

应用多变量脸谱图进行河流与湖泊表层沉积物重金属污染状况的综合对比研究

刘文新 栾兆坤 汤鸿霄

(中国科学院生态环境研究中心, 北京, 100085)

摘 要

依据沉积学原理和水中沉积物重金属的环境地球化学特征, 将地积累指数与改进的多变量 Chernoff 脸谱图相结合, 选择江西德兴铜矿附近的乐安江表层沉积物以及德国西南部 Mannheim 和 Worms 周围若干湖泊的表层沉积物作为研究对象, 开展不同地域、不同类型水体沉积物中重金属积累的对比分析和污染状况的综合性定量评价。多变量脸谱图能清晰地反映出两区域沉积物中重金属的污染特征和空间分布模式。

关键词: 重金属污染, 脸谱图, 地积累指数, 综合评价。

江西乐安江畔的德兴铜矿是我国最大的斑岩型露天铜矿^[1], 超负荷重金属污染物随同酸碱废矿水的大量排放而进入流经矿区的乐安江及其下游流域, 并汇入鄱阳湖, 造成水生生态系统的破坏。比较而言, 德国西南部 Mannheim 和 Worms 附近的湖泊虽然遭受周围工业点源污染排放(如电镀废水)的影响, 但重金属污染类型和程度明显不同于德兴铜矿。鉴于天然水体沉积物是水环境中重金属污染的指示剂^[2], 具有重大意义的天然水体沉积物质量基准的制订和建立急需开展区域水体沉积物重金属污染的对比研究和综合评价以提供背景数据的基础支撑^[3]。

沉积物污染的综合评价涉及相关的多变量因素, 常规的二维平面图、三维立体图均难以通过描点方式形象反映出高维数据的信息特征和内涵, 因此, 特殊的多变量图分析法日益受到重视^[4,5], 如连接向量图、星座图、脸谱图、非线性映射及 Andrews 正弦曲线等。其中 Chernoff 脸谱图^[6,7]是最复杂的肖像符号图, 利用设计的脸谱将一一对应的多变量样本可视化, 通过脸谱各特征部位的形状和大小对所选变量相对值加以直观描述。尽管该方法已得到广泛应用^[8-10], 但在环境水质化学研究领域的报道还相当少见^[11]。本文根据 Muller^[12]提出的地积累指数 I_{geo} 结合改进的 Chernoff 脸谱图, 针对上述区域水体沉积物中重金属的污染状况进行综合评价, 为沉积物质量基准的制订和建立提供背景材料, 同时为后期治理和恢复提供依据。

1 实验部分

1.1 采样布点与实验分析

湖泊表层沉积物样品 (0—10cm) 于 1994 年 9 月采自德国西南部城市 Mannheim 和 Worms 附近的若干湖泊. 湿法筛取国际通用的 $<63\mu\text{m}$ 组分, 在 $30\text{—}40^\circ\text{C}$ 下干燥后研磨混匀. 每个样品称取 1g, 采用 $\text{HNO}_3\text{—HCl}$ 混合液进行消解. 重金属 Cr, Cu, Pb, Zn, Cd, Ni 和 Mn 的测定采取 AAS 技术, 同时用汞分析仪测定 Hg 含量.

国际合作项目 CERP 中最重要的子项目是有关乐安江-鄱阳湖水生生态系统污染现状及潜在生态危害的综合评价, 为此, 1993 年沿江自上而下共布设 15 个样点^[1]. 同样选取 $<63\mu\text{m}$ 的组分进行分析, 样品前处理及消解过程类似于湖泊样品. Cr, Cu, Pb, Zn, As, Ni, Mn 和 Cd 浓度的测试利用 AAS, ICP 和 X 射线荧光技术. 文中所引用的部分数据来自数据库 CERP-DBMS (也属 CERP 子项目).

