

文章编号: 1673-9868(2014)4-0133-06

基于 PCA 的岩溶地下河水质评价

——以重庆青木关南段岩溶槽谷地下河为例^①

颜 赫¹, 贾亚男^{1,2}, 王开然³, 胡大超⁴,
苗海通⁵, 李静文¹, 薛倩倩¹, 彭玲莉⁶

1. 西南大学 地理科学学院, 重庆 400715; 2. 三峡库区生态环境与生物资源重点实验室, 重庆 400715;
3. 吉林大学 环境与资源学院, 长春 130021; 4. 湖南有色地质勘探局, 湖南 郴州 423400;
5. 中铁十六局集团第一工程有限公司, 北京 101300; 6. 江苏省有色金属华东地质勘查局, 南京 210007

摘要: 为研究地下河水质状况, 以重庆青木关南段岩溶槽谷的地下河为研究对象, 采用以主成分分析方法为主的一系列数学方法对野外作业采集的数据进行科学分析, 认为第一、二、三主成分的因子载荷量分别是 48.721%, 19.095% 和 13.112%, 累积贡献率为 80.929%。水质的综合得分为 -0.83。结合水质评价标准, 认为该区的水质虽然受到一定程度的污染, 但是水质的整体质量居于中等偏上。建议暴雨期间进行加密监测, 确定水质在雨水作用下的响应。

关键词: 岩溶水; 地下河; 主成分分析

中图分类号: P964

文献标志码: A

岩溶面积占据了我国国土面积的三分之一, 岩溶区域内自然环境脆弱, 自净能力差。岩溶水是人类赖以生存的主要水源, 但是岩溶区的地下河系统中, 明流伏流交替出现, 加之降雨的作用, 水文系统复杂。在岩溶地区本身的地质作用和降雨的辅助作用下, 地表水和地下水相互转化, 水资源的受污染概率和治理难度同时加大。面对关系国计民生的水源问题, 对岩溶地区的地下河的水质评价工作不容忽视。本文以重庆市青木关南段的地下河(位于我国西南岩溶地区的典型岩溶槽谷区)为研究对象, 以先前积累的研究区水文地质资料为依据, 利用 2010 年 5 月到 10 月野外工作中采集的样品所测出的水化学数据, 运用主成分分析法和方差分析法等数学方法对此进行分析, 同时结合研究区地下河的水化学特征, 通过实地考察, 客观地对研究区地下河的水质进行综合评价。为岩溶地区的水质评价工作提供一些补充性的参考建议。

1 研究区自然地理概况

研究区青木关镇位于重庆市北碚区、璧山区和沙坪坝区的交界处^[1-2], 属于我国南方典型喀斯特地区。本文以青木关南段岩溶槽谷中的地下河为研究对象。该地下河全长 4.25 km。最高点(海拔 466.6 m)是一个积水(面积为 63 000 m²)的洼地, 最低点(地下河出口处)海拔为 326 m。被冬夏季风交替控制^[3], 位于亚热带季风气候区。年均温在 18℃左右, 7 月份和 1 月份分别是最高温和最低温的月份, 夏季均温高^[4]。降雨量每年可达 1 000 mm, 但是降雨的 95%集中在夏半年。植被以亚热带常绿阔叶林为主^[5]。由于西南地区

^① 收稿日期: 2013-08-10

基金项目: 国家自然科学基金青年基金资助项目(41101036)。

作者简介: 颜 赫(1987-), 女, 山西汾阳人, 硕士研究生, 主要从事自然地理学的研究。

通信作者: 贾亚男, 副教授。

干旱缺水和喀斯特地区地表环境的最弱, 研究区生长了大量的灌木丛(旱生), 此外, 在整个流域的中游, 有大量水田分布. 土壤发育主要为黄壤和石灰土. 其中黄壤遵循地带性分布规律, 而石灰土遵循非地带性的分布规律, 土层分布不连续.

2 采样点介绍和样品处理与测试方法

在研究区选取 4 个采样点, 由南向北、从上游到下游分别是天池(岩溶湖、溶洞、表层岩溶泉)、干天池、赖家槽(地下河出口)和丁家龙洞(地下河的出口). 其中, 从天池采样点到中游赖家槽采样点的途中还发育了许多的落水洞, 坡度比较平缓(落差 54 m), 而下游坡度较陡(落差 86 m), 途中只发育有一处落水洞.

