

目次

持久性、迁移性和潜在毒性化学品环境健康风险与控制研究现状及趋势分析 张少轩, 陈安娜, 陈成康, 景侨楠, 刘建国 (3017)

我国厨余垃圾资源化技术的多维绩效评价 杨光, 史波芬, 周传斌 (3024)

基于 MSPA 和电路理论的京津冀城市群热环境空间网络 乔治, 陈嘉悦, 王楠, 卢应爽, 贺瞳, 孙宗耀, 徐新良, 杨浩, 李莹, 王方 (3034)

城市空间格局与热环境响应关系:以合肥市为例 陈媛媛, 姚侠妹, 偶春, 张清怡, 姚晓洁 (3043)

天津市“十三五”期间 PM_{2.5} 减排效果评估 肖致美, 徐虹, 蔡子颖, 张裕芬, 刘茂辉, 孙猛, 李鹏, 杨宁, 戴运峰 (3054)

清洁取暖对保定市采暖期 PM_{2.5} 中碳质气溶胶的影响 罗宇睿, 张凯, 赵好希, 任家豪, 段菁春, 李欢欢, 关健, 郭志强, 李博文 (3063)

南京地区细颗粒物污染输送影响及潜在源区 谢放尖, 郑新梅, 窦焱焱, 杨峰, 刘春蕾, 李洁, 谢轶嵩, 王艳, 胡建林, 陈长虹 (3071)

大气环流型对珠三角 2015~2020 年臭氧变化的影响 汪瑶, 刘润, 辛繁 (3080)

热带气旋对海南岛臭氧污染的影响分析 符传博, 丹利, 佟金鹤, 徐文帅 (3089)

基于 CMAQ 和 HYSPLIT 模式的日照市夏季臭氧污染成因和来源分析 林鑫, 全纪龙, 王伊凡, 陈羽翔, 刘永乐, 张鑫, 敖丛杰, 刘浩天 (3098)

2016~2020 年成都市控制 PM_{2.5} 和 O₃ 污染的健康效益评价 张莹, 田琪琪, 魏晓钰, 张少波, 胡文东, 李明刚 (3108)

深圳市 2022 年春季新冠疫情管控期间空气质量分析 刘婵芳, 张傲星, 房庆, 叶毓婧, 杨红龙, 陈炯恺, 吴雯潞, 侯岳, 莫佳佳, 傅宗攻 (3117)

贵州省生物质燃烧源大气污染物排放清单 王艳妮, 杨敬婷, 黄贤峰, 程燕, 陆标, 顾兆林 (3130)

西安市大气降水的主要化学组分及其来源 周东, 黄智浦, 李思敏, 王森, 牛振川, 熊晓虎, 冯雪 (3142)

宜昌市大气微塑料的分布、呼吸暴露及溯源 刘立明, 王超, 巩文雯, 陆安祥, 任东, 涂清, 贾漫珂 (3152)

雅鲁藏布江水化学演变规律 江平, 张全发, 李思悦 (3165)

无定河流域地表水硝酸盐浓度的时空分布特征及来源解析 徐奇峰, 夏云, 李书鉴, 王万洲, 李志 (3174)

太浦河水体与沉积物中重金属的季节变化特征与污染评价 罗鹏程, 涂耀仁, 孙婷婷, 刘生辉, 高佳欣, 寇佳怡, 顾心彤, 段艳平 (3184)

北京市北运河水体中抗生素污染特征及风险评估 蒋宝, 隋珊珊, 孙成一, 王亚玲, 荆降龙, 凌文翠, 李珊珊, 李国傲 (3198)

氮和氧同位素示踪伊洛河河水硝酸盐来源及转化过程 郭文静, 张东, 蒋浩, 吴洋洋, 张郭妙, 段慧真, 许梦军, 麻冰涓, 陈昊, 黄兴宇 (3206)

淮河下游湖泊表层水和沉积物中 PPCPs 分布特征及风险评估 武宇圣, 黄天寅, 张家根, 田永静, 庞燕, 许秋瑾 (3217)

西宁市浅层地下水化学特征及形成机制 刘春燕, 于开宁, 张英, 荆继红, 刘景涛 (3228)

叶尔羌河流域平原区地下水污染风险评价 闫志云, 曾妍妍, 周金龙, 孙英, 马常莲 (3237)

密云水库细菌群落组成结构及影响因素 陈颖, 王佳文, 梁恩航, 陈倩 (3247)

可见光激发下模拟海水中四环素光降解的机制和路径 许恒韬, 付小航, 丰卫华, 王挺 (3260)

纳米零价铁改性生物炭对水中氨氮的吸附特性及机制 陈文静, 石峻岭, 李雪婷, 张李金, 刘富强, 陈正祝, 庞维海, 杨殿海 (3270)

高锰酸钾改性椰壳生物炭对水中 Cd(II) 和 Ni(II) 的去除性能及机制 张凤智, 王敦球, 曹星洋, 刘桥京, 岳甜甜, 刘立恒 (3278)

铜改性净水污泥水热炭对水体中磷的吸附特性及底泥内源磷的固定 何李文泽, 陈钰, 孙飞, 李艳君, 杨顺生, 张志鹏 (3288)

城镇生活污水处理厂出水硝酸盐浓度及同位素组成的影响因素 张东, 葛文彪, 赵爱萍, 高振朋, 陈昊, 张琮, 蒋浩, 吴文阳, 廖琪, 李成杰, 黄兴宇, 麻冰涓 (3301)

基于 Meta 分析的污水处理工艺对微塑料去除效果影响 符立松, 侯磊, 王艳霞, 李晓琳, 王万宾, 梁启斌 (3309)

我国自然生态系统氮沉降临界负荷评估 黄静文, 刘磊, 顾晓元, 凌超普 (3321)

气候变化和人类活动对东部沿海地区 NDVI 变化的影响分析 金岩松, 金凯, 王飞, 刘春霞, 秦鹏, 宗全利, 刘佩茹, 陈明利 (3329)

基于 InVEST 模型和 PLUS 模型的环杭州湾生态系统碳储量 丁岳, 王柳柱, 桂峰, 赵晨, 朱望远 (3343)

河西走廊中段荒漠绿洲土壤生态化学计量特征 孙雪, 龙永丽, 刘乐, 刘继亮, 金丽琼, 杜海峰, 陈凌云 (3353)

乌梁素海东部流域非生长季草地土壤细菌群落结构的垂向差异 李文宝, 张博尧, 史玉娇, 郭鑫, 李兴月 (3364)

芦芽山华北落叶松林土壤剖面细菌群落分布格局 毛晓雅, 刘晋仙, 贾彤, 吴铁航, 柴宝峰 (3376)

植被类型对黄土高原露天复垦土壤碳循环功能基因的影响 赵蛟, 马静, 朱燕峰, 于昊辰, 张琦, 陈浮 (3386)

施用生物炭对麦田土壤细菌群落多样性和冬小麦生长的影响 姚丽茹, 李伟, 朱良正, 曹布仓, 韩娟 (3396)

甜龙竹不同种植年限对土壤真菌群落的影响 朱书红, 辉朝茂, 赵秀婷, 刘蔚漪, 张仲富, 刘会会, 张文君, 朱礼月, 涂丹丹 (3408)

生物炭对热带地区辣椒种植土壤 N₂O 排放及其功能基因的影响 陈琦琦, 王紫君, 陈云忠, 王誉琴, 朱启林, 胡天怡, 胡煜杰, 伍延正, 孟磊, 汤水荣 (3418)

覆膜和有机无机配施对夏玉米农田温室气体排放及水氮利用的影响 蒋洪雨, 雷琪, 张彪, 吴淑芳 (3426)

不同类型地膜覆盖对土壤质量、根系生长和产量的影响 穆晓国, 高虎, 李梅花, 赵欣茹, 郭宁, 靳磊, 李建设, 叶林 (3439)

基于 PMF 模型的某铅锌冶炼城市降尘重金属污染评价及来源解析 陈明, 王琳玲, 曹柳, 李名闯, 申哲民 (3450)

云南 5 城市道路扬尘 PM_{2.5} 中重金属含量表征及健康风险 韩新宇, 郭晋源, 史建武, 李定霜, 王怡明, 宁平 (3463)

兰州市黄河风情线地表积尘及周边绿地土壤重金属污染特征及风险评价 李军, 李开明, 王晓槐, 焦亮, 臧飞, 毛潇萱, 杨云钦, 台喜生 (3475)

