

利用辅助变量对污染土壤锌分布的克里格估值^{*}

姜 勇¹ 李 琪^{1,2} 张晓珂^{1,2} 梁文举^{1**}

(¹ 中国科学院沈阳应用生态研究所, 沈阳 110016; ² 中国科学院研究生院, 北京 100039)

【摘要】采用协同克里格及与回归相结合的克里格方法,以36个下层(10~20 cm)土壤锌数据为目标变量、另36个下层土壤锌数据为校验数据、72个上层(0~10 cm)土壤锌为辅助变量,对沈阳市南郊某有色金属加工厂附近农田0.1 mol·L⁻¹ HCl浸提态土壤锌进行插值分析,并对这两种利用辅助变量的克里格方法在土壤锌空间分布研究中的适用性进行评价。结果表明,与回归相结合的克里格的估值效果明显优于协同克里格及普通克里格法。结合回归模型的变异函数理论模型决定系数较大、残差较小,估值精度比普通克里格法提高4%,且基于回归克里格的土壤锌分布图与利用72个样点普通克里格插值图具有高度的相似性。而协同克里格与普通克里格相比未表现出明显优势。借助辅助变量,采用基于回归模型的克里格方法是进行土壤重金属空间分布估值的一种有效方法。

关键词 土壤污染 锌 空间变异 克里格

文章编号 1001-9332(2006)01-0097-05 **中图分类号** S153 **文献标识码** A

Kriging prediction of soil zinc in contaminated field by using an auxiliary variable. JIANG Yong¹, LI Qi^{1,2}, ZHANG Xiaoke^{1,2}, LIANG Wenju¹ (¹*Institute of Applied Ecology, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China; ²Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China). -Chin. J. Appl. Ecol., 2006, 17(1):97~101.*

In this study, two kriging methods using an auxiliary variable, *i.e.*, ordinary cokriging (OCK) and ordinary kriging combined with regression (OKR) were used for the interpolation of soil zinc (0.1 mol·L⁻¹ HCl extractable Zn) in a 17.6 hm² field at the vicinity of a metal manufacturer in southern suburb of Shenyang, China. A total of 36 measured data of soil Zn content at the depth of 10~20 cm (subsoil Zn) was selected as target variable, 72 measured data at the depth of 0~10 cm (topsoil Zn) as auxiliary variable, while other 36 measured data of subsoil for validation. The two interpolation methods were evaluated for the suitability of estimating the spatial distribution of soil Zn by using an auxiliary variable. The results showed that OKR gave better results than OCK or ordinary kriging (OK). The theoretical model obtained from OKR exhibited higher coefficient of determination and lower residual sums of squares than that from OCK or OK. The prediction accuracy of soil Zn was increased by 4% with OKR than with OK. The map of soil Zn obtained with OKR was quite similar with that obtained with OK, by using 72 measured Zn data. However, no advantages were found between OCK and OK. It was suggested that OKR was an effective way to estimate the distribution of soil heavy metals by using auxiliary variables.

Key words Soil pollution, Zinc, Spatial variability, Kriging.

1 引言

土壤重金属空间分布特征研究对于土壤的污染风险评价及土壤修复具有重要意义^[4,5,11,12,20,25]。克里格方法利用半方差分析得出属性数据的空间相关结构,通过未知样点周围样点实测数据的平均权重系数对未知样点估值,为土壤属性空间分布提供了一种线性无偏估值的方法,广泛应用于土壤理化及生物学性质空间分布研究^[6,10,15,21,22]。一种变量(目标变量)空间分布克里格估值的精度主要受取样点数和密度的影响^[2,16],增加样点密度耗费大量的人力和时间;在目标变量数据有限的情况下,利用较易获得的辅助变量进行克里格估值,在一定程度上

可以提高估值精度,节省费用^[2,18,26]。协同克里格法通过目标变量与辅助变量之间交互半方差函数的计算,获得未知样点的空间信息,从而可提高估值的质量^[7,9,26];与线性回归相结合的克里格法在存在辅助变量的前提下,通过目标变量与辅助变量间的线性回归模型,获得目标变量的空间数据,然后直接用普通克里格法计算半方差函数并进行空间分布估值^[18,19]。本文通过对沈阳市某有色金属加工厂附近农田土壤的取样调查,采用普通克里格、协同克里格