水样采集时间为 2010 年 5 月到 10 月(夏半年), 每月采水样 1~2 次. 主要测试指标为 pH 值、水温和电导率(EC)(美国 HACH 多参数水质分析仪); K^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Sr^{2+} 和全 Fe 等阳离子(将采集好的水样装于事先用 1:1 的 HNO_3 溶液清洗 50 mL 聚乙烯取样瓶中, 再滴加 1:1 优级纯硝酸溶液 2 滴, 使用美国 PerkinElmer 公司生产的 ICP-OES Optima 2100DV 联机测试); HCO_3^- , NO_3^- , SO_4^{2-} 和 Cl^- 等阴离子(将水样装于清洗过的 200 mL 聚乙烯取样瓶中, 12 h 内运至实验室冰箱中 $0\text{ }^{\circ}\text{C}\sim 4\text{ }^{\circ}\text{C}$ 环境冷藏. 使用岛津紫外分光光度计测定). 室内测试指标均在西南大学地理科学学院实验室中完成. 降雨数据的采集时段为 2010 年 5 月, 7 月—11 月(六月份降雨数据缺失, 不影响研究结果).

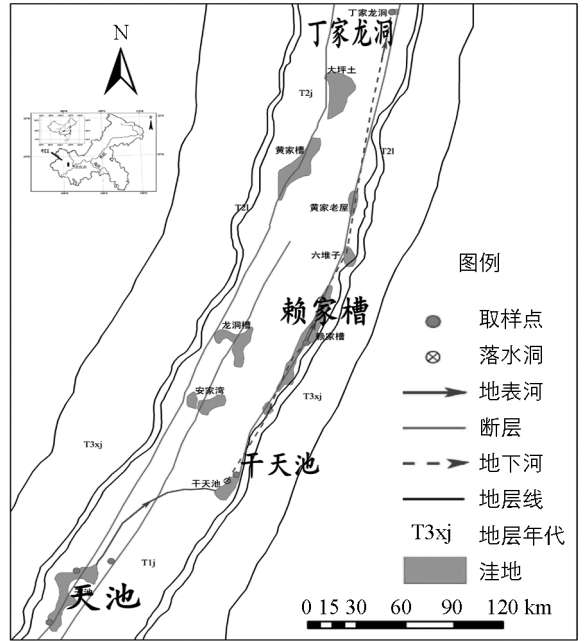


图 1 研究区地理位置^[6]与采样点分布图^[3]

3 实验数据结果分析

3.1 研究区地下水化学特征

降雨是研究区地下河重要的补给来源. 雨水通过自身所含的化学成分, 为补给区岩溶水水动力系统的改变提供条件, 直接影响补给区地下河水的水化学成分^[7]. 由图 2-a 可知, 2010 年降雨集中于夏秋两季. 根据样品测试后的数据绘制出青木关水化学三角图(图 2-b), 可见青木关南部地下暗河的水化学类型为 $Ca^{2+}-HCO_3^-$ 型.

3.2 水质指标的统计学分析及讨论

3.2.1 主成分分析方法的原理

主成分分析法是统计学中做社会经济统计时经常被用到的一种方法, 随着地理学的不断发展, 主成分分析方法逐渐在地理分析中得到广泛运用^[8], 其数学模型^[9]如下:

$$F_1 = a_{11}ZX_1 + a_{21}ZX_2 + \cdots + a_{p1}ZX_p$$

$$F_2 = a_{12}ZX_1 + a_{22}ZX_2 + \cdots + a_{p2}ZX_p$$

...

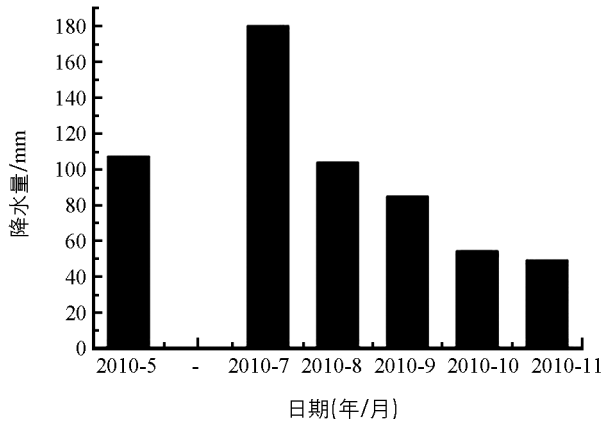
$$F_p = a_{1m}ZX_1 + a_{2m}ZX_2 + \cdots + a_{pm}ZX_p$$

其中: $a_{1i}, a_{2i}, \cdots, a_{pi}$ ($i=1, 2, \cdots, m$) 为 X 协方差阵的特征值所对应的特征向量; ZX_1, ZX_2, \cdots, ZX_p 为各个原始变量经过标准化处理后的值.

