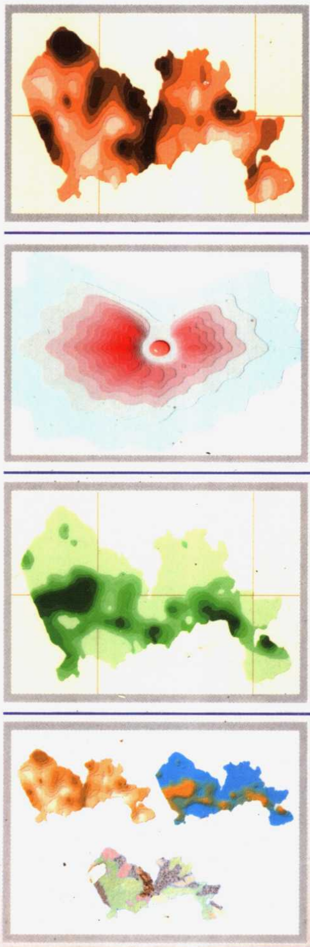
国家科学技术学术著作出版基金
NFAPST

北京大学地理科学丛书

土壤微量金属含量的空间分析



王学军 李本纲 陶 澍/等 著

科学出版社
www.sciencep.com

国家科学技术学术著作出版基金资助出版

北京大学地理科学丛书

土壤微量金属含量的空间分析

王学军　李本纲　陶　澍等　著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

地统计学是一种区域化变量的分析方法，近年来在许多学科中得到广泛应用。本书结合作者承担的一系列科研工作，探讨了空间分析方法在土壤微量金属空间特征研究中的应用途径。

本书共分 6 章，第一章综述了空间分析方法的基本特征、发展过程及应用；第二、三、四和五章分别以深圳、北京和内蒙古地区为例，介绍了不同尺度下土壤微量金属的空间结构特征、克里格插值以及空间模拟结果及其所反映的区域环境特征；第六章探讨了如何利用模拟数据集进行采样方案设计，以及不同采样方案对空间结构表达的影响。

本书适合于从事区域环境科学研究、地理学研究的学者以及大专院校师生阅读，也可供相关领域，如地质学、生态科学等相关领域的专家学者参考。

图书在版编目(CIP)数据

土壤微量金属含量的空间分析/王学军等著. —北京：科学出版社，2005
(北京大学地理科学丛书)
ISBN 7-03-015074-0

Ⅰ. 土… Ⅱ. 王… Ⅲ. 土壤化学分析 Ⅳ. S151.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 014900 号

责任编辑：朱海燕 刘卓澄/责任校对：陈丽珠
责任印制：钱玉芬/封面设计：高海英

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码:100717
http://www.sciencep.com
双青印刷厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2005 年 5 月第 一 版 开本：787×1092 1/16
2005 年 5 月第一次印刷 印张：11
印数：1—1 500 字数：243 000

定价：38.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈环伟〉)

《北京大学地理科学丛书》序

正如所有现象都在时间中存在而有其历史一样，所有现象也在空间中存在而有其地理，地理和历史是我们了解世界不可或缺的两个重要视角。以人类环境、人地关系和空间相互作用为主要研究对象的地理学，是一门包容自然科学、人文社会科学和工程技术科学的综合性学科，已建立了相当完整而独特的学科体系。钱学森院士倡导建立地理科学体系，认为地理科学是与自然科学、社会科学、数学科学、系统科学、思维科学、人体科学、文艺理论、军事科学、行为科学相并列的科学部门，将地理学推向了一个新的境界。

地理学的研究与教学涉及到从环境变化到社会矛盾的广阔领域，其价值源自地理学对地球表层特征、结构与演化的研究，对自然与人文现象在不同地方和区域空间相互作用的过程及其影响的研究。处理这些问题虽远远超出任何一门学科的能力与见识，但这些问题都包含着地理学的基本方面。

对认识和解决当今世界许多关键的问题，例如经济增长、环境退化、全球变化、城市和区域发展、民族矛盾、全球化与本土化、人类健康、全民教育等，地理学都做出了特殊的贡献。地理学对于科学发展观的树立，对于统筹人与自然、统筹城乡发展、统筹区域发展、统筹经济与社会发展、统筹全球化与中国特色思想的普及，起到了独特的作用。它在满足国家社会经济发展对科学技术的若干重大需求上，已经发挥并将继续发挥越来越重要的作用。

