

非平稳型区域土壤汞含量的各种估值方法比较

胡克林, 李保国, 吕贻忠, 张凤荣

(中国农业大学资源与环境学院, 北京 100094)

摘要: 准确地描述土壤重金属含量的空间分布对于防治土壤重金属污染是十分重要的。以分布类型为对数正态分布, 同时具有一阶和二阶趋势效应的土壤重金属 Hg 为例, 分别应用普通克立格法(OK), 简单克立格法(SK), 对数正态克立格法(LNK), 泛克立格法(UK), 析取克立格法(DK)和距离反比权重法(IDW)等 6 种内插方法对其进行了估值, 综合比较了各种内插方法的预测误差、统计特征值及插值结果分布图。结果表明一阶趋势的 OK 方法比 0 阶和二阶趋势的 OK 方法插值结果要好。一阶趋势的 OK 方法中半方差函数模型选用高斯型的比选用球状和指数型的插值效果相对要好。由于“压缩”作用, 原始数据经过对数转换后的插值效果要比没有经过转换的插值方法要差。带趋势项的插值方法要比不带趋势项的插值方法要好, 其中一阶趋势的 UK 方法插值效果最好, 而 IDW 方法最差。

关键词: 非平稳; 土壤重金属; 地质统计学; 插值方法

中图分类号: X53 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2004)03-0132-06

Comparison of Various Spatial Interpolation Methods for Non-stationary Regional Soil Mercury Content

HU Ke-lin, LI Bao-guo, LÜ Yi-zhong, ZHANG Feng-rong

(College of Resources and Environmental Sciences, China Agricultural University, Beijing 100094, China)

Abstract: Accurate delineating of the spatial distribution of soil heavy metal content is essential for pollution assessment and remediation. The objective of this paper is to evaluate various spatial interpolation methods, including ordinary Kriging (OK), simple Kriging (SK), lognormal Kriging (LNK), universal Kriging (UK), disjunctive Kriging (DK) and inverse distance weighting interpolation (IDW) for estimating soil surface Hg content with lognormal distribution, the linear and second-order polynomial trend, and to determine the optimal interpolation method. The predicted errors, statistical feature values and prediction maps obtained by different interpolation methods were compared. The result indicated that first-order trend OK method performed better than both zero and second-order OK methods. Within the method of first-order trend OK, Gaussian semi-variogram model performed better than both the spherical and exponential models. The method using transformed data performed worse than the methods without data transformation because of the ‘distortion’ effect arising from log transformation. Those with trend effect were better than those without trend effect. First-order trend UK method is the best method among the six methods studied, while the IDW method is the least.

Key words: non-stationary; soil heavy metal; geostatistics; spatial interpolation method

区域土壤重金属含量分布十分复杂, 能否准确地描述土壤重金属含量的空间分布对于防治土壤重金属污染是十分重要的。地质统计学方法是一种最优的空间插值方法, 已被广泛地应用到具有区域化变量特征的土壤学、环境科学等领域^[1, 2]。国外已有一些学者对地质统计学中的一些插值方法进行了比较研究^[3~6], 发现距离反比权重法(IDW)比三次样条插值效果要好, 普通克立格法(OK)比 IDW 方法好, 当原始数据服从对数正态分布时, 对数正态克立格法(LNK)比 OK 方法能显著地改善估值精度, 克立格联合回归法比协同克立格法(COK)好, 这些研究所比较的对象主要是平稳型区域化变量。

也有少数研究者对非平稳型区域化变量的估值方法进行了比较研究^[7, 8], 结果表明 COK 方法插值效果最好, 其次是多项式插值, 通常具有一阶或二阶

趋势效应的泛克立格法(UK)比 OK 方法要好; IDW 方法插值效果不如线性的 OK 方法, 析取克立格法(DK)插值效果最差。尽管他们考虑了变量的非平稳性特点, 但仅限于一种类型的非平稳性(一阶或二阶趋势效应), 很少有人对同时具有一阶和二阶趋势效应的区域化变量进行估值方法的比较研究。

本文以分布类型为对数正态分布, 同时具有一阶和二阶趋势效应的土壤重金属 Hg 为例, 分别应用各种插值方法对其进行估值, 并对各种插值方法进行比较和评价, 旨在为此类复杂变量插值方法的选取提供一些建议和参考。

