

北京城区PM_{2.5}各组分污染特征及来源分析

安欣欣, 曹阳, 王琴, 富佳明, 王陈婧, 景宽, 刘保献



■ 主办 中国科学院生态环境研究中心

■ 出版 科学出版社



2022年5月

第43卷 第5期
Vol.43 No.5

目次

北京城区 PM _{2.5} 各组分污染特征及来源分析	安欣欣, 曹阳, 王琴, 富佳明, 王陈婧, 景宽, 刘保献 (2251)
基于时空混合效应模型的京津冀 PM _{2.5} 浓度变化模拟	范丽行, 杨晓辉, 宋春杰, 李梦诗, 段继福, 王卫, 李夫星, 李伟妙 (2262)
2000~2018 年京津冀城市群 PM _{2.5} 时空演变及其与城市扩张的关联	赵安周, 相恺政, 刘宪锋, 张向蕊 (2274)
海-陆大气交汇作用下青岛冬季大气 PM _{2.5} 污染特征与来源解析	虞雄, 杨凌霄, 张婉, 齐安安, 王滢铭, 王鹏程, 黄琦, 赵彤, 张雄飞, 徐鹏, 张天琪, 王文兴 (2284)
硫酸盐非均相机制对颗粒物污染的影响: 上海典型污染事件的 WRF-Chem 模拟	张茹涵, 张皓然, 冯伟航, 汤克勤, 马亚平, 王红丽, 黄成, 胡建林, 张宏亮, 李楠 (2294)
省会城市不同功能区大气 PM _{2.5} 化学组分季节变化及来源分析	孙友敏, 范晶, 徐标, 李彦, 韩红, 张桂芹 (2304)
太原市冬季不同污染程度下 PM _{2.5} 的化学组成、消光特征及氧化潜势	任娇, 赵荣荣, 王铭, 张欢欢, 尹诗杰, 薛永刚 (2317)
郑州市冬季大气 PM _{2.5} 金属元素来源及健康风险评价	姚森, 王乾恒, 薛妍, 史来文, 张俊美, 杨书申 (2329)
淄博市冬季 PM _{2.5} 载带金属元素污染特征、生态风险评价及来源分析	白雯宇, 徐勃, 郭丽瑶, 殷宝辉, 马银红, 李丽明, 杨文, 赵雪艳 (2336)
承德市 PM _{2.5} 中多环芳烃的季节分布特征、来源解析及健康风险评价	贺博文, 聂赛赛, 李仪琳, 郭睿瑶, 姚波, 崔建升, 冯亚平, 王帅, 侯晓松 (2343)
珠三角大气中二噁英污染水平与区域迁移	付建平, 谢丹平, 黄锦琼, 杨艳艳, 冯桂贤, 周长风, 廖海婷, 青亮, 张漫雯, 吴明亮, 张素坤 (2355)
华北平原南部农村地区黑碳气溶胶浓度及来源	张玲, 孔少飞, 郑煌, 胡尧, 曾昕, 程溢, 祁士华 (2363)
基于模式过程分析技术天津地区 PM _{2.5} 污染气象成因分析	郝团, 蔡子颖, 韩素芹, 杨旭, 樊文雁, 姚青, 邱晓滨 (2373)
基于排放量和大气反应活性的 VOCs 污染源分级控制	陈鹏, 张月, 邢敏, 李珊珊 (2383)
基于复杂网络的中国臭氧拓扑特征	菅娜, 陈建华, 李冬, 王迪, 薛志钢 (2395)
基于前体物多情景排放的兰州市 2030 年夏季臭氧预测	陈天雷, 吴敏, 潘成珂, 常莉敏, 李洪, 刘鹏, 高宏, 黄韬, 马建民 (2403)
基于源反演和气溶胶同化方法天津空气质量模式预报能力改进	蔡子颖, 唐邈, 肖致美, 杨旭, 朱玉强, 韩素芹, 徐虹, 邱晓滨 (2415)
基于空气质量监测数据的钢铁行业污染源识别方法	石耀耀, 胡京南, 褚咏昕, 段青春, 胡丙鑫, 殷丽娜, 吕玲玲 (2427)
重污染天气应对“绩效分级、差异化管控”措施首次实践效果后评估	曾景海, 王灿 (2436)
黄河流域水污染风险分区	周夏飞, 曹国志, 於方, 杨威杉, 徐泽升 (2448)
黄河流域甘肃段工业行业水污染物空间排放特征	李雪迎, 杨曦, 乔琦, 刘丹丹, 张玥, 赵若楠, 白璐 (2459)
黄河沉积物重金属时空分布与污染评价	王韬轶, 潘保柱, 韩语, 王雨竹, 李晨辉, 杜蕾 (2467)
APCS-MLR 结合 PMF 模型解析厦门杏林湾近郊流域沉积物金属来源	沈宸宇, 闫钰, 于瑞莲, 胡恭任, 崔建勇, 颜妍, 黄华斌 (2476)
河流底泥 DOM、营养盐与重金属空间分异特征及响应关系	肖艳春, 于会彬, 宋永会 (2489)
太原市汾河河岸带土壤重金属分布特征、评价与来源解析	胡杰, 赵心语, 王婷婷, 苟奎贤, 王春玲 (2500)
洪泽湖溶解态有机质与重金属汞的结合特性	胡斌, 王沛芳, 张楠楠, 包天力, 金秋彤 (2510)
富营养化驱动下西凉湖百年生态演化轨迹	郑佳楠, 徐敏, 郑文秀, 朱可欣, 王荣, 张恩楼 (2518)
