 / 互相关矩阵。二者共同描述了在 D_i 域内变量间的互相关程度和噪声水平。

1.2.3 转移矩阵 U_d 对某一过程或某一时间序列马尔柯夫链性质和转移关系的度量, 是进行空间因子分析的基础。空间因子分析的实质就是求 U_d 矩阵的特征值和特征向量。

1.2.4 噪声量 N 时间序列内噪声程度的度量。

1.2.5 总测度 Q 和谱分量测度 Q_i Q 值的大小给出了空间组分相对意义, 而每个空间因子 U_{d_i} 对整个数据空间结构的贡献用谱分量测度 Q_i 来表示。

1.2.6 复相关系数 R_i^2 和振幅向量 T R_i^2 用来度量第 i 个变量在某一空间因子中的相对贡献, 并刻画空间因子的属性; 振幅向量 T 表示每个变量在各空间因子中的相对作用。

1.3 空间因子分析结果的解释步骤

空间因子分析的结果解释与传统的因子分析结果解释不同, 它不是根据特征值的大小来确定因子的重要程度, 而是靠测度的大小来确定哪些因子是相对重要的, 然后在所选择的因子中再确定元素之间的组合关系, 具体步骤如下: (1) 根据总测度中各变量复相关系数的大小, 确定整个空间因子中的主要变量。(2) 根据谱分量的测度 Q_i 确定有意义的谱分量 U_{d_i} 。如果 $Q_i < 0$, 则认为对应的 U_{d_i} 无意义。在 $0 < Q_i < 1$ 的范围内取与较大 Q_i 值对应的谱分量, 然后再根据各变量在各谱分量上的复相关系数大小, 确定该谱分量代表的变量组合。(3) 在振幅向量矩阵中, 选取已确定的谱分量的振幅向量, 根据幅值和符号的差别确定变量之间的彼此关联性。(4) 同 R 型因子分析相似, 在某一空间(或时间)尺度下, 谱分量中的元素组合往往代表了某一地球化学作用。因此, 空间因子分析的结果解释原理也是元素组合对地球化学作用的成因专属性。

2 CCA121 孔柱状沉积物地球化学旋回元素组合的确定

CCA121 孔位于多金属结核广泛分布的东北太平洋 CC 区, 其地理坐标为 $140^{\circ} 51' W$, $10^{\circ} 25' N$ 。该柱状沉积物的年代范围为 0—19.12Ma, 是多金属结核的主要生长时期。前人

研究表明,多金属结核赖以生存的沉积物为其生长发育提供了主要的成矿物质(许东禹等,1994),而沉积物中成矿元素的活化、迁移和沉淀成矿与环境因素密切相关。不同尺度的周期性环境变化因子必然导致沉积物中成矿元素发生脉冲式活化、迁移和沉淀。

根据硅、氧同位素的变差函数结构分析(孟宪伟等,1997),确定了两个周期性环境变化的空间尺度分别为:65cm和105cm。下面讨论这两个空间尺度下的空间因子分析结果。

2.1 短周期尺度($D_1 = 65\text{cm}$)的地球化学旋回元素组合

根据空间因子分析的具体算法和步骤,在求取正定化相关矩阵 R_c 、 R_q 和转移矩阵 U_d 的前提下,计算出的系统中各元素的复相关系数 R^2 ,总测度 Q 和噪声水平 N (表1)。振幅向量 T 和各元素在谱分量中的复相关系数 R_i^2 分别列于表2和表3。

从表1可以看出,当 $D_1 = 65\text{cm}$ 时,除 Ni 元素外,每种元素的总测度都很高,按从大到小的排序为: $\text{Mn} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{Cu} > \text{Co} > \text{Ca} > \text{SiO}_2 > \text{Fe}$,表明在该尺度的因子空间中,主要以 Mn, Al_2O_3 , Cu 和 Co 的丰度变化为主,而 Ca, SiO_2 和 Fe 的丰度变化较弱。从表2中各谱分量的测度来看,只有4个谱分量 U_{d_1} , U_{d_2} , U_{d_3} 和 U_{d_4} 的 $Q_i > 0$,其余的都小于零,没有意义。在 $Q_i > 0$ 的谱分量中, Q_1 和 Q_3 又远远大于 Q_2 和 Q_4 ,因此,只考察这两个谱分量(因子)中各元素的复相关系数 R_i^2 。很容易看出, U_{d_1} 代表的元素组合为: Mn, Co, SiO_2 和 Al_2O_3 ; U_{d_3} 代表的元素组合为: Fe, Ca, Co 和 Cu。

表1 系统中元素的复相关系数 R^2 ,总测度 Q 和噪声水平 N

Tab.1 Complex correlation coefficients R^2 among the elements in the system, total prediction Q and noise level N