收稿日期: 2003-08-18; 修订日期: 2003-10-28

基金项目: 国家重点基础研究发展规划项目(G1999011810)

作者简介: 胡克林(1971~), 男, 湖北钟祥人, 博士, 副教授, 主要从事土壤空间变异和溶质运移研究。

1 基本原理

通常在比较各种地统计学插值方法时,主要是对其半方差函数模型进行检验,但到目前为止还没有一个行之有效的直接检验方法.地统计学者多采用一种间接的方法,即将建立的半方差函数模型与克立格预测方法相结合进行检验.这种模型检验方法被称为交叉验证法或刀切(Jackknife)法.它的基本思路是依次假设每一个实测点未被测定,由所选定的半方差函数模型,根据 $N - 1$ 个其它测定点数据用特定的克立格方法估算这个点的值.设测定点的实测值为 $Z(x_i)$,预测值为 $Z'(x_i)$,二者的标准化值分别为 $Z_1(x_i)$ 和 $Z_2(x_i)$,则它们的平均误差 ME (Mean Error)、标准化平均误差 MSE (Mean Standardized Error)、平均标准误差 AS (Average Standard Error)、均方根误差 RMSE (Root Mean Square Error) 和标准化均方根误差 RMSSE (Root Mean Square Standardized Error) 可分别表示为:

$$ME = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [Z(x_i) - Z'(x_i)] \tag{1}$$

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [Z_1(x_i) - Z_2(x_i)] \tag{2}$$

$$ASE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| Z'(x_i) - \left| \sum_{i=1}^N Z'(x_i) \right| / N \right|^2} \tag{3}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [Z(x_i) - Z'(x_i)]^2} \tag{4}$$

$$RMSSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [Z_1(x_i) - Z_2(x_i)]^2} \tag{5}$$

判断半方差函数模型及其参数是否合适可按以下标准综合进行:

①平均误差 ME 的绝对值最接近于 0; ②标准

化平均误差 MSE 最接近于 0; ③均方根误差 RMSE 越小越好; ④平均标准误差 ASE 与均方根误差 RMSE 最接近,如果 $ASE > RMSE$,则过高估计了预测值,反之如果 $ASE < RMSE$ 则过低估计了预测值; ⑤标准化均方根误差 RMSSE 最接近于 1,如果 $RMSSE > 1$,则过低估计了预测值,反之,则过高估计了预测值.

如果区域化变量为非平稳型,则还应考虑插值方法对区域总体及局部趋势的反映效果.

2 样品及数据处理

在面积为 $1\,039\text{ km}^2$ 的北京市大兴区采用 GPS 定位,共随机布设了 70 个取样点,每一样点在直径 100 m 范围内选择 3 ~ 5 个 0 ~ 20 cm 耕层土样混合,按四分法取分析样品 1.5 kg.采样时间为 2000 年 5 月底 6 月初.土样经风干后过 0.25 mm 的尼龙网筛,分别测定了重金属 Cu, Zn, Pb, Cr, Cd, Ni, As, Se, Hg 和 Co 的含量,其中 Hg 用王水水浴加热消解^[9],然后用原子荧光光谱仪(海光 AFS-230)测定.数据经探索分析发现 Hg 的含量分布比较复杂,所以本研究以 Hg 为例,对各种插值方法进行比较.采用了 ArcGIS 8.1 平台上的地统计学模块进行数据处理及图形绘制.

3 结果与分析

3.1 土壤重金属 Hg 的统计特征值

由表 1 的偏度和峰度系数可知,土壤重金属 Hg 基本服从对数正态分布.大兴区土壤重金属 Hg 的平均含量为 0.079 mg/kg ,高于该区的背景值含量 0.047 mg/kg ^[10],说明大兴区土壤重金属 Hg 含量受到了一定程度的污染,主要是由于该区长期引用了凉水河和新凤河的污水灌溉所致,但没有超过国家规定的二级标准限值^[11] 1.0 mg/kg .