基于 DGT 技术的黄河上游典型水库沉积物氮磷释放与污染源解析	马玉坤, 朱翔, 庞晴晴, 孔明, 韩天伦, 彭福全, 谢磊, 汪龙眠, 徐斌, 何斐 (2527)
暴雨前后河南北部河流水质分异特征及其污染源解析	张彦, 邹磊, 梁志杰, 姜明, 李平, 黄仲冬, 齐学斌 (2537)
鄱阳湖流域水葫芦 (<i>Eichhornia crassipes</i>) 对水体微塑料的吸附截留效应	李文刚, 吴希恩, 简敏菲, 刘淑丽, 刘海球, 丁惠君 (2548)
太湖塑料添加剂时空分布和生态风险评价	刘舒娇, 丁剑楠, 石波哲, 张军毅, 庄严, 邹华 (2557)
骆马湖表层沉积物微塑料的分布、来源及储量	姚明轩, 白雪, 徐振佳, 李凤杰, 陆滢, 李畅, 华祖林 (2566)
太湖不同介质中磷的污染特征及其治理启示	蔡梅, 陆志华, 王元元, 钱旭 (2575)
辽河四平段流域河流沉积物微生物群落多样性和结构分析	李鹏洋, 安启睿, 王新皓, 孙思宇, 李青乾, 郑娜 (2586)
面源污染诱导嘉陵江沉积物中细菌群落结构与功能异变	薛玉琴, 徐飞, 刘坤和, 王佳颖, 竹兰萍, 朱志豪, 张拓 (2595)
微塑料对沉积物细菌群落组成和多样性的影响	李汶璐, 王志超, 杨文煊, 张博文, 李卫平 (2606)
白洋淀冬季沉积物好氧反硝化菌垂直分布特征及群落构建	张甜娜, 陈召莹, 张紫薇, 周石磊, 孟佳靖, 陈哲, 张一凡, 董宛佳, 崔建升 (2614)
人工诱导水库分层水体提前混合对细菌群落结构和代谢活性的影响	高悦, 黄廷林, 李楠, 齐允之, 司凡, 杨斌 (2624)
鄱阳湖典型区铜锈环螺体内微塑料分布特征	江为群, 胡启武, 简敏菲, 邹龙, 刘淑丽 (2633)
负载多壁碳纳米管的多孔 Ti/SnO ₂ -Sb-Ni 电极电催化氧化双酚 A	符远航, 刘安迪, 黄伟斌, 唐彬彬, 张进忠 (2640)
磁性 Mn _{0.6} Zn _{0.4} Fe ₂ O ₄ 催化 H ₂ O ₂ 降解亚甲基蓝效能及机制	徐冬莹, 余静, 郝旗, 杨迎春, 方淑红 (2650)
两种纳米颗粒对沸石吸附环丙沙星的影响	蒋兰翠, 孟昭福, 刘贤, 刘欣, 王新欣, 曹雪雯 (2662)
AMD 污泥复合材料吸附 As(V) 的机制及其影响因素	张亚辉, 张瑞雪, 吴攀, 陈世万, 杨艳, 安丽, 傅渝然, 张子豪 (2673)
三氯生及其降解中间产物对活性污泥中微生物群落变化和硝化反硝化功能基因的影响	卢英源, 董小琦, 彭星星, 贾晓珊 (2685)
污染场地风险管控可持续评价指标体系构建及关键影响因素分析	李笑诺, 易诗懿, 陈卫平 (2699)
基于生态功能的滨海湿地土壤质量综合评价方法构建及实证分析	张雪, 孔范龙, 姜志翔 (2709)
铜山矿区周边农田土壤重金属来源解析及污染评价	陈航, 王颖, 王澍 (2719)
典型铁、锰矿物对稻田土壤砷形态与酶活性的影响	周一敏, 黄雅媛, 刘凯, 赵儒乐, 李冰玉, 雷鸣 (2732)
两种油菜施肥水溶性壳聚糖修复典型铅污染农田土壤	孟晓飞, 郑国砥, 陈同斌, 杨俊兴, 郭俊梅, 刘杰 (2741)
基于贝叶斯理论的小麦籽粒镉铅超标风险预测	王天齐, 李艳玲, 杨阳, 牛硕, 王美娥, 陈卫平 (2751)
紫色土旱坡地油菜/玉米轮作下氮流失的年度变化特征	徐曼, 高明, 余添, 朱浩宇, 邓华, 王子芳 (2758)
不同原料生物炭的理化特性及其作炭基肥缓释载体的潜力评价	邢莉彬, 成洁, 耿增超, 张宏伟, 梁宏旭, 王强, 孙倩倩, 李艳 (2770)
木醋液酸化生物炭与氮素配施对盐渍土壤活性氮及氮挥发的影响	申书伟, 张丹丹, 王敏鸽, 王旭东 (2779)
生物可降解地膜覆盖对关中地区小麦-玉米农田温室气体排放的影响	郭怡婷, 罗晓琦, 王锐, 陈海心, 冯浩 (2788)
戴云山南坡不同海拔森林土壤微生物群落结构特征和影响因素	何中声, 王紫薇, 朱静, 陈佳嘉, 谷新光, 江蓝, 陈博, 吴则焰, 刘金福, 陈文伟 (2802)
模拟增温和降雨增加对撂荒草地土壤胞外酶活性及计量特征的影响	王兴, 钟泽坤, 简俊楠, 张硕宏, 杨改河, 任成杰, 冯永忠, 任广鑫, 王晓娇, 韩新辉 (2812)
中国主要城市的城市化对局地增温的贡献	李宇, 周德成, 闫章美, 张良侠 (2822)
《环境科学》征订启事 (2293)	
《环境科学》征稿简则 (2426)	
信息 (2585, 2672, 2708)	