1.2 数据变换与统计绘图

原始数据直接作图通常没有实际意义, 需将各变量原始数据变换至预定区间内, 变换公式为:

$$X_{ij} = a_j + (b_j - a_j) \frac{\log_2 Y_{ij} - \log_2 Y_{\min j}}{\log_2 Y_{\max j} - \log_2 Y_{\min j}}; \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, p \quad (1)$$

式中, X_{ij} 代表变换后作图数据; Y_{ij} 为第 i 个样本第 j 个变量的原始浓度; $Y_{\min j}$ 和 $Y_{\max j}$ 分别代表所有样本中第 j 个变量的最小与最大值; a_j 和 b_j 为区间的上下限; 本文将地岩石圈普通页岩中重金属的环境地球化学平均背景值作为研究的样本之一. 沉积物中重金属地积累指数的计算公式为^[12]:

$$I_{\text{geo}} = \log_2 \frac{C_n}{(K \times B_n)} \quad (2)$$

C_n 为实测重金属浓度; B_n 代表普通页岩中重金属地球化学平均背景值^[12]; $K = 1.5$, 是考虑造岩运动可能引起背景值波动而设定的常数. 依据 I_{geo} 将沉积物重金属污染状况划分为 7 个等级:

	清洁	轻度污染	偏中度污染	中度污染	偏重污染	重污染	严重污染
I_{geo}	0	1	2	3	4	5	
级 别	0	I	II	III	IV	V	VI

绘制脸谱图一般需要 18 至 20 个变量, 若少于标准变量数, 则脸谱某些部位将设定为默认值或固定值 (本文绘图分析软件为 STATISTICA™ for Windows™, Vol. 4.5). 实绘时对传统构图法加以改进, 细节如表 1 所示.

表 1 中 $I_{\text{geo}}\text{-AVG}$ (6) 代表六种重金属的地积累指数平均值, 即 Cr, Cu, Hg (或 As), Pb, Zn 和 Cd. Rank-Sum (8) 为所有八种重金属地积累指数分级数值之和. 两者的变换公式类似公式 (2):

$$X_{ij} = a_j + (b_j - a_j) \frac{Y_{ij} - Y_{\min j}}{Y_{\max j} - Y_{\min j}}; \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, p \quad (3)$$

表 1 脸谱特征描述及取值区间

Table 1 Description of facial features and ranges

变量	元素	区间	部位特征	内涵描述
X1	Cr	5—9	脸宽(两耳中心间的水平距离)	脸愈宽,则铬浓度愈高
X2	Rank-SUM(8)	5—9	耳朵高度(耳朵至脸中心的垂直距离)	耳朵位置愈高,Rank-SUM(8)值愈高
X3	Cu	5—9	半脸高度	半脸愈长,铜浓度愈高
X4	Ni	5—9	上半脸椭圆离心率	椭圆离心率大愈大,镍浓度愈高
X5	Mn	5—9	下半脸椭圆离心率	椭圆离心率愈大,锰浓度愈高
X6	As	5—9	鼻子长度	鼻子愈长,砷浓度愈高 (湖泊样品取系统默认值)
X7	Pb	5—9	嘴中心点位置(嘴中心点至脸中心的垂直距离)	垂直距离愈大,即嘴位置愈低,则铅含量愈高
X8	I_{geo} -AVG(6)	5—9	嘴弧线曲率(弧线向下弯曲表示正;弧线向上弯曲表示负)	嘴弧线正向弯曲愈大, I_{geo} -AVG(6)愈高;反之负向弯曲愈大,则 I_{geo} -AVG(6)愈接近背景值
X9	Hg	5—9	嘴弧线长度	嘴弧线愈长,则汞浓度愈高 (河流样品取系统默认值)
X10	Zn	5—9	眼睛高度(眼睛至脸中心点的垂直距离)	眼睛位置愈高,则锌的浓度愈高
X11	None	5 (常数)	两眼水平分离程度	固定默认含义
X12	Cd	5—9	两眼倾斜程度	两眼向脸中心倾斜程度愈大,则镉浓度愈大

2 结果与讨论

2.1 沉积物样品中重金属污染的地积累指数 I_{geo} 及污染程度分级

根据公式(2)和分级,将样品重金属污染的实测结果转换为 I_{geo} 和污染程度分级,结果如表 2 所示。

表 2 样品中重金属污染元素的地积累指数及其分级

Table 2 I_{geo} and rank of heavy metal pollution in sedimental samples from two regions