表 1 大兴区表层土壤重金属 Hg 的统计特征值/ $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$

Table 1 The statistical feature values of soil heavy metal Hg in Daxing county / $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$

项目	样点数	分布类型	最小值	最大值	均值	背景值	二级标值	偏度系数	峰度系数	标准差	变异系数
Hg	70	对数正态	0.031	0.198	0.079	0.047	1.0	0.20	2.25	0.036	0.45

3.2 土壤重金属 Hg 的趋势效应分析

图 1 中, X 轴表示正东方向, Y 轴表示正北方向, Z 轴表示各点位测定值的大小;左后投影面上的浅色线表示东—西向全局性的趋势效应变化情况,右后投影面上深色线表示的是南—北向全局性的趋势效应变化情况.从图 1 可知,大兴区土壤重金属

Hg 的含量分布具有明显的趋势效应,东西方向呈线性或一阶趋势,南北方向呈二阶多项式变化.因此,它同时具有一阶和二阶趋势效应.

3.3 土壤重金属 Hg 的各种估值方法比较

3.3.1 土壤重金属 Hg 的各种趋势的比较

为了比较不同趋势效应的插值情况,假定在半

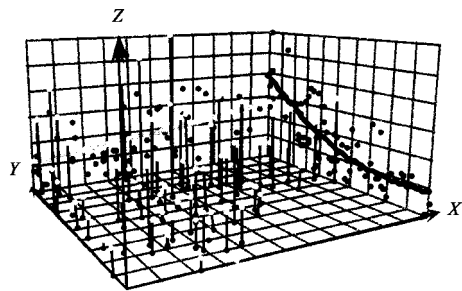


图 1 Hg 的趋势效应
Fig.1 Surface trend of soil Hg

方差函数均拟合为高斯型模型和内插方法均为普通克立格法的情况下,内插的趋势效应分别选 0(无趋势) 1 阶(线性)和 2 阶(二阶多项式).则趋势效应的插值差异体现在各种误差的大小(表 2)和对区域总体及局部趋势的综合反映效果 2 个方面(图 2).

从表 2 可以看出,平均误差 ME 最小的是一阶和二阶趋势效应的内插方法;RMSSE 最接近于 1, MSE 和 RMSE 最小及 ASE 与 RMSE 最接近的均是采用一阶趋势效应的内插方法;综合比较各种误差的大小看,一阶趋势效应的内插方法要比其余 2

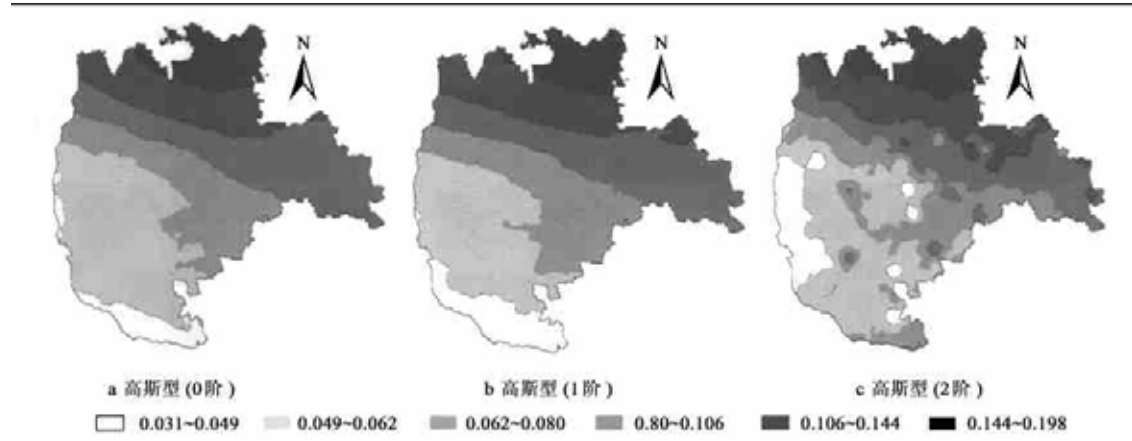


图 2 土壤重金属 Hg 含量 (mg/ kg)采用不同趋势(阶数)的分布
Fig.2 Distribution of soil Hg content(mg/ kg) using different surface trends in Daxing county

表 2 土壤重金属 Hg 的半方差函数模型及各种内插方法的预测误差

Table 2 Types of semivariogram and predicted errors of different interpolation methods for soil heavy metal Hg

