

地下水污染物浓度空间最优估值方法的实验模拟

吕连宏¹ 鞠硕华² 张 征¹ 池志淼¹ 尚晓颖¹ 李道峰¹

(1. 北京林业大学资源与环境学院 北京 100083 ; 2. 哈尔滨工业大学建筑设计研究院 黑龙江 哈尔滨 150006)

摘要 通过二维水动力弥散实验 模拟地下水污染物的运移过程 并选取反距离平方加权法、趋势面法、普通克立格法和方位-分维法对实验数据进行估值效果的比较。在实验尺度下的比较结果表明 普通克立格法是研究地下水污染物浓度空间分布的最优估值方法。

关键词 地下水 ; 污染物浓度 ; 空间最优估值 ; 实验模拟

中图分类号 : X523 ; X820.3 文献标识码 : A 文章编号 : 1004-693X(2006)06-0021-04

Experimental simulation on spatial optimum estimation method of contamination concentration in groundwater

LÜ Lian-hong¹ , JÜ Shuo-hua² , ZHANG Zheng¹ , CHI Zhi-miao¹ , SHANG Xiao-ying¹ , LI Dao-feng¹

(1. College of Natural Resources & Environment , Beijing Forestry University , Beijing 100083 , China ; 2. The Architectural Design & Research Institute of Harbin Institute of Technology , Harbin 150006 , China)

Abstract : The transport process of groundwater contamination was simulated by 2-dimensional hydrodynamic dispersion experiment. Four kinds of spatial estimation methods , including inverse distance square weight , trend surface , ordinary Kriging , and direction-dimension method , were chosen to compare the estimation veracity of the experimental data. The results in the scale of experiments show that ordinary Kriging method is the optimum method for estimating the spatial distribution of the contamination concentration in groundwater.

Key words : groundwater ; contamination concentration ; spatial optimum estimation ; experimental simulation

随着淡水资源紧缺状况日益加重 , 合理利用和保护地下水资源逐渐得到社会的广泛关注 , 水质模拟与预测是评价和保护地下水工作中不可或缺的重要程序。在地下水环境评价中 , 需要准确获得其中各种污染物的浓度分布状况。自然界中多孔介质的非均质各向异性及地下水环境的多种因素的复杂作用 , 导致了在其中的污染物迁移具有复杂的空间变异性 , 因此 , 如何利用有限的监测点来实现地下水污染物浓度分布的精确估值有重要的实际意义。目前 , 常见的空间估值方法主要有反距离平方加权法^[1-2]、趋势面法^[3-4]、地质统计学的普通克立格法^[1, 5-7]及分形估值方法^[8]等 , 这些估值方法在相关的研究领域都已经取得了一定的成果。

1 常见的空间估值方法

1.1 反距离平方加权法 (IDSW)

反距离加权法是最常用的空间内插方法之一 , 是一种与空间距离有关的插值方法。该方法以待估点与已知点之间的距离为权重 , 距离待估点越近的已知点赋予的权重越大 , 其权重贡献与距离成反比。该方法的估值公式

$$Z = \sum_{i=1}^n \frac{1}{(D_i)^p} Z_i / \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{(D_i)^p} \right) \quad (1)$$

$i = 1, 2, 3, \dots, n$

式中 : Z 为待估点的估计值 ; Z_i 为已知点的观测值 ; n 为参与估值的已知点的个数 ; D_i 为待估点与第 i

基金项目 : 教育部科学技术研究重点资助项目 (03028) ; 北京林业大学振兴计划人才培养专项课题 (200202013) ; 北京林业大学研究生培养基金资助项目 (04zy027)

作者简介 : 吕连宏 (1981—) , 男 , 北京人 , 硕士研究生 , 研究方向为环境模拟与评价。E-mail : lvlh@craes.org.cn

个已知点的距离; p 为距离的幂。

p 用来控制权重值随距离变化的速度, 当 p 增加时, 距离远的观测点的权重值会下降。当 p 值取 2 的时候, 该方法被称为反距离平方加权法。

1.2 趋势面法(GPI)