* 国家重点基础研究发展规划项目(2005CB121105)和辽宁省自然科学基金资助项目(20052013)。

** 通讯联系人。

2005-02-21 收稿, 2005-07-05 接受。

及与回归相结合的克里格方法对田间尺度下土壤有效锌含量的空间分布进行分析,比较不同克里格方法的估值精度,探讨利用辅助变量研究点源污染条件下土壤重金属空间分布的特征,旨在为土壤重金属污染状况调查及污染防治等提供依据。

2 研究地区与研究方法

2.1 自然概况

样地位于下辽河平原沈阳市南郊某有色金属加工厂北部的草甸土水稻田,处于金属加工厂下风向,地势平坦,面积 $200\text{ m} \times 880\text{ m}$ (17.6 hm^2)($41^{\circ}41'N, 123^{\circ}23'E$),属暖温带半湿润大陆性气候,年平均气温 $7\sim 8^{\circ}\text{C}$,年降雨量 $650\sim 700\text{ mm}$, $\geq 10^{\circ}\text{C}$ 活动积温 $3\,300\sim 3\,400^{\circ}\text{C}$,无霜期 $147\sim 164\text{ d}$ 。2003年以前种植水稻,2004年全部种植大豆。有色金属加工厂主要生产铜、镍、钛、镉、钛、铬、锆等有色金属,具有50多年的历史。以往研究表明,厂区附近土壤有效Zn含量很高^[14,17]。样地 $0\sim 20\text{ cm}$ 土层全C和全N平均含量分别为 $16.40\text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ 和 $1.40\text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$,土壤pH值为5.65,土壤容重为 $1.25\text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$,年施N量 $225\text{ kg} \cdot \text{hm}^{-2}$ 、施P量 $60\text{ kg} \cdot \text{hm}^{-2}$ 、施K量 $112\text{ kg} \cdot \text{hm}^{-2}$ 。

2.2 样本采集与测定方法

2004年11月以 $40\text{ m} \times 80\text{ m}$ 网格,分 $0\sim 10\text{ cm}$ (上层)和 $10\sim 20\text{ cm}$ (下层)两层取样,每层取72个土样(图1)。规则选取36个下层土壤样点作为校验样点,对有关克里格插值分析的结果进行校验。土壤有效Zn采用 $0.1\text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ HCl

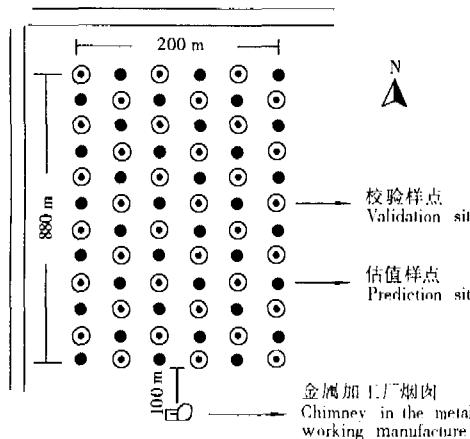


图1 田间取样点分布

Fig.1 Distribution of sampling sites in the field.

表1 土壤Zn数据的描述性统计分析及正态分布检验

Table 1 Descriptive statistics on the prediction data set of soil Zn and its K-S test

有效Zn Available Zn	样本数 n	平均值 Mean (mg·kg ⁻¹)	标准差 SD (mg·kg ⁻¹)	最小值 Min. (mg·kg ⁻¹)	最大值 Max. (mg·kg ⁻¹)	中数 Median (mg·kg ⁻¹)	变异系数 CV (%)	偏度 Skewness	K-S值 K-S value
下层1 Subsoil 1	36	10.786	2.661	7.466	16.955	9.760	24.67	0.786	0.234
下层1+回归 Subsoil 1+ regression	72	10.637	2.610	6.950	16.950	9.785	24.54	0.665	0.061
回归值 Regression value	72	10.624	2.550	6.764	15.729	10.014	24.00	0.511	0.152
下层2 Subsoil 2	72	10.624	2.711	6.914	16.955	9.631	25.58	0.739	0.124
上层 Topsoil	72	11.908	2.622	7.940	17.160	11.280	22.02	0.511	0.154