基于时空混合效应模型的京津冀 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度变化模拟

范丽行^{1,2}, 杨晓辉^{1,3}, 宋春杰^{1,2}, 李梦诗^{1,2}, 段继福^{1,2}, 王卫^{1,2*}, 李夫星^{1,4*}, 李伟妙^{1,2}

(1. 河北师范大学地理科学学院, 石家庄 050024; 2. 河北省环境演变与生态建设实验室, 石家庄 050024; 3. 河北省科学院地理科学研究所, 河北省地理信息开发应用工程技术研究中心, 石家庄 050011; 4. 河北省环境变化遥感识别技术创新中心, 石家庄 050024)

摘要: 为揭示京津冀地区高精度 $\text{PM}_{2.5}$ 的时空分布特征, 以空间分辨率为 1 km 的 MAIAC AOD 数据为主要预测因子, 以气象数据、植被指数、夜间灯光数、人口密度和海拔数据作为辅助因子, 构建了一种新的时空混合效应模型 (STLME), 在拟合最优次区域划分方案基础上对京津冀地区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度进行预测分析。结果表明, 基于 STLME 模型的 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 预测精度高于传统的线性混合效应模型 (LME), 其十折交叉验证 (CV) R^2 为 0.91, 明显高于 LME 模型的 0.87, 说明 STLME 模型在同时校正 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 关系的时空异质性方面具有优势。最优次区域划分方案识别出 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 关系的空间差异, 并结合缓冲区平滑方法, 提高了 STLME 模型预测精度。京津冀 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度时空变化差异显著, 高值区主要分布在以石家庄、邢台和邯郸为中心的河北南部, 低值区则位于燕山-太行山区; 冬季 $\text{PM}_{2.5}$ 污染最严重, 其次是秋季和春季, 夏季污染最轻。STLME 模型提供的高精度 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度时空分布预测结果, 为京津冀地区与 $\text{PM}_{2.5}$ 污染相关的健康风险评估提供了科学依据, 也为大气污染源识别提供了科学参考。

