

分析学

作者：

Kathryn Kuhr

Robert Packer

PerkinElmer, Inc.
Shelton, CT

使用 TIBCO Spotfire® 软件 土壤无机元素仪表盘对英 国土壤质量进行调查分析

简介

土壤状况对于维持环境安全与人类健康至关重要，具体表现在，它不仅影响人类的可持续发展，还容易受到人类活

动的负面影响。土壤中含有水果、蔬菜和谷物生长所需的优质营养元素。但是，这些植物也可以通过其根部吸收农田土壤中的无机元素，从而威胁消费者人身健康^{1,2}。除此之外，住宅区和公园等公共场所的重金属污染也可能危害幼儿健康³。无论我们从何处采集样本，可以肯定的是 -- 前期信息的整理和后续的数据分析同样重要。信息传递不当会误导人们相信实际中不存在的风险，并花费高昂成本开展不必要的检测⁴。TIBCO Spotfire® 软件土壤无机元素仪表盘可以将复杂数据可视化和图像化，帮助人们快速理解，从而避免不当的信息传递。

本研究利用土壤无机元素仪表盘将从英国地质调查局下载的英国部分区域的土壤质量数据图形化、可视化。将测试结果与已建立的基线数据进行比较，然后通过持续检查数据的正偏离和负偏离波动，来确定数据的变动是否是局部相互作用引起的。自上个世纪 60 年代末以来，英国地质调查局一直致力于环境地球化学基线调查 (G-BASE)，并每年在英国各地采集样本。这些从指定城镇采集的样本在上个世纪 90 年代末至 21 世纪初期间分别进行测试。

实验

在本研究中，我们分析欧洲国家土壤质量数据的主要目标是为了用图像显示出英国 11 个地区土壤中无机元素的相对含量，并找出其中超出规定基线浓度的金属元素（如有）。此次分析共涉及以下 14 种金属元素：锑、砷、钡、镉、铬、钴、铜、铅、镍、钼、锡、铀、钒、锌。我们采集了英国加的夫、科比、唐卡斯特、林肯、曼斯菲尔德、斯肯索普、谢菲尔德、斯托克、斯温西、特尔福德和约克地区土壤中上述 14 种元素的平均浓度。在采集数据的过程中，我们对 TIBCO Spotfire® 软件土壤无机元素仪表盘进行了针对性设置，以便得到所需结果。首先，从三维散点图 (3D Scatterplot) 模式切换至二维散点图 (2D Scatterplot) 模式，同时对地图 (Map Chart) 进行格式化调出经纬度标记。然后，调整条形图 (Bar Chart) 设置，以便查看每个元素数据。最后，输入基线数据，判断各个地区土壤中特定金属元素浓度是否会高于或低于基线。图 1 为刚打开文件时初始的无机元素仪表盘，图 2 为替换旧数据表 (Data Table) 后仪表盘自动更新的视图，图 3 为调整后显示新导入土壤数据的仪表盘。

结果

当用新数据表取代默认表 SpotfireInorganicSoilv1 上传时，相应数据表列名必须与其数据类型相互匹配。数据表格式正确并显示出所有适当的数据后，表格重命名为 BGSDDataUnitedKingdom。在替换旧数据表时，TIBCO Spotfire® 软件会自动上传新数据，但不会以新文件名更新数据表；用户必须手动更新文件名。图 1、图 2 和图 3 依次显示了分析过程中发生的变化。

原始三维散点图便于查看数据集群。但由于新数据表中的数据点不足以实现可视化效果，因此将三维散点图重新设计为二维散点图，如图 4 所示。在二维散点图中，横坐标为每种元素的名称，其对应的数值显示在纵坐标。采用这种格式后，图中显示了每个采样区的特定标记。同时，图中还添加了颜色区分功能，每个采样区都具有唯一的标记颜色。这种可视化方法便于我们观察数据。例如，我们很