浸提,原子吸收分光光度法测定,测定波长为 700 nm ^[23]。

2.3 克里格估值方法及数据处理

采用普通克里格、协同克里格法及与回归相结合的克里格法对土壤有效Zn空间变异进行插值分析^[18]。步骤如下:1)利用某些已知数据获得目标变量与辅助变量之间的线性回归关系式;2)对于只获得辅助变量数据的样点,利用线性回归模型回归得到目标变量数据;3)利用目标变量实测数据和回归得到的数据,通过半方差函数对目标变量的空间相关性进行定量分析;4)利用普通克里格方法对目标变量的空间分布进行估计。对几种克里格方法得到的变异函数理论模型进行F检验^[24]。采用SPSS 10.0及Microsoft Excel对数据进行处理。地统计学分析采用GS+软件^[8]。

3 结果与分析

3.1 经典统计学特征

表1为土壤有效Zn含量的经典统计学特征。其中,下层1为72个样点中规则选取的36个进行地统计学分析的样点;下层1+回归为36个样点加上根据上层土壤Zn进行线性回归得到的36个样点,其中下层Zn(y)与上层Zn(x)的线性回归关系式为 $Y = 0.9093X + 2.2474$ ($R^2 = 0.8845$, $P < 0.001$, $n = 72$);回归值为全部通过上层土壤Zn进行线性回归得到的72个数据;下层2为全部72个样点。K-S检验结果表明,各组数据均符合正态分布。下层各处理土壤有效Zn含量的变异系数为24.00%~25.58%。

3.2 变异函数

表2为各变量半方差变异函数的理论模型。用球状模型、指数模型、线性有基台模型及高斯模型进行拟合发现,高斯模型具有最大决定系数的最小残差,故选用高斯模型进行拟合,其一般公式为:

$$\gamma(h) = 0, h = 0;$$

$$\gamma(h) = C_0 + C(1 - e^{-\frac{h^2}{a^2}}), h > 0.$$

拟合结果表明,理论模型的F检验均达到0.01水平显著。其中A(包含36个样点的下层土壤Zn半方差模型)、C(下层36个样点与72个上层土壤Zn的交互半方差模型)的决定系数和F值较小,残差

较大;B(包含36个下层样点实测值加上36个回归值得到的72个土壤Zn数据)的决定系数和F值较大,残差较小;B与D(72个下层土壤Zn实测值)的决定系数、F值及残差的数值较接近。A、B、D的块金方差较接近,用72下层土壤Zn样点(D)进行半方差分析,其变异函数理论模型的变程大于用其他3种方式进行分析的变程,用下层Zn与上层Zn交互方差进行分析,则理论模型的变程变小。

表2 理论模型的相关参数及F检验

Table 2 Parameters for the fitted theoretical model and its F test

变量 Variable	块金值 Nugget (C_0)	基台值 Sill ($C_0 + C$)	变程 Range $A(m)$	$C/(C_0 + C)$ (%)	决定系数 R^2	残差 RSS	F检验 F test
A	1.05	23.09	649	95.45	0.963	14.60	75.19**
B	1.12	23.23	663	95.18	0.987	6.10	463.13**
C	0.61	21.21	622	97.10	0.958	17.60	65.89**
D	1.00	33.00	793	96.97	0.988	6.82	502.23**
E	1.15	22.29	635	94.84	0.983	8.26	352.72**

A:下层36个样点Zn Subsoil Zn of 36 points; B:下层36样点+36样点回归值 Subsoil Zn of 36 measured points and 36 points from regression model; C:下层36个样点与上层Zn的交互 Cross-semivariogram of 36 point subsoil Zn vs. topsoil Zn; D:下层72个样点 Subsoil Zn with 72 points; E:上层72个样点 Zn Topsoil Zn with 72 points. ** $P < 0.01$. 下同 The same below.

