

土壤盐分离子对浸提液电导率的敏感性分析建模

马 亮¹, 何继武^{2*}, 刘 锋¹, 陈亮亮¹

(1. 新疆农业大学水利与土木工程学院, 新疆 乌鲁木齐 830052; 2. 新疆农业大学重大项目管理办公室, 新疆 乌鲁木齐 830052)

摘 要: 为了研究土壤盐分离子对浸提液电导率的敏感性, 首先采用灰色关联分析法对影响土壤浸提液电导率的盐分离子进行初步分析, 之后采用缺省因子法与主成分分析法进一步分析检验。结果表明: Cl^- 、 Na^+ 这两种离子对土壤浸提液电导率的变化最为敏感; 灰色关联分析法所得结果与基于缺省因子法的主成分分析模型结果基本一致; 影响土壤浸提液电导率的 7 种盐分离子之间存在多重共线性, 应用主成分回归方法建立的电导率预测模型能够对实测变量作出合理的模拟。

关键词: 盐分离子; 土壤浸提液电导率; 敏感因子; 主成分分析; 灰色关联分析
中图分类号: S153.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-7601(2011)06-0143-04

土壤以及地下水中水溶性盐类的定量化分析, 是研究土壤盐分动态、确定土壤盐渍化程度以及进行盐渍土改良应用的关键环节之一^[1]。在描述土壤盐分状况时, 常用的指标是土壤总盐含量和土壤浸提液电导率, 但由于土壤总盐含量的检测化验过程较为复杂, 且其与土壤浸提液有着密切联系, 故实际应用中通常采用土壤溶液电导率这一参数来表征土壤盐分的实际状况。土壤溶液电导率包含了水分含量、盐分及离子组成等信息, 且该参数具有简便、快捷、可比性强等特点^[2,3]。电导法测定土壤盐渍度比较简洁、准确, 其测定原理是电解质溶液的导电作用, 目前国内外在测定土壤电导率时, 普遍采用的是 1:5 土水比浸提法。

电导率法测定土壤盐渍度时, 浸提液土水比例、土壤盐分离子组成、溶液盐分浓度、离子迁移速率、溶液温度和电导池常数等都会不同程度地影响土壤溶液电导率的大小^[4]。在以上诸多影响因素中, 许多文献认为土壤溶液的离子组成和浓度对电导率的影响明显大于其余各因素^[3]。

鉴于以上原因, 本文在前人研究的基础上, 首先利用灰色关联分析法初步判断影响土壤浸提液的主要盐分离子, 在此基础上, 将缺省因子检验法引入到主成分回归分析中, 来进一步验证灰色关联分析的正确性, 并进一步对盐分离子与土壤浸提液电导率的敏感关系作定性与定量分析。

1 试验地概况与试验内容

田间试验点位于新疆巴音郭楞蒙古自治州水利

管理处灌溉试验站内, 其地理位置为 $41^{\circ}35' \sim 41^{\circ}37' \text{N}$, $86^{\circ}09' \sim 86^{\circ}12' \text{E}$, 海拔高度在 895~903 m。试验地采用滴灌系统灌溉, 灌溉水为孔雀河河水, 河水矿化度 1.0~1.1 g/L。棉花种植品种为新陆中 21 号, 生育期为 133~136 d。土壤取样采取随机方式, 取样深度为棉花耕作层深度, 即 0~30 cm, 共计取样点 52 处。

将采集的土样带回实验室, 经自然风干之后磨碎、过 1 mm 筛。用天平准确称取 18.0 g 的土壤置于离心管中, 加入 90 ml 蒸馏水, 将离心管置于振荡器上振荡 3 min 后, 将以 4 500~5 000 r/min 转速离心后获得的上清液倒入烧杯中, 并立即测量其电导率和盐分离子组成。浸提液电导率测定时, 电导率仪经过温度校正, 试验室室温为 22.8℃。

土壤浸提液盐分离子参数统计值见表 1。

2 基于灰色关联度的浸提液敏感性分析

2.1 灰色关联模型^[5]