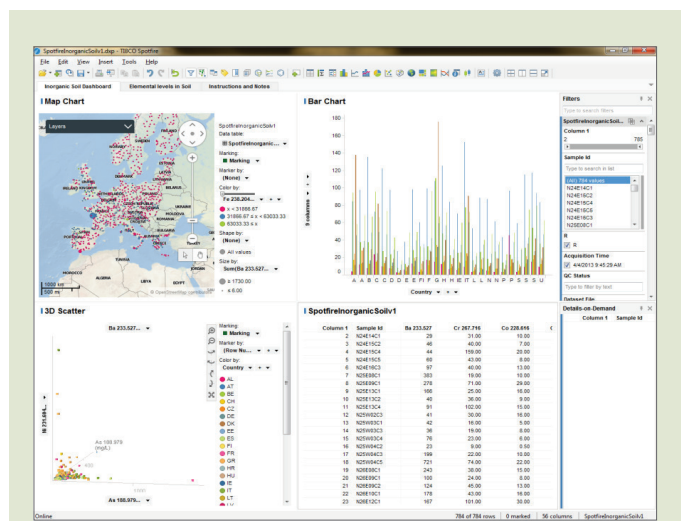


图 1、导入新数据前的土壤无机元素仪表盘视图

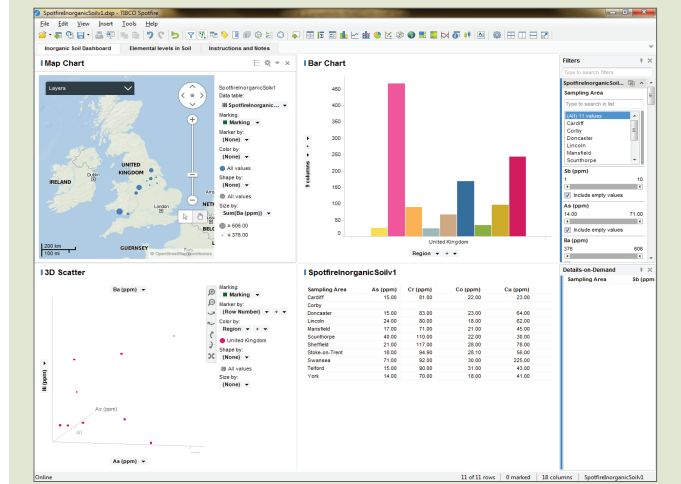


图 2、导入 BGSDDataUnitedKingdom 数据表后的土壤无机元素仪表盘视图

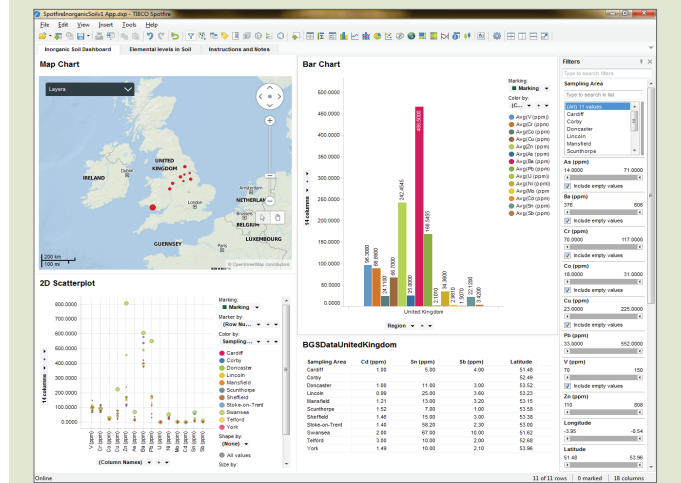


图 3、调整后显示新导入数据的土壤无机元素仪表盘

容易就能从图中发现，斯温西地区土壤中锌、铅和铜元素的浓度远远高于其他城镇土壤中的浓度。经过初步观察后，我们可以进一步探究为什么土壤中会含有某种金属元素或者是什么导致该金属元素的浓度高于或低于基线值。

