

马尔可夫模型在洞庭湖区 Cd 的生态地球化学评价中的应用

张建新, 邢旭东, 鲁江, 郑中

湖南省地质研究所, 湖南 长沙 410007

Zhang Jianxin, Xing Xudong, Lu Jiang, Zheng Zhong

Hunan Institute of Geology, Changsha 410007, China

Zhang Jianxin, Xing Xudong, Lu Jiang, et al. Application of Markov model to ecology-geochemistry evaluation of cadmium in the Dongting Lake region. *Earth Science Frontiers*, 2007, 14(3): 204-212

Abstract: Based on the Markov chain model, we discuss quantitatively the transfer and conversion of Cd element in cultivated areas of the Dongting Lake region, Hunan province, China. We calculate the residence time and environmental capacity of Cd element in the soil-water-paddy-atmosphere system. Furthermore, we discuss the ecology-bearing capacity of the system. We obtain the relationship between the environmental capacity (Cd_A) of Cd and ecology-bearing capacity ($M_{\text{population}}$) of the system: $Cd_A = 3.56 \times 10^{-4} M_{\text{population}}$. This provides a new approach for the geochemistry evaluation of an ecosystem.

Key words: Markov chain; transfer and conversion; residence time; environmental capacity; ecosystem; ecology-bearing capacity; cadmium

摘要:根据马尔可夫链模型,定量地探讨了湖南省洞庭湖区农田生态系统中Cd的迁移转化问题,计算了Cd在土壤-水-稻谷-大气系统中的滞留时间和环境允许量,进而探讨了系统的生态承载力,得到系统中Cd的最大允许排放量 Cd_A 与生态承载力 $M_{\text{人口}}$ 之间的关系式: $Cd_A = 3.56 \times 10^{-4} M_{\text{人口}}$,为生态环境地球化学评价提供了一种新的方法和途径。

关键词:马尔可夫链;迁移转化;滞留时间;环境容量;生态系统;生态承载力;镉

中图分类号:X142;P595 **文献标识码:**A **文章编号:**1005-2321(2007)03-0204-09

0 引言

洞庭湖区 Cd 在表层土壤中的最高含量达 51.20 mg/kg,背景值为 0.36 mg/kg,深层土壤基准值为 0.14 mg/kg,系我国土壤 Cd 丰度最高的区域,被认为是我国近年 1:25 万多目标地球化学调

查中发现的重大科学问题^①。如何针对元素的分布现状选用适当的模型正确评价其生态效应及发展趋势,不仅是该地区土壤 Cd 的生态地球化学评价,也是全国当前生态地球化学评价工作中正在不断探索和研究中的方法问题。

鉴于传统的简单对比评价方法只能是定性的,尤其是在定量反映元素的演变过程和判断趋势方面

收稿日期:2006-12-01;修回日期:2007-03-07

基金项目:湖南省洞庭湖区生态地球化学调查项目(1212010310304)

作者简介:张建新(1958—),男,教授级高级工程师,主要从事环境地球化学、农业(生态)地质研究工作,兼任中国地质大学(武汉)、湖南科技大学硕士生导师。Tel:0731-5362029;E-mail:zjx0731@163.com

①中国地质调查局与湖南省人民政府合作项目“湖南省洞庭湖区生态地球化学调查”阶段成果(2003—2007)。

的不足,难以量化生态地球化学系统不同时刻的元素之动态变化趋势性。而马尔可夫方法在对某种系统变化趋势的定量评价方面具有一定优势。因此,本文尝试将其利用于湖南洞庭湖区农田生态地球化学系统的评价中。

马尔可夫链(Markov chain)是俄国数学家Markov于1907年用数学方法研究布朗运动过程时发现的一种随机运动规律,经几代数数学家的努力,它已成为研究随机过程的专门的数学分支^[1]。作为一种数学分析工具,目前马尔可夫链在市场决策销售分析^[2]、农业估产^[3]、基因遗传、生态环境演化^[4-7]、土地利用及评价^[8-11]、灾害预警预报^[12-15]、信息处理^[16-17]、环境评价、地质研究等社会经济和自然科学各领域的预测和评价中得以广泛应用。如在环境评价方面,李志强和王世俊(2002)利用灰色马尔可夫模型对某平原河段DO浓度进行了预测^[18]。李冰等(2004)建立了成都平原土壤有机质、全N、速效K等3种典型养分的马尔可夫链评价模型,并通过指标近20年的变化趋势验证马尔可夫应用于土壤养分动态评价的可行性及优点,为土壤养分动态评价提供了依据^[19]。

马尔可夫方法在我国地学研究中的应用始于20世纪70年代^[20-22],至今已广泛应用于火山岩相变化^[23]、沉积作用和火山喷发过程的模拟及对比^[24]、水文地质与工程地质中的地层对比^[25-27]、油气勘探^[28]等方面。对文献检索并综合分析后发现,我国地学界应用马尔可夫方法多限于或类似于地层沉积过程的时空结构方面,如运用马尔可夫概型(Markovian scheme)查明火山岩系的喷出顺序和侵入体形成的先后顺序,划分矿床的成矿期和成矿阶段、揭示各个成矿阶段的空间分布等,其均与地层剖面的马尔可夫过程模拟^[21]有关,而地质体中元素转移趋势(概率)的研究则鲜有涉及^[29]。

本文从马尔可夫链的基本数学模型-转移概率(transition probability)入手^[30],以洞庭湖区农田生态地球化学系统的Cd为例,试对表征元素转移趋势的生物地球化学循环建立概率模型,进而对Cd在系统中的持续时间、生态效应和变化趋势作简单探讨,旨在推介方法,以为我国类似的生态地球化学评价提供借鉴。研究认为马尔可夫链模型方法具有直观、模型相对简单、实用性较强、可反映动态趋势的优点,可为生态地球化学评价提供一种新的思路和方法。