采样点	Cr (I/R)	Cu (I/R)	Pb (I/R)	As (I/R)	Hg (I/R)	Zn (I/R)	Cd (I/R)	Ni (I/R)	Mn (I/R)	I_{geo} - AVG(6)	Rank- SUM(8)
HK	-0.43/0	-0.95/0	0.19/1	-0.20/0	—	0.47/1	1.50/2	-1.63/0	-0.94/0	0.10	4
PLA	-0.63/0	3.62/4	0.19/1	-0.29/0	—	-0.80/0	1.74/2	-2.42/0	-0.15/0	0.64	7
GK	0.57/1	5.70/6	0.97/1	1.07/2	—	-0.10/0	1.50/2	-1.77/0	-1.78/0	1.62	12
ZZ	0.16/1	5.32/6	0.37/1	1.14/2	—	-0.06/0	2.00/3	-1.88/0	-0.42/0	1.49	13
XT	0.34/1	4.61/5	0.08/1	-0.04/0	—	0.06/1	2.32/3	-1.35/0	0.13/1	1.23	12

续表 2

采样点	Cr (I/R)	Cu (I/R)	Pb (I/R)	As (I/R)	Hg (I/R)	Zn (I/R)	Cd (I/R)	Ni (I/R)	Mn (I/R)	I_{geo} - AVG(6)	Rank- SUM(8)
DC	0.13/1	4.15/5	2.65/3	2.69/3	—	3.08/4	1.94/2	-1.67/0	0.51/1	2.44	19
HS	0.31/1	4.03/5	1.11/2	1.50/2	—	2.64/3	1.81/2	-1.50/0	0.52/1	1.90	16
JD	0.45/1	2.74/3	0.61/1	0.88/1	—	2.14/3	2.22/3	-1.25/0	-0.21/0	1.51	12
HJD	0.06/1	3.15/4	1.19/2	1.24/2	—	1.78/2	1.87/2	-1.25/0	0.33/1	1.55	14
SZ	0.20/1	3.53/4	0.59/1	1.00/2	—	1.47/2	1.81/2	-1.21/0	0.65/1	1.43	13
CJW	0.26/1	3.75/4	0.61/1	1.42/2	—	2.10/3	2.06/3	-1.21/0	-0.09/0	1.65	14
HLM	0.36/1	2.20/3	0.65/1	0.57/1	—	0.94/1	1.87/2	-1.63/0	0.24/1	1.10	10
SG	0.05/1	2.05/3	0.67/1	0.47/1	—	1.61/2	1.81/2	-1.54/0	0.10/1	1.11	11
LK	0.00/1	2.25/3	0.70/1	0.62/1	—	1.14/2	1.66/2	-1.50/0	0.32/1	1.06	11
BY	0.13/1	2.37/3	0.59/1	0.47/1	—	2.76/3	1.66/2	-1.54/0	0.11/1	1.33	12
VA1	0.57/1	0.24/1	0.28/1	—	0.42/1	-0.92/0	2.06/3	-1.28/0	-1.28/0	0.44	7
VA2	0.60/1	-0.81/0	-0.34/1	—	-1.39/0	-1.09/0	1.74/2	-1.05/0	-1.30/0	-0.22	3
VA3	0.74/1	-0.39/0	-0.21/1	—	-0.81/0	-1.05/0	2.06/3	-0.92/0	-1.33/0	0.06	4
SS1	0.82/1	-0.72/0	0.01/1	—	-1.39/0	-1.14/0	2.06/3	-0.78/0	-1.28/0	-0.06	5
SS2	0.89/1	-0.68/0	-0.08/0	—	-1.39/0	-1.11/0	1.74/2	-0.62/0	-1.28/0	-0.11	3
SS3	0.79/1	-1.02/0	-0.48/0	—	-1.39/0	-1.18/0	2.06/3	-0.70/0	-1.27/0	-0.20	4
STW	0.73/1	-1.14/0	-0.63/0	—	-1.39/0	-1.13/0	2.06/3	-1.02/0	-1.26/0	-0.25	4
SPW	0.67/1	-1.14/0	-0.70/1	—	-1.39/0	-1.17/0	1.74/2	-1.08/0	-1.22/0	-0.33	3
Bk	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	-0.58/0	0

* I_{geo} ; R_{geo} 分级数值; HK: 海口; PLA: 盘龙庵; GK: 沽口; ZZ: 中洲; XT: 香屯; DC: 戴村; HS: 虎山; JD: 接渡; HJD: 韩家渡; SZ: 石镇; CJW: 蔡家湾; HLM: 黄龙庙; SG: 双岗; LK: 龙口; BY: 波阳; VA1 至 VA3: Vorderev Altrhein 1-3; SS1-SS3: Silbersee 1-3; STW: Standerweiher; SPW: Spaitplatzweiher; Bk: 岩石圈普通页岩中重金属地球化学平均背景值。