关键词: $\text{PM}_{2.5}$; 多角度大气校正算法的气溶胶光学厚度 (MAIAC AOD); 时空混合效应模型 (STLME); 时空差异; 京津冀地区 (BTH)

中图分类号: X513 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2022)05-2262-12 DOI: 10.13227/j.hjxx.202108318

Modeling of $\text{PM}_{2.5}$ Concentrations in the Beijing-Tianjin-Hebei Region Using a Space-time Linear Mixed Effects Model

FAN Li-hang^{1,2}, YANG Xiao-hui^{1,3}, SONG Chun-jie^{1,2}, LI Meng-shi^{1,2}, DUAN Ji-fu^{1,2}, WANG Wei^{1,2*}, LI Fu-xing^{1,4*}, LI Wei-miao^{1,2}

(1. College of Geography Science, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China; 2. Hebei Laboratory of Environmental Evolution and Ecological Construction, Shijiazhuang 050024, China; 3. Hebei Engineering Research Center for Geographic Information Application, Institute of Geographical Sciences, Hebei Academy of Sciences, Shijiazhuang 050011, China; 4. Hebei Remote Sensing Technology Identification Innovation Center for Environmental Change, Shijiazhuang 050024, China)

Abstract: To reveal the spatiotemporal distribution characteristics of high-precision $\text{PM}_{2.5}$ concentrations in the Beijing-Tianjin-Hebei (BTH) region, a space-time linear mixed effects (STLME) model was developed in this study. The MAIAC AOD at a 1 km spatial resolution and the meteorological material, vegetation index, light quantity at night, population density, and altitude data were employed as the main and auxiliary predictive factors in the STLME model, respectively, to estimate the ground-level $\text{PM}_{2.5}$ concentrations on the BTH region by optimizing the sub-regional division scheme. The results indicated that the STLME model with the CV R^2 valued at 0.91 outperformed traditional linear-mixed effects (LME) with a CV R^2 of 0.87, indicating the superiority of the STLME model in simultaneously correcting the spatiotemporal heterogeneity of the $\text{PM}_{2.5}$ -AOD relationship. The optimal sub-region partitioning scheme identified the spatial difference in the $\text{PM}_{2.5}$ -AOD relationship and, combined with the buffer smoothing method, improved the prediction accuracy of the STLME model. The $\text{PM}_{2.5}$ levels in the BTH region exhibited strong spatiotemporal variations. The areas with higher $\text{PM}_{2.5}$ concentrations were mainly located in the southern Hebei province centered in the Shijiazhuang, Xingtai, and Handan cities, whereas the Yanshan-Taihangshan mountainous areas were the regions with lower values. In addition, the most heavily polluted season was winter, followed by autumn and spring, and summer was the cleanest season. The spatiotemporal distribution prediction results of high-precision $\text{PM}_{2.5}$ concentrations provided by the STLME model provide a scientific basis for the health risk assessment of $\text{PM}_{2.5}$ pollution in the BTH region and also provide a scientific reference for the identification of air pollution sources.

Key words: $\text{PM}_{2.5}$; MAIAC AOD; space-time linear mixed effects model (STLME); spatiotemporal difference; Beijing-Tianjin-Hebei region (BTH)

大气细颗粒物 ($\text{PM}_{2.5}$) 严重影响区域环境空气质量并危害人类健康^[1]。流行病学研究表明, 长期暴露于 $\text{PM}_{2.5}$ 污染环境下会增加心血管和呼吸道疾病的发病率及死亡率^[2-5]。因此, 精确获取时空解析的 $\text{PM}_{2.5}$ 暴露特征对公共卫生研究及区域环境质量评价极为重要^[6-9]。

虽然地面站点监测可以获取较为准确的 $\text{PM}_{2.5}$ 信息, 但站点稀疏且空间分布不均匀仍难以满足对区域面状空间分布的监测需求^[10]。相较而言, 空气质量模型可提供覆盖全域的格网数据, 但其对污染