1 马尔可夫链的基本概念

事物皆随时而变,其中一些变化是有记忆的,即当前状态与过去的历史有关,如某些生理指标;有些则是无记忆的,从当前状态变化到另一状态的可能性只与其当前状态有关,如农田生态系统中的Cd元素循环,是保留于土壤中抑或溶解于水中、吸收于植物中,只与当前土壤中Cd的总量及各相态的分配状况有关,而与Cd进入土壤之前的历史过程无关,无论之前Cd是由母质母岩风化带来,还是施肥等人为活动加入,结果均一样。对于这类无后效的变化过程,可建立马尔可夫过程数学模型来进行研究。

将事物在 t 时刻所处状态记作 $x(t)$,把被研究事物 $x(t)$ 所有可能状态的集合称为状态空间,记作 U 。因受大量随机因素干扰,状态 $x(t)$ 随时间 t 的变化而具有不确定性,状态 $x(t)$ 在状态空间 U 中是以一定概率出现的。上述依赖于参数 t 的、以一定概率取值于某一状态的过程,可称为随机过程(stochastic process)。

某一随机过程,当时间 t_0 时的状态为 i ,之后经 t ($t \geq 0$)时间,于 t_0+t 时刻状态达到 j ,这一转变过程的概率记作 $p_{ij}(t_0, t_0+t)$,此概率如果与时间 t_0 时所处的状态 i 有关,而与 t_0 前所处的状态无关,这样的过程是无后效性的,定义无后效性的随机过程为马尔可夫过程(Markov process)。

若某随机过程从 t_0 时刻到 t_0+t ,状态从 i 转变到状态 j 的概率 $p_{ij}(t_0, t_0+t)$ 与所处的时刻 t_0 无关,而只与状态 i, j 及时间间隔 t 有关,则称此随机过程关于时间为齐性,即时齐性,此概率可记为 $p_{ij}(t)$ 。时齐性随机过程的状态从 i 到 j 转变的概率为一值,与开始的时间无关,在任何时刻皆适用。本研究局限于时齐性马尔可夫过程。数学上将状态离散、时间离散的马尔可夫过程定义为马尔可夫链。

在马尔可夫链理论中,将从状态 i 经过1步转变成 j 状态的概率 $p_{ij}(1)$ 称为转移概率,记作 p_{ij} 。让 i, j 跑遍所有状态, $p_{ij}(i, j=1, 2, \dots, n)$ 排成的矩阵

$$P = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{bmatrix} \quad (1)$$

称为转移矩阵(transition matrix)。转移矩阵描述了马尔可夫链的时齐性、无后效性的随机过程特性。可证明,对于转移矩阵 P , 它的第 i 行向量 $\{p_{i1}, p_{i2}, p_{i3}, p_{i4}\}$ 分别代表从 i 状态经一步达到所有状态的概率,显然,行向量和代表必然事件,概率等于 1;从状态 i 经过 k 步转变成 j 状态的转移概率是矩阵乘积 P^k 的第 i 行 j 列元素值;状态分配比率为随机向量的事件,经过 k 步转移后,新状态分配比率向量 $X^{(k)} = XP^k$ 。

2 洞庭湖区农田生态系统中 Cd 循环的转移矩阵

研究洞庭湖区农田生态系统中 Cd 循环,考虑土壤中含 Cd、水体含 Cd、稻谷含 Cd、大气尘含 Cd 和流失于系统之外 5 种状态,分别以 u_1, u_2, u_3, u_4 和 u_5 表示,基本状态空间为 $U = \{u_1, u_2, u_3, u_4, u_5\}$ 。

理论上,从地质体中原子的随机运动可建立描述化学元素转移概率的柯尔莫各洛夫(Komlgorov)方程^[31],其涉及粒子位移速率参数等。由科氏方程以及化学动力学和地球化学原理分析,可以推断元素转移概率与其浓度有关。故本文主要据各种分析测试结果,参考理论分析和经验推断,以 a(年)为步长单位,确定洞庭湖区农田生态系统年内 Cd 在各状态间转移的概率。

2.1 土壤与其他 4 种状态的 Cd 相互转移概率

(1) 土壤-水体间的 Cd 转移概率

鲍征宇等^①取洞庭湖出口——城陵矶处的冲湖积土作的 Cd^{2+} 离子吸附-解吸静态法及间歇法动力学实验,静态法结果表明,土壤 Cd 量 $S(\text{mg/kg})$ 与平衡时($t > 100 \text{ h}$)的土壤溶液的 Cd^{2+} 浓度 $C(\text{mg/L})$ 的关系式: $S = 53.075 C$,服从符合 Henry 模式;当加入的 Cd^{2+} 含量为 0 时,实测的解吸量为 0.0066 mg/kg ,仅占土壤原始含量(4.76 mg/kg)的 0.14% ;据关系式算出的、在实验范围内(添加的 Cd^{2+} 浓度为 $0 \sim 100 \text{ mg/L}$) Cd^{2+} 与土壤 Cd 的溶解比为 1.8841% ;间歇法所得关系式为: $S = 650.82 C$,相应的溶解比为 0.1537% 。上述实验与德国莱茵河流域^[32]等同 pH 值条件下 Cd 的年淋出速率相当,当莱茵河流域土壤 pH 分别为 6、5.5、5、4.5 和 4 时, Cd^{2+} 年淋出速率($\%$)分别为 0.14、0.3、0.6、1.4 和 2.9。因此本区 Cd 从土壤转移至溶解态的概率可取 0.14% 。

从上述实验可见,当土壤不外加 Cd^{2+} 时,为溶解、解吸过程,即 Cd 从水体至土壤的转移概率为 0。

(2) 土壤与其他 3 种状态的 Cd 转移概率

从植物生理学可知,植物从土壤中吸收元素是通过土壤溶液的,故 Cd 从土壤转移至稻谷的概率为 0。

考虑稻谷中种子还田约 5% ,系统内牲口家禽等的消耗约 20% (饲料粮占粮食总产的 30%)^②及稻谷撒落等,则 Cd 从稻谷至土壤的转移概率可估计为 25% 。