2.2 两区域水体沉积物中重金属污染状况评价和 Chernoff 脸谱图

包括 Bk 在内的所有样品集成在统一数据集合内, 根据公式 1 和 3, 绘图数据参见表 3, 图 1 为相应的脸谱图。

表 3 绘制评价沉积物中重金属污染的 Chernoff 脸谱图所用数据

Table 3 Data utilised in drawing Chernoff face graph for evaluation of heavy metal pollution

采样点	X1 Cr	X2 Rank- SUM(8)	X3 Cu	X4 Ni	X5 Mn	X6 As	X7 Pb	X8 I_{geo} - AVG(6)	X9 Hg	X10 Zn	X11 None	X12 Cd
HK	5.53	5.84	5.11	6.73	6.39	5.47	6.06	5.90	df*	6.55	5.00	7.87
PLA	5.00	6.47	7.79	5.00	7.69	5.37	6.06	6.62	df	5.36	5.00	8.20
GK	8.15	7.53	9.00	6.43	5.00	7.02	7.00	7.91	df	6.01	5.00	7.87
ZZ	7.08	7.74	8.78	7.70	7.24	7.11	6.28	7.74	df	6.05	5.00	8.56
XT	7.56	7.53	8.37	7.34	8.14	5.67	5.93	7.40	df	6.16	5.00	9.00
DC	7.01	9.00	8.10	6.64	8.76	9.00	9.00	9.00	df	9.00	5.00	8.47
HS	7.46	8.37	8.02	7.00	8.79	7.54	7.16	8.28	df	8.58	5.00	8.29
JD	7.84	7.53	7.27	7.56	7.58	6.49	6.57	7.77	df	8.12	5.00	8.86
HJD	6.82	7.95	7.51	7.56	8.47	7.23	7.25	7.82	df	7.78	5.00	8.38

续表 3

采样点	X1 Cr	X2 Rank- SUM(8)	X3 Cu	X4 Ni	X5 Mn	X6 As	X7 Pb	X8 I_{geo} - AVG(6)	X9 Hg	X10 Zn	X11 None	X12 Cd
SZ	7.19	7.74	7.73	7.63	9.00	6.93	6.55	7.67	df	7.49	5.00	8.29
CJW	7.33	7.95	7.86	7.63	7.79	7.11	6.57	7.96	df	8.08	5.00	8.64
HLM	7.59	7.11	6.95	6.73	8.33	6.41	6.61	7.23	df	6.99	5.00	8.38
SG	6.48	7.32	6.87	6.92	8.10	6.29	6.63	7.24	df	7.62	5.00	8.29
LK	6.66	7.32	6.98	7.00	8.46	6.47	6.67	7.18	df	7.18	5.00	8.09
BY	7.01	7.53	7.06	6.92	8.12	6.29	6.55	7.53	df	8.70	5.00	8.09
VA1	8.16	6.47	5.81	7.48	5.82	df	6.17	6.36	9.00	5.24	5.00	8.64
VA2	8.24	5.63	5.20	7.98	5.80	df	5.43	5.49	5.00	5.09	5.00	8.20
VA3	8.60	5.84	5.44	8.28	5.75	df	5.59	5.85	6.29	5.12	5.00	8.64
SS1	8.82	6.05	5.25	8.58	5.83	df	5.85	5.69	5.00	5.04	5.00	8.64
SS2	9.00	5.63	5.27	8.93	5.83	df	5.74	5.63	5.00	5.07	5.00	8.20
SS3	8.73	5.84	5.07	8.74	5.85	df	5.26	5.50	5.00	5.00	5.00	8.64
STW	8.56	5.84	5.00	8.05	5.86	df	5.08	5.44	5.00	5.05	5.00	8.64
SPW	8.43	5.63	5.00	7.92	5.93	df	5.00	5.33	5.00	5.01	5.00	8.20
Bk	5.12	5.00	5.33	9.00	6.97	5.00	5.14	5.00	6.79	5.56	5.00	5.00

* df:统计绘图软件 STATISTICA™确定的默认值.