物排放清单、污染物理化性质等资料的齐全性要求较高, 致使模型不确定性增大, 影响了其模拟精度^[11]。基于卫星遥感的气溶胶光学厚度 (aerosol optical depth, AOD) 为整层大气柱中气溶胶消光系数在垂直方向上的积分, 其与大气细颗粒物具有相

收稿日期: 2021-08-29; 修订日期: 2021-10-20

基金项目: 国家自然科学基金项目 (41471091); 河北省自然科学基金青年项目 (D2019205027); 河北省教育厅青年基金项目 (QN2018035)

作者简介: 范丽行 (1995 ~), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为大气污染物时空变化模拟, E-mail: 1204098544@qq.com

* 通信作者, E-mail: wangwei@hebtu.edu.cn; lifuxing6042@163.com

近物理机制^[12]. 因此, 学者们利用不同卫星传感器 AOD 产品在世界各地开展了近地面 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度估算研究^[13~16]. 目前, 神经网络^[17,18]、支持向量机^[19]和随机森林^[20]等人工智能模型可以通过增加隐层节点和层的数量来解释不同变量之间复杂的非线性关系, 明显提高了 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度时空分布的模拟精度, 但是过多的隐层节点和层会导致模型过度拟合问题. 在统计模型方面, 早期研究主要通过简单线性回归模型^[21~24]来探索 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 之间的关系, 未考虑二者关系的时空变化特性^[25]. 近年来, 很多研究采用一些高级统计模型来提高 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 相关关系, 如线性混合效应 (linear mixed effects, LME)^[26~30]、地理加权回归 (geographical weighted regression, GWR)^[10]、两阶段 (two stage)^[31~33]、时间地理加权回归 (geographically and temporally weighted regression, GTWR)^[34] 和实时结构自适应 (timely structure adaptive, TSA)^[35] 模型等. 与经典统计模型相比, 这些模型能够对 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 关系进行局部校正, 从而达到较高的预测精度. 进一步改进这些统计模型来提高 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度时空分布预测精度仍然具有挑战性.

早期的混合效应模型 (LME) 通过引入时间随机效应来矫正 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 关系的时间差异性, 证明了良好的性能^[26,27]. 然而上述基于时间随机效应的混合效应模型忽略了 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 关系的空间差异性^[25], 特别是在研究区域范围较大时, 上述空间差异性不容忽视. 鉴于此, 本文采用时空混合效应 (space-time linear mixed effects, STLME) 模型^[36], 该模型在时间随机效应基础上加入空间随机效应来同时校正 $\text{PM}_{2.5}$ -AOD 关系的时空异质性, 弥补了该类模型对空间差异性表达的缺陷, 为近地面 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度反演提供了新的研究方法.

为了提高空间分辨率和覆盖度, 以便更好地研究城市内部或较小区域 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的暴露评估. 本文引入 Lyapustin 等^[13] 开发的多角度大气校正算法 (MAIAC) 生产的空间分辨率为 1km 的 AOD 产品, 并辅以 $\text{PM}_{2.5}$ 气象和土地利用数据等协变量构建一种新的 STLME 模型, 预测 2017 年京津冀地区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的时空分布, 以期为该地区健康风险评估和大气污染源识别提供科学依据和参考.

1 材料与方法

1.1 研究区概况

京津冀区域陆地面积为 21.8 万 km^2 , 人口约 1.127 亿 (2018 年), 位于华北平原北部, 北靠燕山山脉, 西倚太行山, 包括北京市、天津市和河北省的

11 个地级市 (图 1), 拥有得天独厚的地理位置. 该区域属于温带大陆性季风气候, 夏季受海洋水汽影响, 高温多雨; 冬季受内陆干冷空气影响, 寒冷干燥. 作为全国经济最发达的地区之一^[37], 京津冀地区近 40 年快速发展的城市化和工业化, 使其得成为了中国大气污染最严重的区域之一^[38].