当某变量体现出在空间上的连续变化的趋势, 可以用一个平滑的数学平面加以描述, 即用已知采样点数据, 拟合出一个平滑的数学平面方程, 再根据该方程计算无测量值的点上的数据。这种只根据采样点的属性数据与地理坐标的关系, 进行多元回归分析得到平滑数学平面方程的方法, 称为趋势面法, 又称全局多项式内插法。

趋势面法用数学的方法把观测值划分为趋势部分和剩余值两部分:

$$Z(x, y) = \tau(x, y) + e \quad (2)$$

式中: $\tau(x, y)$ 为趋势值; e 为剩余值; x, y 为观测点的坐标。

1.3 普通克里格法(OK)

地质统计学是以区域化变量为核心和理论基础, 以多孔介质空间结构的变异函数为基本工具, 研究那些分布于空间中并显示出一定结构性和随机性的自然现象的一种数学地质方法。克里格法是应用地质统计学理论进行空间估值的方法, 它是在考虑了已知信息样品的形状、大小及其与待估点相互之间的空间分布位置等几何特征, 以及变量的空间结构信息后, 为了达到线性、无偏和最小估计方差的估计, 而对每一个已知值分别赋予一定的权系数, 最后用加权平均法对待估的未知量进行估计的方法。其中, 普通克里格法是克里格法中最基本的估值方法, 其估值的一般公式为

$$Z^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad (3)$$

$i = 1, 2, 3, \dots, n$

式中: $Z^*(x_0)$ 为待估点的估计值; $Z(x_i)$ 为 n 个已知点的观测值; λ_i 为赋予各个已知点的权重, 可由相应的克里格方程组计算得出。

1.4 方位-分维法(D-F)

分形在地质统计分析中的一类应用就是估值, 方位-分维估值法就是这方面研究的一部分, 它是分形理论与地质统计学结合应用的一种内插估值法, 是传统的“按方位取点加权法”的改进。方位-分维估值法是把分形的信息即分维, 引入到权函数中进行滑动加权平均的方法。

设已知某变量在平面上 n 个离散点 x_i 处的取值为 $Z(x_i)$, 预估计该变量在任一点 x 处的值 $Z(x)$, 以 x 点为原点建立一个坐标系, 并将每个象限分为

N_0 个等分, 即把整个坐标平面划分为 $4N_0$ 个方位, 然后在每一个方位中取一个距离点 x 最近的已知点 $x_j (j = 1, 2, 3, \dots, 4N_0)$, 最后取线性估计量作为 $Z(x)$ 的估值:

$$Z^*(x) = \sum_{j=1}^{4N_0} C_j Z(x_j) \quad (4)$$

式中: C_j 为权系数, 可由各个已知点与待估计点间的距离与分维计算求得。

2 实验数据的获取

2.1 二维水动力弥散实验

通过二维水动力弥散实验, 模拟地下水环境中污染物的运移过程。实验模拟装置主要由水箱和模拟箱两部分组成。水箱架设在高于模拟箱 1.5 m 左右的铁架上, 为了保持水箱液面的稳定性, 其进水口和出水口均安装玻璃转子流量计控制进水和出水的稳定。模拟箱长 200 cm, 宽 100 cm, 高 20 cm, 示踪剂投药点设在距入水口 30 cm、两侧各 50 cm 的位置, 箱内铺设多种粒径不同的石英砂。模拟箱是实验装置的主体部分, 其主要功能是模拟污染物在多孔介质中的弥散运动。

