

# 再谈环境质量值的计算\*

刘 多 森

(中国科学院南京土壤研究所)

同电子计算机的发展相伴随,多元分析近十余年来发展很快,在理论上已经成熟.多元分析在环境科学、特别是环境质量评价中具有广阔前途.多元分析的分支——主组元分析(也称为主成分分析),可用于分辨环境的污染类型及相应的污染过程<sup>[1]</sup>.聚类分析、判别分析等多元分析方法,也可用于环境质量的分类.

多元分析的计算工作量很大.如无电子计算机,仅靠人工笔算是很难完成、甚至是不可能完成的.同时,多元分析对环境域某一点位的质量缺乏直观的表示.“人们总想以最适当的方式来画出一幅简化的和易领悟的世界图象”.不断寻求环境域点位质量的比较合理、简洁的表达式,正是人们刻画“世界图象”的尝试之一.

1978年盛夏,笔者在评述目前几个使用较多的环境域点位质量表达式的基础上,提出了如下公式<sup>[2]</sup>:

$$A_i = -\sqrt{\sum_{j=1}^m x_{ij}^2}$$

式中  $A_i$  为某环境域(气域、水域或土域)第  $i$  点位质量相对值,简称为环境质量值;  $i$  为环境域内的点位编号;  $j$  为所研究的有害物编号;  $m$  为有害物种类的总个数;  $x_{ij}$  为环境域内第  $i$  点位的第  $j$  有害物含量的标准化值,即其含量的观测值与该有害物最大允许含量之比.

广东省湛江地区环境保护办公室在《一九七八年漠阳江水质初步调查报告》一文中,使用了笔者提出的  $A_i$  式.结果说明,该式基

本上是适用的.同时,我们注意到,姚志麒同志提出的大气污染超标指数 ( $I_2$ )<sup>[3]</sup>,美国密特大气质量指数及其极限指数<sup>[4]</sup>,加拿大大气质量综合指数<sup>[4]</sup>,从数学上说,都可以抽象为本文讨论的  $A_i$  式.上述情况说明,  $A_i$  式在实践上是可行的.实践上可行的事物,必然有其内在的理论意义.

作为拙作<sup>[2]</sup>的续篇,本文将进一步阐述  $A_i$  值内在的理论意义:

## (一) $A_i$ 值的线性代数学意义

向量的模,表示了向量的大小,可视作为向量的长度测量.在定义了内积的实数域线性空间——欧几里得空间,向量  $X_i$  的模或长度可定义为:

$$\|X_i\| = \sqrt{(X_i, X_i)}$$

如果向量  $X_i$  为  $m$  维,则:

$$\|X_i\| = \sqrt{\sum_{j=1}^m x_{ij}^2}$$

第  $i$  点位的  $m$  个有害物含量标准化值,可表示成一个  $m$  维向量  $X_i$ <sup>[2]</sup>,简称为“有害物向量”.显然,

$$A_i = -\|X_i\|$$

因此,  $A_i$  值的线性代数学意义,即为  $m$  维欧几里得空间内第  $i$  个“有害物向量”的模的负值.  $A_i$  的绝对值表示了“有害物向量”的大小,亦即综合表示了该点位各有害物含量标准化值的大小.

\* 南京大学数学系唐述钊、夏定中老师曾对本文提出宝贵意见,谨此致谢.

## (二) $A_i$ 值的统计学意义

假设, 第  $i$  个随机样本的个体数为  $m$ , 样本内的个体分别为  $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}$ , 则该样本的方差  $S_i^2$  为:

$$S_i^2 = \frac{\sum_{j=1}^m (x_{ij} - \bar{x}_i)^2}{m-1}$$

$$= \frac{\sum_{j=1}^m x_{ij}^2 - \frac{(\sum_{j=1}^m x_{ij})^2}{m}}{m-1}$$

故有:

$$(m-1)S_i^2 + \bar{x}_i \sum_{j=1}^m x_{ij} = \sum_{j=1}^m x_{ij}^2$$

显然,

$$\sqrt{(m-1)S_i^2 + m\bar{x}_i^2} = \sqrt{\sum_{j=1}^m x_{ij}^2}$$

当  $m \gg 1$  时, 则有:

$$\sqrt{m(S_i^2 + \bar{x}_i^2)} = \sqrt{\sum_{j=1}^m x_{ij}^2}$$

第  $i$  点位的  $m$  个有害物含量标准化值  $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}$ , 可视为一个由  $m$  个数字构成的数组, 简称为“有害物数组”。该数组与统计学上的随机样本的概念不同, 但我们仍然可以研究它的  $m$  个数字的均值、方差和分布。显然,

$$A_i = -\sqrt{(m-1)S_i^2 + m\bar{x}_i^2}$$

$$\approx -\sqrt{m(S_i^2 + \bar{x}_i^2)}$$

因此,  $A_i$  值的统计学意义, 即为第  $i$  个“有害物数组”的标准差  $S_i$  和均值  $\bar{x}_i$  的单调函数;  $A_i$  的代数值随  $S_i$  及  $\bar{x}_i$  的增加而减小。值得注意的是, 决定  $A_i$  值大小的因子——方差和均值, 恰恰又是决定数组分布的两个重要参量。

姚志麒同志提出的大气质量指数 ( $I_1$ ), 表示为某点位各有害物含量标准化值的最大值与均值之积的平方根<sup>[3]</sup>, 从而减弱了 Nemerow 表达式<sup>[5]</sup>给最大值以过高的权的缺

点。但是, 姚的表达式同 Nemerow 的表达式一样, 在均值以外的构造单元中, 仅仅利用了最大值的信息而没有充分利用各个有害物的数据提供的全部信息, 从而都不能分辨各有害物含量标准化值的分布不同而最大值与均值又分别相等的任意二个点位的质量。与此相反,  $A_i$  式对这一情况仍然可以分辨。 $A_i$  式与 Nemerow 式在这一情况下的表现, 笔者曾作过讨论<sup>[2]</sup>, 不再赘述。

姚志麒式 ( $I_1$ )、Nemerow 式、简单加和式及下文的加权式的共同点, 恰恰在于都没有与决定“有害物数组”分布的重要参量——方差联系起来, 因而都与“有害物数组”的分布无关。

## (三) $A_i$ 值的生物学意义

“经验始终是数学构造的物理效用的唯一判据。”经验说明, 人群对有害物的感受(毒害反应)概率并不是有害物剂量的线性函数, 而是指数  $\approx 1$  的指数函数; 而且当有害物剂量尚不特别高时, 有害物剂量的指数  $> 1$ 。所谓经验, 无非是人们对某种现象的统计分布和变差经长期实践留在头脑中的影象, 因而经验是有统计意义的。这里需要说明, 上述的“指数”, 是数学概念, 而不是人们在环境质量评价中惯用的“污染指数”、“环境质量指数”等词汇中的“指数”概念。

Miettinen 正确地指出, 以有害物剂量为横轴, 以人群感受%为纵轴, 则剂量-感受曲线可表示成高斯积分分布曲线。

高斯积分分布曲线的拐点的纵坐标为概率 50%, 其曲线形态类似于极谱分析的波形, 在拐点以下为上凹形, 在拐点以上为上凸形。因此, 在人群的 50% 出现毒害以前, 剂量-感受曲线的斜率是逐渐增加的, 亦即这一区间的人群感受%是有害物剂量的指数函数, 且此指数  $> 1$ 。作为权宜方法, 我们可近似地将上述区间的有害物含量标准化值的指数取为 2。人群感受%低于 50% 的区间, 恰

恰代表了环境保护工作中实际遇到的绝大多数情况。因为人群的50%以上出现毒害的情况是十分罕见的。

$A_i$  值决定于各有害物含量标准化值的2次方。因此,  $A_i$  值的生物学意义, 即其绝对值近似地反映了人群或生物群落50%出现毒害以前对该点位各有害物的综合感受概率的相对大小。