由于新数据表中已经输入经纬度坐标，因此，图 5 中的地图会自动识别这些字段并更新其标记。为便于观察，我们还采用了颜色区分功能，即对超过镍元素基线值的数据以红色标记，而对低于基线值的数据以绿色标记。由图可知，斯温西是采样的 14 个英国城镇中唯一一个土壤中镍元素平均浓度超过基线值的城市。这一方法可以帮助我们更快地发现数据的变化趋势和重要的数据点。我们还可通过编辑颜色、大小、形状和标记区分功能，改变各数据字段的显示方式。本次分析中使用的基线值是整个英国的平均值，而非各个城镇的平均值。即便得到某种金属元素的平均浓度值高于基线值，也并不一定会威胁环境或人类健康。

如图 6 所示，对于最初的条形图中并未包含的无机元素，我们必须沿纵坐标添加，以便显示相应数据。每个条形上方都标有对应的浓度值。如上所述，二维散点图主要显示每种元素的样本测试结果，而条形图则是以图形显示样本测试结果的平均值，对样本数据进行了补充。

在分析报告的第二页，软件更新生成了更多的二维散点图，方便用户查看每种元素的详细数据。此次分析中，我们以英国地质调查局的基线数据作为基线值，然后通过比较，判断不同地区土壤中各元素平均浓度在哪个区间。表 1 列出了基线和样本数据的一些基本统计指标。图 7 为软件生成的可视化图形。