设有一母因素数列, 记作 $X_0 = (X_0(1), X_0(2), X_0(3), \dots, X_0(n))$, 同时有一系列子因素数列, 依次记作 $X_1, X_2, X_3, \dots, X_m$ 。

$$\begin{aligned} X_1 &= (X_1(1), X_1(2), X_1(3), \dots, X_1(n)); \\ X_2 &= (X_2(1), X_2(2), X_2(3), \dots, X_2(n)); \\ &\dots \\ X_m &= (X_m(1), X_m(2), X_m(3), \dots, X_m(n)). \end{aligned}$$

对于 X_i 对 X_0 在 k 点的关联系数可以用 $\zeta_i(K)$ 来表示, $\zeta_i(K)$ 的表达式为:

收稿日期: 2011-05-16
基金项目: 新疆农业大学前期资助课题(XJAU200921); 新疆维吾尔自治区高校科研计划项目(XJEDU2010S14); 教育部/新疆农业大学棉花工程研究中心项目。
作者简介: 马 亮(1980—), 男, 新疆石河子人, 讲师, 主要从事农业节水灌溉研究。E-mail: xjml1999@163.com。
*通讯作者: 何继武(1964—), 男, 新疆乌鲁木齐人, 副教授, 主要从事科研管理工作。
(C)1994-2022 China Academic Electronic Journal Publishing. All rights reserved. http://www.cnki.net

$$\zeta_i(K) = \frac{\min_i \min_k |X_0(K) - X_i(K)| + P \max_i \max_k |X_0(K) - X_i(K)|}{\max_i |X_0(K) - X_i(K)| + P \max_i \max_k |X_0(K) - X_i(K)|} \quad (1)$$

式中, $\min_i \min_k |X_0(k) - X_i(k)|$ 为两级最小差, $\max_i \max_k |X_0(k) - X_i(k)|$ 为两级最大差, P 为分辨系数,

其值在 $0 \sim 1$ 之间, 一般可取 $0.5^{[6]}$ 。
因为每一列的数据都有 n 个, 所以计算出来的关联系数也有 n 个, 对这 n 个数据取平均值, 即为关联度。关联度越大, 说明该离子成分与土壤浸提液电导率关系越密切, 从而该因素的影响就大。

表 1 土壤浸提液盐分离子参数统计
Table 1 Statistical parameters of soil extracts ion

项目 Item	浸提液电导率 Conductivity (ms/cm)	浸提液总盐 Total salt (g/L)	离子浓度(g/L) Ion concentration						
			HCO ₃ ⁻	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	Ca ²⁺	Mg ²⁺	Na ⁺	K ⁺
最大值 Max·	14.79	24.418	1.331	9.871	8.386	0.706	1.463	7.031	0.301
最小值 Min·	0.74	0.607	0.221	0.092	0.119	0.041	0.035	0.085	0.008
平均值 Mean	4.60	6.007	0.504	1.423	2.178	0.268	0.281	1.288	0.060
标准差 St·dev·	3.42	5.636	0.233	1.930	1.948	0.169	0.257	1.574	0.060
变异系数 Vari·coefi·	0.74	0.938	0.461	1.356	0.894	0.630	0.917	1.222	0.996

2.2 敏感因子的灰色关联分析

利用式(1)计算得出各盐分离子组成与土壤浸提液电导率的关联度(见表 2, 由于 CO₃²⁻ 离子在土壤浸提液中的存在时间较短, 实验所有样本中该项

指标观测值均为 0, 故未将其引入灰色关联分析, 这里仅对其余除 CO₃²⁻ 离子的其余 7 种离子进行分析)。

表 2 土壤浸提液电导率与各离子的关联度
Table 2 Correlation of soil extracts conductivity and each ion

离子 Ion	HCO ₃ ⁻	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	Ca ²⁺	Mg ²⁺	Na ⁺	K ⁺
关联度 Correlation	0.7664	0.8765	0.8741	0.7597	0.852	0.9073	0.8429
排序 Order	6	2	3	7	4	1	5