当前人类面临的许多重大问题还没有得到根本解决，这与我们认识上的缺陷有很大关系，其中包括地理认识的缺陷。无论在国际尺度、国家尺度、区域尺度，还是地方尺度和个体尺度，对许多问题的决策过程尚不能充分驾驭地理复杂性，存在一些"地理空白"，这使得在达到经济繁荣和环境可持续的双重目标方面，乃至在个人健康发展方面，都可能要付出高昂的代价。

因此，加强地理研究和教育，提高地理学者自身、决策者以至广大民众的地理学认识和能力，是摆在地理学界面前的一项崇高职责，任重道远。北京大学的地理学工作群体也义不容辞。

北京大学的地理学可以追溯到19世纪末京师大学堂设立的地理教学计划，可惜由于诸多原因，这个计划未能实施。1929年清华大学成立地理学系，后因增加地质学研究与教学而改名为地学系。抗日战争期间，北大、清华、南开三校合称西南联合大学，北大地质学系与清华地学系合并，并增设气象学研究与教学，称地质地理气象学系。抗日战争胜利后，恢复了北京大学、清华大

学、南开大学。并在清华设地学系、气象学系，地学系下设地质组和地理组。1952年全国院系调整，由清华大学地学系地理组和燕京大学部分教员联合成立北京大学地质地理系。先设自然地理学专业，1955年、1956年、1994年、1997年相继设立地貌学、经济地理学、环境学、地图学与地理信息系统专业，成为国内地理专业和方向、硕士点、博士点和重点学科最多的地理系。1978年国家改革开放之始，北京大学撤消地质地理学系，分别成立地质学系和地理学系。1984年北京大学以地理系遥感教研室为基础成立了遥感技术与应用研究所（1994年易名遥感与地理信息系统研究所），1988年地理系为了充分体现为国家社会经济发展服务的工作实质和适应招生的需要，采用双名法，在国内称“城市与环境学系”，在国际上称 *Department of Geography*，并逐步形成了人文地理（人文地理、历史地理、城市规划、区域经济）—自然地理（综合自然地理、环境地学、地貌与第四纪）—地理信息科学“三足鼎立”的格局，发展欣欣向荣。

“北大是常为新的”，北大的地理学也是常为新的。顺应科学发展和社会需要，北大地理学在不同历史时期相继率先开拓出综合自然地理、城市规划、环境保护、遥感等重要方向。进入21世纪，北京大学进行院系调整，原地理系主体进入了环境学院，形成资源环境与地理学系、城市与区域规划系、生态学系、历史地理研究所四个研究和教学实体，遥感和地理信息系统进入了地球与空间科学学院。北大地理学科在新的组织框架下，以地理科学研究中心为纽带，继续高举地理学大旗，促进北京大学地理科学整体水平的提高，推动北大地理学与国内外同仁的学术交流与合作，为建成一流的地理学教学与科研基地而努力。

作为实现上述目标的一种途径，我们与科学出版社合作推出《北京大学地理科学丛书》，至今已陆续出版了多部著作，并且一再重印，表明它确实符合学界和社会的需求，并逐步形成了自己的品牌。我们将继续把这件很有意义的事情做得更大，做得更好。兼收并蓄是北大的传统，我们欢迎国内外同仁也能加盟。

北京大学地理科学研究中心

2004年6月5日

前　言

空间分析有狭义和广义的理解，本书中的空间分析主要是指地统计学。地统计学是一种区域化变量的分析方法，该方法最初从地质探矿中发展起来，近年来逐步拓展到许多相关领域，在许多学科中都发挥了十分重要的作用。本书结合作者自 20 世纪 90 年代以来承担的一系列科研工作，探讨了空间分析方法在土壤微量金属空间特征研究中的应用途径。

根据地理学的区域性特点，本书在章节结构上以研究区域为主线，围绕作者开展的工作，分为几个不同区域探讨不同空间分析方法的应用。在内容上，本书不侧重介绍空间分析的具体方法，而是探讨如何将空间分析方法应用于区域土壤微量金属含量的分析，如何将空间分析方法与环境地球化学分析结合起来，为解决区域环境问题提供帮助。