模型 类型	内插 方法	趋势 阶数	变程/ km		长轴方 位角	C	C ₀	C ₀ /(C ₀ + C)	预测误差				
			长轴	短轴					ME	RMSE	ASE	MSE	RMSSE
高斯	OK	0	35.78	24.55	283.1	1.36 E-03	5.15 E-04	0.274	3.63 E-04	0.02668	0.02471	- 8.12 E-03	1.072
高斯	OK	一阶	32.64	13.77	90.9	2.38 E-04	5.79 E-04	0.709	1.47 E-04	0.02616	0.02555	7.78 E-03	1.022
高斯	OK	二阶	1.82	1.82	同性	6.05 E-04	6.05 E-07	0.001	1.39 E-04	0.02844	0.02598	8.35 E-03	1.086
球状	OK	一阶	32.65	15.20	92	2.84 E-04	5.24 E-04	0.649	- 1.48 E-05	0.02624	0.02546	2.26 E-03	1.028
指数	OK	一阶	32.68	15.17	274.5	3.62 E-04	4.50 E-04	0.554	- 1.09 E-04	0.0264	0.02541	1.08 E-04	1.036
高斯	LNK	0	35.79	24.56	288.8	0.172	9.09 E-02	0.346	- 3.07 E-04	0.02659	0.03276	7.23 E-03	0.8292
高斯	LNK	一阶	9.79	9.79	同性	1.38 E-02	0.101	0.880	- 6.21 E-04	0.02678	0.02894	- 0.0154	0.9301
高斯	SK1	无	35.78	24.55	283.1	1.36 E-03	5.15 E-04	0.274	- 1.57 E-04	0.02674	0.02465	1.99 E-05	1.075
高斯	SK2	对数	35.79	24.56	288.8	1.72 E-01	9.09 E-02	0.346	- 3.40 E-04	0.02677	0.02745	- 0.0174	1.018
高斯	UK1	常量	35.78	24.55	283.1	1.36 E-03	5.15 E-04	0.274	- 3.63 E-04	0.02668	0.02471	- 8.12 E-03	1.072
高斯	UK2	一阶	28.13	14.23	92.2	2.64 E-04	5.66 E-04	0.681	1.20 E-03	0.02539	0.02678	0.0505	0.9812
高斯	DK1	0	35.84	22.96	287.3	0.842	0.476	0.361	- 4.31 E-04	0.02686	0.02576	- 0.0110	1.033
高斯	DK2	常量	35.84	22.96	287.3	0.842	0.476	0.361	4.36 E-04	0.02684	0.02576	- 0.0111	1.032
高斯	DK3	一阶	25.92	11.99	284.5	0.2436	0.794	0.765	- 8.24 E-04	0.02627	0.0253	- 0.0300	1.035
IDW									- 2.04 E-03	0.0282			

种要好.

从图 2 可以看出,二阶趋势效应的内插方法突出了研究区内局部信息的反映,而对总体趋势的反映不够好,如对 Hg 最低含量级别(0.031 ~ 0.049

mg/kg) 在最南边的分布基本没有反映,而在最西边的反映比较突出,另外对 Hg 含量的各种级别在局部地方均有所反映.由于二阶趋势效应的内插方法采用二次多项式来拟合南北方向趋势,对于在最南边 Hg 含量最低的部分面积没有被反映出来.虽然 0 阶和一阶趋势效应的内插方法忽视了一些分布面积较小的局部信息,但对总体的反映比较好.在上述例子中,综合各种误差大小和反映区域与局部趋势的效果两方面看,一阶趋势的内插结果最好.

3.3.2 各种半方差函数模型的比较

为了比较不同类型的半方差函数模型拟合的精

度情况,假定在一阶全局趋势和考虑异向性的条件下,均采用普通克立格内插方法,只是拟合的半方差函数理论模型分别为球状、指数型和高斯型.从表 2 可以看出,3 种模型拟合出的异向性长、短轴的变程都非常接近,基台值($C + C_0$)也相差不大,指数模型拟合出的长轴方位角为 274.5° ,高斯型和球状模型长轴方位角很相近约为 91° .它们的块金值 C_0 与基台值之比 $[C_0/(C + C_0)]$ 的顺序为高斯模型(0.709) > 球状模型(0.649) > 指数模型(0.554),均大于 0.5 ,说明随机因素引起的土壤重金属 Hg 含量的空间异质性程度要大于自相关部分,其中高斯模