由于灰色关联分析主要是通过对系统数据序列的几何关系进行比较来分析系统中各因素间的关联程度的^[7], 故灰色关联度大, 是不是一定代表着该离子对电导率的敏感度大呢? 为了进一步验证灰色关联分析法的准确性, 本文将缺省因子法引入主成分分析当中, 以验证灰色关联分析法的正确性。

3 基于缺省因子法与主成分分析的土壤浸提液敏感性建模

3.1 主成分分析法

1933 年由 Hotelling 提出的主成分分析利用降维的思想, 把多指标转化为少数几个不相关的综合指标的一种多元统计分析方法, 从可观测的显式变量中提取信息, 组成不能直接观测的隐含变量。所采用的主要原则是使方差最大, 不改变样本的数据结构, 尽可能多地保留原变量所包含的信息, 同时用尽可能少的主成分替代原有变量, 从而使问题简化^[8]。

设有 p 个指标组成的随机变量 $X = (x_1, x_2, \dots, x_p)'$, 作指标的线性组合:

$$\begin{cases} F_1 = a_{11}x_1 + a_{21}x_2 + \dots + a_{p1}x_p \\ F_2 = a_{12}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{p2}x_p \\ F_3 = a_{13}x_1 + a_{23}x_2 + \dots + a_{p3}x_p \\ \dots\dots\dots \\ F_p = a_{1p}x_1 + a_{2p}x_2 + \dots + a_{pp}x_p \end{cases} \quad (2)$$

式中, F_1 在 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 的一切线性组合中方差最大; F_2 与 F_1 不相关, 且在 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 的一切线性组合中方差最大; F_p 与 $F_1, F_2, \dots, F_{p-1}$ 都不相关, 且在 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 的一切线性组合中方差最大。

X 的协方差阵 $\sum > 0 (\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0)$, λ_i 为 $\sum$ 的非零特征根, u_i 为对应 λ_i 的标准特征向量, 数学定理已证明, 第 i 主成分为 $F_i = u_i'X (i = 1, 2, \dots, p)$ 。 $\lambda_k / \sum_{i=1}^p \lambda_i$ 为主成分 $F_1, F_2, \dots, F_m$ 的累积贡献率, 累积贡献率越大, 丢失数据信息就越少, 通常 m 取值标准应使累积贡献率达到 85% 以上^[9]。

3.2 主成分计算分析

将 52 个土样盐分离子与土壤浸提液电导率值进行主成分回归分析, 结果见表 3。由表 3 可以知

道,第一、第二、第三这 3 个主成分的累计贡献率为 92.31%,基本上能够反映所有变量的原有信息,因此,选用前 3 个主成分作为数据分析的有效成分。

从表 3、表 4 可以看出,在影响土壤浸提液电导率的 7 种离子中,第一主成分的贡献率占总变异信息的 69.33%,主要反映 Cl^- 、 Na^+ 两种离子的变异信息,第二主成分的贡献率占总变异信息的 13.68%;主要反映 HCO_3^- 和 K^+ 两种离子成分的变异信息;第三主成分的贡献率占总变异信息的 9.29%,主要反映 SO_4^{2-} 、 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 的变异信息。载荷值主要反映的是各变量对主成分的贡献大小,从表 4 可以知道,第一主成分主要涵盖了 Cl^- 、 Na^+ 这两种离子的信息数据,这两种离子在第一主成分上的载荷分别为 0.9241 和 0.9163,都超过了 0.9 以上,因此认为这两种离子是影响第一主成分的主要离子。第二个主成分主要涵盖了 HCO_3^- 和 K^+ 这两

种离子的信息数据,这两种离子在第二主成分上的载荷分别为 0.9243 和 0.7754。第三个主成分主要涵盖了 SO_4^{2-} 、 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 这三种离子成分的信息数据,这三种离子在第三主成分上的载荷分别为 -0.6921 、 -0.9098 、 -0.7399 。