PMF 和 RF 模型联用的土壤重金属污染来源解析与污染评价:以西北某典型工业园区为例 高越, 吕童, 张鑫凯, 张博哈, 毕思琪, 周旭, 张炜, 曹红斌, 韩增玉 (3488)

基于 APCS-MLR 受体模型和地统计法的矿区周边农用地土壤重金属来源解析 张传华, 王钟书, 刘力, 刘燕 (3500)

PCA-APCS-MLR 和地统计学的典型农田土壤重金属来源解析 王美华 (3509)

三峡库区稻田土壤重金属污染特征及风险评价 刘娅君, 李彩霞, 梅楠, 张美平, 张成, 王定勇 (3520)

皖江经济带耕地重金属健康风险评价及环境基准 刘海, 魏伟, 潘海, 宋阳, 靳磊, 李建设, 叶林 (3531)

张家口市万全区某种植区土壤重金属污染评价与来源分析 安永龙, 殷秀兰, 李文娟, 金爱芳, 鲁青原 (3544)

滁州市表层土壤重金属含量特征、源解析及污染评价 汤金来, 赵宽, 胡睿鑫, 徐涛, 王宜萱, 杨扬, 周葆华 (3562)

矿业废弃地重金属形态分布特征与迁移转化影响机制分析 魏洪斌, 罗明, 向奎, 查理思, 杨慧丽 (3573)

基于成土母质的矿产资源基地土壤重金属生态风险评价与来源解析 卫晓峰, 孙紫坚, 陈自然, 魏浩, 孙厚云, 刘卫, 傅大庆 (3585)

不同种类蔬菜重金属富集特征及健康风险 祁浩, 庄坚, 庄重, 王琪, 万亚男, 李花粉 (3600)

山东省典型灌溉区土壤-小麦重金属健康风险评估 王菲, 费敏, 韩冬锐, 李春芳, 曹文涛, 姚磊, 曹见飞, 吴泉源 (3609)

基于机器学习方法的小麦镉富集因子预测 牛硕, 李艳玲, 杨阳, 商艳萍, 王天齐, 陈卫平 (3619)

《环境科学》征订启事(3062) 《环境科学》征稿简则(3116) 信息(3164, 3259, 3572)

基于机器学习方法的小麦镉富集因子预测

牛硕^{1,2}, 李艳玲³, 杨阳^{2*}, 商艳萍⁴, 王天齐², 陈卫平²

(1. 郑州大学河南先进技术研究院, 郑州 450003; 2. 中国科学院生态环境研究中心城市与区域生态国家重点实验室, 北京 100085; 3. 中交天津航道局有限公司天津市疏浚工程技术企业重点实验室, 天津 300461; 4. 河南省济源市种子管理站, 济源 459000)

摘要: 应用机器学习方法解析区域土壤-小麦系统镉(Cd)富集特征有助于风险决策的准确性和科学性. 基于区域调查, 构建了 Freundlich-type 转移方程、随机森林(RF)模型和神经网络(BPNN)模型对小麦 Cd 富集因子(BCF-Cd)进行预测, 验证不同模型的预测精度并评估其不确定性. 结果表明, RF($R^2 = 0.583$)和 BPNN($R^2 = 0.490$)模型预测性能均优于 Freundlich 转移方程($R^2 = 0.410$). 重复训练结果显示 RF 和 BPNN 平均绝对误差(MAE)和均方根误差(RMSE)较为接近, 但 RF(R^2 为 0.527 ~ 0.601)较 BPNN(R^2 为 0.432 ~ 0.661)模型精度和稳定性更高. 特征变量重要性分析显示多重因素的共同作用导致小麦 BCF-Cd 的异质性, 其中土壤磷(P)和锌(Zn)是影响小麦 BCF-Cd 变化的关键变量. 参数优化可进一步提高模型精度、稳定性和泛化能力.

关键词: 随机森林; 神经网络; 回归方程; 富集系数; 小麦

中图分类号: X171.5 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2023)06-3619-08 DOI: 10.13227/j.hjkk.202207237

Prediction of Cadmium Uptake Factor in Wheat Based on Machine Learning

NIU Shuo^{1,2}, LI Yan-ling³, YANG Yang^{2*}, SHANG Yan-ping⁴, WANG Tian-qi², CHEN Wei-ping²

(1. Henan Institutes of Advanced Technology, Zhengzhou University, Zhengzhou 450003, China; 2. State Key Laboratory of Urban and Regional Ecology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China; 3. Tianjin Key Laboratory for Dredging Engineer Enterprises, China Communications Construction Company Tianjin Dredging Co., Ltd., Tianjin 300461; 4. Henan Jiyuan County Seed Management Station, Jiyuan 459000, China)

Abstract: Applying machine learning methods to resolve the cadmium (Cd) uptake characteristics of regional soil-wheat systems can contribute to the accuracy and rationality of risk decisions. Based on a regional survey, we constructed a Freundlich-type transfer equation, random forest (RF) model, and neural network (BPNN) model to predict wheat Cd enrichment factor (BCF-Cd); verified the prediction accuracy; and assessed the uncertainty of different models. The results showed that both RF ($R^2 = 0.583$) and BPNN ($R^2 = 0.490$) were better than the Freundlich transfer equation ($R^2 = 0.410$). The RF and BPNN were further trained repeatedly, and the results showed that the mean absolute error (MAE) and root mean square error (RMSE) of RF and BPNN were close to each other. Additionally, the accuracy and stability of RF ($R^2 = 0.527$ - 0.601) was higher than that of BPNN ($R^2 = 0.432$ - 0.661). Feature importance analysis showed that multiple factors led to the heterogeneity of wheat BCF-Cd, in which soil phosphorus (P) and zinc (Zn) were the key variables affecting the change in wheat BCF-Cd. Parameter optimization can further improve the accuracy, stability, and generalization ability of the model.

Key words: random forest; neural network; regression equation; uptake factors; wheat

我国农田土壤镉(Cd)污染形势严峻^[1]. 近年来, 我国西北^[2]、华北^[3]和华东^[4]等地均相继出现小麦 Cd 含量超标现象. 有研究指出矿区周边农田土壤 Cd 超标率达 100%^[5]. 准确预测区域小麦籽粒 Cd 富集风险对于保障农产品质量安全和维护民众健康尤为重要.

小麦 Cd 富集因子(BCF-Cd, 小麦籽粒 Cd 含量与土壤 Cd 含量的比值)和多元回归模型的联用来初步量化 Cd 从土壤进入小麦的转移过程, 近年来在农田 Cd 污染风险管理方面应用较多^[5-7]. 然而, 小麦 Cd 富集过程强度低, 周期长, 影响因素繁杂, 传统的多元回归模型无法准确预测 BCF-Cd 变化趋势, 且缺乏普适性, 难以推广应用^[8-10]. 通过大样本数据训练的机器学习方法可实现对目标变量的高精度预测, 在面对复杂系统中自变量和因变量的非线性关系以及处理多维特征数据集时均表现出较大潜

力^[11-16]. Palansooriya 等^[11]通过神经网络和随机森林方法评估了生物炭应用下土壤重金属固定效率. Li 等^[10]基于卷积神经网络(CNN)开发了土壤-水稻系统中水稻重金属含量预测模型, 并指出该模型精度显著优于多元线性回归和贝叶斯岭回归方法. Hou 等^[17]通过遗传算法-神经网络(GA-BPNN)对区域稻米 Cd 富集量进行了预测, 并对影响因子进行了评估. 然而该类机器学习方法在北方碱性小麦田的应用研究相对较少, 模型精度和不确定性仍不明确.

本文选取河南省济源麦田为研究区, 结合区域调查的土壤-小麦系统采样数据, 应用多元线性回归

收稿日期: 2022-07-25; 修订日期: 2022-09-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(41907353, 41977146)

作者简介: 牛硕(1998~), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为农田土壤 Cd 治理, E-mail: 202022592017736@gs.zzu.edu.cn

* 通信作者, E-mail: yyang@rcees.ac.cn

模型、随机森林 (RF) 和神经网络 (BPNN) 模型, 解析区域土壤-小麦系统 Cd 富集特征, 预测小麦 BCF 变化趋势并评估不同模型准确性和不确定性, 优化模型参数, 以期为我国小麦 Cd 污染防治提供技术支撑.

1 材料与方法

1.1 研究区概况

研究区 (112°30' ~ 112°45' E、35°00' ~ 35°10' N) 位于河南省西北部, 总面积 363 km², 总人口约 67.6 万, 周围分布有在产大型有色金属矿场和冶炼基地, 为当地产业和人口聚集区. 主要土壤类型为潮土和褐土, 土壤 pH 范围在 6.07 ~ 8.16. 主要种植作物有冬小麦、玉米和大豆等, 为济源市粮食主产区. 土壤 Cd 主要来源为大气沉降和废水灌溉, 约占贡献源的 82.7% [7].