先仅考虑因扬尘和降尘时土壤与大气间的 Cd 转移(工业排放等外源性添加后文详述)。据资料^③本研究区内 6 个地级以上城市的空气质量均为三级,即总悬浮颗粒物(TSP)年平均为 0.30 mg/m^3 。设其扬尘与其他工业排放等的分担率为 50% ,并假设大气和地表的有效影响高(深)度分别为 1 km 和 2 cm ,则 TSP 与表土密度 1.3 g/cm^3 比值按有效高(深)度校正后为 $5.75 \times 10^{-6} : 1$,此比例作为 Cd 从土壤进入大气的概率估计值。保留于大气中的 Cd 量按空气质量二级标准(TSP 年平均为 0.20 mg/m^3)的 75% 计算,即约 50% 通过大气降尘返回地表。考虑水稻叶面吸收 Cd 和水稻覆盖度,设大气降尘总量中土壤和稻谷分担降尘 Cd 的比例为 $99 : 1$,则 Cd 从大气至土壤和稻谷的概率分别为 49.5% 和 0.5% 。

Cd 因水土流失随土壤迁出系统外的量可从 1951—1999 年出入洞庭湖泥沙相对量^[33]估算,出入洞湖泥比例为 $0.0086 : 1$,即 Cd 随水土流失于系统外概率为 0.0086 。若不考虑从系统外输入 Cd,则反向概率为 0。

2.2 水中 Cd 与其他 4 种状态的转移概率

农田生态系统水体分为可互相转换的土壤溶液和灌溉水两类,不含地下和地表径流水。稻谷通过土壤溶液从土壤中吸收 Cd 的比率可从各类水的 Cd 含量比较中间接推测。

杨忠芳等^④在本区采用静止法获取的土壤溶液

① 鲍征宇,等. 洞庭湖湿地的生态地球化学评价与研究报告. 2006(科研报告).

② 张建新,等. 土地利用与经济建设协调发展战略研究. 2001(科研报告).

③ 湖南省环境保护局. 2005 年湖南省环境状况公报.

④ 杨忠芳,等. 湖南洞庭湖地区农田生态系统区域生态地球化学评价报告. 2006(科研报告).

结果 Cd 含量平均为 0.000 56 mg/L,灌溉水 Cd 平均为 0.000 17 mg/L,两者均很低,与本区地表、地下水基本相当,后两 Cd 分别平均为 0.000 2 mg/L 和 0.000 03 mg/L(资料来源^①),说明土壤溶液吸持 Cd 的量较小,从土壤中溶解出的 Cd 较多且很快转移至稻谷中。有研究表明,植物根表附近残留的元素浓度可低至忽略不计^[34]。考虑到各类水体间的交换,可粗略假设农田生态系统的土壤溶液和灌溉水之 Cd 转移至稻谷的概率为 33%,残留于植物根系较远处的土壤溶液中的 Cd 为 10%,其余随水类间的交换流失于系统外。从杨忠芳及彭科林等^②两资料稻谷 Cd 含量等权平均值 0.12 mg/kg 与土壤背景值的比较,生物富集系数为 0.33 亦可得以佐证。

不难理解,反向从稻谷至水体 Cd 的转移概率为 0。

2.3 农田生态系统 Cd 循环的转移矩阵

Cd 在洞庭湖农田生态系统中的转移概率归纳于表 1。

其中如土壤中 Cd 的转移概率有 $p_{12}=0.001\ 4$, $p_{13}=0$, $p_{14}=0.000\ 005\ 75$, $p_{15}=0.008\ 6$,则保留于土壤的概率 $p_{11}=1-p_{12}-p_{13}-p_{14}-p_{15}=0.989\ 994\ 3$;水体中 Cd 转移出系统外的转移概率有 $p_{25}=1-p_{11}-p_{12}-p_{13}-p_{14}=0.57$;稻谷投放市场 Cd 转移出系统的概率为 $p_{35}=1-p_{31}-p_{32}-p_{33}-p_{34}=0.75$;若不考虑从系统外输入的 Cd,则 $p_{55}=1$, $p_{41}=p_{42}=p_{43}=p_{44}=0$ 。

3 农田生态系统 Cd 滞留时间的吸收马尔可夫链评价

3.1 吸收状态及吸收马尔可夫链典范式转移矩阵

表 1 所列 Cd 流失于系统外不再返回的状态称为吸收状态。

当马尔可夫链中状态 i 的转移概率满足两条件:(1) $p_{ii}=1$, (2) $p_{ik}=0, k \neq i$,则该状态为吸收状态(absorbing state)。吸收马尔可夫链(absorbing Markov chain)是指至少存在一个吸收状态或从任何状态经有限步终可到达一个吸收状态的马尔可夫链。吸收马尔可夫链中的非吸收状态称为转移状态(transient state)。

对于吸收马尔可夫链,从任何状态出发最终进入吸收状态的概率为 1,最终不能进入吸收状态的概率为 0。

因为吸收马尔可夫链的状态不是吸收状态就是

转移状态,所以可将吸收马尔可夫链的转移矩阵写成 r 个吸收状态排在前面、 k 个转移状态排在后面的统一的规范形式,称为典范式(canonical form):

$$P=\begin{bmatrix} E & O \\ R & Q \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} r \text{ 个吸收状态} \\ k \text{ 个转移状态} \end{matrix} \quad (2)$$

其中 E, O, R 和 Q 是矩阵 P 相应于上述排列的分块矩阵。 E 是 $r \times r$ 阶单位矩阵; O 是 $r \times k$ 阶零矩阵; R 是 $k \times r$ 阶矩阵,表示从转移状态一步就达到吸收状态的概率; Q 是 $k \times k$ 阶矩阵,表示从一个转移状态转入新的(包括自身)转移状态的概率。

