

两种地统计学方法在耕地表土中 Ni 空间变异研究中的应用比较

杨 梅¹, 刘洪斌², 武 伟³

(1. 西南农业大学资源环境学院, 重庆 400716; 2. 中国科学院地球化学研究所, 贵州 贵阳 550005;
3. 西南农业大学信息学院, 重庆 400716)

摘要:以重庆市土壤中重金属 Ni 为例, 分别运用地统计学中普通克里格方法与秩序列地统计学中标准秩克里格方法进行分析研究, 结果表明, 重庆市耕地土壤中 Ni 的含量为 (32.85 ± 16.35) mg/kg, 变异系数为 49.77%, 属中等变异强度. 比较预测误差可知, 标准秩克里格方法对研究区域预测较为准确, 所得到的重庆市耕地表土 Ni 含量的空间分布图更为可信. 由标准秩克里格插值结果逆转换至土壤 Ni 含量的分布, 可以看出重庆市耕地表土中 Ni 含量总体分布不规则, 在东北部城口、巫溪, 中部丰都, 西北部潼南一带耕地表土中 Ni 含量相对较高.

关键词:地统计学, 秩序列地统计学, 重金属 Ni, 空间变异, 半方差函数

中图分类号: S15, S11+4

文献标识码: A

文章编号: 1006-7647(2005)S1-0011-04

当前我国区域农业环境恶化与农产品重金属污染十分严重, 特别是在经济发达地区, 重金属污染是农业环境研究和保护的重点和难点. 在各种污染物中, 重金属污染具有不可逆性、长期性、后果严重性和不易消除性等特点, 因此引起社会的特别关注.

地统计学 (Geostatistics) 于 20 世纪 50 年代首先应用于南非采矿业的矿藏勘察计算中. 60 年代法国著名统计学家 G Matheron 在做了大量理论工作的基础上提出区域化变量理论 (the theory of regionalized variable) 形成了地统计学的基本框架^[1]. 经过 30 年的发展, 地统计学已经在需要评估空间和时间变异的许多领域得到广泛应用. 地统计学是研究空间变异性比较稳健的工具, 可最大限度地保留空间变异信息. 该方法是以区域化变量为核心和理论基础、以空间相关和变异函数为基本工具的一种数学地质方法. 地统计学在矿产地质中的应用目前已经达到了成熟阶段, 在水文学、土壤学等领域中也得到了广泛的应用^[2,3].

由于土壤中重金属的空间变异性极高, 分布极不规则, 而土壤样品的采样又常常是离散的, 这就掩盖了重金属空间分布的相关性^[4,5]. 在有些情况下, 会出现某几个观测值非常高, 而周围的观测值较低的现象, 导致拟合半方差模型中的块金系数很大, 如果纯

块金效应发生, 那么 Kriging 估值就会变成样品数据的简单数学平均, 由此得到的等值线图也没有多大意义. 为此, 专家们提出了先将遵循对数正态分布的数据进行对数转换, 再利用对数正态 Kriging (logistic normal kriging) 来进行空间插值这一方法^[6,8]. 这种方法是基于多元高斯模型的, 只有当数据严格地遵从多元高斯分布 (或多元正态分布) 时, Kriging 插值才有效. 实际上大部分数据难以满足如此严格的要求, 为此 Journel 和 Deutsch 提出了一种称为秩序列地统计学 (rank-order geostatistics) 的方法来将数据的不同类型、比例和精度综合起来^[9]. 它所应用的标准化秩转换对需要转化的数据没有任何特定要求, 因此已成为解决高度不规则数据的另一有效的地统计学方法^[10].

1 地统计学和秩序列地统计学方法概述

1.1 地统计学方法概述

地统计学方法一般以半方差图作为描述空间变异性的工具^[4,5,9,10].

设在一维 (二维或三维) 空间中不同位置 x_1, x_2, \dots, x_n 上某土壤特性的观测值为 $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$, 半方差 ($\gamma(h)$) 可反映区域化变量的空间依赖关系, 由下式计算 (估计):

基金项目: 重庆市教委科技项目 (011802)

作者简介: 杨梅 (1978—), 女, 新疆乌鲁木齐人, 硕士研究生, 从事土壤学、地理信息系统等研究.