3.3 克里格估值的交叉检验

表3为不同克里格法的估计值与原数据进行 $Y = aX + b$ 线性回归模型的交叉检验。在利用不同克里格方法对下层土壤Zn进行的估值中,A的均方差最大,决定系数最低;其次为C;B回归模型的均方差较小、决定系数较大;相对而言,B与D的均方差、决定系数数值较接近。与用36个点(A)进行下层土壤Zn的克里格估值相比,利用与回归相结合的估值方法(B)的估值精度提高4%。利用36个实测Zn数据结合线性回归关系及与上层土壤Zn数

表3 克里格估值的交叉检验

Table 3 Cross-validation between estimated and actual Zn values

变量 Variable	回归系数 Regression coefficient	均方差 Standard error	Y截距 Y intercept	决定系数 R^2	增加精度 Increase of accuracy(%)
A	0.999	0.105	-0.024	0.728**	-
B	0.993	0.067	0.061	0.757**	4.0
C	0.897	0.093	1.348	0.730**	0.3
D	0.998	0.058	0.008	0.810**	11.3
E	0.993	0.067	0.071	0.757**	-

据进行的协同克里格估值的精度(C)与直接用36个数据进行估值(A)的精度无显著差异(表3)。

图2为不同克里格方法估值的方差比较。下层土壤Zn克里格方法中,B和D的估值方差大小及分布格局较接近,这2种方法的克里格估值方差分布与上层土壤Zn的克里格估值方差大小及分布格局(E)也较相似。利用36个样点实测值进行克里格估值的方差(A)大于利用回归与实测相结合(B)及利用72个样点(D)进行克里格估值的方差。

3.4 土壤有效锌含量空间分布格局

利用36个样点结合回归数据(B)与利用72个样点(D)进行克里格估值的下层土壤Zn含量的空间分布格局具有较高的相似性;利用协同克里格方法得到的土壤有效Zn的空间分布格局(C)与利用72个样点估值(D)的土壤有效Zn空间分布格局也较相似,同时与上层土壤Zn分布格局(E)也有较高的相似性。利用36样点(A)与利用72个样点(D)得到的土壤有效Zn的空间分布图也有较高的相似性,但A中有效Zn含量为 $9 \sim 10 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$,所占面积略大于D(图3)。

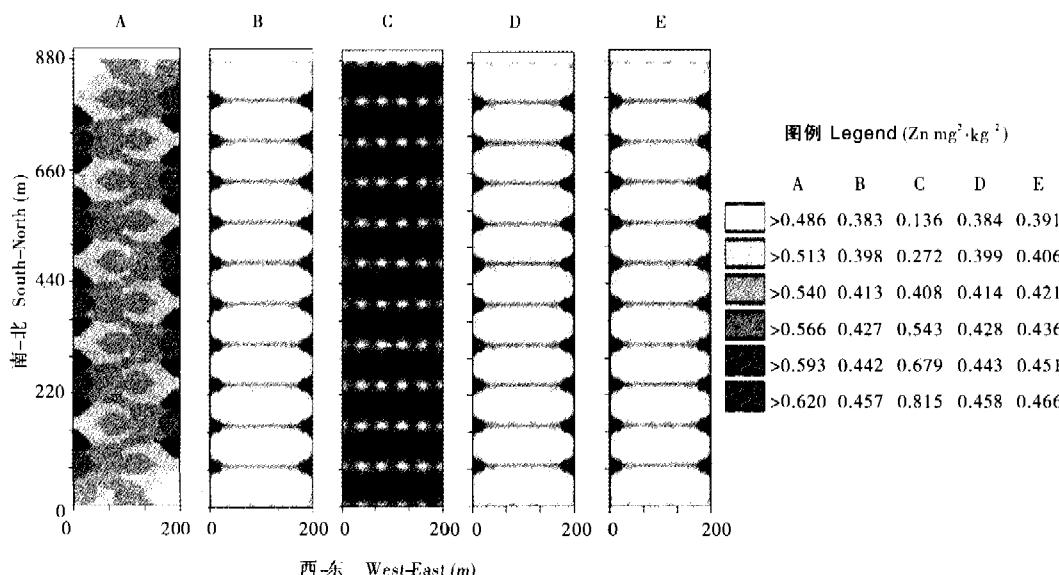


图2 不同克里格插值方法的估值方差

Fig. 2 Standard deviation under different kriging methods.