1.2 数据获取

本研究在济源市 (112°01' ~ 112°45' E、34°53' ~ 35°16' N) 进行大面积野外区域调查, 并设置 206 个采样点. 利用五点取样法分别采取相应小麦和表层土壤 (0 ~ 20 cm) 样品, 样点分布详细情况见图 1. 采集后的土壤样品密封存于自封袋中带回, 经风干过筛 (0.15 mm) 后密封保存备用. 小麦样品经自来水洗净后剪去麦穗, 用去离子水洗净, 105℃ 杀青 30 min, 60℃ 烘干至恒重, 脱壳后研磨粉碎. 土壤 pH、阳离子交换量 (CEC) 和土壤有机质 (SOM) 等土壤基本性质分析测试方法详见文献 [18], 应用四酸法 (HCl-HNO₃-HF-HClO₄) 消解土壤样品, HNO₃-HClO₄ 消解小麦样品, CaCl₂ 溶液浸提土壤有效态 Cd (0.01 mol·L⁻¹, 固液比 1:2) [7].

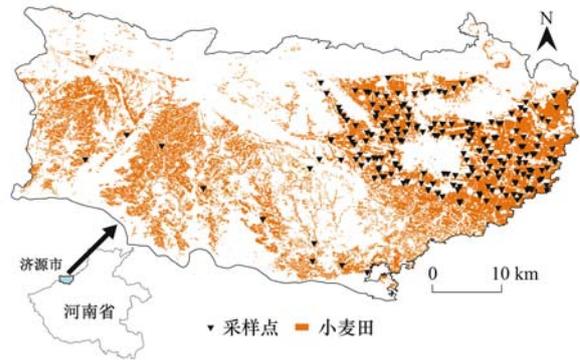


图 1 研究区概况及采样点分布示意

Fig. 1 Location of the study area and distribution of sampling sites

应用 ICP-OES (PerkinElmer Optima 8300, USA) 测定样品 K、Na、P、Ca、Zn、Cu、Fe、Mn、Mg 和 Al 含量, 应用 ICP-MS (Agilent 7500a, USA) 测定样品 Cd 和 Pb 含量. 使用国家标准物质 (GBW 10046 河南小麦; GBW 07427 华北平原土壤) 进行质量控制, 测得空白加标回收率在 86.5% ~ 109%. 14 组选取变量分析结果如下: 土壤 pH 为 7.66 ± 0.328 , 土壤阳离子交换量 (CEC) 为 $(16.2 \pm 3.96) \text{ cmol} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤有机质 (SOM) 为 $(27.0 \pm 5.75) \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Ca})$ 为 $(26\,479 \pm 16\,102) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Mg})$ 为 $(11\,984 \pm 4\,328) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{K})$ 为 $(19\,519 \pm 2\,739) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Na})$ 为 $(10\,649 \pm 2\,476) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Fe})$ 为 $(29\,196 \pm 4\,762) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Al})$ 为 $(55\,977 \pm 8\,049) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{P})$ 为 $(764 \pm 263) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Zn})$ 为 $(88.7 \pm 29.5) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Cu})$ 为 $(30.7 \pm 15.6) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 土壤 $\omega(\text{Mn})$ 为 $(561 \pm 83.0) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 和土壤 $\omega(\text{Pb})$ 为 $(108 \pm 124) \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$. 土壤-小麦系统 Cd 含量参见表 1.

表 1 土壤-小麦系统 Cd 含量特征¹⁾

Table 1 Cd concentration in soil-wheat system

项目	最小值	最大值	平均值	标准差	变异系数
土壤 Cd	0.202	20.7	1.52	2.19	144
有效态 Cd	0.000 5	2.15	0.084	0.188	224
土壤 Cd 活性系数 (AR)	0.130	20.8	5.24	4.90	93.5
小麦 Cd	0.021	1.64	0.198	0.201	102
小麦 Cd 富集因子 (BCF-Cd)	0.045	0.405	0.146	0.059	40.4

1) AR 的单位%, 变异系数单位为%, 富集因子无量纲, 其余单位为 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$

1.3 模型

以小麦 BCF-Cd 量化土壤-小麦 Cd 富集过程. Freundlich-type 方程的变形公式用于分析 Cd 在土壤-小麦系统的迁移特征.

$$\text{BCF} = \text{Cd-P}/\text{Cd-S} \quad (1)$$

$$\lg(\text{BCF-Cd}) = a + a \times \text{pH} + \sum_{i=1}^n a_i \lg(x_i) \quad (2)$$

式中, Cd-P 为小麦籽粒 Cd 含量, Cd-S 为土壤 Cd 全

量, a_i 为各特征变量回归系数, x_i 为特征变量.

随机森林 (RF) 模型是 Breiman 提出的基于决策树的集成学习算法, 利用 bootstrap 自助采样法, 重复性有放回的采取部分样本进行训练并通过投票或平均的方式选取最优模型 [12]. 本研究中将 2017 和 2018 年的 206 个样本混合作为数据集进行后续分析. RF 模型通过随机抽样, 抽取数据集 15% 样本作为模型测试集, 余下的 85% 数据为训练集, 训练集

通过 K 折验证 ($K = 10$) 的方法, 分成 10 组数据 (其中 1 组为验证集), 分别连续进行 10 次训练. 随机森林决策树数量为 400, 最大深度为 7.

神经网络 (BPNN) 模型相较于传统模型无需事先确定输入变量和输出变量的映射函数, 其可通过自身训练, 不断学习最终可得到最接近期望值的结果^[13]. 模型结构包括输入层、隐藏层和输出层. 本研究中 BPNN 模型中输出层神经元个数为 1, 输入层神经元个数为 13 个, 与输入变量一致. 通过不断矫正模型最终设置 13 个隐藏层, 每个隐藏层设置 20 个神经元, 每层的正向传播为 Linear 全连接函数, 激活函数为 SiLu 函数, 并添加 Dropout 函数防止过拟合^[19]. 梯度下降方法为自适应梯度方法 (AdamW), 设置学习率为 0.01, 模型迭代 500 次后趋于稳定. 数据集划分与 RF 模型一致, 抽取 15% 样本作为模型测试集, 余下 85% 样本为训练集.

3 种模型的性能评价指标选取决定系数 (R^2), 均方误差 (RMSE) 和平均绝对误差 (MAE). 特征重要性利用随机森林解释器中节点不纯度基尼系数 (Gini) 计算, 特征变量 x_i 的重要性为决策树节点分支前后基尼指数变化量的归一化数值^[12,15].

$$\text{Linear}(x_i) = x_i A^T + b \quad (3)$$

$$\text{SiLu}(x_i) = x_i \frac{1}{1 + e^{-x_i}} \quad (4)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{pi} - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n \left(y_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i\right)^2} \quad (5)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{pi} - y_i)^2} \quad (6)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_{pi} - y_i| \quad (7)$$

$$\text{Gini}(t) = 1 - \sum_{k=1}^q p^2(k|t) \quad (8)$$

式中, x_i 为样本, A^T 为隐藏层矩阵, 即正向传播中样本特征变量的权重, b 为偏置, y_{pi} 为目标变量的预测值, y_i 为目标变量观测值, t 为决策树分支节点, $p^2(k|t)$ 为估计类别的概率, 即从节点 t 中随机抽取两个样本, 其类别标记不一致的概率.

1.4 数据分析

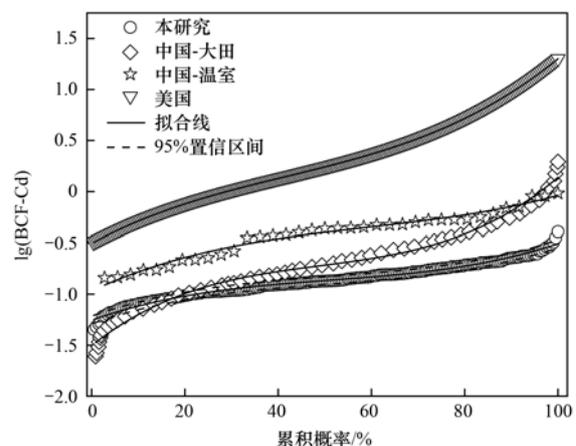
数据分析通过 Python 3.9 实现, RF 通过 sklearn 包中的函数搭建, BPNN 通过 pytorch.nn 包中的函数搭建, 可视化过程通过 matplotlib 包和 OriginPro 2022b 实现.