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} [z(x_i + h) - z(x_i)]^2 \quad (1)$$

式中: $n(h)$ 为距离 h 分隔的观测点的对数; h 为滞后距离 (Lag), 以 h 为横坐标、 $\gamma(h)$ 为纵坐标作图, 即为半方差图。

Kriging 法也称空间局部估计或空间局部插值, 是地统计学两大主要内容之一。从数学角度讲就是一种对空间分布的数据求线性最优无偏内插估计量的方法。更具体地讲, 它是根据待估样点 (或待估块段) 有限邻域内若干已测定地样点数据, 在认真考虑了样点的形状、大小和空间相互位置关系, 它们与待估样点相互空间位置关系, 以及变异函数提供的结构信息之后, 对该待估样点值进行的一种线性无偏最优估计。

1.2 秩序列地统计学方法概述

秩序列地统计学方法是在地统计学方法的基础上通过标准秩转换, 标准秩克里格进行克里格估计, 再由标准秩逆转换到污染区域, 从而得到研究区域的重金属含量值及其估测误差^[10]。

2 应用实例

2.1 研究区域概况

研究区域为重庆市内的 39 个县 (区), 总面积 8.2 万 km², 位于东经 105°17' ~ 110°11', 北纬 28°10' ~ 32°13' 之间, 青藏高原与长江中下游平原的过渡地带, 以丘陵、低山为主的地形状态。海拔最高处 2296.8 m, 最低处 73 m, 大部分地区在 500 m 以下。地处中亚热带, 水热丰富, 雨热同季, 年平均气温在 13.8 ~ 18.7℃ 之间, 各地区降水量在 940 ~ 1375 mm 之间, 土壤类型以紫色土、水稻土为主。

2.2 布点原则

土壤重金属调查通常采用网格均匀布点和典型污染区密点相结合的方法。前者便于估算污染面积, 后者用于估计重点污染区范围。针对重庆地形复杂、土种多且分布散的特点, 为使样品更有代表性, 调查布点根据各地土类分布、面积大小, 采用系统分层抽样方法, 同步采集土壤和作物样品。①按土壤类型布点, 每个区县按其面积最大的 1 ~ 2 个土类布点, 可以使整个抽样结果代表重庆大多数土壤类型。土壤类型包括酸性、中性和钙质紫色土、黄壤、冲积土、水稻土等主要农地土壤。②按照利用方式取样, 旱地、水田兼顾。③按照污染程度轻、中、重分别抽样。

2.3 样品采集

在重庆市耕地土壤中共布设 455 个样点, 土样于 2003 年采自深度为 0 ~ 20 cm 的耕层土壤, 取样点位分布如图 1 所示。



图 1 取样点位分布示意图

2.4 分析项目与测定方法

土壤样品经风干后过 1 mm 尼龙网筛备分析用, 重金属 Ni 采用盐酸-硝酸-高氯酸消煮后, 火焰原子吸收分光光度法测定。方法来源为 GB/T17139-1997, 监测范围为 0.3 ~ 10 mg/L, 最低检出限为 0.06 mg/L。

2.5 结果与分析比较

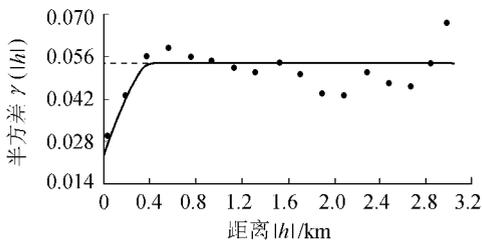
2.5.1 统计分析结果

重庆市耕地土壤中 Ni 的含量为 (32.85 ± 16.35) mg/kg, 最大值为 183.10 mg/kg; 最小值为 2.84 mg/kg; 变异系数为 49.77%, 属中等变异强度; 分布类型为对数正态分布。