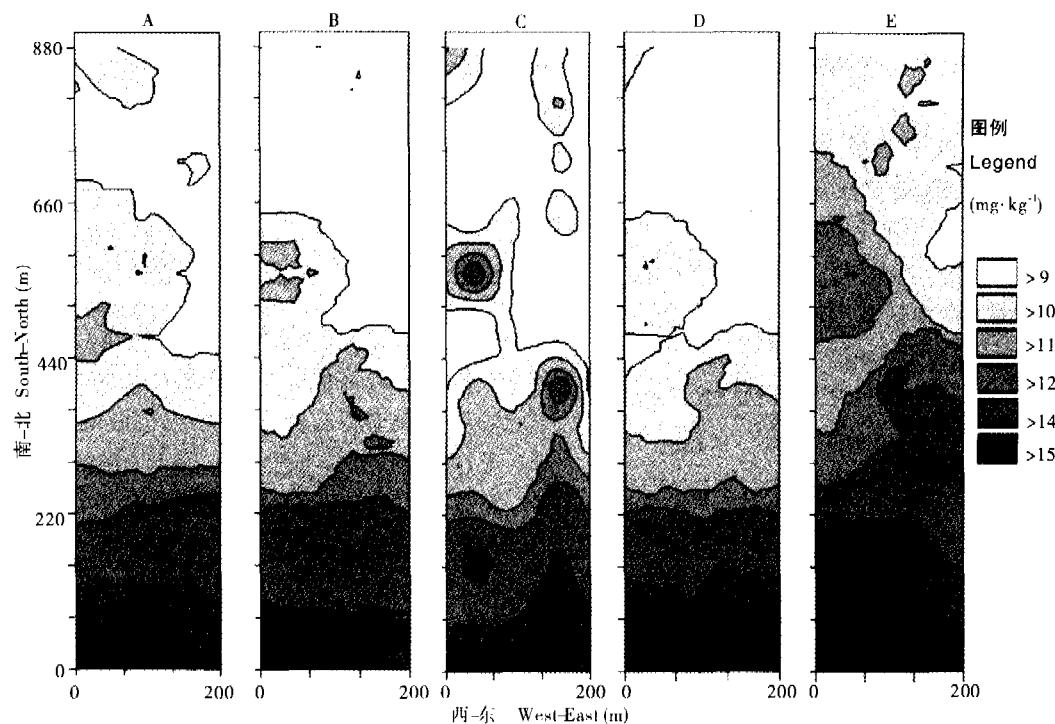


图3 不同克里格插值方法土壤有效锌的空间分布

Fig.3 Spatial distribution of soil available Zn using various kriging interpolation methods.

4 讨 论

上下层土壤有效Zn数据有很好的相关性($R = 0.940, P < 0.001, n = 72$)。若目标变量与辅助变量的相关系数在0.5以上,利用协同克里格法可以提高估值精度^[27](本研究中下层土壤Zn为目标变量,上层土壤Zn为辅助变量);而相关系数在0.7以上时,利用辅助变量与目标变量的回归模型获得数据进行克里格估值,效果优于有限数据普通克里格估值结果^[11]。因此,本研究适合选取辅助变量对目标变量进行协同克里格及与回归相结合的克里格分析。

用高斯模型对下层土壤Zn变异函数进行拟合表明,以36个样点为目标变量的下层土壤Zn变异函数理论模型的基台方差、变程、结构系数等均无明显差异,但结合回归模型得到的变异函数的决定系数较高,残差大大降低。克里格插值分析的结果也很好地验证了利用辅助变量回归模型在增加估值精度方面的优势,并有效地降低了克里格估值的方差。目标变量结合辅助变量回归模型得到的有效Zn含量空间分布图不仅与以36个点为目标变量的空间分布格局具有高度的相似性,且十分接近用72个实测点进行估值的结果。因此,目标变量结合辅助变量回归模型大大提高了理论模型的拟合程度,提高了估

值的精度。Juang等^[18]的研究也表明,用20个土样(0~15 cm)全Zn实测值结合35个用全Pb回归得到的全Zn含量的克里格估值精度,比仅用20个实测值进行普通克里格估值的精度提高了40%,比用协同克里格法的精度提高了约7%,同时,采用与回归相结合的克里格法与用55个实测样点得到的土壤Zn的空间分布图具有高度相似性。本研究利用上下层土壤有效Zn在空间分布上的相关关系,采用线性回归模型,结合目标变量实测数据进行克里格估值,达到了较好效果。Knotters等^[19]及Wu等^[26]也报道了采用与回归相结合的方法明显优于协同克里格法的研究实例。在实际应用中,可以利用土壤重金属复合污染的原理^[3, 18]以及土壤重金属与土壤有机C、pH、阳离子交换量(CEC)、土壤颗粒组成^[26]之间的相关关系,以这些容易得到的土壤理化指标为辅助变量,对重金属含量(目标变量)进行克里格估值。当然,目标变量与辅助变量的回归模型不仅仅局限于线性回归模型,辅助变量也不局限为1个^[19],只要辅助变量与目标变量回归模型的决定系数较高,能较真实地反映目标变量的数值,就可以借助辅助变量来增加目标变量的估值点,从而提高克里格估值的精度和效果。