根据示踪剂投药点位置和石英砂铺设情况, 在投药点下游共设监测点 9×14 共 126 个, 监测点间距均为 10 cm, 投药点和监测点的布置见图 1。

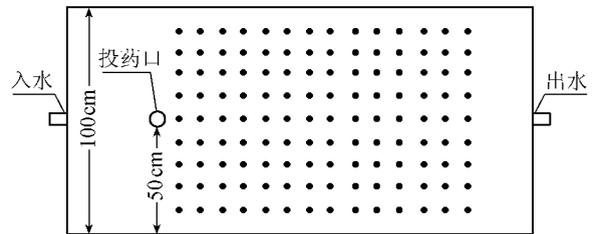


图 1 模拟装置监测孔分布

水流稳定时, 注意监测未投放示踪剂前模拟箱中各个监测点的背景电导率值。水流稳定后, 在投药点连续稳定投放 0.1 mol/L 的 NaCl 溶液作为示踪剂, 使用 DDS-11A 型电导率仪测量距石英砂表层 5 cm 深度的各监测点电导率, 每间隔 45 min 监测一次, 同时监测模拟箱中溶液的温度, 直至模拟箱内各个监测点的监测数据稳定为止。

实际测量得到的电导率值不仅与模拟箱中的 Cl^- 的浓度有关, 同时还受到溶液温度的影响, 以 25℃ 为基准温度, 通常每变化 1℃, 电导率变化 2%。将实测数据根据温度变化修正后, 通过电导率—NaCl 浓度标准曲线将测量电导率换算为浓度, 结果以 Cl^- 的浓度来表征。

2.2 实验数据的数理统计分析

根据实验结果, 选取其中一组浓度分布数据作

为分析对象,比较各种空间估值方法的估计效果。实验数据的数理统计分析见表1。从统计结果来看,实验数据实测的浓度很小,但变异系数超过了0.9,单纯从数值的角度反映了试验数据有较大的变异性。

表1 实验数据基本统计特征

示踪剂	最大值/ (mol·L ⁻¹)	最小值/ (mol·L ⁻¹)	均值/ (mol·L ⁻¹)	标准差	变异系数
Cl ⁻	0.005193	0.000063	0.000765	0.000697	0.911111

克立格方法估值的计算一般要求数据近似符合正态分布,分析表明原始数据属偏正态分布,经过对数变换后较为符合正态分布。

3 不同估值方法的估计精度比较

实验选择反距离平方加权法、趋势面法、普通克立格法及方位-分维法4种较有代表性的空间估值方法对实验数据进行空间估值。

具体做法是,在规则采样的9×14共126个点的采样方阵中按10%的去除率(统计意义上,下同)随机去除采样点上的监测值,用4种方法通过剩余点的监测值对去除点进行估值,然后通过估计值与实际监测值的比较,对所用估值方法的估值精度进行比较分析。

选用平均误差(ME)、均方根误差(RMSE)和误差标准差(SE)来评价估值精度。平均误差可用来衡量估计结果的无偏性,理想状态下其值为零,即平均误差越趋于零,估值效果越好;均方根误差,可用来衡量估计结果的有效性,其值越小,估计结果越好;误差标准差用来衡量估计结果的离散性,估计值离其均值越近,说明估值的稳定性越好,估计效果越好。

按上述方法,再分别在去除率为20%和30%条件下对去除点进行估值,通过估值效果的比较,验证在不同估值方法下,样本数量及密度对估计效果的影响。

反距离平方加权法、趋势面法和普通克立格法的计算过程可通过ArcGIS软件的地质统计分析模块完成,方位-分维法尚无成熟计算软件,该方法的计算由本课题组基于Matlab软件自行编写的计算程序完成。3种不同去除率条件下的估值结果见表2。

3.1 同一去除率下4种方法的估值精度比较

在去除率为10%情况下,方位-分维法的平均误差的绝对值偏大比其它方法的误差大一个数量级,估计值偏离真值较远;反距离平方加权法的平均误差的绝对值最小,显示出较好的估计无偏性,趋势面法的各项误差指标都相对较大,估计效果较差;反距离平方加权法和普通克立格法的均方根误差较小,