3.2 吸收马尔可夫链转移矩阵的运用

关于吸收马尔可夫链矩阵的运算有下述定理。

定理 1,典范式转移矩阵的乘幕按矩阵分块运算有以下结果:

$$P^t=\begin{bmatrix} E & O \\ R^t & Q^t \end{bmatrix} \quad (3)$$

其中 $R^t=(I+Q+Q^2+\cdots+Q^{t-1})R$, I 是 $k \times k$ 阶单位矩阵。

定理 2,对于吸收马尔可夫链典范式的转移矩阵,(1)当 $t \rightarrow \infty$ 时, $Q^t \rightarrow O$; (2)矩阵 $I-Q$ 可逆; (3) $N=(I-Q)^{-1}=I+Q+Q^2+\cdots$,其中 N 是 k 阶方阵,称为该吸收马尔可夫链的基本矩阵(fundamental matrix)。

定理 3,具有 r 个吸收状态的吸收马尔可夫链,从转移状态 $i_1=r+i$ 开始,到达吸收状态之前,进入转移状态 $j_1=r+j$ 的次数的平均值是基本矩阵 $N=(I-Q)^{-1}$ 的第 i 行 j 列元素之值。

换言之,基本矩阵 N 中的每个元素表示从一个非吸收状态出发,过程到达另一个非吸收状态的平均转移次数。进一步推论,就是在所有转移状态之间传递步数的数学期望值是基本矩阵 $N=(I-Q)^{-1}$ 的第 i 行元素之和,即在转移状态之间传递的步数也就是进入每个转移状态步数的总和。

下面就表 1 数据讨论洞庭湖区农田生态系统中 Cd 的持续时间问题。该系统如果没有外界的补充,理论上 Cd 最终都将转移达到吸收状态,随长期耕种, Cd 将愈来愈少,最终消耗殆尽(实际是在“可溶”框架内)。

① 中国地质调查局与湖南省人民政府合作项目“湖南省洞庭湖区生态地球化学调查”阶段成果(2003—2007)。

② 彭科林,等. 湖南省洞庭湖区主要粮油基地生态地球化学调查. 2006(科研报告)。

表 1 洞庭湖区农田生态系统中 Cd 的转移概率

Table 1 The transfer probability of Cd in the cropland ecosystems in the Dongting lake region

状 态	到达状态				
	u_1 土壤	u_2 水体	u_3 稻谷	u_4 大气	u_5 系统外
u_1 土壤中含 Cd	0.989 994 3	0.001 4	0	0.000 005 75	0.008 6
u_2 水体含 Cd	0	0.1	0.33	0	0.57
u_3 稻谷含 Cd	0.25	0	0	0	0.75
u_4 大气含 Cd	0.495	0	0.005	0.5	0
u_5 流失系统外	0	0	0	0	1

为了获得典范式转移矩阵,状态按“1-系统外、2-土壤、3-水体、4-稻谷、5-大气”的顺序重新排序成新的典范式转移矩阵如下:

$$P = \begin{bmatrix} \text{系统外} & \text{土壤} & \text{水体} & \text{稻谷} & \text{大气} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.008\ 6 & 0.99 & 0.001\ 4 & 0 & 0.000\ 005\ 75 \\ 0.57 & 0 & 0.1 & 0.33 & 0 \\ 0.75 & 0.25 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.495 & 0 & 0.005 & 0.5 \end{bmatrix} & \begin{matrix} \text{系统外} \\ \text{土壤} \\ \text{水体} \\ \text{稻谷} \\ \text{大气} \end{matrix} \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$Q = \begin{bmatrix} 0.99 & 0.001\ 4 & 0 & 0.000\ 005\ 75 \\ 0 & 0.1 & 0.33 & 0 \\ 0.25 & 0 & 0 & 0 \\ 0.495 & 0 & 0.005 & 0.5 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$I - Q = \begin{bmatrix} 0.01 & -0.001\ 4 & 0 & -0.000\ 005\ 75 \\ 0 & 0.9 & -0.33 & 0 \\ -0.25 & 0 & 1 & 0 \\ -0.495 & 0 & -0.005 & 0.5 \end{bmatrix} \quad (6)$$

基本矩阵 $N = (I - Q)^{-1}$

$$= \begin{bmatrix} 101.358\ 6 & 0.157\ 7 & 0.052\ 0 & 0.001\ 2 \\ 9.291\ 2 & 1.125\ 6 & 0.371\ 4 & 0.000\ 1 \\ 25.339\ 7 & 0.039\ 4 & 1.013\ 0 & 0.000\ 3 \\ 100.598\ 4 & 0.156\ 5 & 0.061\ 6 & 2.001\ 2 \end{bmatrix} \begin{matrix} 101.569\ 5 & \text{土壤} \\ 10.788\ 3 & \text{水体} \\ 26.392\ 4 & \text{稻谷} \\ 102.817\ 7 & \text{大气} \end{matrix}$$

土壤 水体 稻谷 大气 行向量和

(7)

据推论,行向量和是在所有转移状态之间传递步数的平均值,所以 Cd 能够在土壤、水体、稻谷和大气中的平均保存时间分别是 101.569 5、10.788 3、26.392 4 和 102.817 7 a。

如果开始时 Cd 在 4 个转移状态的分配比率是随机向量 $X = [x_1, x_2, x_3, x_4]$, 按此随机向量的加权值可给出 Cd 在系统中保存时间的概率平均值为

$$t = 101.569\ 5x_1 + 10.788\ 3x_2 + 26.392\ 4x_3 + 102.817\ 7x_4$$

由洞庭湖区农田生态系统中 Cd 在土壤、水体、稻谷和大气中的平均含量值分别为:0.36 mg/kg、0.000 365 mg/kg、0.12 mg/kg 和 0.000 044 57 mg/kg(空气的密度为 1.29 g/m³,大气尘 Cd 按戴