相对而言,采用协同克里格法进行空间变异分析在提高估值精度方面效果并不明显,且本研究中

的协同克里格法的估值方差略有增加。一般情况下,采用协同克里格法可在一定程度上提高对目标变量的估值精度,但协同克里格法需满足两个无偏条件^[13],即权重系数 $\sum \lambda_i = 1$, $\sum \lambda_g = 0$,由于 λ_g 可能会 <0 或 >1 ,因此协同克里格估值的波动可能较高,致使协同克里格插值图出现“噪声(noise)”,这种现象在本研究中表现较明显。对于协同区域化变量,如果全部交互协方差函数和交互变异函数都与一个基本模型成正比,这些变量则称为本征协同区域化变量。此时,如果每个变量数据构型相同,则某一点上的协同克里格估计值与用普通克里格估计值一致。因此,只有当某一变量采样点明显不足时,才适合采用协同克里格方法进行估值^[24]。当然,协同克里格法估值的精度还受目标变量和辅助变量之间关系及各自的自然属性影响,如Chien等^[7]以大量土壤颗粒分布数据为辅助变量,对台湾地区中部10 km²区域土壤交换性盐基总量(SEB)进行协同克里格估值,其精度和效果明显优于仅采用SEB数据进行的普通克里格估值。

不同克里格插值方法土壤有效锌的空间分布显示,土壤有效Zn含量与离金属加工厂的距离成反比,离烟囱越近土壤有效Zn含量越高,等值线图的密度也相对越大,说明工厂对农田锌的污染可能主要来自于粉尘污染^[14]。而各种克里格方法均有效地反映了农田受点源污染的基本情况,达到较好效果。

5 结 论

不同克里格方法空间插值分析可基本反映农田土壤有效Zn的空间分布特征,其中以目标变量实测数据结合回归模型进行的克里格分析在提高估值精度方面优于协同克里格方法。目标变量结合辅助变量回归模型得到的土壤有效Zn空间分布与目标变量数据量增加1倍条件下的分布具有极高的相似性,说明与回归模型相结合的克里格方法在土壤污染调查及重金属空间分布研究中具有较好的实用性。