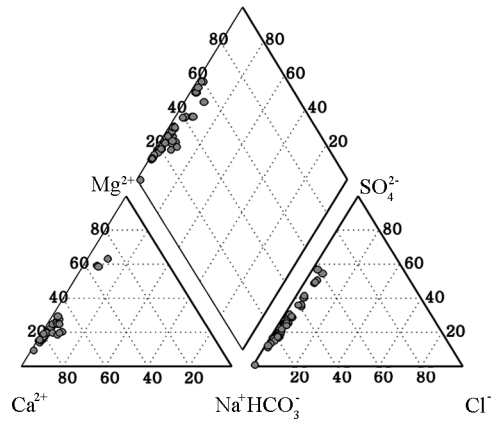
综合主成分计算方法为:

$$F_{\text{综}} = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\lambda_i}{\sum_{k=1}^p \lambda_k} \right) F_i$$

其中 $\frac{\lambda_i}{\sum_{k=1}^p \lambda_k}$ 为第 i 主成分的贡献率.



(a)



(b)

图 2 研究区地下水化学三角图(b)和 2010 年各月降雨(a)

运用 SPSS 17.0 对研究区地下河的 9 种水化学指标与水温、电导率、pH 值进行主成分分析, 对数据进行统计学检验(KMO 和球型检验), 发现该数据符合主成分分析的要求. 分析后得出 12 种指标的相关性矩阵见表 1. 同时得出解释的总方差和成分矩阵. 提取特征根大于 1 的 3 个主成分的特征值分别是 PC1 为 5.847, PC2 为 2.291, PC3 为 1.573(表 2, 表 3). 3 个主成分的方差贡献率分别为 48.721%, 19.095% 和 13.112%, 累积贡献率为 80.929%, 包含了这 12 种指标的大部分信息, 可作进一步的分析.

表 1 青木关南部地下河地下水 12 项水化学指标的相关系数矩阵

指标	电导率	pH	水温	HCO ₃ ⁻	NO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	CL ⁻	K ⁺	Na ⁺	Ca ²⁺	Mg ²⁺	Sr
电导率	1											
pH	-0.661	1										
水温	-0.353	0.423	1									
HCO ₃ ⁻	0.853	-0.796	-0.417	1								
NO ₃ ⁻	0.277	-0.247	-0.444	0.321	1							
SO ₄ ²⁻	0.33	-0.263	-0.465	0.313	0.507	1						
CL ⁻	0.326	-0.191	-0.41	0.363	0.443	0.897	1					
K ⁺	-0.093	0.23	0.215	-0.191	-0.117	0.282	0.24	1				
Na ⁺	0.402	-0.246	-0.225	0.283	0.12	0.607	0.609	0.531	1			
Ca ²⁺	0.691	-0.491	-0.279	0.607	0.107	0.376	0.365	0.178	0.639	1		
Mg ²⁺	0.655	-0.523	-0.339	0.602	0.255	0.542	0.549	0.324	0.873	0.847	1	
Sr	0.407	-0.278	-0.265	0.297	0.081	0.598	0.591	0.476	0.985	0.665	0.878	1

表 2 青木关南部地下河各水质指标解释的总方差

成分	初始特征值			成分	初始特征值		
	合计	方差的 %	累积 %		合计	方差的 %	累积 %
1	5.847	48.721	48.721	7	0.342	2.849	96.182
2	2.291	19.095	67.817	8	0.223	1.862	98.044
3	1.573	13.112	80.929	9	0.144	1.204	99.248
4	0.613	5.104	86.033	10	0.049	0.408	99.656
5	0.471	3.921	89.954	11	0.032	0.263	99.919
6	0.405	3.379	93.333	12	0.01	0.081	100