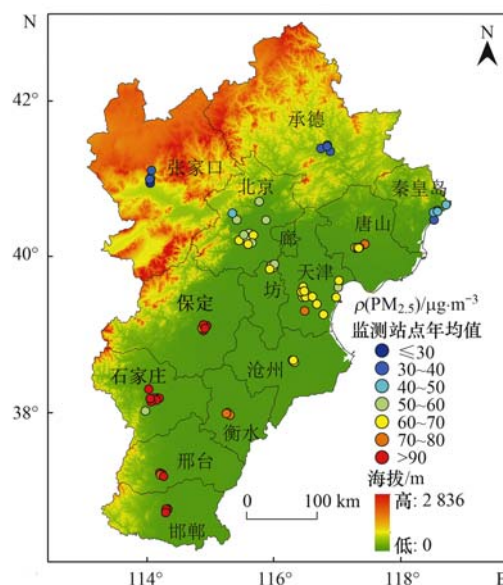


图 1 研究区地理位置和空气质量监测站点及其 2017 年 $\text{PM}_{2.5}$ 年均值分布

Fig. 1 Geographical location and air quality monitoring stations in the study area and distribution of annual mean $\text{PM}_{2.5}$ in 2017

1.2 数据获取

1.2.1 $\text{PM}_{2.5}$ 监测数据

$\text{PM}_{2.5}$ 日均浓度数据来源于全国空气质量实时发布平台 (<http://106.37.208.233:20035/>). 共获取研究区 2017 年 79 个国控监测点的 $\text{PM}_{2.5}$ 日均值数据, 剔除低于监测限值 (日均值 $< 2 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) 的 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ ^[32].

1.2.2 MAIAC AOD

MAIAC AOD 产品来自 NASA 气候模拟中心 (<https://portal.nccs.nasa.gov/datashare/maiac/DataRelease/>). 采用 h03v01、h03v02 和 h04v01 这 3 个条带内的 2017 年京津冀地区 AOD 数据. 为提高空间覆盖度, 采用最小二乘法对 Terra 和 Aqua 卫星的 AOD 数据分别逐月建立线性回归模型, 以此互相预测缺失的 AOD 值; 最后将每日 Terra 和 Aqua 卫星 AOD 通过计算平均值进行数据融合, 该值表征了当地 10:30 ~ 13:30 的 MAIAC AOD 平均状况^[31], 增强了与 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度日均值数据的相关性.

1.2.3 $\text{PM}_{2.5}$ 时间-空间预测因子

$\text{PM}_{2.5}$ 时间-空间预测因子包括气象因子、归一化植被指数和夜间灯光指数. 其中气象因子包括大

气边界层高度(boundary layer height, BLH)、地面气温、风速、气压和相对湿度等. 其中, 大气边界层高度数据来源于第5版的戈达德地球观测系统数据同化系统的网格化气象数据产品(<ftp://rain.ucis.dal.ca>), 时空分辨率为 $0.25^\circ \times 0.3125^\circ$ 的小时数据; 地面气温、相对湿度、风速和气压等气象数据来源于国家青藏高原数据中心^[39,40] (<http://data.tpdc.ac.cn/zh-hans/data/>), 时空分辨率为 $0.1^\circ \times 0.1^\circ$ 的日均值. 所有数据都使用双线性内插法重采样成与 AOD 相同分辨率的栅格数据.

归一化植被指数来源于 NASA (<https://modis.gsfc.nasa.gov/>) 提供的 2017 年 MODIS 产品, 产品序列号为 MOD13A2, 时空分辨率为 1 km 的 16 d 合成图像. 通过 ENVI 5.3 进行影像拼接、投影变换和裁剪等预处理, 得到京津冀地区的 NDVI 数据.

夜间灯光指数数据来源于 NPP/VIIIRS (National Polar-orbiting Partnership's Visible Infrared Imaging Radiometer Suite) 月度合成夜间灯光数据 (<https://earthdata.nasa.gov/earth-observation-data/>), 空间分辨率为 0.5 km. 原数据通过投影变换、重采样以及裁剪和消除负值等预处理, 最终得到京津冀地区的夜间灯光指数数据.

1.2.4 $PM_{2.5}$ 空间预测因子

空间预测因子包括人口密度和海拔高度. 人口数据为美国能源部橡树岭国家实验室 (ORNL) (<https://www.satpalda.com/product/landscan/>) 2010 年 1 km 格网数据集. 海拔数据为 NASA (<https://landsweb.modaps.eosdis.nasa.gov/>) 航天飞机雷达地形测绘任务 (SRTM) 提供的分辨率 30 m 的 DEM 数据.