尺度 (cm)	R^2								Q	N
	Ca	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	SiO_2	Al_2O_3		
65	0.95	1.85	0.81	1.12	0.28	1.43	0.84	1.33	1.04	15.32
105	0.78	0.80	1.06	3.82	0.39	0.77	0.48	1.37	1.21	21.05

表2 振幅向量(T)矩阵($D_1=65\text{cm}$, $d=33\text{cm}$)

Tab.2 Matrix of amplitude vectors T for $D_1=65\text{cm}$ and $d=33\text{cm}$

U_{d_i}	Ca	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	SiO_2	Al_2O_3
U_{d_1}	-0.1929	-0.6927	-0.1175	-0.5473	-0.7636	0.4441	0.5442	0.5442
U_{d_2}	0.1354	-0.9692	0.0975	0.0238	0.2027	-0.1749	-0.0539	0.7254
U_{d_3}	-0.5626	-0.0736	-0.4206	-0.5120	-0.119	0.5278	0.0695	-0.1762
U_{d_4}	0.3324	0.1277	-0.7240	-0.0754	-0.0213	-0.0125	0.1613	-0.7340
U_{d_5}	0.2559	0.3229	0.2928	-0.0320	0.4537	1.0139	0.2115	0.0187
U_{d_6}	0.3765	0.3838	-0.1189	0.1240	0.1666	-0.05888	-0.1771	0.4149
U_{d_7}	-0.2316	-0.5881	0.3813	1.3293	-1.1246	-0.2964	1.2261	1.0737
U_{d_8}	-0.0946	0.4888	0.1464	0.1011	0.8050	0.0031	0.1941	-0.0519

2.2 长周期尺度($D_2 = 105\text{cm}$)的地球化学旋回元素组合

$D_2 = 105\text{cm}$ 时的空间因子分析参数 Q , N , R^2 , T , R_i^2 如表1、表4和表5。从表1中可以看出,当 $D_2 = 105\text{cm}$ 时,只有 Co, Al_2O_3 和 Fe 的复相关系数较大,表明在该尺度内只有 Co, Al_2O_3 和 Fe 呈旋回性变化。

表3 元素在各谱分量中的复相关系数 (R_i^2) ($D_1=65\text{cm}$, $d=33\text{cm}$)
 Tab.3 Complex correlation coefficients R_i^2 of elements in each component of the spectrum for $D_1=65\text{cm}$ and $d=33\text{cm}$

U_{d_i}	Qi	Ca	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	SiO ₂	Al ₂ O ₃
U_{d_1}	0.3101	0.0382	0.6453	0.0141	0.3329	0.2159	0.5966	0.6455	0.3279
U_{d_2}	0.0349	0.0029	0.1964	0.0015	0.0001	0.0053	0.0049	0.0015	0.0906
U_{d_3}	0.3032	0.6407	0.0144	0.3551	0.5738	0.0002	0.5613	0.0311	0.0677
U_{d_4}	0.0401	0.0260	0.0050	0.1226	0.0014	0.0001	0.0000	0.0195	0.1369
U_{d_5}	-0.0153	-0.0047	-0.0098	-0.0061	-0.0001	-0.00119	-0.0732	-0.0102	0.000
U_{d_6}	-0.0006	-0.0010	-0.0014	-0.0001	-0.0001	-0.0002	0.0000	-0.0007	-0.0013
U_{d_7}	-0.0083	-0.0005	-0.0043	-0.0014	-0.0181	-0.0097	-0.0008	-0.0453	-0.0118
U_{d_8}	0.0037	-0.0002	-0.0085	-0.0006	-0.0003	-0.0142	-0.0003	-0.0032	-0.0001

表4 振幅向量 (T) 矩阵 ($D_2=105\text{cm}$, $d=53\text{cm}$)

Tab.4 Matrix of amplitude vectors T for $D_2=105\text{cm}$ and $d=53\text{cm}$

U_{d_i}	Ca	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	SiO ₂	Al ₂ O ₃
U_{d_1}	-0.1864	-0.1940	-0.5036	-1.5976	-0.5266	-0.3511	0.0956	0.0016
U_{d_2}	0.3968	-1.0056	1.3227	0.6602	-0.0707	-0.7696	0.4015	1.7657
U_{d_3}	0.6800	0.2970	0.3940	0.5999	0.0388	-0.4903	-0.1018	0.0009
U_{d_4}	0.2207	-0.8015	0.7398	0.3841	-0.1858	-1.1175	0.0509	1.0586
U_{d_5}	-0.7246	0.5516	0.3406	-0.0745	-0.6759	-0.0621	0.3659	-0.7148
U_{d_6}	-0.2712	0.6990	-0.4047	-0.1449	0.2927	-0.2824	0.4411	-0.5026
U_{d_7}	-0.3239	0.0309	0.0726	-0.1908	-1.0735	-0.0073	-0.0602	0.5760
U_{d_8}	-0.7000	0.8460	1.5118	0.2994	0.8852	0.6292	-0.6183	0.9134