全书共分 6 章，第一章为空间分析方法，综述了空间分析方法本身的发展过程以及在各学科中的应用，该章中还介绍了主要空间分析方法的基本特征；第二章为深圳土壤微量金属含量的中尺度空间分析，介绍了深圳地区土壤微量金属的中尺度空间结构特征、克里格插值结果及其所反映的区域环境本底和污染特征；第三章为北京东郊污灌区土壤微量金属含量的小尺度空间分析。该章以污灌地区土壤为例，利用空间分析方法分析了土壤微量金属的小尺度空间分异特征，并进行了污染评价；第四章为内蒙古土壤微量金属含量的空间分异特征，探讨了土壤微量金属的经向分异、纵向分异以及空间结构特征；第五章为北京东郊污灌区土壤微量金属含量的小尺度空间模拟，利用空间模拟方法分析了土壤微量金属的空间分布趋势；第六章为模拟数据集及其在土壤微量金属含量空间分析中的应用，探讨了如何利用模拟数据集进行采样方案设计，以及不同采样方案对空间结构表达的影响。

由于污染来源多样，重金属在环境中的空间分布特征及迁移转化趋势十分复杂，为规划、风险评价和修复带来困难。本书内容具有一定的理论和应用价值，可以为土壤重金属污染的源识别、空间分布特征分析、风险评价以及修复提供帮助。

本书适合于从事区域环境科学研究、地理学研究的学者以及大专院校师生阅读。同时，也可供相关领域，如地质学、土壤学、生态科学等相关领域的专家学者参考。

本书各章写作的分工是：前言由王学军、李本纲、陶澍执笔；第一章由王学军、刘瑞民和张泽浦执笔；第二章、第四章由李本纲、陶澍执笔；第三章、第五章由王学军、张泽浦执笔；第六章由王学军、齐峰执笔。

由于空间分析方法在环境科学中的应用是一个比较新的领域，涉及面很广，特别是由于作者的知识、理论和实践的局限性，使本书在对许多问题进行阐述和讨论时可能会有不周、不妥和错误之处，敬请批评指正。

目　录

第一章　空间分析方法

§1.1　空间分析方法及其发展趋势

1.1.1　空间分析及地统计学的概念

空间分析的概念可以从广义和狭义两个角度来理解，不同学科也有不同的认识。本书从狭义的角度来理解空间分析的概念，将空间分析等同于地统计学(geostatistics)。

地统计学是20世纪60年代创立并发展起来的一门新兴的边缘学科，是统计学的一个独立分支。它开始是为解决从普查勘探、矿山设计到矿山开采整个过程中各种矿床储量计算和误差估计问题而发展起来的，因此得名地统计学。

“地统计学”一词首先是法国著名统计学家Matheron采用的，Matheron教授在研究了南非矿山地质工程师Krige等人的工作的基础上，从理论与实践上进行了系统的研究，于1962年提出并创立了地统计学。经过几十年的发展，现在已形成了较完整的理论基础和方法体系，扩大了其应用领域。

地统计学是以区域化变量理论为基础，以半变异函数为主要工具，研究那些在空间上既有随机性又有结构性，或空间相关性和依赖性的自然现象的科学(侯景儒、郭光裕，1993)。地统计学几十年的发展表明，它不仅仅可以在地质学中得到应用，而且在土壤学、农业、气象、海洋、生态、森林和环境治理方面也可以得到广泛应用。

地统计学在经过了15年的发展之后，于20世纪70年代后期传入我国，继而得到进一步发展，逐渐为我国矿业地质和矿业开发部门及相关单位所重视，相继组织力量研究地统计学的理论和方法，并组织学术交流和进行国际合作。各大地质院校也相继开设了地统计学课程。自此之后，地统计学的应用领域逐步拓宽，在其他学科中也不断得到应用。

1.1.2　地统计学的产生背景

统计学在地质科学中的应用在一百多年以前就开始了，主要是根据地质勘探所取得的大量信息，对地质矿产资源进行定量估计和评估。但是在20世纪40年代末期，一些地质学家和为地质矿产资源进行定量估计和评估的统计学家们发现传统储量计算方法存在一些问题：

传统储量计算方法简单地把钻孔的品位延伸到某一块段，作为该块段的平均品位。实际上二者承载(support，一般指样品或块段的体积大小)是不同的，钻孔岩心的承载小，块段的承载大，二者的平均品位不能简单地等同起来。

传统储量计算方法没有考虑品位的空间变化特征(或矿化的空间结构特征)，因而影响了估计的精度。经典统计学计算方法最多也只考虑到用样品长度、矿体厚度、剖面面积及样品到待估块段的距离等几何因素为权重进行加权平均，没有考虑品位空间变化特征