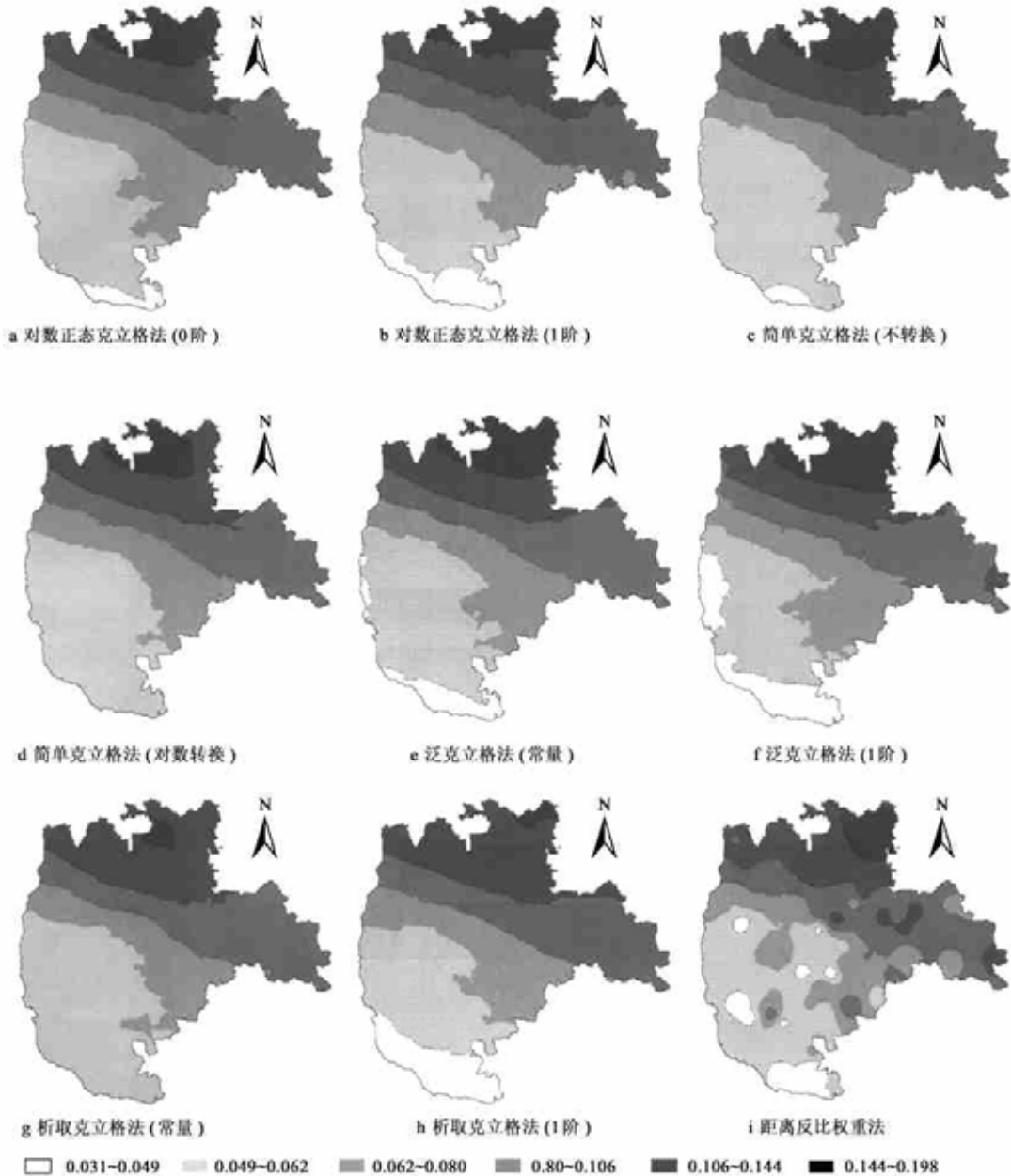


图 3 土壤重金属 Hg 含量 (mg/kg) 采用不同内插方法的分布

Fig. 3 Distribution of soil Hg content (mg/kg) using different interpolations in Daxing county

型对随机因素引起的空间变异反映相对较好,而指数模型反映较弱。

从各种模型交互验证的结果来看,指数模型的各项误差(除 MSE 外)均比球状模型的大,其中 ME 最小的是球状模型;RMSSE 最接近于 1, RMSE 最小及 ASE 与 RMSE 最接近的是高斯模型;综合 3 种模型对实测数据的反映和误差大小分析,高斯模型相对较好。