表5 元素在各谱分量中的复相关系数 (R_i^2) ($D_2=105\text{cm}$, $d=53\text{cm}$)

Tab.5 Complex correlation coefficients R_i^2 of elements in each component of the spectrum for $D_2=105\text{cm}$ and $d=53\text{cm}$

U_{d_i}	Qi	Ca	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	SiO ₂	Al ₂ O ₃
U_{d_1}	0.3781	0.0256	0.0354	0.1676	2.6634	0.3532	0.0874	0.0363	0.0000
U_{d_2}	0.3225	0.0450	0.3688	0.4485	0.1764	0.0025	0.1627	0.2481	0.8940
U_{d_3}	-1.6525	-3.7123	-0.9042	-1.1185	-4.0945	-0.0209	-1.8569	-0.4488	0.0000
U_{d_4}	-0.2730	-0.0225	-0.3782	-0.2265	-0.0964	-0.0274	-0.5539	-0.0064	-0.5187
U_{d_5}	0.0047	0.0078	0.0057	0.0015	0.0001	0.0117	0.0001	0.0107	0.0076
U_{d_6}	-0.0083	-0.0027	-0.0226	-0.0053	-0.0011	-0.0054	-0.0028	-0.0380	-0.0132
U_{d_7}	-0.0094	-0.0039	0.0000	-0.0002	-0.0019	-0.0736	0.0000	-0.0007	-0.0123
U_{d_8}	-0.0219	-0.0115	-0.0212	-0.0481	-0.0030	-0.0317	-0.0089	-0.0483	-0.0196

从表5来看,两个测度较大的谱分量为 U_{d_1} 和 U_{d_2} ,各自代表的元素组合分别为 Co, Fe, Mn 和 Al₂O₃。

至此可以看出,在同一时间序列内,不同的地球化学旋回周期尺度对应的元素组合并不相同。由于元素组合自身不仅是环境变化的响应,而且也包含了在环境因素作用下的成矿元素的成矿信息。因此,元素组合是连结沉积环境与成矿作用的桥梁。

3 元素组合的环境和成矿意义

深海沉积物中的 Al_2O_3 和 SiO_2 主要源于陆源, Ca 主要源于生物源, Fe 主要源于火山(热液)源, 而 Mn, Co, Ni 和 Cu 是典型的自生源元素组合 (Heath *et al.*, 1977)。因此, 就沉积物物源环境意义而言, $D_1 = 65\text{cm}$ 时的谱分量 U_{d_1} 代表了陆源和自生源因子, U_{d_3} 代表了生物源和自生源因子; $D_2 = 105\text{cm}$ 时的谱分量 U_{d_1} 代表了自生源因子, U_{d_3} 代表了火山(热液)源因子。另一方面, 从成矿作用来看, Mn, Fe, Co, Ni 和 Cu 是主要的成矿元素, 很显然 4 个谱分量都具有成矿意义, 但各谱分量代表的成矿意义不同: $D_1 = 65\text{cm}$ 时的谱分量 U_{d_1} 代表了 Mn, Cu 和 Co 的活化和转移, U_{d_3} 代表了 Fe, Co 和 Cu 的活化和转移; $D_2 = 105\text{cm}$ 的谱分量 U_{d_1} 代表了 Co 的自生成成矿作用, 而 U_{d_2} 则反映了 Fe 和 Mn 的活化和转移。

物源环境对成矿元素的制约作用需从振幅向量矩阵中彼此的相互关系来考察。从表 2 可以看出 $D_1 = 65\text{cm}$ 时的谱分量 U_{d_1} 元素组合中 Mn, Co 和 Cu 正相关, SiO_2 和 Al_2O_3 正相关, 两对元素组合之间负相关; 谱分量 U_{d_3} 元素组合中 Ca, Fe, Co 三者之间正相关, 它们与 Cu 负相关。从表 4 可以看出 $D_2 = 105\text{cm}$ 时的谱分量 U_{d_2} 元素组合中 Mn, Fe 和 Al_2O_3 正相关。由此看来, 物源环境对成矿元素成矿的制约表现如下几个方面: (1) 在小尺度范围内 ($D_1 = 65\text{cm}$), 沉积物中陆源物质的增加不利于 Mn, Co 和 Cu 的成矿, 而沉积物中的自生组分是多金属结核形成的主要物质来源。(2) 在小尺度范围内 ($D_1 = 65\text{cm}$), 沉积物中的生物源物质利于 Fe, Co 成矿元素参与多金属结核成矿, 但不利于 Cu 成矿。(3) 在大尺度范围内 ($D_2 = 105\text{cm}$), 火山(热液)源物质利于 Mn, Fe 元素参与多金属结核成矿。(4) 多金属结核中 Ni 元素的成矿作用几乎不受沉积物物源组成变化的影响。