表 3 主成分的特征值及贡献率

Table 3 Eigenvalues and cumulative contribution ratios

主成分 PC	特征值 Eigenvalue	百分率(%) Percentage	累计百分率(%) Accumulation percentage
1	4.8531	69.3306	69.3306
2	0.9579	13.6836	83.0142
3	0.6506	9.2949	92.3091
4	0.3829	5.4702	97.7792
5	0.1006	1.4365	99.2157
6	0.0548	0.7828	99.9985
7	0.0001	0.0015	100

表 4 主成分特征向量与载荷矩阵

Table 4 Eigenvectors and factor loads of correlation matrix

离子成分 Ion type	第一主成分 First PC		第二主成分 Second PC		第三主成分 Third PC	
	特征向量 Eigenvectors	荷载 Load	特征向量 Eigenvectors	荷载 Load	特征向量 Eigenvectors	荷载 Load
HCO_3^-	0.2673	0.0996	0.7344	0.9243	0.1546	-0.1209
Cl^-	0.3842	0.9241	-0.3754	0.161	0.4344	-0.3066
SO_4^{2-}	0.4355	0.5729	-0.0934	0.3708	-0.1564	-0.6921
Ca^{2+}	0.3409	0.2417	-0.2040	0.1051	-0.6713	-0.9098
Mg^{2+}	0.415	0.3991	0.0470	0.4439	-0.3176	-0.7399
Na^+	0.3998	0.9163	-0.3008	0.2419	0.4459	-0.3063
K^+	0.3781	0.3814	0.4202	0.7754	0.1119	-0.3527

综上所述,可以看出,第一主成分的贡献率占总变异信息的 69.33%,而第一主成分又突出反映了 Cl^- 、 Na^+ 这两种盐分离子的信息数据,故认为 Cl^- 、 Na^+ 这两种离子是影响土壤浸提液电导率的主要因素(这仍然是定性分析),下面将结合缺省因子法与主成分回归进行定量分析计算。

3.3 基于缺省因子法与主成分回归的敏感因子建模

3.3.1 缺省因子法 本文将文献[10]的缺省因子法引入到主成分回归计算中,通过对各输入因子的缺省进行主成分回归模型的建立及检验,根据其检验误差与全因子模型检验误差的比值 R_i 大小来确定缺省因子对输出因子的敏感程度。

$$R_i = RMSE_i / RMSE$$

(3)

式中, R_i 为敏感性指数; $RMSE_i$ 为缺省第 i 个因子时模型检验误差; $RMSE$ 为全因子模型检验误差。若 $RMSE_i > RMSE_j$, 表示土壤浸提液电导率对第 i 个因子较第 j 个因子敏感

3.3.2 敏感性因子分析结果 本文利用主成分回归模型将 7 种离子逐一进行缺省,建立 6 因子的主成分回归模型。通过缺省因子检验法分析比较,结果见表 5。

表 5 缺省因子检验结果

Table 5 Validation results of default factors

离子种类 Ion type	平均相对误差(%) Relative error	R
全部离子 All ion	10.42	—
HCO_3^-	11.41	1.10
Cl^-	14.42	1.38
SO_4^{2-}	10.73	1.03
Ca^{2+}	11.46	1.07
Mg^{2+}	11.15	1.07
Na^+	14.69	1.41
K^+	11.57	1.11

由表 5 可知, Cl^- 、 Na^+ 这两种离子对土壤浸提

液电导率的敏感性指数较大,其 R 值分别为 1.38 和 1.41;其次为 HCO_3^- 和 K^+ 这两种离子,其 R 值分别为 1.10 和 1.11;最后为 SO_4^{2-} 、 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 这三种离子,其 R 值分别为 1.03、1.07 和 1.07。此分析结果与主成分分析的定性结果基本一致,与灰色关联分析的结果存在一定的出入(主要是 HCO_3^- 、 K^+ 、 SO_4^{2-} 、 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 这五种离子),但是在主要影响离子的判定上是完全一致的,这也充分说明了该地区土壤浸提液电导率受 Cl^- 、 Na^+ 这两种离子的影响较大。