2 结果与讨论

2.1 土壤-小麦系统污染特征

研究区土壤 pH 在 6.07 ~ 8.37 之间, 平均值为 7.66, 其中大部分采样点 (94.7%) 土壤 pH 均显碱性, 与河南省第二次普查数据相比^[20] (pH = 7.70) 变化不大. 据表 1 可知, 区域土壤 $\omega(\text{Cd})$ 变化幅度较大 (0.202 ~ 20.7 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$), 变异系数 (CV) 高达 144%. 土壤 $\omega(\text{Cd})$ 平均值为 (1.52 ± 2.19) $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 是当地土壤背景值 (0.073 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$) 的 20.8 倍, 72.3% 的土壤样品 $\omega(\text{Cd})$ 高于风险筛选值 (0.6 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$), 11.2% 的采样点土壤 $\omega(\text{Cd})$ 超过风险管控值 (3 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, GB 15618-2018)^[21]. 以 0.01 $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ CaCl_2 浸提的区域土壤 $\omega(\text{有效态 Cd})$ 范围为 0.0005 ~ 2.15 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 平均值为 0.084 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$. 土壤 Cd 活性系数 (AR, 有效态 Cd 与土壤 Cd 含量的百分比) 平均值为 5.24%, 与华东地区矿区周边农田土壤相似 (5.48%)^[22]. 研究区小麦 $\omega(\text{Cd})$ 平均值为 (0.198 ± 0.201) $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ (表 1), 为国家粮食安全标准 (0.1 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, GB 2762-2022)^[23] 的 2 倍, 超标率为 58.3%. 可见区域土壤-小麦系统 Cd 迁移风险较高, 小麦 Cd 富集水平显著.

小麦 Cd 富集系数 (BCF-Cd) 可以量化 Cd 在土壤-小麦的转移过程, 表征小麦吸收积累 Cd 的能力^[6]. 研究区 BCF-Cd 范围为 0.045 ~ 0.405, 平均值为 0.146 ± 0.06, 中值为 0.134, 变异系数为 40.4%. 应用 Gaussian 分布方程对小麦 BCF-Cd 进行拟合 (图 2), 拟合结果显著 ($P < 0.001$), 可决系数高达 0.95, 可见区域 BCF-Cd 服从自然对数正态分布. 应用 Gaussian 分布方程进一步对中国和美国小麦



美国数据来自文献[24], 中国-大田和中国-温室数据分别来自文献[25]和文献[26,27]

图 2 小麦 Cd 富集因子累积分布特征

Fig. 2 Cumulative probability distributions of the Cd BCF for wheat

BCF-Cd 进行拟合,结果显示研究区 BCF-Cd 显著低于美国(平均值为 3.98 ± 5.29 ,中值为 1.96,图 2),中国-大田小麦 BCF-Cd(平均值为 0.280 ± 0.350 ,中值为 0.190)和中国-温室小麦 BCF-Cd(平均值为 0.433 ± 0.215 ,中值为 0.438)与本研究累积分布更为相似,研究区 BCF-Cd 在模型预测领域较为典型,可为其他小麦种植区 Cd 富集研究提供一定参考。

2.2 BCF 预测模型

相关分析显示小麦 Cd 富集系数(BCF-Cd)与土壤 P($r = -0.432^{**}$)、Zn($r = -0.324^{**}$)、Fe($r = -0.286^{**}$)、Mn($r = -0.282^{**}$)、CEC($r = -0.236^{**}$)和 K($r = -0.227^{**}$)均呈显著负相关(**表示 $P < 0.01$ 下显著性水平)。应用 Freundlich-type 转移方程进一步对各变量进行解析。结果显示(表 2),单一变量对 BCF 的解释率较低[方程式(9)],而引入土壤 P 后模型对小麦 BCF 解释率为 0.247[方程式(10)],引入土壤 Zn、Na、Mn 和 Ca 等土壤因子后, R^2 显著提高至 0.410[方程式(11)]。其他土壤因子与 BCF-Cd 之间没有显著性。

将特征变量($n = 13$,参见 1.2 节的数据获取)纳入机器学习模型[由于土壤有机质和阳离子交换

量具有较强共线性,且土壤有机质空间异质性较弱($CV = 21.3\%$),所以将土壤有机质剔除],分别构建随机森林模型(RF)和神经网络模型(BPNN),对小麦 BCF-Cd 变化特征进行解析。结果显示,与最优多元回归模型相比[$R^2 = 0.410$,方程式(11)],RF 模型($R^2 = 0.583$)和 BPNN 模型($R^2 = 0.490$)均取得了相对较高的预测效果,且 RF 模型预测精度优于 BPNN 模型(图 3)。此外,RF 模型(RMSE = 0.035)和 BPNN 模型(RMSE = 0.039)的均方误差都达到了较低水平,显著低于多元回归模型(RMSE = 0.135,图 3)。Li 等^[10]研究发现利用卷积神经网络(CNN)预测水稻 Cd 含量时($R^2 = 0.82$),预测精度显著高于多元线性回归($R^2 = 0.52$)。Yang 等^[28]研究指出在预测土壤对 Cd 吸附性能时,随机森林模型($R^2 = 0.720$)和神经网络模型($R^2 = 0.563$)预测性能均优于线性回归($R^2 = 0.385$)。于灏等^[9]利用神经网络模型分别对小麦和水稻 Cd 含量进行预测,发现神经网络模型在水稻和小麦中的预测结果均优于多元线性回归。这些结果与本研究相似,均表明神经网络和随机森林模型表现更为可靠,有较大应用潜力。

表 2 不同预测模型的性能

Table 2 Performance of different prediction models

方程式编号	回归模型	R^2	P	RMSE
(10)	$\lg(\text{BCF-Cd}) = -1.232 + 0.047 \times \text{pH}$	0.008	0.200	0.173
(11)	$\lg(\text{BCF-Cd}) = 0.919 + 0.003 \times \text{pH} - 0.633 \times \lg(P)$	0.247	<0.01	0.151
(12)	$\lg(\text{BCF-Cd}) = 1.948 - 0.017 \times \text{pH} - 0.570 \times \lg(P) - 0.315 \times \lg(\text{Zn}) + 0.335 \times \lg(\text{Na}) - 0.511 \times \lg(\text{Mn}) - 0.087 \times \lg(\text{Ca})$	0.410	<0.001	0.135
(13)	随机森林(RF)	0.583	<0.001	0.035
(14)	神经网络(BPNN)	0.490	<0.001	0.039

进一步对 RF 和 BPNN 模型进行 100 次训练,分别得出每次训练之后测试集的 R^2 、RMSE 和 MAE(图 4)。结果显示,RF 模型预测稳定性优于 BPNN 模型。具体而言,RF 模型 R^2 稳定在 0.527 ~ 0.601,而 BPNN 模型 R^2 在 0.432 ~ 0.661 之间,两种模型 MAE 和 RMSE 相当,RF 模型表现略优于 BPNN 模型(图 4)。总体而言,RF 和 BPNN 模型对 BCF 的预测优于多元回归模型,这主要是因为两种模型均可以看作黑箱模型,特征变量之间通过较多元线性回归更为复杂的交互作用来预测目标变量,并能够处理复杂模糊的映射关系^[28],而不需要准确反映变量之间的关系^[10]。此外,RF 模型在模型精度和稳定性方面要更优于 BPNN 模型,这可能是因为 BPNN 模型容易产生局部最优解,使得每次训练结果相差较大。Hou 等^[17]通过引入遗传算法(GA-BPNN)得到了较 BPNN 模型更加准确的结果,其可能原因就是遗传算法在寻找全局最优方面具有优势。

2.3 特征变量重要性

应用 RF 解释器对特征变量重要性进行排序,结果如图 5 所示。磷(P)是影响 BCF-Cd 预测最重要的特征变量,其重要性为 0.249。Hu 等^[29]研究发现施用 P 肥等肥料对农田土壤 Cd 的贡献率高达 30.8%。Wiggenhauser 等^[30]通过同位素标记法分析了 P 肥和土壤 Cd 的来源,发现土壤常年连续施用 P 肥会导致土壤残留 Cd 库的积累。Chen 等^[31]通过模型模拟发现土壤 Cd 含量会随着 P 肥施用逐年增加,进而增加作物 Cd 超标风险。此外,Grant 等^[32]发现土壤施 P 可能增加了土壤溶液离子强度从而减小土壤对 Cd 的固定;而 Yazici 等^[33]通过控制实验发现土壤施 P 改变了小麦根部生长环境,抑制根际土壤和小麦根部的菌根定植从而增加了小麦 Cd 累积。而高施 P 量也会导致小麦对 Zn 的吸收减小和小麦体内 Zn 失衡^[34],促进小麦 Cd 累积。可见长期施用 P 肥会增加小麦籽粒 Cd 超标风险,需根据区