塔根和吴玺虹等^①的最小值 0.23 mg/kg 计),确定 Cd 在 x_1 、 x_2 、 x_3 和 x_4 等 4 个状态的分配比率是 0.749 4:0.000 8:0.249 8:0.000 1,可算出系统中 Cd 停留时间 t 为 82.72 a。换句话说,在没有外界补充情况下,平均经过 82.72 a 系统中 Cd 理论上将基本耗尽。

再据定理 1 计算经 t 步转移后,状态的矩阵乘积 P^t 的值(表 2),即 Cd 在不同介质中的逐年变化情况和 Cd 能在系统中存留多长时间。

表 2 洞庭湖区农田生态系统中 Cd 的转移概率随时间 t 的变化

Table 2 The change of transfer probability of Cd through time in the cropland ecosystems, Dongting lake region

t/a	P^t				
	1	0	0	0	0
2	0.017 9	0.980 1	0.001 5	0.000 5	0.000 0
	0.874 5	0.082 5	0.010 0	0.033 0	0.000 0
	0.752 2	0.247 5	0.000 4	0.000 0	0.000 0
	0.008 0	0.738 8	0.000 7	0.002 5	0.250 0
16	1	0	0	0	0
	0.145 2	0.853 0	0.001 3	0.000 4	0.000 0
	0.920 0	0.079 8	0.000 1	0.000 0	0.000 0
	0.784 2	0.215 4	0.000 3	0.000 1	0.000 0
64	0.134 5	0.863 7	0.001 4	0.000 5	0.000 0
	1	0	0	0	0
	0.469 0	0.529 9	0.000 8	0.000 3	0.000 0
	0.950 3	0.049 6	0.000 1	0.000 0	0.000 0
82	0.865 9	0.133 8	0.000 2	0.000 1	0.000 0
	0.462 3	0.536 5	0.000 8	0.000 3	0.000 0
	1	0	0	0	0
	0.555 8	0.443 3	0.000 7	0.000 2	0.000 0
256	0.958 4	0.041 5	0.000 1	0.000 0	0.000 0
	0.887 8	0.111 9	0.000 2	0.000 1	0.000 0
	0.550 2	0.448 8	0.000 7	0.000 2	0.000 0
	1	0	0	0	0
	0.920 9	0.078 9	0.000 1	0.000 0	0.000 0
	0.992 6	0.007 4	0.000 0	0.000 0	0.000 0
	0.980 0	0.019 9	0.000 0	0.000 0	0.000 0
	0.919 9	0.079 9	0.000 1	0.000 0	0.000 0

① 戴塔根, 吴玺虹, 等. 长株潭城市区域生态地球化学评价报告. 2006(科研报告).

表 2 表明,随 t 增加, P^t 取极限而收敛。

当 $t=256$ a, Cd 将以 92% 以上的概率转移到吸收状态。Q 值已很小,说明能保留在转移状态中的 Cd 已很少。照此过程持续下去,理论上所有状态中的 Cd 终将都将转移到吸收状态,整个系统的 Cd 将净化。

再看前面计算的值 t , 当 $t=82$ a 时, P^{82} 显示转移到吸收状态的概率已为 55%~96%, 即大多数的 Cd 可迁移出系统之外。

4 带输入的马尔可夫链对农田生态系统 Cd 的评价

4.1 带输入的马尔可夫链

如果改变上例系统与外界的关系,从外界不断有污染物加入,这就是带输入的马尔可夫链。考察具 r 个吸收状态、 k 个转移状态的一般情形的吸收马尔可夫链典范矩阵(如公式(2))。

假设: $Y=[y_1 y_2 \cdots y_r]$ 代表吸收状态, $X=[x_1 x_2 \cdots x_k]$ 代表转移状态, $Z=[YX]$ 表示初始时每个状态的目标元素(如 Cd)的数量, $F=[f_1 f_2 \cdots f_r]$ 表示每次补充的目标元素的数量, $Y^{(t)}$ 、 $X^{(t)}$ 和 $Z^{(t)}$ 分别时间为 $t(t=0, 1, 2, \cdots)$ 时向量 Y 、 X 和 Z 所处的状态值。

经 k 步后, $Z^{(k)}=Z^{(k-1)}P+[OF]$ 。

其中向量 $[OF]$ 的前 r 个分量属于吸收状态,即零矩阵; $Z^{(k)}=[Y^{(k)} X^{(k)}]$, $(k=0, 1, 2, \cdots)$ 。

称序列 $Z^{(0)} Z^{(1)} Z^{(2)} \cdots$ 为带输入的吸收马尔可夫链的状态向量序列,它由 r 维吸收部分和 k 维转移部分构成, F 为它的输入向量。

带输入的吸收马尔可夫链有如下定理:

定理 4, 带有输入的吸收马尔可夫链, 输入向量为 F , 则其状态向量序列的转移向量部分 $X^{(k)}$ ($k=0, 1, 2, \cdots$) 存在极限 FN , 其中 N 是吸收马尔可夫链的基本矩阵。

该定理说明随着时间的推移, 具有带输入的吸收马尔可夫序列的最后状态 FN 与初始状态 X 无关, 仅与输入向量 F 有关; 初始状态只是暂时的, 它对系统的影响将逐渐湮灭; 而输入向量却是长期持续的因素, 它的影响随时间增加而逐渐增强, 直至完全控制系统。