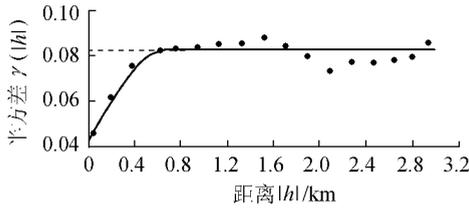
2.5.2 Ni 含量的空间变异特征分析

由于半方差函数的计算一般要求数据符合正态或近似正态分布, 否则可能存在比例效应, 根据检验, 重庆市耕地土壤中 Ni 含量在取对数后符合对数正态分布, 可以对重庆市耕地土壤 Ni 含量在取对数后采用半方差函数进行分析。同时, 根据秩序列地统计学方法通过标准秩转换, 标准秩克里格采用半方差函数进行分析。采用软件 VARIOWIN2.2 分别分析, 拟合了 Ni 含量的对数半方差函数 (图 2(a)) 和标准秩半方差函数 (图 2(b)), 共取得样点对数为 103285 对。

块金常数通常表示由于实验误差和小于实验采样尺度所引起的变异, 如果块金常数较大, 表示较小尺度上的某些过程影响不容忽视。一般以块金常数与基台值的比值作为衡量变量空间相关程度的尺度, 如果其值小于 25%, 为空间强相关, 介于 25% ~ 75% 之间为中等程度空间相关, 75% 以上为空间弱相关^[13]。从重庆耕地土壤中 Ni 含量的半方差图 (图 2) 及其半方差函数的拟合参数 (表 2) 可以看出, Ni 含量数据经对数转换及经标准秩转换后的块金常数/基台值分别为 82.08% 和 75.07%, 均属于空间弱相关。引起空间弱相关的原因可能是某些随机性因素, 如耕作、管理措施、种植制度、污染等人为活动的影响较大, 削弱了 Ni 的空间相关性。



(a)数据经对数转换



(b)数据经标准秩转换

图2 土壤中 Ni 含量的半方差

表2 重金属理论模型和半方差函数的拟合参数

数据转换法	理论模型	块金常数	块金常数/基台值/%	变程	基台值	均方根误差
对数转换	球状模型	0.256810	82.08	4.483	0.312876	14.3000
标准秩转换	指数函数模型	0.069419	75.07	4.483	0.092475	0.2508

2.5.3 Ni 含量的空间分布趋势

根据重庆市耕地土壤中 Ni 含量对数半方差及标准秩半方差函数的拟合参数,在 ArcGIS 软件的支持下,分别进行了 Ni 元素的克里格插值与标准秩克里格插值,结果如图 3、图 4 所示。