3.3.3 各种内插方法的比较

由表 2 可知,单纯地应用 LNK 方法进行估值,其各项预测误差(除 RMSSE 外)均比一阶趋势的 OK 方法要大,而且其 ASE(0.3276)远大于 RMSE(0.02659),RMSSE 远小于 1,导致了该方法过高地估计了预测值,从图 3 也可以看出,其最低含量级别 0.031 ~ 0.049 mg/kg 的分布面积较小。如果应用 LNK 方法再加上一阶趋势进行估值,虽然同样地存在对预测值估计过高的问题,但其估值效果比单纯的 LNK 方法要好一些,但其最高含量级别 0.144 ~ 0.198 mg/kg 的分布面积较小,导致出现这种现象的原因可能是数据经对数转换后,原始数据被“压缩”,减弱了趋势效应,它们的内插结果比简单克立格法(SK)还差。

由于 SK 方法假设实测数据的均值是已知的,从各项预测误差和图 3 可知,其插值结果明显比 OK 方法差,另外经对数转换后的 SK 方法比未转换的 SK 方法还差,经对数转换后的 SK 方法插值图中

最低含量级别的面积分布基本没有,其最高含量级别的面积分布也比较少,导致这种现象的原因同样是数据的“压缩”作用。

由图 3 可知,常量趋势的 UK 方法与一阶趋势的 OK 方法的插值效果基本相同,但前者的各项预测误差(除 ASE)均比后者大;虽然一阶趋势的 UK 方法的各项预测误差(除 RMSE 和 RMSSE)均比一阶趋势的 OK 方法大,甚至比常量趋势的 UK 方法差,但它对东西方向总体趋势的反映比较好,在东西方向其最低含量级别和含量为 0.106 ~ 0.144 mg/kg 的面积分布均比较明显。

0 阶和常量趋势的 DK 方法的各项预测误差基本相同,但它们的插值效果均不如一阶趋势的 DK 方法,前者最低含量级别的面积分布基本没有,而且它们的最高含量级别的面积分布均很少,所以它们的插值效果比较差,甚至不如没有趋势效应的 OK 方法。

图 3 还给出了距离反比权重法的插值图,虽然该方法对局部现象的反映比较好,但对总体趋势的反映却比上述各种方法均差,而且其 ME 和 RMSE 也均较其它内插方法差。

图 4 给出了实测数据和各种内插方法经交叉验证后的 7 项统计特征值。从图中可以看出,各种内插方法与实测数据的均值基本相同,中值基本相近;最小值比实测数据的大,最大值和标准差比实测数据的小;25 %分位数比实测数据的大,而 75 %分位数

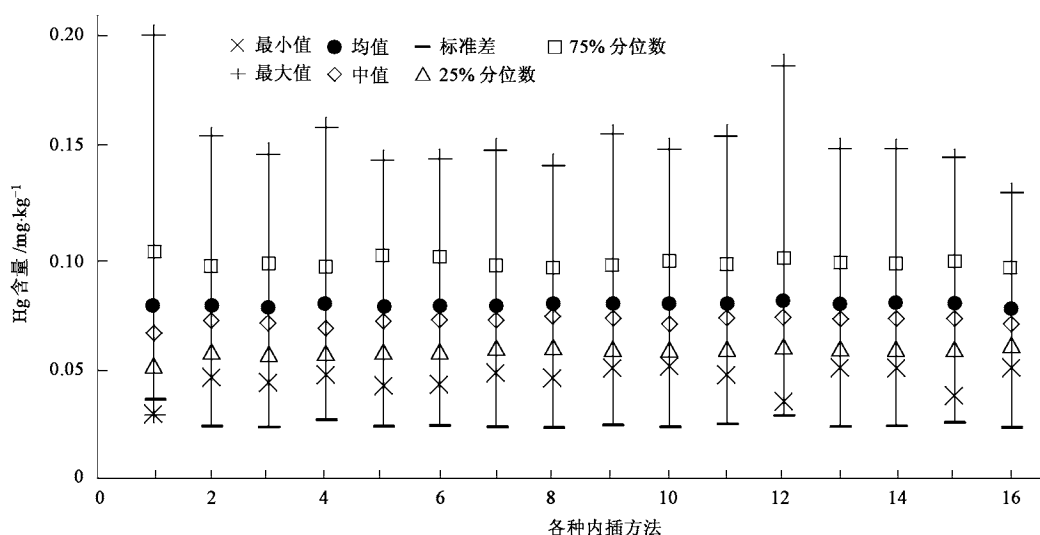


图 4 土壤重金属 Hg 含量 (mg/kg) 的不同内插方法统计结果比较

Fig. 4 Comparison of statistical results of different interpolations for soil Hg content