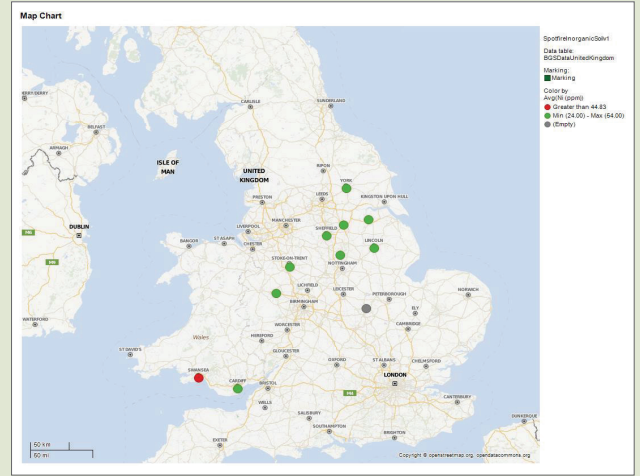


图 5、各地区镍元素平均浓度值的视图

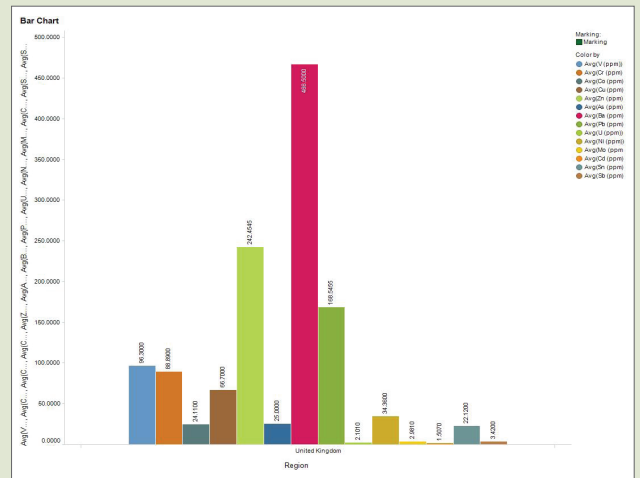


图 6、所有地区各无机元素平均浓度值的条形图

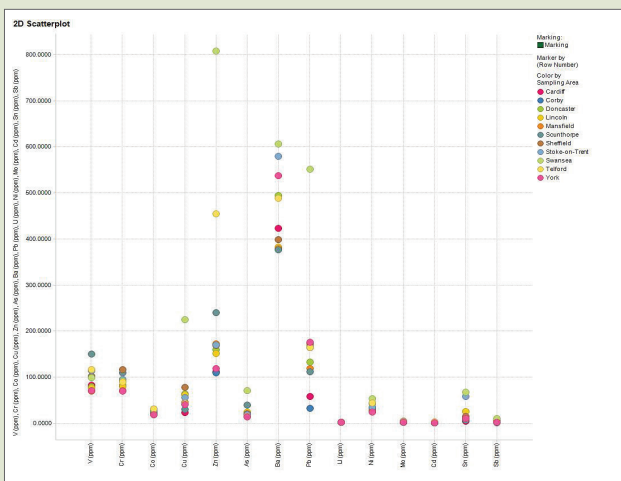


图 4、各元素样本测试结果的二维散点图。添加颜色区分功能对每个地区采用不同颜色标记。

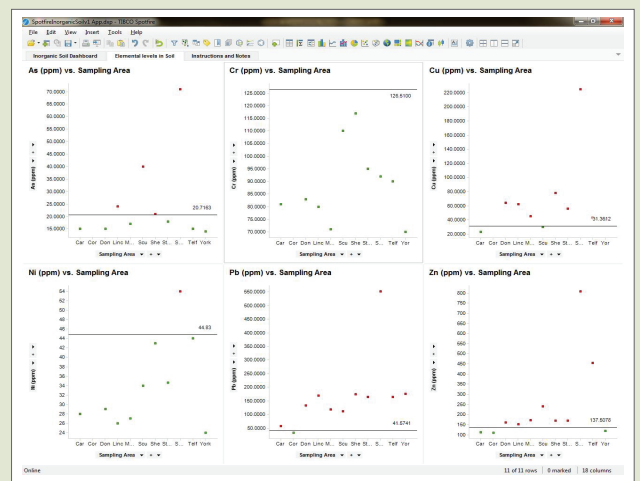


图 7、各采样区不同金属元素数据结果的二维散点图。图中可见样本浓度值与英国地质调查局基线数据间的差异。

表 1、各金属元素的样本数据及其相应基线浓度的统计指标

金属元素	基线数据				样本数据			
	平均值	中位值	最大值	最小值	平均值	中位值	最大值	最小值
砷	20.7	14.2	106.5	5.1	25.0	17.5	71.0	14.0
钡	372.7	357	791	186	466.5	456.0	606	376
镉	0.75	0.25	7.8	0.25	1.5	1.4	3.0	1.0
钴	16.2	12.7	66.4	5.4	24.1	22.5	31.0	18.0
铬	126.51	117	312	69	88.9	86.5	117.0	70.0
铜	31.36	30.6	65.1	16.9	66.7	50.5	225.0	23.0
钼	4.55	0.4	2967.6	0.4	3.0	2.9	4.3	1.7
镍	46.67	41.7	1527.4	16.1	34.4	31.5	54.0	24.0
铅	41.69	33.9	1142.3	8.2	168.5	164.0	552.0	33.0
铈	0.60	0.5	15.0	0.5	3.4	3.0	10.0	1.0
锡	4.73	3.9	114.4	0.4	22.1	12.0	67.0	5.0
铀	2.30	2.0	174.0	0.3	2.1	2.0	2.6	1.8
钒	125.11	118	572.0	0.9	96.3	91.0	150.0	70.0
锌	137.69	121.6	1163.9	26.2	242.5	169.0	808.0	110.0

根据上述图形编制表 2 的数据。采样区土壤中金属元素平均浓度高于基线值的，统一用“X”表示。科比镇的样本数据中仅包含铅元素和锌元素的浓度，没有数据的金属元素以灰色阴影显示。分析结果显示，所有采样区土壤中只有铬元素和钼元素的浓度均低于基线值。但从另一个角度来看，除了科比镇之外，未发现任何其他城镇土壤中的所有金属元素的平均浓度都在基线值以下。