3.3.3 主成分回归建模分析 在对土壤盐分离子与土壤浸提液电导率进行主成分回归建模之前,有必要先对这 7 种离子进行多重共线性诊断。目前,在诊断自变量系统中是否存在多重相关性时,经常采用方差膨胀因子(VIF)诊断法^[11]。如果 $\text{VIF}_i > 10$,表示多重相关性将严重影响到系统的模拟值。

针对该建模系统,土壤盐分离子与浸提液电导率的共线性诊断结果见表 6。

表 6 方差膨胀因子
Table 6 Variance inflation factors

离子类型 Ion type	VIF
HCO_3^-	22.3
Cl^-	2981.7
SO_4^{2-}	1513.0
Ca^{2+}	73.4
Mg^{2+}	431.1
Na^+	4646.1
K^+	6.8

由表 6 可以看出,7 种盐分离子之间存在较为严重的多重共线性,可以用主成分回归模型来加以分析。

在经过主成分分析与多重共线性诊断后,将 3 个主成分的得分值代替原来的自变量进行多重回归分析,得到标准化自变量与因变量间的回归模型:

$$y = 4.5962 + 1.465z_1 - 0.5112z_2 + 1.0238z_3$$
$$(n = 52, r = 0.9846, r_{0.01} = 0.354) \quad (4)$$

式(4)中, z_1 为第一主成分得分值; z_2 为第二主成分得分值; z_3 为第三主成分得分值; n 为样本数; r 为模型相关系数; $r_{0.01}$ 为模型临界相关系数。

该回归方程通过了相关系数法的统计检验,达到极显著水平,方程是可靠的,可以用第一、第二、第三主成分的得分值来对土壤浸提液电导率进行预测,如表 7 所示,建立的主成分回归方程,各回归系

数均通过 t 检验,达到极显著水平。

表 7 主成分回归方程系数值

Table 7 Coefficient of principal component regression equation				
变量 z variable z	回归系数 Regression coefficient	标准误差 Standard error	t 值 T value	显著水平 Significance
b_0	4.5962	0.0848	54.2279	0.0001
b_1	1.465	0.0388	37.7157	0.0001
b_2	-0.5112	0.0874	-5.8465	0.0001
b_3	1.0238	0.1061	9.6507	0.0001

4 结论与讨论

1) 针对土壤盐分离子对土壤浸提液电导率的敏感性分析,本文首先采用灰色关联分析法进行初步判断,之后引入缺省因子法与主成分分析法进行校核,结果表明两种方法所得结果在主要敏感因子的判断方面是完全一致的,但是在次要敏感离子的判断上存在一定的差别,这说明该组合模型在主要敏感因子的判别上是适用的。

2) 通过离子敏感性分析,得出在该地区、该土壤条件下 Cl^- 、 Na^+ 两种离子对土壤浸提液电导率的变化最为敏感,电导率的变化主要受这两种离子的影响。

3) 影响浸提液电导率的 7 种离子之间存在严重的多重共线性,应用主成分回归方法建立电导率的预测模型能够对实测因变量(土壤浸提液电导率)的变化作出合理的、符合实际的模拟预测。

4) 由于土壤盐分组成是地质条件、地球化学条件以及环境条件所决定的,既有地理空间上的差异性,也有季节上的差异性,而且与探测的技术和方法没有任何本质联系。故本文提出 Cl^- 、 Na^+ 两种离子对浸提液电导率的变化最为敏感,仅仅适合该研究地区的土壤状况,不具有普遍意义。

参 考 文 献:

[1] Marshal T J, Holmes J W. Soil Physics[M]. London:Cambridge University Press, 1979:121-123.

[2] Rhoades J D, Shouse P J, Alves N A. Determining soil salinity from soil electrical conductivity using different models and estimates[J]. Soil Sci Soc Am J, 1990,54:46-54.

[3] Bhoades J D, Chanduvi F, Lesch S. Soil Salinity Assessment[R]. FAO Irrigation and Drainage Papers, 1999,57:3-7.