下面利用该定理讨论上例系统中有 Cd 补充时的循环问题。

4.2 带输入时农田生态系统 Cd 的计算

据研究^①大气沉降 Cd 年输入通量为 918.155 kg/(亩·a) (1 亩=666.67 m²), 工业排放等的分担率据前面分析为 50%, 本区域面积 4 万 km² 中年接纳大气沉降 Cd 量为 27.54 t。省内年废水排放中镉量^②为 23.8 t, 假设全部进入农田系统。则每年向洞庭湖区农田生态系统输入的 Cd 向量 F 为

$$F=[0 \quad 23.8 \quad 0 \quad 27.54 \quad 0] \quad (8)$$

利用吸收定理 4, 将 8 式右乘 7 式, 得:

$$FN=[2 \ 991.6 \quad 31.1 \quad 10.54 \quad 55.1] \quad (9)$$

即状态的稳定向量 FN 表示系统中土壤、水、稻谷和大气 4 种状态的含 Cd 量将分别稳定于 2 991.6、31.1、10.54 和 55.1 t。

5 镉排放的最大允许量及生态承载力估计

如果每年向本区土壤中加入的 Cd 总量为 x kg, 而向水体、稻谷和大气 3 种介质的输入分量为 0, 则输入向量为 $F=[x \quad 0 \quad 0 \quad 0]$ 。

按照带输入的吸收马尔可夫链定理 4, 该系统转移状态构成的向量取极限:

$$FN=[100.598 \ 4x \quad 0.156 \ 5x \quad 0.061 \ 6x \quad 2.001 \ 2x]$$

其包含在稻谷中的总 Cd 量是 0.061 6x(kg)。

如果每人日食大米上限为 0.75 kg(约相当于稻谷 1 kg), 该区生态承载力为 $M_{\text{人口}}$ (承载人数, 单位: 人), 便可以计算出每人每日摄入的镉, 以 Cd_d 表示(单位: kg/(人·d)):

$$Cd_d=0.061 \ 6x/(365M_{\text{人口}}) \quad (10)$$

按照目前国际上公认的主要毒性指标日许量(Acceptable Daily Intakes, 简称 ADI), Cd 的 ADI 值为 0.06 mg/(人·d)。以每天每人允许摄入的 Cd 的 ADI 值作为 Cd_d 代入公式(10), 计算出的 x 为区域土壤允许每年排放加入镉的质量上限, 以 Cd_A 表示(单位为 kg), 有:

$$x=Cd_A=365 \times 6 \times 10^{-8} M_{\text{人口}} / 0.061 \ 6 = 3.56 \times 10^{-4} M_{\text{人口}}$$

则

$$Cd_A=3.56 \times 10^{-4} M_{\text{人口}} \quad (11)$$

① 杨忠芳, 等. 湖南洞庭湖地区农田生态系统区域生态地球化学评价报告. 2006(科研报告)。

② 湖南省环境保护局. 2000 年湖南省环境状况公报. 2000.

或 $M_{\text{人口}} = 2.8 \times 10^3 \text{ Cd}_A$ (12)

生态承载力 $M_{\text{人口}}$ 若以 7 000 万人(注:湖南 2005 年末人口为 6 732 万)计算,由公式(11)可得洞庭湖区农田生态系统镉排放的最大允许量(Cd_A)为 24 886 kg,即 24.9 t。

6 讨论

按照吸收马尔可夫链,随着时间的发展,事物变化最终要达到以某个吸收状态为终结。洞庭湖区农田生态系统中 Cd 以土壤、水体、稻谷和大气现有含量状态作为分配比率,在无外界 Cd 补充情况下,Cd 在系统中的保存时间是 82 a。这正是生态地球化学系统的评价所关心的元素的最终去向和生态效应问题。然而值得注意的是,以地球化学观点来看,微量的残留 Cd 永远也不能清除,清除只是一个极限过程。

从带输入的吸收马尔可夫链理论可知,若改变系统与外界的关系,允许从外界不断加入元素,随着时间推移,初始状态对系统影响将逐渐消失,而输入量影响将随时间而逐渐增强,直至最终完全控制系统。以现有污水、废气排放(降尘)量计算,到状态稳定时,系统中的 Cd 将主要赋存于土壤中,为 2 991.6 t,占总量的 96.87%;而水、稻谷和大气 3 种状态的 Cd 仅分别占 1.01%、0.34%和 1.78%。

从本区农田生态系统吸收马尔可夫链模型的转移状态取极限及 Cd 的日许量 ADI 值,可获得向土壤排放镉的最大允许量为 24.9 t。若本区大气沉降和废水排放保持近几年排放量,如大气沉降和废水合计含 Cd 51.34 t,且全部直接排入农田生态系统的土壤中的话,则年输入的 Cd 量超过最大允许量 1 倍。所以,必须加强环境保护和治理,在近年排放量的基础上减少排污或排镉 50%以上,才能保证区内人民生活对健康的需求。

公式 $\text{Cd}_A = 3.56 \times 10^{-4} M_{\text{人口}}$ 、或 $M_{\text{人口}} = 2.8 \times 10^3 \text{ Cd}_A$ 表达了在不对人体健康构成潜在危害前提下洞庭湖区土壤一年可最大接纳的 Cd 量, Cd_A 具有环境容量的涵义; $M_{\text{人口}}$ 指在 ADI 值框架内至少必须由多少人来分食这些稻米才不至于摄取 Cd 过量,所以亦可定义为生态承载力。

通过研究,笔者认为马尔可夫链模型是解决生态地球化学问题、进行生态地球化学评价行之有效的方法,在定量研究污染或有益元素的持续时间、生

态效应和变化趋势方面具有优势,可为生态环境评价和建设提供科学依据,其技术的关键在于确定和建立系统的转移概率矩阵。本文的研究还只是比较初步的,由元素含量及其比例来估算转移概率的理论和方法。状态数和状态的具体划分等尚待进一步研究。

本文撰写中较多地参考了徐克学的《生物数学》,修改时得到了鲍征宇的指点;文中 Cd 的有关分析数据主要来自于由鲍征宇、杨忠芳、彭科林、戴塔根和吴玺虹等主持的笔者(单位)课题研究成果,谨此一并致谢。