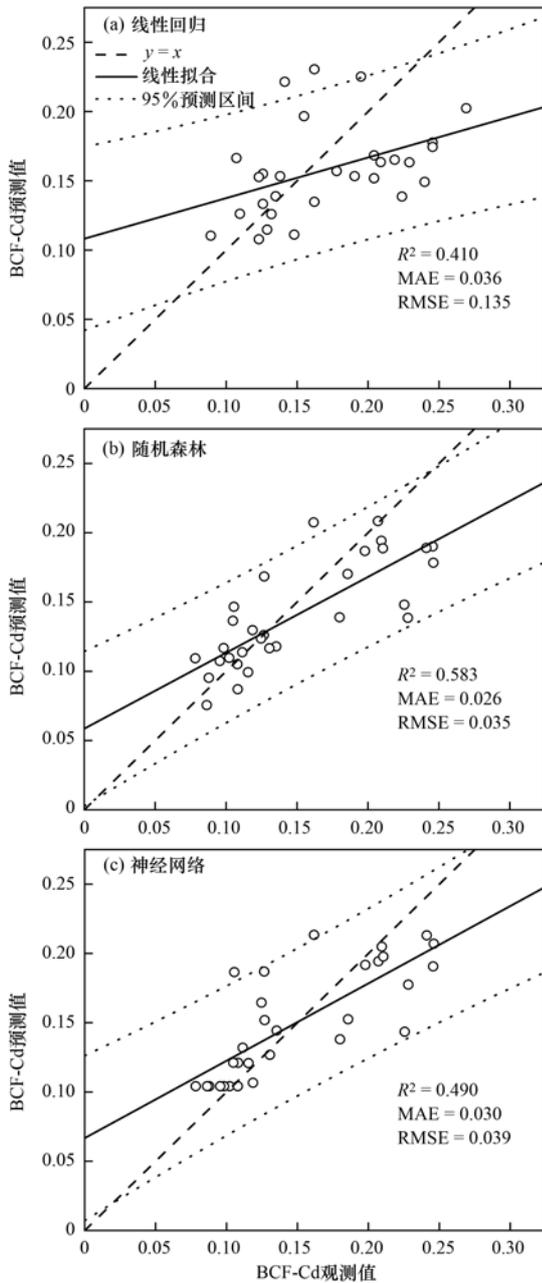


图 3 不同模型对 BCF 观测值和预测值

Fig. 3 BCF observations and predictions for different models

域土壤 Cd 污染状况进行剂量调整.

Zn 的重要性为 0.153 排在第 2 位(图 5). Zn 与

Cd 化学性质相似, 在小麦吸收转运过程中共用相同转运体, 存在一定交互作用^[35]. 一般而言, Zn 与 Cd 存在广泛的拮抗作用^[36], 即土壤施 Zn 会抑制小麦 Cd 累积. 然而另有研究发现土壤 Zn/Cd 存在使小麦籽粒 Cd 降至最低的阈值^[37], 特别是土壤高 Zn 含量往往会促进小麦吸收 Cd, 表现出协同作用^[38]. 土壤 Mg 和 Ca 的重要性分别为 0.133 和 0.084(图 5). Ca 和 Mg 也可与 Cd 竞争小麦根膜表面的吸附点位, 降低小麦籽粒 Cd 累积^[39]. 土壤 pH 值通过影响土壤水合氧化物、黏土矿物和有机质表面负电荷数量, 来影响土壤 Cd 生物有效性^[40]. 然而区域土壤 pH 变化较小, 小麦种植环境相对稳定, 很难通过调节 pH 提升小麦降 Cd 效果. 其余特征变量主要通过间接作用影响小麦籽粒 BCF-Cd.

2.4 模型不确定性

重要性较低的参数和多组输入参数会降低模型的泛化能力和计算效率^[9,29]. 通过特征重要性分析(图 5), 进一步筛选重要性较高(重要性 > 0.05)的特征变量(P、Zn、Mg、Ca、CEC 和 Mn)进行模型优化, 并对减少特征变量前后的两种模型进行比对. 结果显示(图 6), 剔除掉一些特征变量之后, RF 和 BPNN 模型 R² 均有一定程度降低, 其中 BPNN 模型 R² 由 0.490 降至 0.452, RF 模型则由 0.583 降至 0.549[图 6(a)]. 然而 RF 和 BPNN 模型均没有表现出明显的性能下降[图 6(a)]; 且模型绝对误差较为吻合, 没有出现明显偏离的情况[绝对误差在 ±0.05 附近, 图 6(b)]. 可见本研究所构建的模型稳定性较高, 具有较高可信度.

模型数据结构和输入参数选取也会增加模型不确定性^[13]. Li 等^[7] 通过 PMF 受体模型和矩阵分解模型量化了该区域区因素对土壤 Cd 贡献的空间分布, 结果显示大气沉降是研究区土壤 Cd 主要来源; 工厂分布、地形地势和盛行风向等因素导致区域土壤 Cd 含量分布存在较强的空间异质性, 进而通过影响模型数据结构增加模型不确定性. 除此以

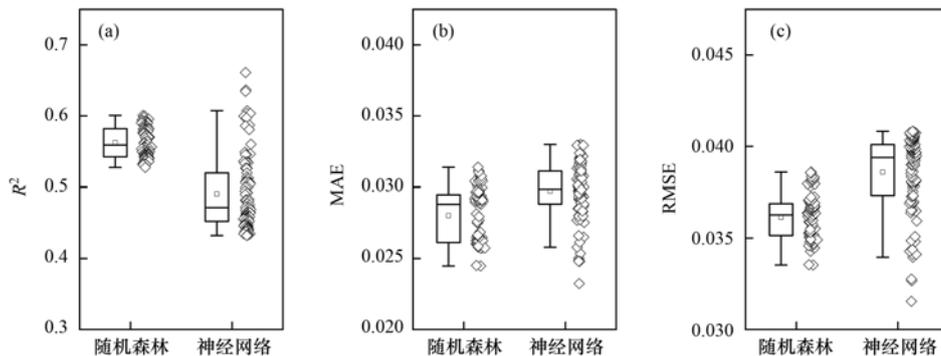


图 4 重复 100 次训练过程的模型稳定性评价

Fig. 4 Evaluation of the stability of the model with 100 repetitions of the training process

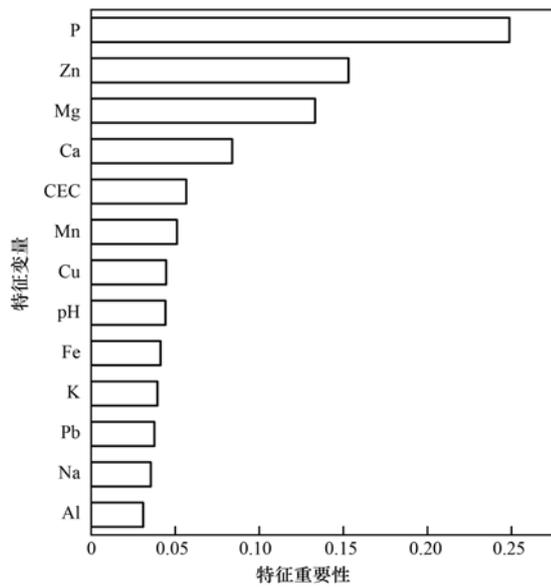
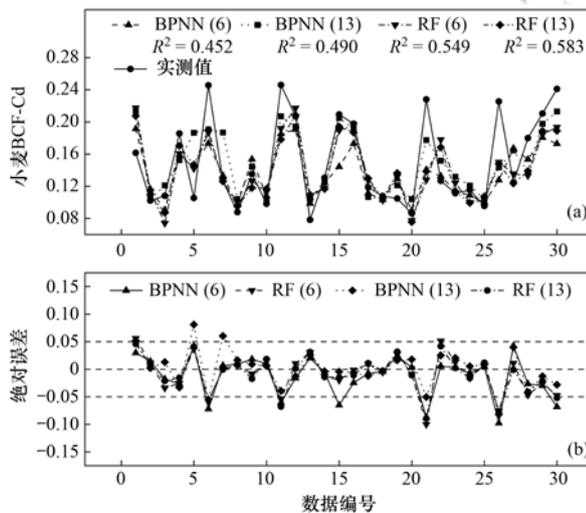