这一因素。

由于传统储量计算方法不考虑品位之间的空间相关性，因而就无法反映矿化强度的空间变化性(或离散性)。

传统储量计算方法给不出估计精度的概念，只能用不同方法的计算结果加以对比，当然更谈不上有一种衡量估计精度的标准和方法了。而一种估计如果没有给出估计误差的大小(或估计精度的好坏)，则对采矿工作者来说是没有多大益处的。

传统储量计算方法不能适应采矿设计和生产的要求。采矿设计要求对各个开采块段都进行平均品位和储量的估计，传统方法则做不到。

早在 20 世纪 30 年代初期，苏联地质勘探人员就开始应用数理统计方法研究矿床变化性、勘探网密度和储量误差三者之间的关系。后来他们发现，地质变量并不总是纯随机变量，因而认识到，想用简单的统计学方法来解决复杂的地质勘探问题是有不少缺陷的。经典统计方法的问题主要有：

1)经典统计方法在统计样品品位的频率和作频率直方图时均不考虑各样品的空间分布，但在地质研究和采矿工作中，这种空间分布则是十分重要的。

2)经典统计方法的研究对象必须是纯随机变量，而地质、采矿中所遇到的许多地质变量并不是纯随机变量，而是既有随机性又有结构性(指在空间分布上有某种程度的相关性或连续性)的变量。

3)经典概率统计学所研究的变量原则上都是可以无限次重复实验或大量观测的，但地质变量则不行。因为一旦在矿体某处取一个样品后，严格说来，就不可能在同一地方再次取到样品了。

4)经典概率统计学一般要求每次取样品必须是独立进行的，但地质变量在两个相邻样品中的值就不见得独立，往往有某种程度的空间相关性(或说某种程度的空间连续性)。

为了解决在地质变量具有随机性和结构性的条件下仍能使用统计方法的问题，20 世纪 40 年代末出现了自相关和半变异函数(variogram)的概念。由于它能够同时描述地质变量的随机性和结构性变化，因而为在地质、采矿中进行应用铺平了道路。

从 1951 年起，南非的矿山地质工程师 Krige 等人从南非金矿储量计算的具体问题出发，提出了用样品的空间位置和相关程度来估计块段品位及储量，使其估计误差最小的储量计算方法，这就是克里格法(Kriging)。半变异函数的产生和克里格法的提出为地统计学的诞生准备了重要的条件。到了 20 世纪 50 年代后期，法国在地质矿产资源估计方面优秀的统计学家 Matheron 教授在认真研究了 Krige 等人工作的基础上，从理论和实践上进行了系统的研究。他在研究了 10 个国家 40 多个矿床的丰富实践基础上，把 Krige 等人的研究成果进一步理论化、系统化，又采用了随机函数来同时描述地质变量的结构性和随机性，从而提出了“区域化变量”的概念，紧接着于 1962 年第一次提出了“地统计学”这个名词，并出版了《应用地统计学导论》。从此，地统计学作为一门新兴的边缘学科诞生了。

1.1.3 地统计学的优点

地统计学之所以发展如此之快、普及如此之广泛是因为它有一系列明显的优点：

地统计学不是简单地把现成的概率统计理论、方法直接搬到地质、采矿领域中来套用，而是从地质、采矿实际出发，根据地质变量本身的特点来选择合适的数学概念、理论、模型、方法，并加以改造、创新，使之适应地质学特殊性的需要。

地统计学最大限度地利用了勘探工程所提供的各种信息。如在用克里格法估计矿床中某块段的平均品位时，不仅考虑了落在该块段中的样品数据，而且还考虑了落在该块段外的临近样品的数据。

地统计学不仅可以进行储量的整体估计，更重要的是可以进行储量的局部估计。传统的储量计算方法提供的只是若干个勘探块段的储量，这种块段对采矿设计来说是太大了，而且很不规则，设计部门难以使用。

地统计学估计出的品位和储量数字一般比传统方法的数字更为精确，至少可以避免系统误差。

地统计学方法能给出估计精度来。用地统计学可以算出克里格方差，它是度量估计精度一个很好的尺度。而传统的储量计算方法做不到这一点，从而其估计结果的意义也受到很大影响。实际上，用地质统计学中的克里格方法给出的估计是一种无偏、最优（即估计方差最小）的内插估计。

应用地统计学方法必定要使用电子计算机。这二者相结合不仅能实现储量计算的科学化、精确化，还能实现自动化。这样既可节省人力和时间，又可提高储量计算的质量。

地统计学中的条件模拟可以很好地再现变量的变化性（或波动性）。它与克里格估计是相辅相成的，缺一不可。

地统计学可为计算机自动成图和分块拼图提供有利的工具和方法。由于克里格估计是一种无偏最优的内插估计，且在数据点处的估值就是该数据本身，因而可为计算机绘图中数据的网格化提供一种理想的工具。