References:

- [1] Shi Renjie. Markov chain base and its application [M]. Xi'an: Xidian University Press, 1992: 80-85 (in Chinese).
- [2] Li Zhenlie, Ji Ling. Applications of Markovian decision process in market predicting and decision [J]. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2000, 34(suppl): 39-41 (in Chinese).
- [3] Jiang Huifei, Liao Shuhua, Ding Yi, et al. Prediction of grain output base on Markov process and probability distribution character [J]. Chinese Journal of Agrometeorology, 2006, 27(4): 269-272 (in Chinese).
- [4] Hulst R. On the dynamics of vegetation: Markov chains as models of succession [J]. Vegetation, 1979, 40: 3-14.
- [5] Sha Jinming, Li Xiaomei, Yang Wunian, et al. Dynamic change prediction of vegetation in Fuzhou city by Markov's model [J]. Bulletin of Soil and Water Conservation, 2004, 24(5): 5-9 (in Chinese).
- [6] Wang Xuelei, Wu Yijin. The Application of the Markov model on the dynamic change of wet land landscape pattern in Four-Lake Area [J]. Journal of Huazhong Agricultural University, 2002, 21(3): 288-291 (in Chinese).
- [7] Zheng Yuanrun. Prediction studies for succession of forest community in Daqinggou [J]. Forest Science, 1999(2): 23-28 (in Chinese).
- [8] Tashpolat Tiyp, Zhao Rui, Ding Jianli, et al. Analysis of Markov process of LUCC in oasis of arid area—a case of the Yutian Oasis [J]. Arid Land Geography, 2006, 29(4): 548-556 (in Chinese).
- [9] Wang Liangjian, Bao Haosheng, Peng Buzhuo. The dynamic monitoring and prediction of the regional land use change based on RS and GIS [J]. Economic Geography, 2000, 20(2): 47-50 (in Chinese).
- [10] Li Decheng, Xu Binbin, Shi Xiaori. Simulation and forecast of soil erosion development with Markov process—a case study in Yuexi, Anhui Province [J]. Remote Sensing of Environment China, 1995, 10(2): 90-96 (in Chinese).
- [11] Luijten J C. A systematic method for generating land use patterns using stochastic rules and basic land scape characteris-

- tics; results for a Colombian hill side water shed[J]. Agriculture, Ecosystems and Environment, 2003, 95(2):427-441.
- [12] Vázquez-Prada M, González Á, Gómez J B, et al. A minimalist model of characteristic earthquakes [J]. Nonlinear Processes in Geophysics, 2002(9): 513-519.
- [13] Xiang Kezong. Fuzzy Markov process and its preliminary application[J]. Fuzzy Mathematics, 1982 (2):89(in Chinese).
- [14] Jiang Xuepeng, Xu Zhisheng, Leng Bing. Fuzzy Markov model about the prediction for fire calamity[J]. Calamity Science, 2006, 21(3):27-32(in Chinese).
- [15] Li Xiang, Wang Xinyuan, Li Yulong, et al. Forecasting flood disasters in the Chaohu lake basin on Grey-Makov theory[J]. Journal of China Hydrology, 2006, 26(4):43-54(in Chinese).
- [16] Zuo Dongguang, Han Chongzhao, Zheng Lin, et al. Maneuvering target tracking based on time-varying Markov transition probability[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2003, 37(8):825-828(in Chinese).
- [17] You Yangsheng, Wang Xinzhou. Information spread estimation applicable to Gauss-Markov model and its performance [J]. Science of Surveying and Mapping, 2001, 26(2):15-19 (in Chinese).
- [18] Li Zhiqiang, Wang Sijun. Applying of Grey-Markov model in predicting the DO's density of ground water[J]. Environmental Science of Chongqing, 2002, 24(3):35-37(in Chinese).
- [19] Li Bing, He Xin, Wang Changquan, et al. Applying of Markov method in dynamic evaluation of soil nutrient[J]. Soil Letter, 2004, 3(6):739-742(in Chinese).
- [20] Yu Chongwen. Revealing the essence and crux of geological phenomena—geological processes and spatio-temporal structures[J]. Earth Science Frontiers, 2000, 7(1): 2-12(in Chinese).
- [21] Yu Chongwen. Application and method in mathematical geology—multivariate analysis in geology and geochemical exploration[M]. Beijing, Metallurgical Industry Press, 1980:341 (in Chinese).
- [22] Yu Chongwen. Complexity of geosystem: basic issues of geological science(2)[J]. Earth Science, 2003, 28(1):31-39(in Chinese).
- [23] Zhao Yuchen. Compute and analysis based on Markov chain for stratigraphic section in Ningwu[J]. Jiangsu Geology, 1991(3):169-174(in Chinese).
- [24] Yan Changhai, Chen Tieling. The preliminary application of fuzzy Markov process in geology[J]. Henan Geology, 1991, 9 (3):61-86(in Chinese).
- [25] He Fang, Wu Jichun. Markov chain-based multi-indicator geostatistical model[J]. Hydrogeology and Engineering Geology, 2003(5):28-32(in Chinese).
- [26] Li Yang, Tang Zhonghua, Fang Qiong. Markov chain geostatistic method and its application in the study of aquifer heterogeneity[J]. Geological Science and Technology Information, 2006(5):92-96(in Chinese).
- [27] Wang Baojun, Ma Jian. Analysis on statistic distribution and spatial correlativity of hydrogeological parameters of shallow aquifer[J]. Site Investigation Science and Technology, 2002 (4):9-13(in Chinese).
- [28] Lin Sheng, Song Wenjun. Monitoring and prediction of oil deposits for oil enterprises[J]. Industrial Engineering Journal, 2006(1):62-64(in Chinese).
- [29] Yan Changhai. A study of the spatial structural feature of the regional geochemical data[J]. Computing Techniques for Geophysical and Geochemical Exploration, 1991, 13(4):289-294 (in Chinese).
- [30] Xu Kexue. Biological mathematics [M]. Beijing: Science Press, 1999(in Chinese).
- [31] Jiang Zhi. Application of statistical geochemistry[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2006(in Chinese).
- [32] Xie Xuejin. Chemical time bomb and Chinese environment for sustainable development[J]. Scientific Chinese, 1997(5):13-16(in Chinese).
- [33] Committee of Science and Technology for Politics and Economy of Hunan Province. Research on the influence of the Three Gorge engineering on the Dongtinghu Lake[M]. Changsha: Hunan Science and Technology Press, 2002 (in Chinese).
- [34] Li Ruimin. Method of geochemical evaluation of agrogeological environment[M]. Beijing: Geological Publishing House, 2007.