表2 不同去除率下4种方法的估计结果

10⁻⁴

去除率/%	误差指标	IDSW	GPI	OK	D-F
10	ME	0.1295	-0.6617	-0.3618	1.8300
	RMSE	2.5240	3.3790	2.6800	3.8050
	SE	2.6200	3.4500	2.7600	3.4700
20	ME	0.2870	-1.0600	0.0215	0.7270
	RMSE	3.6150	4.6340	3.2410	4.5180
	SE	3.6800	4.6000	3.3000	4.5500
30	ME	-0.7959	-0.6315	-0.2836	0.3820
	RMSE	6.5000	6.5700	5.4300	5.9800
	SE	6.5400	6.6200	5.4900	6.0400

估计有效性较高,误差标准差几种方法相差不大,反距离平方加权法和普通克立格法相比来说更好一些。在10%去除率下,总体来说,反距离平方加权法估计精度较高,普通克立格法稍次,其次是趋势面法,方位-分维法在此次估计中估计效果最差。

在去除率为20%的估值中,普通克立格法的平均误差明显地小于其它方法,其它两项误差指标也均为最小值,显现出明显的优越性;反距离平方加权法估计的无偏性、有效性及离散性仅次于普通克立格法,趋势法各项误差指标均为最大,估计精度较低,而方位-分维法则稍强于它。在20%去除率下,总体来说,普通克立格法估计精度较高,反距离平方加权法次之,其次是方位-分维法,趋势面法的估计效果最差。

在30%去除率下,普通克立格法的估计结果用各项指标来衡量都是最优的;方位-分维法仅次于它,趋势面法和反距离平方加权法的估值结果比较接近,估值精度都比较差。

3.2 不同去除率下4种方法的估值精度比较

不同去除率下4种方法估值精度排序见表3。

表3 4种估值方法的估值精度排序

去除率/%	10				20				30			
排序	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
	IDSW	OK	GPI	D-F	OK	IDSW	D-F	GPI	OK	D-F	GPI	IDSW

在去除率比较小、实测值相对较密的情况下,反距离平方加权法体现出一定的优越性,在去除率为10%时,其估计精度稍强于普通克立格法;当去除率达20%时,反距离平方加权法的估计精度则仅次于普通克立格法,随着去除率的进一步增大到30%的时候,反距离平方加权法就没有优势,估计效果变为最差。

趋势面法在3次估计中,都未能优于其他几种估计方法,它作为一种“全局”插值方法,适于做变化比较缓慢的,具有全局性趋势的变量的估值与预测,而对于地下水污染物浓度分布这种具有复杂空间变

异性的变量 则不能体现其空间估计的优越性。

方位-分维法在小去除率下估值效果一般,在去除率为 30% 时则现出较好的估计精度,各项误差指标仅差于普通克里格法。在实测点较少,受距离因素影响较小的情况下,对于地下水弥散运动这类问题的估值,方位-分维法也表现了一定的优越性。

普通克里格法在实验数据的空间估计中,体现了明显的优越性,其估计具有明显的无偏性、有效性和最小的离散性,这种优势随去除率的增大、已知观测值较少的条件下仍然存在,是本研究中各种空间估值方法中效果最优的。

4 结论与展望

a. 结论。①反距离平方加权法作为传统的空间估计方法,在实际监测值密度较大,待估计点较少时,有一定的应用价值;②趋势面法作为识别总体趋势的方法,不适于地下水渗流污染物这种空间变异性强烈的变量进行局部估值;③普通克里格法在地下水污染物弥散实验数据的估计中,表现出较好的估计效果,估计的无偏性、有效性及误差离散性都在一定程度上优于其他估值方法。尤其是在已知观测值较少的情况下,仍然具有较好的估值效果,体现了空间最优估值方法的价值,适合研究地下水污染物弥散运动;④方位-分维法也是一种较好的空间估计方法,在样本数量较小时往往显示出其空间估计的优越性,并对弥散等具分形特征的变量有很好的刻画。

b. 展望。①对比 4 种方法的估值精度选用的数据来自于实验室的模拟实验,研究尺度较小,下一

步应对地下水野外监测数据进行进一步的估值效果验证,探讨其尺度效应;②克里格法在地下水环境模拟与评价中具有广阔的应用空间,其它种类的克里格法如协同克里格法、泛克里格法、指示克里格法等,也有其应用的价值。