1.1.4　地统计学的发展及其在环境科学领域的应用

经过几十年的发展，目前地统计学已初步形成了一套较完整的理论体系和基本工作方法，也有大量的程序包、程序库和数据库，扩大了其应用的领域和影响。

随着方法和理论的不断更新与完善，地统计学的应用领域从最开始的地质学逐渐拓宽到土壤、农业、气象、海洋、生态、森林和环境治理等各个方面（王政权，1999）。特别是近20年里，地统计学在土壤科学和环境科学中得到了广泛的应用。Tao（1995a，1995b）采用地统计学方法研究了深圳地区土壤中微量元素含量的空间结构和相关性，并进行了克里格插值；徐吉言和Webster(1983）对彰武县表土中的全氮含量进行了空间分析和块状克里格插值；Vauclin等（1983）采用协克里格方法对土壤黏粒含量和有效水分等进行了空间分析和插值；Yost等（1982a，1982b）采用地统计学方法对土壤化学参数在较大尺度上的空间变异特征及影响因素进行了分析；王学军和席爽（1997）则将克里格插值的结果应用于区域污染水平的评价。

Carlon等（2001）研究了某化工厂旧址附近土壤中的PAHs污染，用克里格法做出了污染物在水平和垂直方向上的浓度分布图，并结合当地的水文特征，建立了PAHs空间迁移的概念模型；Colin等（1996）揭示了土壤电阻系数与PAHs浓度之间的相关性，利用

已有的电阻系数数据弥补了 PAHs 数据的不足，通过指示克里格法成功地进行了土壤 PAHs 污染的风险分析；Broos 等(1999)则将地统计学方法和污染治理成本模型相结合，探讨了受 PAHs 污染的土壤的修复成本和不确定性。

§1.2 空间结构分析

由于区域化变量能够同时反映变量的空间分布结构性与随机性，所以无论是用完全确定性的数学方法还是用经典统计学的方法来研究、描述这类变量都是困难的或根本不可能的。而地统计学中的一个基本工具——半变异函数，则能够较好地描述区域化变量的上述特征，从而使针对区域化变量的空间变异性分析得以实现。

若将空间变量看作随空间位置 x 而变化的区域化变量 $Z(x)$（为讨论问题方便不妨设 $Z(x)$ 定义在一维坐标轴上），那么，当空间点 x 在一维 x 轴上变化时，区域化变量 $Z(x)$ 在点 x 和 $x+h$ 处的值 $Z(x)$ 与 $Z(x+h)$ 差的方差一半定义为区域化变量 $Z(x)$ 在 x 轴方向上的半变异函数（又称变异函数），记作 $\gamma(x,h)$。即：

$$\gamma(x,h) = \frac{1}{2}\mathrm{Var}[Z(x) - Z(x+h)] \tag{1-1}$$

根据协方差函数的理论，半变异函数可以展开为：

$$\begin{aligned}\gamma(x,h) &= \frac{1}{2}\mathrm{Var}[Z(x) - Z(x+h)] \\ &= \frac{1}{2}E[Z(x) - Z(x+h)]^2 - \frac{1}{2}\{E[Z(x)] - E[Z(x+h)]\}^2\end{aligned} \tag{1-2}$$

在实际的地统计学研究中，通常要作一些假设。通常是二阶平稳假设，或本征假设(intrinsic hypotheses，也叫内蕴假设)。在这两种假设下均有：

$$E[Z(x+h)] = E[Z(x)],\ \forall h$$

因此公式(1-2)就可以简化为：

$$\gamma(x,h) = \frac{1}{2}E[Z(x) - Z(x+h)]^2 \tag{1-3}$$

这是地统计学中最常用的基本公式之一。

从公式(1-3)中可以看出，$\gamma(x,h)$ 一般是依赖于 x 和 h 两个自变量的。当半变异函数 $\gamma(x,h)$ 仅依赖于 h（基本步长或基本滞后）而与位置 x 无关时，则可把半变异函数 $\gamma(x,h)$ 写成 $\gamma(h)$，即：

$$\gamma(h) = \frac{1}{2}E[Z(x) - E(x+h)]^2 \tag{1-4}$$

此时，以 h 为横坐标，以 $\gamma(h)$ 值为纵坐标作出的图形就叫做变差图。故半变异函数与变差图严格说来，还是有区别的。但当半变异函数 $\gamma(x,h)$ 不依赖于 x 时，这二者就是一样的，只不过一个代表函数关系式，另一个表示其函数的图形。