1.2.5 $PM_{2.5}$ 和 AOD 数据预处理

AOD 是解释 $PM_{2.5}$ 浓度最重要的因子, 为优化每日 $PM_{2.5}$ 观测值和 AOD 之间的关系, 在建模之前, 需要对数据进行预处理. AOD 数据在反演过程中由于云污染 (无法观测到地表)、水或者积雪 (反射率过高无法区分地表和大气的贡献) 等原因, 会导致数据异常. 为了确保高质量的 AOD 数据, 上述被污染的数据则需要删除^[41,42]. 首先, 考虑到 $PM_{2.5}$ -AOD 两者正相关关系, 删除二者关系明显相冲突 ($AOD < \text{第 } 50 \text{ 个百分位数}$ 和 $PM_{2.5} > \text{第 } 85 \text{ 个百分位数}$, 以及 $PM_{2.5} < \text{第 } 50 \text{ 个百分位数}$ 和 $AOD > \text{第 } 80 \text{ 个百分位数}$) 的数据; 其次, 剔除每个监测站点少于 30d 有效记录的数据; 最后, 剔除因水面和冰雪覆盖 ($NDVI \leq 0$) 造成异常的 AOD 数据. 通过上述处理, 本文删除了约 4% 的 AOD 异常数据.

1.3 研究方法

1.3.1 STLME 模型

STLME 模型包括固定效应和随机效应, 其中随机效应又包含时间随机效应和空间随机效应. STLME 模型与流行的 LME 模型不同之处在于, 在时间随机效应中嵌套空间随机效应来表征 $PM_{2.5}$ -AOD 关系的空间异质性. 因此 STLME 模型能够表征 $PM_{2.5}$ -AOD 关系在京津冀随时空变化的特性. STLME 模型公式如下:

$$PM_{ij} = (a + \mu_j + g_{jreg}) + (\beta_1 + v_j + h_{jreg}) AOD_{ij} + \sum_{m=1}^2 \gamma_{1m} x_{1mi} + \sum_{m=1}^7 \gamma_{2m} x_{2mij} + \varepsilon_{ij} (\mu_j, v_j) \sim N[(00), \sigma_1], (g_{jreg}, h_{jreg}) \sim N[(00), \sigma_2] \quad (1)$$

式中, PM_{ij} 为研究区第 i 个地面监测站点第 j 天的 $PM_{2.5}$ 浓度监测值; a 和 β_1 为截距项和 AOD 项的固定效应, 分别表示固定截距和固定斜率; μ_j 和 v_j 为第 j 天的随机效应, 分别表示随机截距和随机斜率; g_{jreg} 和 h_{jreg} 分别为次级区域第 j 天的随机截距和随机斜率, 其中 g_{jreg} 和 h_{jreg} 嵌套在时间随机效应 μ_j 和 v_j 中; AOD_{ij} 为第 i 个地面监测站点所在网格 ($1 \text{ km} \times 1 \text{ km}$) 第 j 天遥感反演的气溶胶光学厚度值; x_{1mi} 为 i 网格点第 m 个空间预测因子的值 (即人口密度、海拔); x_{2mij} 为第 i 个网格点第 j 天第 m 个时间-空间预测因子值 (即边界层高度、地面气温、相对湿度、风速、气压、归一化植被指数和夜间灯光指数), γ 为各个时空预测因子对 $PM_{2.5}$ 浓度影响的固定效应. ε_{ij} 是站点 i 在第 j 天的随机误差项; σ_1 为时间随机效应协方差矩阵, 其对角元素为 σ_μ 和 σ_v ; σ_2 为空间随机效应协方差矩阵, 其对角元素为 σ_g 和 σ_h . 模型中的固定效应代表各个因子对 $PM_{2.5}$ 浓度的固定影响, 它们并不随时空变化而变化; 随机效应 μ_j 和 v_j 随时间变化而改变但并不随空间变化, 体现 $PM_{2.5}$ -AOD 关系随时间的变化; 随机效应 g_{jreg} 和 h_{jreg} 随着站点所在次区域的改变而改变, 反映了 $PM_{2.5}$ -AOD 关系在空间上的差异.

1.3.2 次区域划分方案优选与 $PM_{2.5}$ 预测结果的边界平滑

由于大气污染物排放强度、颗粒物组成成分和颗粒物浓度垂直廓线等因素存在次区域尺度上的空间差异, 从而导致 $PM_{2.5}$ -AOD 关系存在次区域尺度的空间异质性^[36]. 因此, 次区域优选就成为 STLME 模型构建的重要一环, 本研究在初步选择多个次区域划分方案的基础上, 采用模型预测精度验证法进行次区域划分方案优选, 选出模型预测精度最高的次区域划分方案.