参考文献:

- [1] 施仁杰. 马尔科夫链基础及其应用[M]. 西安:西安电子科技大学出版社, 1992:80-85.
- [2] 李振烈, 季令. 应用马尔可夫理论对市场进行预测与决策[J]. 上海交通大学学报, 2000, 34(增刊):39-41.
- [3] 姜会飞, 廖树华, 丁谊, 等. 基于马尔可夫过程和概率分布特征的粮食产量预测[J]. 中国农业气象, 2006, 27(4):269-272.
- [5] 沙晋明, 李小梅, 杨武年, 等. 利用马尔可夫模型预测福州市植被动态变化[J]. 水土保持通报, 2004, 24(5):5-9.
- [6] 王学雷, 吴宜进. 马尔可夫模型在四湖地区湿地景观变化研究中的应用[J]. 华中农业大学学报, 2002, 21(3):288-291.
- [7] 郑元润. 大青沟森林群落演替预测研究[J]. 林业科学, 1999 (2):23-28.
- [8] 塔西甫拉提·特依拜, 赵睿, 丁建丽, 等. 干旱区绿洲LUCC马尔柯夫过程分析——以新疆于田绿洲为例[J]. 干旱区地理, 2006, 29(4):548-556.
- [9] 王良健, 包浩生, 彭补拙. 基于遥感与GIS的区域土地利用变化的动态监测与预测研究[J]. 经济地理, 2000, 20(2):47-50.
- [10] 李德成, 徐彬彬, 石晓日. 利用马氏过程模拟和预测土壤侵蚀的动态演变——以安徽省岳西县为例[J]. 遥感学报, 1995, 10(2):90-96.

- [13] 向可宗. 模糊马尔可夫过程及其初步应用[J]. 模糊数学, 1982(2):89.
- [14] 姜学鹏, 徐志胜, 冷彬. 火灾预测的模糊马尔可夫模型[J]. 灾害学, 2006, 21(3):27-32.
- [15] 李详, 王心源, 李玉龙, 等. 基于灰色-马尔可夫预测模型的巢湖流域洪涝灾害预测研究[J]. 水文, 2006, 26(4):42-54.
- [16] 左东广, 韩崇昭, 郑林, 等. 基于时变马尔科夫转移概率的机动目标多模型跟踪[J]. 西安交通大学学报, 2003, 37(8): 825-828.
- [17] 游扬声, 王新洲. 适用于高斯-马尔可夫模型的信息扩散估计及其性能[J]. 测绘科学, 2001, 26(2):15-19.
- [18] 李志强, 王世俊. 灰色马尔柯夫模型在地表水体 DO 浓度预测中的应用[J]. 重庆环境科学, 2002, 24(3):35-37.
- [19] 李冰, 何鑫, 王昌全, 等. 马尔可夫法在土壤养分动态评价中的应用[J]. 土壤通报, 2004, 3(6):739-742.
- [20] 於崇文. 揭示地质现象的本质与核心——地质作用与时空结构[J]. 地学前缘, 2000, 7(1): 2-12.
- [21] 於崇文. 数学地质的方法与应用——地质与化探工作中的多元分析[M]. 北京:冶金工业出版社, 1980:341.
- [22] 於崇文. 地质系统的复杂性——地质科学基本问题(Ⅱ)[J]. 地球科学, 2003, 28(1):31-39.
- [23] 赵玉琛. 应用马尔可夫链对宁芜一些地层剖面的计算模拟和分析[J]. 江苏地质, 1991(3):169-174.
- [24] 燕长海, 陈铁岭. 模糊马尔科夫过程在地质学中的初步应用[J]. 河南地质, 1991, 9(3): 61-86.
- [25] 何芳, 吴吉春. 基于马尔可夫链的多元指示地质统计模型[J]. 水文地质工程地质, 2003(5):28-32.
- [26] 李杨, 唐仲华, 方琼. 含水层非均质结构的马尔可夫链地质统计方法及应用[J]. 地质科技情报, 2006(5):92-96.
- [27] 王宝军, 马健. 浅层含水层水文地质参数的统计分布与空间相关性[J]. 勘察科学技术, 2002(4):9-13.
- [28] 林盛, 宋文俊. 油气生产企业油藏地质监测预警系统研究[J]. 工业工程, 2006(1):62-64.
- [29] 燕长海. 区域地球化学数据空间结构特征研究[J]. 物探与化探计算技术, 1991, 13(4):289-294.
- [30] 徐克学. 生物数学[M]. 北京:科学出版社, 1999.
- [31] 蒋志. 统计地球化学及其应用[M]. 北京:冶金工业出版社, 2006.
- [32] 谢学锦. 化学定时炸弹与可持续发展[J]. 科学中国人, 1997(5):13-16.
- [33] 湖南省政协经济科技委员会. 三峡工程与洞庭湖关系研究[M]. 长沙:湖南科学技术出版社, 2002.
- [34] 李瑞敏. 农业地质地球化学研究[M]. 北京:地质出版社, 2007.