表 3 成分矩阵及提取平方和载入

指 标	成 份			指 标	成 份		
	1	2	3		1	2	3
电 导 率	0.741	-0.434	-0.28	Na ⁺	0.818	0.498	-0.118
pH	-0.612	0.581	0.217	Ca ²⁺	0.8	-0.022	-0.399
水 温	-0.522	0.372	-0.424	Mg ²⁺	0.929	0.137	-0.233
HCO ₃ ⁻	0.709	-0.575	-0.194	Sr	0.824	0.463	-0.143
NO ₃ ⁻	0.407	-0.291	0.654	特征值	5.847	2.291	1.573
SO ₄ ²⁻	0.74	0.207	0.538	方差贡献率/%	48.721	19.095	13.112
Cl ⁻	0.726	0.215	0.504	累积方差贡献率/%	48.721	67.817	80.929
K ⁺	0.237	0.8	-0.103				

3.2.2 研究区水化学过程的统计学解读

1) 研究发现,与 PC1 具有密切正相关的是 Na⁺,NO₃⁻,K⁺,Cl⁻和电导率(EC),其载荷分别为 0.818,0.407,0.237,0.726 和 0.741(表 3),直接反映水岩作用和农业肥料对地下水的影响.电导率的高低与离子的活跃程度呈正相关.同时,由农业活动(包括牲畜代谢物)所导致的非点源污染已成为当今世界地下水资源的主要威胁^[10].农田中,地表径流的大面积形成,均由降雨导致.大面积的地表径流携带着大量的残留肥料和家禽的代谢物^[11]进入地下河,导致地下水中 K⁺,Na⁺,NO₃⁻和 Cl⁻浓度上升(可推测 PO₄³⁻的浓度也会升高),进而引起电导率的升高.研究区土地利用类型多为水田,流域内多为土层深厚的洼地.青木关地区的农户每年在春末夏初的时候就开始对农田施肥,所施的大都是合成化肥(尿素约为 225 kg/hm²,碳酸氢铵约为 750 kg/hm²,还有一定量的磷酸二氢钾).肥料并不能完全被农作物吸收^[12].另外,近年来,该地居民一直有在大片水田中放养鸭子的习惯.研究表明,水田中含氮和含钾有机肥料量的增多,与牲畜代谢物的排放及残留的化肥等密不可分^[13].与 PC1 具有密切正相关的 SO₄²⁻,其载荷值达到了 0.74.可见青木关岩溶地下水中高 SO₄²⁻浓度的主要原因是:研究区内的北部存在煤洞,SO₄²⁻浓度极高,达 200 mg/L 以上,补给地下河,导致地下河的 SO₄²⁻浓度比其他类型岩溶水高的多.

2) 与 PC2 负相关的是 Ca²⁺,HCO₃⁻和电导率,其载荷分别为-0.022,-0.575,-0.434(表 3).由于 Ca²⁺和 HCO₃⁻都是灰岩溶解的产物,电导率的高低与其活跃程度呈正相关.说明 PC2 所反映的是降雨期间,在雨水作用下,所造成的地下水中离子(与灰岩溶解相关)的稀释效应.根据杨平恒等人^[2]的研究成果显示,青木关地区的降雨的 pH 值是偏弱酸性的,其 SIc 平均值远小于 0,表明雨水对灰岩具有较强的溶蚀能力,在岩溶管道运移过程中溶蚀了围岩.整个降雨的半年中研究区地下水中 HCO₃⁻,Ca²⁺等离子的溶解通量远远大于常规天气下的溶解能量.

3) 与 PC3 具有密切正相关的是 NO₃⁻,其载荷为 0.654(表 3).说明 PC3 主要反映的也是农业肥料对地下水的影响.研究区内以种植玉米和竹笋等蔬菜为主,除了冬季,其他三个季节都需要施肥,肥料种类包括粪肥和氮磷钾无机复合肥.已有研究表明,农作物生长过程中并没有将所施用的肥料完全吸收,在农田中,依然残留着大量的有机、无机肥料^[14-15].汪智军等^[16]利用稳定¹⁵N 同位素技术,发现在该研究区,残留在稻田中的化肥是春季的地下河水中硝态氮的来源,可以作为本文分析结果的一个验证.

3.3 水质的变化规律和综合评价

将 PC1,PC2 和 PC3 三个主成分得分与其方差贡献率乘积再求和,得到综合得分.PC_综能够反映一定时期内地下水的水文地球化学状况,成为水质评价的有力依据.PC_综越高,表明受外界环境的影响越大,水质也越差^[2].由于 PC1 和 PC2 对整个分析的方差贡献程度明显,所以本文只讨论 PC1 和 PC2 得分对青木关地下河系统水质变化的影响.由于本文样品采集为 5 月到 10 月的降雨的半年,针对的情况主要是降雨的宏观背景下,研究区整体的水质情况,所以采用均值的方法来总结研究区地下水水质的变化规律.