如果 $Z(x)$ 是定义在二维、三维空间中的区域化变量，则 x 是二维、三维空间中的点，h 是二维、三维空间中的向量（此时，h 本应写成 $\boldsymbol{h}$，为了简化，在不致发生混淆的情况下，可写成标量形式）。此时，就要考虑二维、三维半变异函数了。

在实际工作中，要对区域化变量 $Z(x)$ 做变异性分析，通常是先求出实验半变异函数，然后再用理论模型拟合，得到最终的半变异函数公式。对于离散点的情况，由于有了（准）二阶平稳假设或（准）本征假设，我们可以把在 x 轴上相隔为 h 的 $N(h)$ 对点 x_i 和 $x_i+h(i=1,2,\cdots,N(h))$ 处的 $N(h)$ 对观测值 $Z(x_i)$ 和 $Z(x_i+h)(i=1,2,\cdots,N(h))$ 看成是 $Z(x)$ 和 $Z(x+h)$ 的 $N(h)$ 对实现。其实验半变异函数的基本公式为

$$\gamma^*(h)=\frac{1}{2N(h)}\sum_{i=1}^{N(h)}[Z(x_i)-Z(x_i+h)]^2 \tag{1-5}$$

这样，对于不同的空间分隔距离 h，根据公式(1-5)可计算出相应的 $\gamma^*(h)$ 值来。这就是计算实验半变异函数的最基本的公式。经计算后，得出诸对 h、$\gamma^*(h)$ 值，在 $h-\gamma^*(h)$ 直角坐标上标出诸点 $(h,\gamma^*(h))$ 来，再将相邻各点用线段连接起来，就得到实验半变异函数图，或称实验变差图。这样的曲线图可以直接地展示区域化变量 $Z(x)$ 的空间变异特点，是空间变异分析和结构分析的有效工具。

根据公式(1-5)，计算出的实验半变异函数值，只是不同方向上的一些不连续的点，还必须经过理论模型拟合得出理论模型，才能较好地分析区域化变量 $Z(x)$ 的空间变异性。到目前为止，地统计学中的半变异函数理论模型基本分为三大类：一类是有基台值模型，包括球状模型、指数模型、高斯模型、线性有基台值模型和纯块金效应模型，另一类是无基台值模型，包括幂函数模型、线性无基台值模型、抛物线模型，最后一类是孔穴效应模型。在这些半变异函数的理论模型中，最常用的是球状模型，其一般公式为：

$$\gamma(h)=\begin{cases}0 & h=0\\ C_0+C\left(\dfrac{3}{2}\cdot\dfrac{h}{a}-\dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{h^3}{a^3}\right) & 0<h\leqslant a\\ C_0+C & h>a\end{cases} \tag{1-6}$$

式中：C_0 为块金常数，C_0+C 为基台值，C 为拱高，a 为变程。当 $C_0=0$，$C=1$ 时，称为标准球状模型，见图 1.1。在原点处的切线斜率为 $3C/2a$，与基台值线的交点的横坐标为 $2a/3$。球状模型是地统计学应用最广泛的理论模型。许多区域化变量的理论模型都可以应用球状模型来拟合。

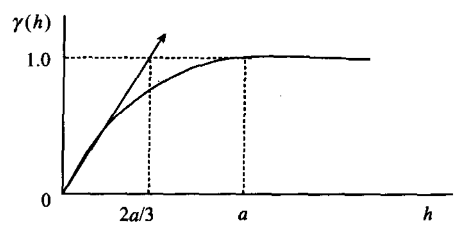


图 1.1　球状模型

半变异函数是地统计学的主要工具，有了半变异函数，就可以应用地统计学的理论和方法对参数的空间分布进行研究了。研究主要有两方面的内容，一方面是应用半变异函数对参数的空间分布进行结构分析和变异性分析，另一方面是应用结构分析的结果和克里格法进行估值。

§1.3　克里格插值

用于估值的方法种类繁多，常用的有多角形法、剖面法、算术平均值法以及距离平方反比法等。这些估值方法在空间插值应用中有一定的局限性。地统计学与上述常规方法有着明显的不同。它基于这样一种概念，即用于推断的样品相互间不是独立的，它们之间