图5 特征变量对于 BCF 的重要性

Fig. 5 Importance of feature variables for BCF



(6) 和 (13) 表示模型输入变量的数量,

(b) 中虚线表示绝对误差区间

图6 保留重要特征变量后模型性能对比

Fig. 6 Comparison of model performance after retaining important feature variables

外,本研究忽略的土壤水分和有机质等变量可能也会影响模型不确定性. 土壤水分通过改变土壤氧化还原状态从而影响土壤胶体中 CdS 和 CdSO₄ 的转化过程^[41,42],进而影响小麦 Cd 富集. 土壤有机质对 Cd 的络合作用能使 Cd 转变为相对稳定形态(降低交换态 Cd,增加有机结合态 Cd 含量)^[43],从而间接影响小麦对 Cd 富集. 综上可知,RF 和 BPNN 模型能够充分利用现有大数据集进行数据解析,人为干扰低,相较于传统的多元线性回归模型其适用性更加广泛,具有较大的应用潜力. 模型参数和数据结构会给机器学习模型造成一定的不确定性,但参数的筛选和模型优化可进一步提高模型的泛化能力和算

力,且使模型能够适应具有更多样点的数据集以及更广泛的研究区,有利于区域 Cd 污染农田修复和风险管理的科学决策.

3 结论

研究区土壤-小麦 Cd 累积风险较高,小麦 Cd 富集水平显著. 小麦 Cd 富集因子 (BCF-Cd) 累积分布具有一定代表性,对其他地区 BCF-Cd 预测有一定参考价值. 相较于多元线性回归模型,随机森林 (RF) 和神经网络 (BPNN) 模型均能够起到更加精确的预测效果,而 RF 相较 BPNN 模型运行更加稳定和准确. 特征重要性分析显示土壤 P 和 Zn 是影响小麦 Cd 富集能力最重要的两个影响因子. 总体看来,RF 模型在预测小麦 BCF-Cd 时更具优势,为土壤-小麦系统 BCF-Cd 预测提供了新的视角和解决方案. 未来通过筛选重要性较高的特征变量可进一步增加模型可靠性,为小麦 Cd 污染的精细化治理提供指导和帮助.

参考文献:

- [1] 徐建明, 孟俊, 刘杏梅, 等. 我国农田土壤重金属污染防治与粮食安全保障[J]. 中国科学院院刊, 2018, **33**(2): 153-159.
Xu J M, Meng J, Liu X M, *et al.* Control of heavy metal pollution in farmland of China in terms of food security [J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2018, **33**(2): 153-159.
- [2] Li Y P, Wang S L, Nan Z R, *et al.* Accumulation, fractionation and health risk assessment of fluoride and heavy metals in soil-crop systems in northwest China [J]. Science of the Total Environment, 2019, **663**: 307-314.
- [3] Cai K, Zhang M J, Yu Y Q, *et al.* Pollution, source, and relationship of trace metal(loid)s in soil-wheat system in Hebei plain, Northern China[J]. Agronomy, 2019, **9**(7), doi: 10.3390/agronomy9070391.
- [4] Ran J, Wang D J, Wang C, *et al.* Heavy metal contents, distribution, and prediction in a regional soil-wheat system[J]. Science of the Total Environment, 2016, **544**: 422-431.
- [5] Xing W Q, Zhang H Y, Scheckel K G, *et al.* Heavy metal and metalloid concentrations in components of 25 wheat (*Triticum aestivum*) varieties in the vicinity of lead smelters in Henan province, China[J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2016, **188**(1), doi: 10.1007/s10661-015-5023-3.
- [6] McBride M B, Shayler H A, Spliethoff H M, *et al.* Concentrations of lead, cadmium and barium in urban garden-grown vegetables: the impact of soil variables[J]. Environmental Pollution, 2014, **194**: 254-261.
- [7] Li Y L, Chen W P, Yang Y, *et al.* Quantifying source-specific intake risks of wheat cadmium by associating source contributions of soil cadmium with human health risk[J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2021, **228**, doi: 10.1016/j.ecoenv.2021.112982.
- [8] Li C, Zhang C S, Yu T, *et al.* Use of artificial neural network to evaluate cadmium contamination in farmland soils in a karst area with naturally high background values [J]. Environmental Pollution, 2022, **304**, doi: 10.1016/j.envpol.2022.119234.

- [9] 于灏, 苏智杰, 祝培甜, 等. 水稻、小麦与土壤中重金属 Cd 含量的关系模拟研究[J]. 地学前缘, 2021, **28**(1): 438-445.
Yu H, Su Z J, Zhu P T, *et al.* Relationship between Cd contents in rice or wheat and soil: insight from a simulation study[J]. *Earth Science Frontiers*, 2021, **28**(1): 438-445.
- [10] Li P P, Hao H J, Mao X G, *et al.* Convolutional neural network-based applied research on the enrichment of heavy metals in the soil-rice system in China [J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2022, **29**(35): 53642-53655.
- [11] Palansooriya K N, Li J, Dissanayake P D, *et al.* Prediction of soil heavy metal immobilization by biochar using machine learning [J]. *Environmental Science & Technology*, 2022, **56**(7): 4187-4198.
- [12] Zhong S F, Zhang K, Bagheri M, *et al.* Machine learning: New ideas and tools in environmental science and engineering [J]. *Environmental Science & Technology*, 2021, **55**(19): 12741-12754.
- [13] Gupta S, Aga D, Pruden A, *et al.* Data analytics for environmental science and engineering research [J]. *Environmental Science & Technology*, 2021, **55**(16): 10895-10907.
- [14] Qian Y G, Zhou W Q, Yan J L, *et al.* Comparing machine learning classifiers for object-based land cover classification using very high resolution imagery [J]. *Remote Sensing*, 2015, **7**(1): 153-168.
- [15] Li Y P, Du Y, Deng Y M, *et al.* Predicting the spatial distribution of phosphorus concentration in quaternary sedimentary aquifers using simple field parameters [J]. *Applied Geochemistry*, 2022, **142**, doi: 10.1016/j.apgeochem.2022.105349.
- [16] Fu T T, Zhao R Y, Hu B F, *et al.* Novel framework for modelling the cadmium balance and accumulation in farmland soil in Zhejiang Province, East China; Sensitivity analysis, parameter optimisation, and forecast for 2050 [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2021, **279**, doi: 10.1016/j.jclepro.2020.123674.
- [17] Hou Y X, Zhao H F, Zhang Z, *et al.* A novel method for predicting cadmium concentration in rice grain using genetic algorithm and back-propagation neural network based on soil properties [J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2018, **25**(35): 35682-35692.
- [18] 王美娥, 彭驰, 陈卫平. 宁夏干旱地区工业区对农田土壤重金属累积的影响 [J]. *环境科学*, 2016, **37**(9): 3532-3539.
Wang M E, Peng C, Chen W P. Impacts of industrial zone in arid area in Ningxia Province on the accumulation of heavy metals in agricultural soils [J]. *Environmental Science*, 2016, **37**(9): 3532-3539.
- [19] Srivastava N, Hinton G, Krizhevsky A, *et al.* Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting [J]. *The Journal of Machine Learning Research*, 2014, **15**(1): 1929-1958.
- [20] 国家环境保护局, 中国环境检测总站. 中国土壤元素背景值 [M]. 北京: 中国环境科学出版社, 1990.
- [21] GB 15618-2018, 土壤环境质量 农用地土壤污染风险管控标准 (试行) [S].
- [22] Zhong X, Chen Z W, Li Y Y, *et al.* Factors influencing heavy metal availability and risk assessment of soils at typical metal mines in Eastern China [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2020, **400**, doi: 10.1016/j.jhazmat.2020.123289.
- [23] GB 2762-2022, 食品安全国家标准 食品中污染物限量 [S].
- [24] Chen W P, Li L Q, Chang A C, *et al.* Characterizing the solid-solution partitioning coefficient and plant uptake factor of As, Cd, and Pb in California croplands [J]. *Agriculture, Ecosystems & Environment*, 2009, **129**(1-3): 212-220.
- [25] 张红振, 骆永明, 章海波, 等. 水稻、小麦籽粒砷、镉、铅富集系数分布特征及规律 [J]. *环境科学*, 2010, **31**(2): 488-495.
Zhang H Z, Luo Y M, Zhang H B, *et al.* Characterizing the plant uptake factor of As, Cd and Pb for rice and wheat cereal [J]. *Environmental Science*, 2010, **31**(2): 488-495.
- [26] Wang Z W, Nan Z R, Wang S L, *et al.* Accumulation and distribution of cadmium and lead in wheat (*Triticum aestivum* L.) grown in contaminated soils from the oasis, north-west China [J]. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 2011, **91**(2): 377-384.
- [27] Liu K, Lv J L, He W X, *et al.* Major factors influencing cadmium uptake from the soil into wheat plants [J]. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2015, **113**: 207-213.
- [28] Yang H R, Huang K, Zhang K, *et al.* Predicting heavy metal adsorption on soil with machine learning and mapping global distribution of soil adsorption capacities [J]. *Environmental Science & Technology*, 2021, **55**(20): 14316-14328.
- [29] Hu W Y, Wang H F, Dong L R, *et al.* Source identification of heavy metals in peri-urban agricultural soils of southeast China: an integrated approach [J]. *Environmental Pollution*, 2018, **237**: 650-661.
- [30] Wigenhauser M, Bigalke M, Imseng M, *et al.* Using isotopes to trace freshly applied cadmium through mineral phosphorus fertilization in soil-fertilizer-plant systems [J]. *Science of the Total Environment*, 2019, **648**: 779-786.
- [31] Chen W P, Chang A C, Wu L S. Assessing long-term environmental risks of trace elements in phosphate fertilizers [J]. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2007, **67**(1): 48-58.
- [32] Grant C, Flaten D, Tenuta M, *et al.* The effect of rate and Cd concentration of repeated phosphate fertilizer applications on seed Cd concentration varies with crop type and environment [J]. *Plant and Soil*, 2013, **372**(1-2): 221-233.
- [33] Yazici M A, Asif M, Tutus Y, *et al.* Reduced root mycorrhizal colonization as affected by phosphorus fertilization is responsible for high cadmium accumulation in wheat [J]. *Plant and Soil*, 2021, **468**(1-2): 19-35.
- [34] Takagi D, Miyagi A, Tazoe Y, *et al.* Phosphorus toxicity disrupts Rubisco activation and reactive oxygen species defence systems by phytic acid accumulation in leaves [J]. *Plant, Cell & Environment*, 2020, **43**(9): 2033-2053.
- [35] Hall J L, Williams L E. Transition metal transporters in plants [J]. *Journal of Experimental Botany*, 2003, **54**(393): 2601-2613.
- [36] Chaney R L. How does contamination of rice soils with Cd and Zn cause high incidence of human Cd disease in subsistence rice farmers [J]. *Current Pollution Reports*, 2015, **1**(1): 13-22.
- [37] Yang Y, Li Y L, Chen W P, *et al.* Dynamic interactions between soil cadmium and zinc affect cadmium phytoavailability to rice and wheat: Regional investigation and risk modeling [J]. *Environmental Pollution*, 2020, **267**, doi: 10.1016/j.envpol.2020.115613.
- [38] Sarwar N, Ishaq W, Farid G, *et al.* Zinc-cadmium interactions: Impact on wheat physiology and mineral acquisition [J]. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2015, **122**: 528-536.
- [39] Kikuchi T, Okazaki M, Motobayashi T. Suppressive effect of magnesium oxide materials on cadmium accumulation in winter wheat grain cultivated in a cadmium-contaminated paddy field under annual rice-wheat rotational cultivation [J]. *Journal of*