[4] 中国土壤学会盐渍土专业委员会. 中国盐渍土分类分级文集[C]. 南京:江苏科学技术出版社,1989:75-78.

[5] 魏光辉,马 亮. 基于灰色关联分析与 RBF 神经网络的水面蒸发量预测[J]. 干旱气象,2009,27(1):73-77.

(下转第 178 页)

Correlations between weighted VTCI in key growth and development stages of winter wheat and wheat yields in the Guanzhong Plain

HUANG Hong, WANG Peng-xin^{*}, LI Li

(College of Information and Electrical Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China)

Abstract: Selecting drought monitoring results of Vegetation Temperature Condition Index (VTCI) in the key growth and development stages of winter wheat in the Guanzhong Plain, two subjective weighting methods, analytic hierarchy process method and factor rank ordering method, and two objective weighting methods, principal component analysis and entropy method are used to calculate weighted VTCI values. The linear regression analysis is applied to study the correlation between the weighted VTCI values and wheat yields for the five regions in the Guanzhong Plain respectively, and as well as the drought impact on wheat yield based on VTCI. The results show that there are significant correlations between wheat yields and weighted VTCI values by using the subjective weighting methods, while there are poor correlations by using the objective weighting methods. These results indicate that the subjective weighting methods are more effective ways to calculate weighted VTCI values, which can be used to establish the linear relationship with wheat yields, prove the feasibility of wheat production forecast by using VTCI approach, and show that monitoring drought in the Guanzhong Plain is very referable.

Keywords: impact estimation; vegetation temperature condition index; subjective weighting method; objective weighting method

(上接第 146 页)

- [6] 邓聚龙. 灰色系统基础方法[M]. 武汉: 华中理工大学出版社, 1987, 45—51.
- [7] 刘思峰, 谢乃明. 灰色系统理论及其应用(第四版)[M]. 北京: 科学出版社, 2008, 88—97.
- [8] 陈 慧, 冯利华, 孙丽娜. 南京市水资源承载力的主成分分析[J]. 人民长江, 2010, 41(12): 95—98.
- [9] 黄 婷, 岳西杰, 葛玺祖, 等. 基于主成分分析的黄土沟壑区土壤肥力质量评价——以长武县耕地土壤为例[J]. 干旱地区农业研究, 2010, (3): 141—147.
- [10] 于国强, 李占斌, 张 霞, 等. 土壤水盐动态的 BP 神经网络模型及灰色关联分析[J]. 农业工程学报, 2009, 25(11): 141—147.
- [11] 刘国旗. 多重共线性的产生原因及其诊断处理[J]. 合肥工业大学学报(自然科学版), 2001, 24(4): 607—610.

Modeling on sensitivity of soil salt ions to electrical conductivity of soil extract

MA Liang¹, HE Ji-wu², LIU Feng¹, CHEN Liang-liang¹

(1. College of Water Resources & Civil Engineering, Xinjiang Agricultural University, Urumqi, Xinjiang 830032, China;

2. Major Project Management Office, Xinjiang Agricultural University, Urumqi, Xinjiang 830052, China)

Abstract: A study was conducted on the sensitivity of soil salt ions to the electrical conductivity of soil extract to promote technical progress in improved alkaline field and salt-water movement theory in depth. A preliminary qualitative analysis was first made by applying grey relational analysis in electrical conductivity of soil extract and salt ions, and then by default factor analysis and principal component analysis for further authentication. The results show that: Cl^- and Na^+ ions are more sensitive than any other ions to the electrical conductivity of soil extract; the results of grey relational analysis method are the same as the results of principal component analysis model based on the default factor method; the seven salt ions have multicollinearity on electrical conductivity of soil extract, and the conductivity prediction model based on principal component regression method can make reasonable simulation of variables. This provides a new way for further study on salt-water movement theory.

Keywords: salt ion; electrical conductivity of soil extract; sensitive factor; principal component analysis; grey relational analysis