参考文献:

- [1] MUELLER T G, PUSULURI N B, MATHIAS K K, et al. Map quality for ordinary kriging and inverse distance weighted interpolation [J]. Soil Science of America Journal, 2004, 68 (6) : 2042-2047.
- [2] 朱求安, 张万昌. 流域水文模型中面雨量的空间插值 [J]. 水土保持研究, 2005, 12 (2) : 11-14.
- [3] 齐鑫山, 王晓明, 张玉芳. 环境监测数据空间分布规律的研究方法及应用——趋势面分析法 [J]. 环境保护, 2000 (10) : 20-22.
- [4] 方书敏, 钱正堂, 李远平. 甘肃省降水的空间内插方法比较 [J]. 干旱区资源与环境, 2005, 19 (3) : 47-50.
- [5] 龚元石, 廖超子, 李保国. 土壤含水量和容重的空间变异及其分形特征 [J]. 土壤学报, 1998, 35 (1) : 10-15.
- [6] CATTLE J A, MCBRANTNEY A B, MINASNY B. Kriging method evaluation for assessing the spatial distribution of urban soil lead contamination [J]. Journal of Environmental Quality, 2002, 31 : 1576-1588.
- [7] 刘英华, 张世熔, 张素兰, 等. 成都平原地下水硝酸盐含量空间变异研究 [J]. 长江流域资源与环境, 2005, 14 (1) : 114-118.
- [8] 肖朝明. 渗流水位空间变异性分析的分形估值方法 [D]. 北京: 北京林业大学, 2004.

(收稿日期 2005-10-11 编辑 舒建)

(上接第 17 页)

- [4] 唐剑武, 叶文虎. 环境承载力的本质及其定量化初步研究 [J]. 中国环境科学, 1998, 18 (3) : 7-9.
- [5] 崔凤军. 城市水环境承载力及其实证研究 [J]. 自然资源学报, 1998, 13 (1) : 15-17.
- [6] 朱一中, 夏军, 谈戈. 关于水资源承载力理论与方法的研究 [J]. 地理科学进展, 2002, 21 (2) : 180-188.
- [7] 赵明华, 周鹏. 威海市水资源承载力与经济协调发展的协调策略研究 [J]. 水利经济, 2004, 22 (4) : 18-21.
- [8] 彭静, 廖文根, 何少苓, 等. 珠江三角洲水环境承载能力与协同调控初探 [C] / 水资源及水环境承载能力. 北京: 中国水利水电出版社, 2002 : 183-190.
- [9] 左其亭. 城市水资源承载能力——理论方法·应用 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2005.

- [10] 龙江, 张立. 水环境承载力的含义及定量指标 [C] / 水资源与承载能力学术研讨会论文集. 北京: 中国水利水电出版社, 2002 : 29-32.
- [11] 惠泱河, 蒋晓辉, 黄强, 等. 水资源承载力指标体系研究 [J]. 水土保持通报, 2001, 21 (1) : 30-34.
- [12] 贾振邦, 赵智杰, 李继超, 等. 本溪市水环境承载力及指标体系 [J]. 环境保护科学, 1995, 21 (3) : 8-11.
- [13] 中国 21 世纪议程管理中心, 中国科学院地理科学与资源研究所. 可持续发展指标体系的理论与实践 [M]. 北京: 社会科学文献出版社, 2004.
- [14] 彭静, 廖文根. 对水环境研究的认识及展望 [J]. 中国水利学报, 2004, 35 (4) : 271-275.
- [15] 高吉喜. 可持续发展理论探索——生态承载力理论、方法与应用 [M]. 北京: 中国环境科学出版社, 2001.

(收稿日期 2005-08-01 编辑 舒建)