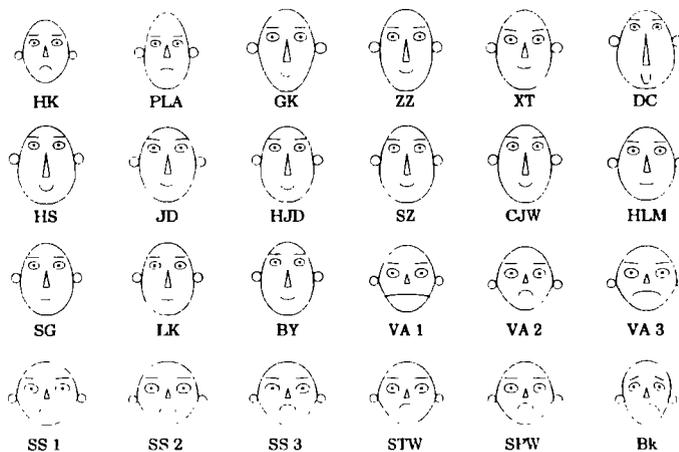


图 1 各样点 Chernoff 脸谱图

Fig. 1 Chernoff face graphs for each sampling sites

图中 Bk 脸谱是代表环境地球化学背景值的标准脸谱,其它脸谱分别表征乐安江(从上游海口至下游波阳)和若干湖泊(顺序为 VA1 至 SPW)表层沉积物中重金属污染积累的实际状况和综合特征. 在上游相对清洁的海口,其脸谱特征接近地球化学背景值(Bk),可作为该流域的背景参考点. 因流经德兴大型铜矿,Cu 在该河流沉积物中的作用举足轻重,表现为绝大多数脸谱的长度明显大于背景值. 上游的盘龙庵至下游的蔡家湾河段的沉积物均达到偏重污染的 4 级以上水平,尤其是沽口和中洲,因受支流大坞河大量废矿水排放的影响,指示 Cu 污染的脸谱半脸高度达到最大值. 此外,另一废水排放支流

——洮水河则造成香屯至虎山相当严重的 Cu 污染。Cd 和 Zn 属于第二级污染强度,鉴于样品脸谱上的眼睛相对 Bk 都明显向脸谱中心倾斜,因而 Cd 含量普遍较高且沿江污染分布比较均匀。Zn 与 Cu 不同,主要是上游工厂含锌废水的排放以及沿江小型冶炼厂点源污染所致。依据脸谱眼睛的高度位置,Zn 近似存在两个分布峰值区:戴村—虎山段和波阳。乐安江中 As 和 Pb 在 I_{geo} 和污染空间分布上比较接近,值得注意的是戴村样点受洮水河沿岸铅锌矿开采和冶炼的影响,其脸谱的鼻子和嘴弧线中心点位置都达到极值。重金属 Cr, Mn 含量水平基本属于洁净或轻度污染, Ni 的浓度则低于环境背景值 Bk。

依据 I_{geo} -AVG(6) 和 Rank-SUM(8), 乐安江沉积物中重金属综合污染的分布大体可划分为 5 个区段: (1) 上游相对清洁区, 包括海口和盘龙庵; (2) 污染强度沿江呈现逐渐递减的重污染区, 从沽口至香屯段; (3) 综合污染最高峰值区。即戴村和虎山; (4) 稳定污染区, 对应区段为接渡到蔡家湾; (5) 最后是从黄龙庙向下流的污染过渡区。上述分布特征在相应脸谱图上得到验证: 峰值样点脸谱的嘴部弧线正向弯曲最大, 如戴村, 代表综合污染最为严重; 第(3)至第(4)区的沿程样点中, 尽管有小波动, 但嘴弧线的正向曲率逐渐减弱进而转为水平, 体现出重金属污染强度的空间变化; 而上游对照样点脸谱的嘴部弧线已经变为负向, 显示出相对清洁的状态。

德国西南部若干湖泊沉积物中重金属污染程度及分布状况与乐安江形成鲜明对比。除 Cd 和 Cr 外, 样品中其它重金属的污染等级绝大部分属于清洁。因一定程度上遭受周围工业生产排放的影响, 湖泊沉积物中 Cd 污染较为严重, 普遍达到中等 2—3 级水平。相对本区其它重金属而言, Cr 的污染程度虽不太严重, 但污染分布比较均衡, 应引起足够重视。上述情形反映在 8 个样点脸谱的宽度和双眼向脸中心点的倾斜程度均非常近似, 在 Vorderev 1 和 3, 由于 I_{geo} -AVG(6) 略大于 0, 故脸谱嘴弧线的负向弯曲较其它点缓和, 说明污染状况相对较重, 在 Vorderev 1 处因 Hg 的浓度略高而使脸谱嘴弧线较长。