存在着一定的相关关系。这种相关性除了随样品距离变化外，还随样品间的相对方向的变化而变化。它是建立在半变异函数理论及结构分析基础上，在有限区域内对区域化变量的取值进行无偏最优估计的一种方法。克里格法是地统计学的核心。

克里格法(Kriging)也称空间局部估计或空间局部插值，是地统计学中两大主要内容之一。它是建立在半变异函数理论及结构分析基础上，在有限区域内对区域化变量的取值进行无偏最优估计的一种方法。这种方法最早由南非矿业工程师 Krige 在 20 世纪 50 年代根据样品空间位置不同和样品间相关程度的不同，对每个样品赋予一定的权重，进行滑动加权平均，来估计未知样点上样品平均值的一种方法。

克里格法实质上是利用区域化变量的原始数据和半变异函数的结构特点，对未采样点的区域化变量的取值进行线性无偏最优估计的一种方法。从数学的角度讲就是一种对空间分布的数据求线性最优无偏内插估计量(Best Linear Unbiased Estimator，简写为 BLUE)的一种方法。更具体地讲，它是根据待估样点(或待估块段)有限邻域内若干已测定的样点数据，在认真考虑了样点的形状、大小和空间相互位置关系，它们与待估样点间相互空间位置关系，以及半变异函数提供的结构信息之后，对该待估样点值进行的一种线性无偏最优估计。

传统的估计方法中常用的多边形法，主要是根据多边形块段内的一个采样资料来估计数值，其缺点是没有考虑周围其他采样点的信息，可以说是“一孔之见”；剖面法和三角形法中所利用的每一个采样数据在估值计算中的贡献是一样的，即都是等权的，没有区别不同情况给以不同的权重系数，这就是它们的不足之处；距离反比法(或距离平方反比法)虽然前进了一步，考虑了周围的样品，而且也对各数据用样品到待估块段中心的距离(或距离平方)的倒数为权进行了加权平均，但它们还没有考虑样品彼此之间和样品与待估块段之间的空间构形几何因素的影响，同时也没有考虑到所研究变量的空间分布结构信息(即半变异函数)。克里格法与传统的估计不同，它最大限度地利用了空间取样所提供的各种信息，在估计未知样点数值时，它不仅考虑了落在该样点的数据，而且还考虑了临近样点的数据，不仅考虑了待估样点与临近已知样点的空间位置，而且还考虑了各临近样点彼此之间的位置关系。除了上述的几个因素外，还利用了已有观测值空间分布的结构特征。使这种估计比其他传统的估计方法更精确，更符合实际，并且避免系统误差的出现，给出估计误差和精度。这些是克里格法的最大优点。但是，如果半变异函数和相关分析的结果表明区域化变量的空间相关性不存在，则空间局部插值的方法不适用。

克里格法是多种多样的，且其本身也在不断发展、完善之中。针对各种不同的目的和不同的条件，可以采用各种不同的克里格法，这样可以取得更好的效果。在满足二阶平稳(或本征)假设时可用普通克里格法(Ordinary Kriging，简称 OK)。在非平稳(或说有漂移存在)现象中，可应用泛克里格法；在计算局部估值时要用到非线性估计量，就可用析取克里格法。此外，当区域化变量服从对数正态分布时，可用对数正态克里格法；对有多个变量的协同区域化现象，可用协克里格法等。其中最常用的是普通克里格法。

1.3.1 一般问题及其解法

设 $Z(x)$ 为区域化变量，满足二阶平稳和本征假设，其数学期望为常数 m，协方差函数

$C(h)$和半变异函数 $\gamma(h)$存在，即

$$
\begin{aligned}
E[Z(x)] &= m \\
C(h) &= E[Z(x)Z(x+h)] - m^2 \\
\gamma(h) &= \frac{1}{2}E[Z(x)-Z(x+h)]^2
\end{aligned}
\tag{1-7}
$$

对中心位于 x_0 的块段 V 的平均值 $Z_V(x_0)$以

$$Z_V(x_0) = \frac{1}{V}\int_V Z(x)\mathrm{d}x \tag{1-8}$$

进行估值。在待估块段 V 的邻域内，$Z_i(i=1,2,3,\cdots,n)$是一组离散的信息样品数据，它们是定义在点承载 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$上的；或是确定在以 x_i 点为中心的承载 v_i 上的平均值 $Z_{V_i}(x_i)$（简记为 Z_i）。且这 n 个承载 $v_i(i=1,2,\cdots,n)$既不同于 V，又各不相同（见图1.2）。