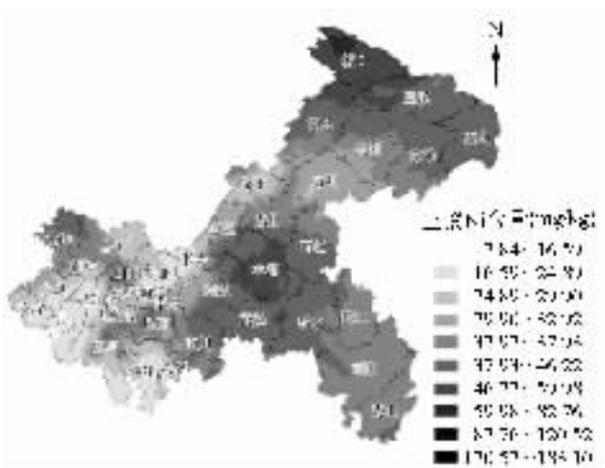


图3 重庆市土壤中 Ni 含量的克里格插值结果

由标准秩克里格插值结果逆转换至土壤中的 Ni 含量分布,得到重庆市耕地土壤 Ni 含量的空间分布,如图 5 所示。

为了判断哪个方法、模型最适合重庆市耕地土壤 Ni 含量数据的预测,利用 ArcMap 软件可以得到一些相关统计数字,如表 3 所示。

如果预测误差是无偏的,则平均预测误差应该接近于零。当比较模型时,应该寻找一个标准平均预

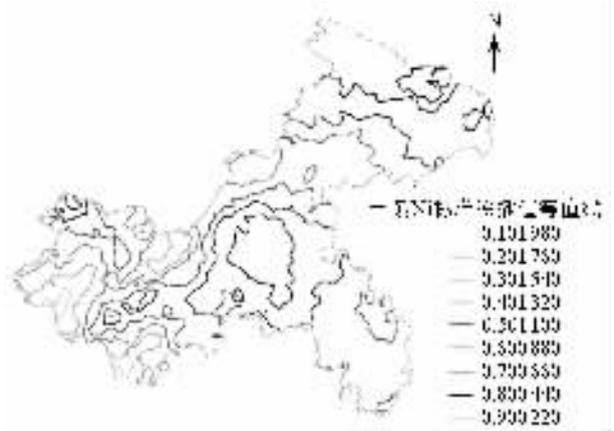


图4 Ni 的标准秩克里格插值等值线

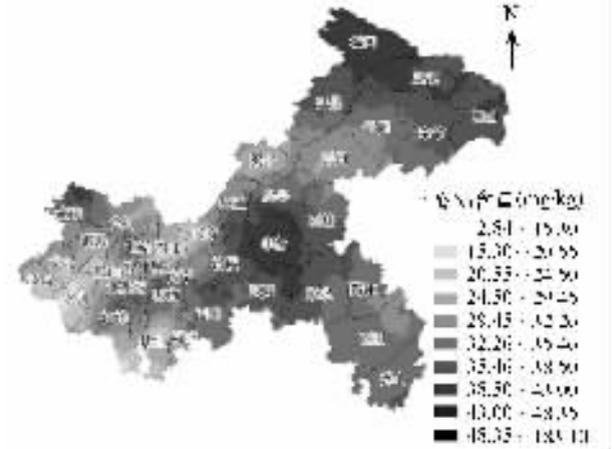


图5 由标准秩克里格插值结果逆转换得到的重庆市土壤中的 Ni 含量

表3 重金属方法模型的预测误差

方法	理论模型	标准平均预测误差	均方根预测误差	平均标准差	标准均方根预测误差
普通克里格法	球状模型	0.86330	14.3000	20.3400	0.6801
标准秩克里格法	指数函数模型	0.00035	0.2508	0.2746	0.9117

测误差接近于零、均方根预测误差较小、平均标准差接近于均方根预测误差、标准均方根预测误差接近于 1 的方法、模型。由表 3 可知,标准秩克里格方法对研究区域预测较为准确。从图 5 可以看出:重庆市耕地土壤中 Ni 含量的总体分布不规则,在图中表现出较多的岛状区;在东北部城口、巫溪,中部丰都,西北部潼南一带耕地土壤中 Ni 含量相对较高。

3 结语

地统计学是研究空间变异性比较稳健的工具,可最大限度地保留空间变异信息。该方法是以区域化变量为核心和理论基础,以空间相关和变异函数为基本工具的一种数学地质方法。它要求原始数据或经过转换的数据符合正态分布,以避免半变异函数产生比例效应,进而抬高基台值和块金值,使实验

变异函数发生畸变,增大估值误差,变异函数点的波动大,甚至会掩盖其固有的结构.秩序列地统计学方法将数据的不同类型、比例和精度综合起来,它所应用的标准化秩转换对需要转化的数据没有任何的特定要求,因此已成为解决高度不规则数据的另一种有效的地统计学方法.

重庆市耕地土壤中 Ni 含量为 (32.85 ± 16.35) mg/kg,变异系数为 49.77% 属中等变异强度.

从重庆耕地土壤中 Ni 含量的半方差图及其半方差函数的拟合参数可以看出,Ni 含量原始数据及数据经标准秩转换后的块金常数/基台值分别为 82.08% 和 75.07% 均属于空间弱相关.引起空间弱相关的原因可能是某些随机性因素,如耕作、管理措施、种植制度、污染等人为活动的较大影响,削弱了 Ni 的空间相关性.

当比较模型时,应该寻找一个标准平均预测误差接近于零、均方根预测误差较小、平均标准差接近于均方根预测误差、标准均方根预测误差接近于 1 的方法、模型.由重庆市耕地中重金属 Ni 的空间变异预测方法、模型的预测误差可知,标准秩克里格方法对研究区域预测较为准确.由标准秩克里格插值结果逆转换至土壤 Ni 的含量分布,得到重庆市耕地土壤的 Ni 含量空间分布图,可以看出:重庆市耕地土壤中 Ni 含量分布不规则,在图中表现出较多的岛状区,在东北部城口、巫溪,中部丰都,西北部潼南一带耕地土壤中 Ni 含量相对较高.