由于基线样本是从英国所有地区采集的，土壤中金属浓度较低的地区（如风景优美的农村地区）可能会拉低总体平均值。本研究选择的采样区均为人口密集的城镇，人类活动强度较大。由于受基础设施建设和其他市政工程影响，这些城镇土壤中的金属浓度可能高于其他地区。如前文所述，这些无机元素本身不会危害环境，但必须严密监测，以便及时发现可能出现的问题。

表 2、二维散点图结果显示土壤中金属元素平均浓度高于基线值的城镇列表

金属元素	加的夫	科比*	唐卡斯特	林肯	曼斯菲尔德	斯肯索普	谢菲尔德	斯托克	斯温西	特尔福德	约克
砷				X		X	X		X		
钡	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
镉	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
钴	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
铬											
铜			X	X	X		X	X	X	X	
钼											
镍									X		
铅	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
铈	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
锡	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X
铀							X	X			
钒						X					
锌			X	X	X	X	X	X	X	X	

* 科比镇样本数据中仅包含铅、锌元素浓度数据。

结论

土壤无机元素仪表盘是在类似于 PerkinElmer Syngistix™ 数据分析软件输出项配置文件的基础上开发得到的。它允许用户重新加载任何格式的新数据，代替默认的 SpotfireInorganicSoilv1 数据表。使用 TIBCO Spotfire® 软件时，用户仅需完成数据列名的匹配即可，即将旧数据表列名与新数据表列名和数据类型建立起关联。执行这一操作后，系统会自动更新现有图表。

在本次分析过程中，系统共生成了两种图表：对比性图表与分析性图表。根据地图、二维散点图和条形图，我们可以对不同数据点之间的关系做出基本的判断。另一方面，通过比较二维散点图中各金属元素数据与土壤基线数据，我们可以进一步判断哪些无机元素会对英国采样区的当地环境造成危害。如果将新数据不断地输入到诸如此类的分析中，我们就可以发现金属元素浓度发生变动的具体时间。在此基础上，我们可以进一步将这些波动与潜在的因果事件联系起来。此外，我们还可利用 TIBCO Spotfire® 软件，对样本测试数据和基线数据进行统计分析计算，得到二者间的方差，并判断二者平均值是否具有统计学意义。TIBCO Spotfire® 软件生成的每种

图表都揭示了有关土壤质量数据的真实信息，而所有图表结合起来又构成了无缝多变量分析的整个过程。

参考文献

1. Chang, C.Y., Yu, H.Y., Chen, J.J., et al, "Accumulation of Heavy Metals in Leaf Vegetables from Soils and Associated Potential Health Risks in the Pearl River Delta, South China", *Environmental Monitoring and Assessment* 186 (2014) 1547-1560, 5 Sept 2014
2. Antonious, G.F., Turley, E.T., Sikora, F., and Snyder, J.C., "Heavy Metal Mobility in Runoff Water and Absorption by Eggplant Fruits From Sludge Treated Soil", *Journal of Environmental Science and Health, Part B* 43, 6 (2008) 526-532, 9 Sept 2014
3. Tsuji, Joyce S., Van Kerkhove, Maria D., Kaetzel, Rhonda S., et al, "Evaluation of Exposure to Arsenic in Residential Soil", *Environmental Health Perspectives* 113, 12 (2005), 5 Sept 2014
4. United States Department of Agriculture, and Natural Resources Conservation Service, "Heavy Metal Soil Contamination", *Soil Quality Institute* 3 (2000) 1-7, 8 Sept 2014

珀金埃尔默企业管理（上海）有限公司
地址：上海 张江高科技园区 张衡路 1670 号
邮编：201203
电话：021-60645888
传真：021-60645999
www.perkinelmer.com.cn



请访问 www.perkinelmer.com/ContactUs 获取我们位于全球的各个办公室的完整列表

版权所有 ©2014, 珀金埃尔默公司，保留所有权利。PerkinElmer® 是珀金埃尔默公司的注册商标。其它所有商标均为其各自所有者的财产。