- Hazardous Materials, 2009, **168**(1): 89-93.
- [40] Yang Y, Wang M E, Chen W P, *et al.* Cadmium accumulation risk in vegetables and rice in southern China: insights from solid-solution partitioning and plant uptake factor [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2017, **65**(27): 5463-5469.
- [41] 张雪霞, 张晓霞, 郑煜基, 等. 水分管理对硫铁镉在水稻根区变化规律及其在水稻中积累的影响[J]. 环境科学, 2013, **34**(7): 2837-2846.
Zhang X X, Zhang X X, Zheng Y J, *et al.* Accumulation of S, Fe and Cd in rhizosphere of rice and their uptake in rice with different water managements[J]. Environmental Science, 2013, **34**(7): 2837-2846.
- [42] 唐明灯, 艾绍英, 王艳红, 等. 土壤持水量对生菜生长和镉浓度的影响[J]. 土壤学报, 2012, **49**(6): 1158-1163.
Tang M D, Ai S Y, Wang Y H, *et al.* Effect of soil moisture on growth of and Cd concentration in lactuca sativa [J]. Acta Pedologica Sinica, 2012, **49**(6): 1158-1163.
- [43] Abedi T, Mojiri A. Cadmium uptake by wheat (*Triticum aestivum* L.): an overview[J]. Plants, 2020, **9**(4), doi: 10.3390/plants9040500.