3 结 论

Cu 的污染主要来源于流域内的德兴铜矿, 从样点脸谱所表征的情况看, 在废矿水排放源附近的地段表现尤为突出, 污染程度达到顶级。脸谱特征表明 Cd 和 Zn 的污染属于中等, Cd 污染的沿江分布比较均匀; 而 Zn 含量呈现双峰分布。乐安江中 As 和 Pb 的总体分布类型是一致的, 污染程度也弱一些, 而其它重金属的污染级别则更低。按地积累指数可将乐安江重金属综合污染划分为 5 个区段: (1) 上游相对清洁区; (2) 中上游逐渐递减的重污染区; (3) 中游综合污染极值区; (4) 中下游污染稳定区; (5) 下游过渡状态区。

与乐安江形成鲜明对比, 德国西南部几个湖泊沉积物中除 Cd 和 Cr 外, 其它重金属的污染很弱, 脸谱图显示出与背景值的某种相似性。周边工业污染排放导致 Cd 污染水平达到较严重的中级水平; 同时本地区 Cr 的污染程度虽然不高, 但其空间分布均匀, 且与附近污染点源关系密切, 应引起高度重视。

致谢: 对 UNESCO 及 MAB 有关人员深表感谢; 对德国海德堡大学沉积物研究所的 Muller G 教授、Yahya A 博士及其同事以及中方协同人员的热情支持表示诚挚谢意。

参 考 文 献

- [1] Tang H X, Wang Z J, Liu J Y et al. , Ecological Impacts of Heavy Metal from Dexing Copper Mine to Poyang Lake. *China Environmental Sciences*, 1994, **5**(2) : 97—101
- [2] Forstner U et al. , Metal Pollution in the Aquatic Environment, Springer-Verlag, Berlin, 1979, p110—192
- [3] 文湘华, 水体沉积物重金属质量基准研究. *环境化学*, 1993, **12**(5) : 334—341
- [4] Brucker L A, In Graphical Representation of Multivariate Data. C C P Wang eds. , New York, Academic Press, 1978, p93—120
- [5] Mac Eachren A M, Taulor D R F (eds), *Visualization in Modern Cartography*, PERGMAN, 1994, p120—205
- [6] Chernoff H, The Use of Face to Represent Points in K-dimensional Space Graphically. *J. Am. Statist. Assoc.*, 1973, **68** : 361—368
- [7] Chernoff H, Rizvi M H, Effects on Classification Error of Random Permutations of Features in Representing Multivariate Data by Faces. *J. Am. Statist. Assoc.*, 1975, **70** : 548—554
- [8] Riedwyl H, Graphical Representation of Multivariate Data by Means of Asymmetrical Face. *J. Am. Statist. Assoc.*, 1981, **76** : 757—765
- [9] Schmid C F, *Statistical Graphics Design, Principle and Practices*, New York, Wiley, 1983, p187—190
- [10] 方开泰, 实用多元统计分析. 华东师范大学出版社, 1989, p120—180
- [11] 赵智杰, 贾振邦, 张宝权等, 应用脸谱图与地积累指数法综合评价沉积物中重金属污染的研究. *环境科学*, 1994, **14**(4) : 48—52
- [12] Muller G, *Chemiker Zeitung*, 1981, **105** : 53—58

1996年1月11日收到.

COMPARATIVE ASSESSMENT OF HEAVY METAL POLLUTION IN SURFACE SEDIMENT OF RIVER AND LAKE WITH MULTIVARIATE FACE GRAPH

Liu Wenxin Luan Zhaokun Tang Hongxiao

(Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100085)

ABSTRACT

Based on principle of sedimentology and geochemical characteristics of heavy metals, we selected surface sedimental samples collected from: 1) Lean river which flew through Dexing copper mine in south of China, and 2) several lakes located in southwest of Germany. Concentrations of various heavy metals in these samples were determined, and the relative index of geoaccumulation (I_{geo}) for heavy metal pollution was calculated as well. Furthermore, the comparative analysis of heavy metal accumulation between two regions was comprehensively carried out by means of visualized multivariate graphical method — modified Chernoff face graph. Face graphs intuitively demonstrated the situation of heavy metal contamination and related distribution in these areas.

Keywords: heavy metal, sediment, assessment, I_{geo} , face graph.