参考文献

- 1 Ahmed S, De Marsily G. 1987. Comparison of geostatistical methods for estimating transmissivity using data on transmissivity and specific capacity. *Water Resour Res*, 23(9):1717~1737
- 2 Andronikov SV, Davidson DA, Spiers RB. 2000. Variability in contamination by heavy metals: Sampling implication. *Water Air Soil Poll*, 120(1):29~45
- 3 Barcan V, Kovnatsky E. 1998. Soil surface geochemical anomaly around the copper-nickel metallurgical smelter. *Water Air Soil Poll*, 103(1~4):197~218
- 4 Brus DJ, de Grujter JJ, Walvoort DJJ, et al. 2002. Mapping the probability of exceeding critical threshold for cadmium concentrations in soils in the Netherlands. *J Environ Qual*, 31(6):1875~1884
- 5 Cahoon LB, Ensign SH. 2004. Spatial and temporal variability in excessive soil phosphorus levels in eastern North Carolina. *Nutr Cycl Agroecosyst*, 69(2):111~125
- 6 Chen F-S(陈伏生), Zeng D-F(曾德慧), Chen G-S(陈广生). 2004. Effect of land use change on spatial distribution pattern of soil total nitrogen in Keerqin sandy land. *Chin J Appl Ecol*(应用生态学报), 15(6):953~957(in Chinese)
- 7 Chien YJ, Lee DY, Guo HY, et al. 1997. Geostatistics analysis of soil properties of mid-west Taiwan soils. *Soil Sci*, 162(4):291~298
- 8 Gamma Design Software. 2000. GS⁺: Geostatistics for the Environmental Sciences 5.1 User's Guide. Michigan, USA.
- 9 Goovaerts P. 1994. Study of spatial relationships between two sets of variables using multivariate geostatistics. *Geoderma*, 62(1~3):93~107
- 10 Guo X-D(郭旭东), Fu B-J(傅伯杰), Ma K-M(马克明), et al. 2000. Spatial variability of soil nutrients based on geostatistics combined with GIS—A case study in Zunhua City of Hebei Province. *Chin J Appl Ecol*(应用生态学报), 11(4):557~563(in Chinese)
- 11 Holmgren GGS, Meyer MW, Chaney RL, et al. 1993. Cadmium, lead, zinc, copper and nickel in agricultural soils of the United States of America. *J Environ Qual*, 22(2):335~348
- 12 Hu K-L(胡克林), Zhang F-R(张凤荣), Lü Y-Z(吕贻忠), et al. 2004. Spatial distribution of concentrations of soil heavy metals in Daxing County, Beijing. *Acta Sci Circ*(环境科学学报), 24(3):463~468(in Chinese)
- 13 Isaaks EH, Srivastava RM. 1989. An Introduction to Applied Geostatistics. New York: Oxford University Press.
- 14 Jiang Y(姜勇), Liang W-J(梁文举), Wen D-Z(闻大中). 2003. Middle- and Micro-elements in Cultivated Soils of Shenyang Suburbs. Beijing: China Agricultural Science and Technology Press. (in Chinese)
- 15 Jiang Y(姜勇), Zhang Y-G(张玉革), Liang W-J(梁文举), et al. 2003. Spatial variability of soil nutrients in cultivated surface soil of Sujiatun District, Shenyang City. *Chin J Appl Ecol*(应用生态学报), 14(10):1673~1676(in Chinese)
- 16 Jiang Y(姜勇), Zhuang Q-L(庄秋丽), Liang W-J(梁文举), et al. 2005. Application of spatial variability in long-term site-specific observatory study of soil properties and sampling strategy. *Chin J Soil Sci*(土壤通报), 36(4):432~438(in Chinese)
- 17 Jiang Y, Liang WJ, Wen DZ, et al. 2005. Spatial heterogeneity of DTPA-extractable zinc in cultivated soils induced by city pollution and land use. *Sci Chin Ser C*, 48(supp.):82~91
- 18 Juang KW, Lee DY. 1998. A comparison of three kriging methods using auxiliary variables in heavy-metal contaminated soils. *J Environ Qual*, 27(2):355~363
- 19 Knotters MD, Brus DJ, Oude Voshaar JH. 1995. A comparison of kriging, co-kriging and kriging combined with regression for spatial interpolation of horizon depth with censored observations. *Geoderma*, 67(3):227~246
- 20 Lark RM, Ferguson RB. 2004. Mapping risk of soil nutrient deficiency or excess by disjunctive and indicator kriging. *Geoderma*, 118(1):39~53
- 21 Liang WJ, Li Q, Jiang Y, et al. 2003. The effect of cultivation on the spatial distribution of nematode trophic groups in black soil. *Pedosphere*, 13(2):97~102
- 22 Meul M, van Meirvenne M. 2003. Kriging soil texture under different types of nonstationarity. *Geoderma*, 112(3):217~233
- 23 Page AL, Miller RH, Keeney DR. 1982. Methods of Soil Analysis. Part 2. Chemical and Microbiological Properties(2nd Ed). Wisconsin, USA: American Society of Agronomy, Inc. and Soil Science Society of America, Inc.
- 24 Wang Z-Q(王政权). 1999. Geostatistics and Its Application in Ecology. Beijing: Science Press, 140~141(in Chinese)
- 25 White JG, Welch RM, Norvell WA. 1997. Soil zinc map of the USA using geostatistics and geographic information systems. *Soil Sci Soc Am J*, 61(1):185~194
- 26 Wu J, Norvell WA, Hopkins DG, et al. 2003. Improved prediction and mapping of soil copper by kriging with auxiliary data for cation-exchange capacity. *Soil Sci Soc Am J*, 67(3):919~927
- 27 Yates SR, Warrick AW. 1987. Estimating soil water content using cokriging. *Soil Sci Soc Am J*, 51(1):23~30

作者简介 姜 勇,男,1968年生,博士,研究员,主要从事土壤生态学和土壤性质空间变异性研究,发表论文70余篇。Tel:024-83970359;E-mail:jiangyong@iae.ac.cn

责任编辑 肖 红