环 境 科 学

CONTENTS

Research Status and Trend Analysis of Environmental and Health Risk and Control of Persistent, Mobile, and Toxic Chemicals	ZHANG Shao-xuan, CHEN An-na, CHEN Cheng-kang, <i>et al.</i> (3017)
Assessment of the Multidimensional Performances of Food Waste Utilization Technologies in China	YANG Guang, SHI Bo-fen, ZHOU Chuan-bin (3024)
Spatial Network of Urban Heat Environment in Beijing-Tianjin-Hebei Urban Agglomeration Based on MSPA and Circuit Theory	QIAO Zhi, CHEN Jia-yue, WANG Nan, <i>et al.</i> (3034)
Relationship Between Urban Spatial Pattern and Thermal Environment Response in Summer: A Case Study of Hefei City	CHEN Yuan-yuan, YAO Xia-mei, OU Chun, <i>et al.</i> (3043)
Assessment of Emission Reduction Effect of Major Air Pollution Control Measures on PM _{2.5} Concentrations During 13th Five-Year Period in Tianjin	XIAO Zhi-mei, XU Hong, CAI Zi-ying, <i>et al.</i> (3054)
Effect of Clean Heating on Carbonaceous Aerosols in PM _{2.5} During the Heating Period in Baoding	LUO Yu-qian, ZHANG Kai, ZHAO Yu-xi, <i>et al.</i> (3063)
Transport Influence and Potential Sources of PM _{2.5} Pollution for Nanjing	XIE Fang-jian, ZHENG Xin-mei, DOU Tao-tao, <i>et al.</i> (3071)
Impact of Atmospheric Circulation Patterns on Ozone Changes in the Pearl River Delta from 2015 to 2020	WANG Yao, LIU Run, XIN Fan (3080)
Effects of Tropical Cyclones on Ozone Pollution in Hainan Island	FU Chuan-bo, DAN Li, TONG Jin-he, <i>et al.</i> (3089)
Analysis of Causes and Sources of Summer Ozone Pollution in Rizhao Based on CMAQ and HYSPLIT Models	LIN Xin, TONG Ji-long, WANG Yi-fan, <i>et al.</i> (3098)
Health Benefit Evaluation for PM _{2.5} as Well as O ₃ Pollution Control in Chengdu, China from 2016 to 2020	ZHANG Ying, TIAN Qi-qi, WEI Xiao-yu, <i>et al.</i> (3108)
Impacts of COVID-19 Lockdown on Air Quality in Shenzhen in Spring 2022	LIU Chan-fang, ZHANG Ao-xing, FANG Qing, <i>et al.</i> (3117)
Emission Inventory of Airborne Pollutants from Biomass Combustion in Guizhou Province	WANG Yan-ni, YANG Jing-ting, HUANG Xian-feng, <i>et al.</i> (3130)
Main Chemical Components in Atmospheric Precipitation and Their Sources in Xi'an	ZHOU Dong, HUANG Zhi-pu, LI Si-min, <i>et al.</i> (3142)
Distribution, Respiratory Exposure, and Traceability of Atmospheric Microplastics in Yichang City	LIU Li-ming, WANG Chao, GONG Wen-wen, <i>et al.</i> (3152)
Hydrochemical Evolution in the Yarlung Zangbo River Basin	JIANG Ping, ZHANG Quan-fa, LI Si-yue (3165)
Temporal and Spatial Distribution Characteristics and Source Analysis of Nitrate in Surface Water of Wuding River Basin	XU Qi-feng, XIA Yun, LI Shu-jian, <i>et al.</i> (3174)
Seasonal Variation Characteristics and Pollution Assessment of Heavy Metals in Water and Sediment of Taipu River	LUO Peng-cheng, TU Yao-jen, SUN Ting-ting, <i>et al.</i> (3184)
Pollution Characteristics and Risk Assessment of Antibiotics in Beiyun River Basin in Beijing	JIANG Bao, SUI Shan-shan, SUN Cheng-yi, <i>et al.</i> (3198)
Tracking Riverine Nitrate Sources and Transformations in the Yiluo River Basin by Nitrogen and Oxygen Isotopes	GUO Wen-jing, ZHANG Dong, JIANG Hao, <i>et al.</i> (3206)
Distribution Characteristics and Risk Assessment of PPCPs in Surface Water and Sediments of Lakes in the Lower Reaches of the Huaihe River	WU Yu-sheng, HUANG Tian-yin, ZHANG Jia-gen, <i>et al.</i> (3217)
Characteristics and Driving Mechanisms of Shallow Groundwater Chemistry in Xining City	LIU Chun-yan, YU Kai-ning, ZHANG Ying, <i>et al.</i> (3228)
Groundwater Pollution Risk Assessment in Plain Area of the Yarkant River Basin	YAN Zhi-yun, ZENG Yan-yan, ZHOU Jin-long, <i>et al.</i> (3237)
Composition Structure and Influence Factors of Bacterial Communities in the Miyun Reservoir	CHEN Ying, WANG Jia-wen, LIANG En-hang, <i>et al.</i> (3247)
Photo-Degradation Mechanism and Pathway for Tetracycline in Simulated Seawater Under Irradiation of Visible Light	XU Heng-tao, FU Xiao-hang, FENG Wei-hua, <i>et al.</i> (3260)
Adsorption Characteristics and Mechanism of Ammonia Nitrogen in Water by Nano Zero-valent Iron-modified Biochar	CHEN Wen-jing, SHI Jun-ling, LI Xue-ting, <i>et al.</i> (3270)
Removal Performance and Mechanism of Potassium Permanganate Modified Coconut Shell Biochar for Cd(II) and Ni(II) in Aquatic Environment	ZHANG Feng-zhi, WANG Dun-qiu, CAO Xing-feng, <i>et al.</i> (3278)
Phosphorus Adsorption in Water and Immobilization in Sediments by Lanthanum-modified Water Treatment Sludge Hydrochar	HE Li-wenze, CHEN Yu, SUN Fei, <i>et al.</i> (3288)
Factors Affecting Nitrate Concentrations and Nitrogen and Oxygen Isotope Values of Effluents from Waste Water Treatment Plant	ZHANG Dong, GE Wen-biao, ZHAO Ai-ping, <i>et al.</i> (3301)
Effects of Wastewater Treatment Processes on the Removal Efficiency of Microplastics Based on Meta-analysis	FU Li-song, HOU Lei, WANG Yan-xia, <i>et al.</i> (3309)
Assessment of Critical Loads of Nitrogen Deposition in Natural Ecosystems of China	HUANG Jing-wen, LIU Lei, YAN Xiao-yuan, <i>et al.</i> (3321)
Impacts of Climate Change and Human Activities on NDVI Change in Eastern Coastal Areas of China	JIN Yan-song, JIN Kai, WANG Fei, <i>et al.</i> (3329)
Ecosystem Carbon Storage in Hangzhou Bay Area Based on InVEST and PLUS Models	DING Yue, WANG Liu-zhu, GUI Feng, <i>et al.</i> (3343)
Soil Stoichiometry Characterization in the Oasis-desert Transition Zone of Linze, Zhangye	SUN Xue, LONG Yong-li, LIU Le, <i>et al.</i> (3353)
Vertical Differences in Grassland Bacterial Community Structure During Non-Growing Season in Eastern Ulansuhai Basin	LI Wen-bao, ZHANG Bo-yao, SHI Yu-jiao, <i>et al.</i> (3364)
Distribution Pattern of Bacterial Community in Soil Profile of <i>Larix principis-rupprechtii</i> Forest in Luya Mountain	MAO Xiao-ya, LIU Jin-xian, JIA Tong, <i>et al.</i> (3376)
Effects of Vegetation Types on Carbon Cycle Functional Genes in Reclaimed Soil from Open Pit Mines in the Loess Plateau	ZHAO Jiao, MA Jing, ZHU Yan-feng, <i>et al.</i> (3386)
Effects of Biochar Application on Soil Bacterial Community Diversity and Winter Wheat Growth in Wheat Fields	YAO Li-ru, LI Wei, ZHU Yuan-zheng, <i>et al.</i> (3396)
Effects of Different Planting Years of <i>Dendrocalamus brandisii</i> on Soil Fungal Community	ZHU Shu-hong, HUI Chao-mao, ZHAO Xiu-ting, <i>et al.</i> (3408)
Effects of Biochar Amendment on N ₂ O Emission and Its Functional Genes in Pepper Growing Soil in Tropical Areas	CHEN Qi-qi, WANG Zi-jun, CHEN Yun-zhong, <i>et al.</i> (3418)
Effects of Mulching and Application of Organic and Chemical Fertilizer on Greenhouse Gas Emission and Water and Nitrogen Use in Summer Maize Farmland	JIANG Hong-li, LEI Qi, ZHANG Biao, <i>et al.</i> (3426)
Effects of Different Types of Plastic Film Mulching on Soil Quality, Root Growth, and Yield	MU Xiao-guo, GAO Hu, LI Mei-hua, <i>et al.</i> (3439)
Pollution Assessment and Source Analysis of Heavy Metals in Atmospheric Deposition in a Lead-zinc Smelting City Based on PMF Model	CHEN Ming, WANG Lin-ling, CAO Liu, <i>et al.</i> (3450)
Characterization and Health Risk of Heavy Metals in PM _{2.5} from Road Fugitive Dust in Five Cities of Yunnan Province	HAN Xin-yu, GUO Jin-yuan, SHI Jian-wu, <i>et al.</i> (3463)
Pollution Characteristics and Risk Assessment of Heavy Metals in Surface Dusts and Surrounding Green Land Soils from Yellow River Custom Tourist Line in Lanzhou	LI Jun, LI Kai-ming, WANG Xiao-huai, <i>et al.</i> (3475)
Source Apportionment and Pollution Assessment of Soil Heavy Metal Pollution Using PMF and RF Model: A Case Study of a Typical Industrial Park in Northwest China	GAO Yue, LÜ Tong, ZHANG Yun-kai, <i>et al.</i> (3488)
Source Analysis of Soil Heavy Metals in Agricultural Land Around the Mining Area Based on APCS-MLR Receptor Model and Geostatistical Method	ZHANG Chuan-hua, WANG Zhong-shu, LIU Li, <i>et al.</i> (3500)
Source Analysis of Heavy Metals in Typical Farmland Soils Based on PCA-APCS-MLR and Geostatistics	WANG Mei-hua (3509)
Characteristics and Risk Evaluation of Heavy Metal Contamination in Paddy Soils in the Three Gorges Reservoir Area	LIU Ya-jun, LI Cai-xia, MEI Nan, <i>et al.</i> (3520)
Health Risk Assessment and Environmental Benchmark of Heavy Metals in Cultivated Land in Wanjiang Economic Zone	LIU Hai, WEI Wei, SONG Yang, <i>et al.</i> (3531)
Evaluation and Source Analysis of Soil Heavy Metal Pollution in a Planting Area in Wanquan District, Zhangjiakou City	AN Yong-long, YIN Xiu-lan, LI Wen-juan, <i>et al.</i> (3544)
Heavy Metal Concentration, Source, and Pollution Assessment in Topsoil of Chuzhou City	TANG Jin-lai, ZHAO Kuan, HU Rui-xin, <i>et al.</i> (3562)
Analysis on the Distribution Characteristics and Influence Mechanism of Migration and Transformation of Heavy Metals in Mining Wasteland	WEI Hong-bin, LUO Ming, XIANG Lei, <i>et al.</i> (3573)
Ecological Risk Assessment and Source Apportionment of Heavy Metals in Mineral Resource Base Based on Soil Parent Materials	WEI Xiao-feng, SUN Zi-jian, CHEN Zi-ran, <i>et al.</i> (3585)
Enrichment Characteristics of Heavy Metals and Health Risk in Different Vegetables	QI Hao, ZHUANG Jian, ZHUANG Zhong, <i>et al.</i> (3600)
Health Risk Assessment of Heavy Metals in Soil and Wheat Grain in the Typical Sewage Irrigated Area of Shandong Province	WANG Fei, FEI Min, HAN Dong-nui, <i>et al.</i> (3609)
Prediction of Cadmium Uptake Factor in Wheat Based on Machine Learning	NIU Shuo, LI Yan-ling, YANG Yang, <i>et al.</i> (3619)