有些研究者在其环境域点位质量表达式中, 愿意使用加权式的构造单元:

$$\sum_{j=1}^m (\omega_j x_{ij})$$

对于权的考虑, 确实是有参考意义的思想。然而, 第  $j$  有害物的权系数  $\omega_j$  的求解方法, 多种多样, 真是众说纷纭。同时, 我们注意到, 第  $j$  有害物的权系数  $\omega_j$  实际上随该有害物含量标准化值  $x_{ij}$  的增加而增加, 亦即  $\omega_j$  并不是一个常量。笔者接受了上述构造单元的合理因素, 扬弃了求解权系数  $\omega_j$  的过程, 而将权系数视为有害物含量标准化值  $x_{ij}$  的本身。因为,  $A_i$  式的构造单元可视为:

$$\sum_{j=1}^m x_{ij}^2 = \sum_{j=1}^m (\omega_j x_{ij})$$

此处有:

$$\omega_j = x_{ij}$$

鉴于  $A_i$  值具有上述三方面的理论意义, 因而  $A_i$  值的计算方法将可能成为用单一数值表达环境域点位质量的比较合理的方法之一。诚然, 将客观自然界刻画成某种主观图象的合理性, 总与一定的范畴条件相关联, 而且往往与其简化程度相矛盾。用任何单一数值表达环境质量的所有方法, 都是简化的。作为这些方法之一,  $A_i$  值的表达方法也是简化的。因此,  $A_i$  值内在的理论意义, 并不能使其上升到完美无缺的境地。甚至可以说, 在用单一数值表达环境质量的所有方法中, 尽管有些方法可能是简洁、直观和比较合理的, 但都不可能尽善尽美。

### 参 考 文 献

- [1] 刘多森, 主组元分析在分辨土壤类型及风化-成土过程上的应用(以水稻土为例). 土壤学报, 16 2, 177 页, 1979.
  - [2] 刘多森, 环境质量的数值计算. 环境科学研究与进展, 科学出版社, 1980.
  - [3] 姚志麒, 关于采用环境质量指数的几个问题. 环境科学, 2, 1979.
  - [4] 唐永鑫, 环境质量综合指数简介. 环境科学, 2, 74, 1979.
  - [5] Nemerow, N. L., Scientific Stream Pollution Analysis. 220, Scripta Book Company, Washington, D. C., 1974.
- ~~~~~
- (上接第 78 页)
- Letl., 8, 91(1975).
  - [19] Cardweell, T. J. et al., *Anal. Chim. Acta*, 85, 415(1976).
  - [20] Radecki, A. et al., *J. Chromatog.*, 151(2), 259 (1978).
  - [21] Ahmad, M. and Aziz, A., *J. Chromatog.*, 152 (2) 542(1978).
  - [22] Tavlaridis, A. et al., *Z. Anal. Chem.*, 293(3), 211; 293(4), 290(1978).
  - [23] Tavlaridis, A. et al., *Z. Anal. Chem.*, 292(3), 199(1978).
  - [24] Kleinmann, A. and Neeb, R., *Z. Anal. Chem.*, 285(2), 109(1977).
  - [25] 木藤 晃、中根正典、三宅義造, 分析化学(日), 26, 19 (1977).
  - [26] Chau, Y. K. et al., *Anal. Chim. Acta*, 85, 421 (1976).
  - [27] 中国科学院兰州化学物理所, 环境科学, 3, 35 (1977).
  - [28] Chau, Y. K., et al., *Anal. Chem.*, 47(13), 2279 (1975).
  - [29] Talmi, Y. and Bostick, D. T., *Anal. Chem.*, 47(13) 2145(1975).
  - [30] Andrae, M. O., *Anal. Chem.*, 49, 820(1977).
  - [31] Dilli, S. and Patsalides, B., *J. Chromatog.*, 130, 251(1977).
  - [32] 王顺荣、徐福正、周恒福、金秀兰, 环境科学, 3, 11 (1980).
  - [33] Shimoishi, Y. and Tari, K., *Anal. Chim. Acta*, 100, 65(1978).
  - [34] 王顺荣、徐福正、周恒福, 分析化学, 3, 236(1980).