参考文献:

- [1] 王政权.地统计学及在生态学中的应用[M].北京:科学出版社,1999.
- [2] 徐吉炎,WEBSTER R.土壤调查数据地域统计的最佳估值研究——彰武县表层土全氮量的半方差图和块状 Kriging 估值[J].土壤学报,1983,20(4):419-430.
- [3] 雷志栋,杨诗秀,许志荣,等.土壤特性空间变异性研究[J].水利学报,1985(9):10-20.
- [4] JUANG K W,LEE D Y. A comparison of three kriging methods using auxiliary variadles in heavy-metal contaminated soil[J]. Environ Oual,1998,27:355-363.
- [5] JUANG K W,LEE D Y,CHEN Z S. Geostatistical cross-validation for additional sampling assessment in heavy-metal contaminated soil[J]. Chinese Inst Environ Eng,1999,9:89-96.
- [6] CAMBARDELLA C A,MOORMAN T B,NOVAK J M,et al. Field-scale variability of soil properties in central Iowa soils[J]. Soil Sci Soc Am J,1994,58:1501-1511.
- [7] LITAOR M I. Spatial analysis of plutonium in soils around Rocky Flats,Colorad[J]. Environ Qual,1995,24:506-516.
- [8] VAN MEIRVENNE M,PANNIER M J,HOFMAN G,et al. Regional characterization of the long-term change in soil organic

carbon under intensive agriculture[J]. Soil Use Manage,1996,12:86-94.

- [9] JOURNEL A G,DEUTSCH C V. Rank order geostatistics: A proposal for a unique coding and common processing of diverse data[C]//BAAFI E Y,SCHOFIELD N A. Geostatistics Wollongong '96. Proc 5th Int Geostatistics Congress, Dordrecht, the Netherlands:Kluwer Academic Publ,1997:174-187.
- [10] JUANG K W,LEE D Y,TIMOTHY R E. Using rank-order geostatistics for spatial Interpolation of highly skewed data in a heavy-metal contaminated site[J]. Journal of Environmental Quality,2001,30:894-903.
- [11] GOOVAERTS P. Geostatistics for natural resources evaluation [M]. New York:Oxford Univ Press,1997.
- [12] JUANG K W,LEE D Y. Comparison of three nonparametric kriging methods for delineating heavy-metal contaminated soils[J]. Environ Qual,2000,29:197-205.
- [13] 赵永存,汪景宽,王铁宇,等.吉林公主岭土壤中砷、铬和锌含量的空间变异性及分布规律研究[J].土壤通报,2002,33(10):372-376.

(收稿日期:2005-01-31 编辑:高建群)

· 简讯 ·

“水生生态系统修复与重建国际研讨会”在宁召开

“水生生态系统修复与重建国际研讨会”于 2005 年 11 月 12~16 日在河海大学召开.来自荷兰、加拿大、德国及国内的著名专家学者交流和讨论了以下议题:城市水循环中的复合污染问题及控制,健康水生生态系统的评价与构建,受损水生生态系统修复,微生物在水生生态系统修复中的作用等.中国科学院生态环境研究中心的曲久辉教授在学术报告中,提出了城市水循环复合污染的科学问题及其过程控制的理念,强调了人为干扰下污染效应不断积累、复合、放大所导致的生态健康风险,学术观点新颖,具有很强的科学前瞻性;来自荷兰奈梅亨 Radboud 大学水与社会中心的 Smits 教授从流域大尺度(基于生态系统的水管理)和微生态小尺度(水体自净)层面阐述了生态系统的管理方法;加拿大皇后大学土木工程系的 Anderson 教授以加拿大典型的城市与半城市区域为例,从概念和模型模拟等角度阐述了暴雨管理和污水就地处理不同管理措施带来的环境和经济效应,对我国城市生态系统的保护具有启发性;来自荷兰奈梅亨 Radboud 大学植物生态学系的 de Kroon 教授则从植物内部结构出发,阐述了节水灌溉的新思路;德国杜伊斯堡-埃森大学的 Jähnig 博士以不同的生物生态指标对河流生态状况进行了评价.研讨会期间,与会专家参观了设在河海大学的水文水资源及水利工程科学国家重点实验室,与河海大学相关研究人员进行了深入的交流和讨论.

(本刊编辑部供稿)