比实测数据的小,说明各种内插方法对原始数据具有不同程度的“压缩”作用,其主要原因是各种插值方法均具有明显的“平滑效应”,减小了原始数据的变异性^[12]。

各种内插方法中 7 项统计特征值与原始数据最接近的是 UK(1 阶)插值方法,而结果最差的是距离反比权重法,说明当区域化变量存在“漂移”,即具有非平稳的数学期望时,应用一阶趋势的 UK 方法进行估值效果最好。

4 结论与讨论

4.1 结论

(1)一阶趋势的 OK 方法比 0 阶和二阶趋势的 OK 方法插值结果要好;一阶趋势的 OK 方法中半方差函数模型选用高斯型的比选用球状和指数型的插值效果相对要好。

(2)当区域化变量服从对数正态分布且同时具有趋势效应时,由于原始数据经对数转换后均有不同程度的“压缩”作用,所以原始数据经过对数转换后的插值效果要比没有经过转换的插值方法要差。

(3)在各种内插方法中,带趋势项的插值方法要比不带趋势项的插值方法要好,其中一阶趋势的 UK 方法不仅对南北方向的总体趋势把握比较好,而且对东西方向的总体趋势反映也比较好,在 7 项统计特征值中也与原始数据最接近,所以在实验条件下该插值方法最好,而 IDW 方法最差。

4.2 讨论

由于各种内插方法均存在不同程度的“平滑效应”,导致其插值后的最小值比实测数据的大,最大值和标准差比实测数据的小,减小了原始数据的变

异性,改变了其空间结构^[12],因此,在对土壤重金属污染进行风险评价时,采用条件模拟的方法可能会更好一些^[1]。

参考文献:

- [1] Goovaerts P. Geostatistics in soil science: state-of-the-art and perspectives[J]. *Geoderma*, 1999, **89**:1~45.
- [2] Goovaerts P. *Geostatistics for Natural Resources Evaluation* [M]. New York: Oxford Univ. Press, 1997.
- [3] Laslett G M, Mcbratney A B, Pahl P J, *et al.* Comparison of several spatial prediction methods for soil pH[J]. *J. Soil Sci.*, 1987, **38**:325~341.
- [4] Gotway C A, Ferguson R B, Hergert G W, *et al.* Comparison of kriging and inverse-distance methods for mapping soil parameters[J]. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1996, **60**(4):1237~1247.
- [5] Kravchenko A, Bullock D G. A comparative study of interpolation methods for mapping soil properties[J]. *Agronomy Journal*, 1999, **91**(3):393~400.
- [6] Brodsky L, Vanek V, Bazalova M, Balik J. The differences in the interpolation methods for mapping spatial variability of soil properties[J]. *Rostlinna Vyroba*, 2001, **47**(12):529~535.
- [7] Hosseini E, Gallichand J, Caron J. Comparison of several interpolators for smoothing hydraulic conductivity data in south west Iran[J]. *Trans. Asae*, 1993, **36**(6):1687~1693.
- [8] Hunner G, Mowrer H T, Reich R M. An accuracy compared six spatial interpolation methods for modeling forest stand structure on the fraser experimental forest, Colorado. <http://www.gis.wau.nl/Accuracy2000/abstracts/hunner.htm>. 2000.
- [9] DZG 93-01, 氰化物无色散原子荧光光度法测定汞量. 中华人民共和国地质矿产部岩石和矿物分析规程[M]. 北京:地质出版社, 1993. 108~109.
- [10] 李建, 郑春江, 等. 环境背景值数据手册[M]. 北京:中国环境科学出版社, 1989. 73~74.
- [11] GB 15618-1995, 土壤环境质量标准. 1995, 288.
- [12] 李保国, 胡克林, 陈德立, 等. 农田土壤表层饱和导水率的条件模拟[J]. *水利学报*, 2002, (2):36~40.