4 结论

在不同尺度的周期性环境因素制约下, 沉积物中的地球化学元素, 特别是成矿元素发生了振荡式活化、迁移和沉淀, 而且不同的元素由于其对环境变化响应的程度不同, 因而造成了活化、迁移和沉淀机制的差异, 结果在沉积物中留下了以元素组合周期性变化为特征的多级地球化学旋回。空间因子分析有效地刻画了元素组合周期性变化特征。就 CCA121 柱状沉积物而言, 小尺度的周期性环境变化 ($D_1 = 65\text{cm}$) 伴随陆源、自生源和生物源物质的旋回变化, 并诱发成矿元素 Mn, Co, Cu 和 Fe 的振荡式活化、迁移和沉淀, 参与多金属结核成矿; 大尺度的周期性环境变化 ($D_2 = 105\text{cm}$) 伴随着自生源和火山(热液)源物质的旋回变化, 并诱发 Co, Fe, Mn 元素发生振荡式活化、迁移和沉淀, 参与多金属结核成矿。多金属结核的成矿元素(除 Ni 外), 始终受沉积物中呈不同尺度周期性变化的物源组成的制约。

参 考 文 献

- 许东禹 陈宗团 孟祥营, 1994, 太平洋中部晚新生代古海洋环境及事件. 北京: 地质出版社. 40—50
 李扬, 1993. 太平洋海盆微结核研究. 北京: 地质出版社. 20—40
 孟宪伟, 1993. 地球化学变量的空间自相关 / 互相关与空间因子分析. 物探化探计算技术, 15(3): 192—203
 孟宪伟 吴世迎 韩貽兵, 1997, 变差函数与沉积地球化学旋回周期率确定. 海洋科学, 4: 28—31
 Grunsky E C, Agterberg F P, 1988, Spatial and multivariate analysis of geochemical data from metavolcanic rocks in the Ben Nevis area Ontario. *Meth. Geol.*, 20(7): 825—861
 Grunsky, E. C., Agterberg F P, 1991a, FUNCORR: A FORTRAN-77 Program for computing

multivariate spatial auto-correlation. *Comp. Geosci.*, 17(1): 115—131

Grunsky, E C, Agterberg F P, 1991b. SPFAC: A FORTRAN-77 program for spatial factor analysis of multivariate data. *Comp Geosci*, 17(1): 132—154

Heath G R, Dymond J, 1977. Genesis and transformation of metalliferous sediments from the East Pacific Rise, Bauer Deep and Central Basin, Northwest Nazca Plate. *Geol. Soc. Amer. Bull.*, 88: 723—733

SPATIAL FACTOR ANALYSIS AND DETERMINATION OF ELEMENT ASSOCIATIONS RELATING TO SEDIMENTARY GEOCHEMISTRY CYCLES

MENG Xian-wei, WU Shi-ying, HAN Yi-bing

(First Institute of Oceanology, State Oceanic Administration, Qingdao 266003)

Abstract In May, 1995, using geochemical data of the CCA121 sediment core collected by MGMR and the method of spectrum decomposition for multivariate time series-spatial factor analysis, element associations in association with geochemical cycles were identified on two spatial scales (i. e. $D_1 = 65\text{cm}$, $D_2 = 105\text{cm}$). The elements associations corresponding to the smaller scale ($D_1 = 65\text{cm}$) were $U_{d_1}(\text{Mn, Co, Cu, Al}_2\text{O}_3, \text{SiO}_2)$ and $U_{d_1}(\text{Fe, Ca, Co, Cu})$ those corresponding to the larger scale ($D_2 = 105\text{cm}$) were $U_{d_2}(\text{Co})$ and $U_{d_2}(\text{Mn, Fe, Al}_2\text{O}_3)$. Periodic environmental changes relating to the smaller scale were accompanied by cyclic changes in terrestrial, authigenic and biogenic inputs, reducing the remobilization, migration and deposition of metallogenetic elements Mn, Co, Cu, and Fe in the form of oscillation; these elements were involved in the metallogenetic process of polymetallic nodules. On the other hand, periodic environmental changes relating to the larger scale were accompanied by cyclic changes in authigenic and volcanogenic (hydrothermal) inputs, reducing the remobilization, migration and deposition of metallogenetic elements Co, Fe and Mn in the same way during the formation of polymetallic nodules. Such oscillatory metallogenetic processes for each of the metallogenetic elements were controlled by source composition of sediments which varies periodically on different scales.

Key words Spatial factor analysis Geochemical cycle Element Association Scale

Subject classification number P 736.4