对 PC1,PC2 之和得分矩阵进行方差分析,在求得高相关性的同时,还求出了它们的方差,发现综合主成分得分的方差为 0.66,波动很小.同时,方差分析的 P-value 值为 2.73E-05,远远小于 0.05.由此可见采用均值的方法分析研究区的水质是可行的.

整个半年的水文过程中,PC1的均值为-1.613,PC2的均值为0.328,PC3的均值为-0.83。而且PC1得分的范围在-2.5—1之间,PC2的得分范围在-1—1.4之间,PC2的得分明显地高于PC1,说明在研究区内,水质的略微恶化为土壤流失和农田肥料及牲畜代谢物的输入量增大而引起的,同时宏观上看,土壤流失对水质恶化的贡献程度略微大于农田肥料和牲畜代谢物,土壤流失输入量下降使水质逐渐好转。雨季,土壤和元素在雨水的作用下,从地表流入地下河中,引起地下水水质的恶化和地下水化学性质的变化^[17],并有可能造成排泄区水体的富营养化^[18],严重破坏水生生态环境。本研究基于长时间的观测和计算,综合主成分得分在-0.83左右,由此可以初步确定,青木关南段地下水的水质虽然受到了一定程度的污染,但是水质的评价等级居中。结合地下水水质标准^[19],水温最低值达到13.7℃,最高值达到32.1℃。pH值的平均值为7.78;电导率的最低值为147 $\mu\text{s}/\text{cm}$,平均达到562 $\mu\text{s}/\text{cm}$,发现研究区青木关南部地下水水质在半个水文年内的综合评价为三级(较好)。受仪器和设备条件的限制,本研究没有根据流量对主成分得分进行分段研究,但是根据得分矩阵可以推测,降雨期间降雨流量的不同,对水质的等级会造成不同的影响。

4 结 论

1) 基于主成分分析法,提取了3个主成分,它们的累积贡献率占到了总体信息量的80.929%。其中,PC1反映农业活动中的肥料对地下水的影响,PC2反映降雨机制下岩溶区地下河流域的离子的稀释和土壤的流失,PC3主要反映农业氮肥对地下水的影响。

2) 一年中降雨较多的半年里,研究区的水质综合评价为中等。土壤流失、农田残留肥料和牲畜代谢物的大量输入,是水质恶化的根源所在。同时宏观上看,土壤流失对水质恶化的贡献程度略微大于农田肥料和牲畜代谢物。因此,在今后的水资源保护工作中,应该注意肥料的施放量以及家禽代谢物的处理。

3) 由于技术条件的限制,没有对主成分的得分与岩溶区地下水水质的好坏进行分段讨论,只是得出了宏观的结论。特别是没有进行暴雨监测,因为在暴雨期间,随着流量的变化,土壤流失与代谢物输入对水质恶化的贡献程度应该会呈此消彼长的态势,在以后的研究工作中可以对此进一步探索。

参考文献:

- [1] 苗海通. 现代岩溶槽谷地质构造与水化学特征及岩溶水源地的保护研究 [D]. 重庆: 西南大学, 2011.
- [2] 杨平恒. 重庆青木关地下水系统的水文地球化学特征及悬浮颗粒物运移规律 [D]. 重庆: 西南大学, 2010.
- [3] 胡大超. 岩溶地下水雨季¹⁵N同位素及微量元素特征研究 [D]. 重庆: 西南大学, 2011.
- [4] 王开然, 贾亚男, 胡大超. 基于¹⁵N同位素技术的地下水硝酸盐污染源对比——以重庆青木关地下水为例 [J]. 长江流域资源与环境, 2013, 22(6): 750—755.
- [5] 贾亚男, 袁道先. 土地利用变化对水城盆地岩溶水水质的影响 [J]. 地理学报, 2003, 56(6): 831—838.
- [6] LI Ting-yong, SHEN C C, LI Hong-chun, et al. Oxygen and Carbon Isotopic Systematics of Aragonite Speleothems and Water in Furong Cave, Chongqing, China [J]. Geochimica et Cosmochimica Acta, 2011, 75: 4140—4156.
- [7] 杨平恒, 袁道先, 袁文昊, 等. 以PCA揭示降雨期间岩溶地下水文地球化学的形成 [J]. 科学通报, 2010(9): 788—797.
- [8] 高吉喜, 段飞舟, 香 宝. 主成分分析在农田土壤环境评价中的应用 [J]. 地理研究, 2006(5): 836—842.
- [9] 张 鹏. 基于主成分分析的综合评价研究 [D]. 南京: 南京理工大学, 2004.
- [10] BOUWER H. Integrated Water Management: Emerging Issues and Challenges [J]. Agricultural Water Management, 2000, 45(3): 217—228.
- [11] 白秀娟. 稻鸭共生生态模式(一) [J]. 农民科技培训, 2005(8): 14—15.
- [12] BRONSON K F, MALAPATI A, BOOKER J D, et al. Residual Soil Nitrate in Irrigated Southern High Plains Cotton Fields and Ogallala Groundwater Nitrate [J]. Journal of Soil and Water Conservation, 2009, 64(2): 98—104.
- [13] YADAV S. Formulation and Estimation of Nitrate-Nitrogen Leaching from Corn Cultivation [J]. Journal of Environmental Quality, 1997, 26(3): 808—814.
- [14] 汪智军, 杨平恒, 旷颖仑, 等. 基于¹⁵N同位素示踪技术的地下水硝态氮来源时空变化特征分析 [J]. 环境科学, 2007, 30(12): 3548—3554.

- [15] ELMI A, MADRAMOOTOO C, EGEH M, et al. Water and Fertilizer Nitrogen Management to Minimize Nitrate Pollution from a Cropped Soil in Southwestern Quebec, Canada [J]. *Water Air & Soil Pollution*, 2004, 151(1): 117–134.
- [16] VOUTSA D, MANOLI E, SAMARA C, et al. A Study of Surface Water Quality in Macedonia, Greece; Speciation of Nitrogen and Phosphorus [J]. *Water Air & Soil Pollution*, 2001, 129(1): 13–32.
- [17] 袁文昊, 贺秋芳, 杨平恒, 等. 典型岩溶槽谷区地下水化学时空变化特征及影响因素初探——以重庆青木关地下水系统为例 [J]. *西南大学学报: 自然科学版*, 2009, 31(6): 160–163.
- [18] 何守阳, 朱立军, 董志芬, 等. 典型岩溶地下水系统地球化学敏感性研究 [J]. *环境科学*, 2010(5): 1176–1182.
- [19] 何宇彬, 徐超. 喀斯特隙流水与管流水的耦合及转化关系研究 [J]. *中国岩溶*, 1995(6): 150–155.

A PCA-Based Evaluation of Water Quality of Underground Rivers in Karst Areas ——A Case Study on the South of Qingmuguan Subterranean Stream in Chongqing

YAN He¹, JIA Ya-nan^{1,2}, WANG Kai-ran³, HU Da-chao⁴,
MIAO Hai-tong⁵, LI Jing-wen¹, XUE Qian-qian¹, PENG Ling-li⁶

1. School of Geographical Sciences, Southwest University, Chongqing 400715, China;
2. Key Laboratory of Eco-Environments in Three Gorges Reservoir Area, School of Geographical Sciences, Southwest University, Chongqing 400715, China;
3. College of Environment and Resources, Jilin University, Changchun 130021, China;
4. Hunan Non-Ferrous Geological Survey Office, Chenzhou, Hunan 423400, China;
5. China Railway 16th Bureau Group Co. Ltd. First Engineering, Beijing 101300, China;
6. East China Mineral Exploration and Development Bureau, Nanjing, Jiangsu 210007, China

Abstract: Previous researches related to the water quality of underground rivers put more emphasis on qualitative evaluation than on quantitative analysis. In a study reported in this paper, water samples were collected from the southern section of a Qingmuguan subterranean stream in Chongqing. Experiments were conducted in the laboratory to analyze the water samples collected outdoors, and Principal Component Analysis (PCA) was utilized to analyze the resulting data. The factor load capacity of the first, second and third principal components were 48.721%, 19.095% and 13.112%, respectively, and their cumulative contribution rate was 80.929%. The water quality composite score was -0.83 . It is concluded based on the water quality evaluation criteria that the quality of the underground water in this region is, as a whole, a little above the medium despite a slight pollution. It is recommended that high frequent monitoring be made during rainstorms to make clear the response of underground water quality to rainfall.

Key words: karst water; underground river; principal component analysis

责任编辑 胡 杨