进行估计所使用的线性估计量为

$$Z_V^* = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i Z_i \tag{1-9}$$

它是 n 个数值的线性组合。

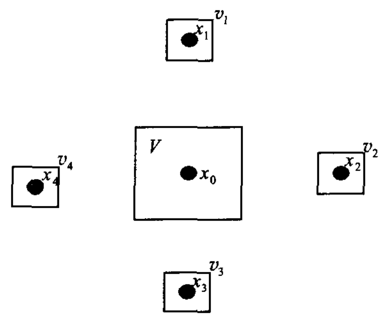


图 1.2 $n=4$ 时信息样点和待估块段的承载图（或估计构形图）

克里格估值的原则，就是在保证这个估计量 Z_V^* 是无偏的，且估计方差最小的前提下，求出 n 个权系数 λ_i。

1.3.2 普通克里格法

当区域化变量 $Z(x)$的数学期望 $E[Z(x)]=m$ 为未知常数时，这时的估计采用普通克里格法。若要使 Z_V^* 为 Z_V 的无偏估计量，即要求

$$E(Z_V^* - Z_V) = 0 \tag{1-10}$$

$$\because \quad E(Z_V) = \frac{1}{V}\int_V E[Z(x)]\mathrm{d}x = m$$

又 $$\because \quad E(Z_V^*) = E\Big(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i Z_i\Big) = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i E(Z_i) = m\sum_{i=1}^{n}\lambda_i$$

故得无偏性条件：

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i = 1 \tag{1-11}$$

在满足无偏性条件下，估计方差 σ_E^2 为

$$
\begin{aligned}
\sigma_E^2 &= E(Z_V - Z_V^*)^2 = E\Big[Z_V - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i Z(x_i)\Big]^2 \\
&= \bar{C}(V,V) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\lambda_i\lambda_j\bar{C}(x_i,x_j) - 2\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\bar{C}(x_i,V)
\end{aligned}
\tag{1-12}
$$

要使估计方差 σ_E^2 为最小，根据拉格朗日原理，令

$$F=\sigma_E^2-2\mu\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i-1\right) \tag{1-13}$$

这里 F 是 n 个权系数 λ_i 和 μ 的 $(n+1)$ 元函数，-2μ 是拉格朗日乘数。求出 F 对 λ_i $(i=1,2,\cdots,n)$ 以及 F 对 μ 的偏导数，并令其为零，便得到下列方程组：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial \lambda_i}=-2\bar{C}(x_i,V)+2\sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_j C(x_i,x_j)-2\mu=0 \quad (i=1,2,\cdots,n) \\ \dfrac{\partial F}{\partial \mu}=-2\left(\sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i-1\right)=0 \end{cases} \tag{1-14}$$

整理得：

$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{n}\lambda_j C(x_i,x_j)-\mu=\bar{C}(x_i,V) \quad (i=1,2,\cdots,n) \\ \sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i=1 \end{cases} \tag{1-15}$$

这 $(n+1)$ 个方程的方程组，称为普通克里格方程组。

普通克里格方差计算公式为

$$\sigma_K^2=\bar{C}(V,V)-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\bar{C}(x_i,V)+\mu \tag{1-16}$$

用半变异函数表示为

$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{n}\lambda_j\gamma(x_i,x_j)+\mu=\bar{\gamma}(x_i,V) \quad (i=1,2,\cdots,n) \\ \sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i=1 \end{cases} \tag{1-17}$$

$$\sigma_K^2=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\bar{\gamma}(x_i,V)-\bar{\gamma}(V,V)+\mu \tag{1-18}$$

以上是样品的承载是点承载的情况，若样品的承载是以 x_i 为中心其体积为 v_i 的承载时，将公式中的协方差 $C(x_i,x_j)$ 变为样品域之间的平均协方差 $\bar{C}(v_i,v_j)$，相应的公式为

$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{n}\lambda_j\bar{C}(v_i,v_j)-\mu=\bar{C}(v_i,V) \quad (i=1,2,\cdots,n) \\ \sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i=1 \end{cases} \tag{1-19}$$

$$\sigma_K^2=\bar{C}(V,V)-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\bar{C}(v_i,V)+\mu \tag{1-20}$$

$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{n}\lambda_j\bar{\gamma}(v_i,v_j)+\mu=\bar{\gamma}(v_i,V) \quad (i=1,2,\cdots,n) \\ \sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i=1 \end{cases} \tag{1-21}$$