由于次区域划分方案一经确定其范围和边界就

是固定的,有研究表明^[36],如果相邻次区域之间 PM_{2.5} 浓度差异较大时,容易在相邻边界两侧产生“断崖式”差异,这种现象与实际情况不符.为了消除这一问题,本研究以 LME 模型预测结果为背景参照,通过在次区域边界两侧设置缓冲区并计算相邻两区域的预测均值替代原单一预测值,依据背景参照确定缓冲区的最佳宽度,从而解决上述“断崖式”差异问题.

1.3.3 模型验证

为消除模型的过拟合问题,采用十折交叉验证法来验证 STLME 模型预测精度.本文用模型预测值与实测值间的决定系数 R^2 、均方根预测误差 (RMSE) 和相对预测误差 (RPE) 等统计指标来评估.其中 R^2 是预测值与观测值的拟合程度, R^2 预测越接近于 1,表明预测精度越高;斜率解释模型的预测偏差,斜率越接近于 1,表明预测偏差越小;RMSE 和 RPE 分别反映模型预测的绝对误差和相对误差,二者数值越小,模型精度越高.其中, RMSE 和 RPE 的计算公式如下:

$$RMSE = \sqrt{n^{-1} \cdot \sum_{i=1}^n (y_{obs,i} - y_{model,i})^2}$$
 (2)

$$RPE = (RMSE/\bar{y}) \times 100\%$$
 (3)

式中, $y_{obs,i}$ 为地面各监测站点 PM_{2.5} 浓度监测值; $y_{model,i}$ 为各站点 PM_{2.5} 浓度模型预测值; n 为建模数据集的样本总数, $\bar{y}$ 为 PM_{2.5} 浓度的监测均值.

为探查 STLME 模型相比于 LME 模型是否提高模型精度,本文用时间维决定系数(时间 R^2)和空间维决定系数(空间 R^2)来评估 STLME 模型对校正 PM_{2.5}-AOD 关系的时空差异效果.其中,时间 R^2 是所有站点每天 $\Delta PM_{2.5}$ 与预测 $\Delta PM_{2.5}$ 回归拟合所得, $\Delta PM_{2.5}$ 是所有站点第 j 天的 PM_{2.5} 浓度的平均值,预测 $\Delta PM_{2.5}$ 是所有站点第 j 天的预测 PM_{2.5} 浓度的平均值;空间 R^2 为各站点全年 $\Delta PM_{2.5}$ 与预测 $\Delta PM_{2.5}$ 回归拟合所得.

2 结果与分析

2.1 描述性统计分析

京津冀地区 2017 年 PM_{2.5} 地面监测站点的有效观测量为 28 275 个, AOD 的有效观测量 17 288 条. 顺应建模要求,在栅格匹配过程中剔除了不满足 4 个分区均有有效数据条件的天数,共删除 50 d, 剩余 315 d (86% 的时间覆盖率) 16 163 条 (61.86% 的空间覆盖率) 有效建模数据记录.

表 1 为建模数据中 PM_{2.5} 及 AOD 的描述性统计分析. 京津冀地区各城市的 PM_{2.5} 浓度之间的差异很大, 其中, 邯郸 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 的均值最高 (86.50 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), 保定次之, 张家口最低, 空气质量最好. AOD 中邯郸的均值同样最大, 邢台次之, 张家口最小 (0.23). 从整体来看, PM_{2.5} 分布规律与 AOD 空间分布大体一致, 都是南高北低.

表 1 2017 年建模数据中 PM_{2.5} 和 AOD 的描述性统计量

Table 1 Descriptive statistics of PM_{2.5} and AOD in modeling data in 2017

城市	样本量	$\rho(\text{PM}_{2.5})/\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$				AOD			
		均值	标准差	最小值	最大值	均值	标准差	最小值	最大值
北京	2 584	53.64	58.80	2	499	0.40	0.47	0.02	3.09
天津	2 863	61.20	47.40	4	318	0.50	0.53	0.003	3.27
保定	1 216	83.36	62.80	15	369	0.56	0.56	0.23	3.26
沧州	589	65.91	45.10	18	262	0.53	0.51	0.02	2.61
承德	1 112	32.71	23.06	7	201	0.31	0.37	0.03	3.24
邯郸	780	86.50	57.29	14	344	0.72	0.53	0.09	3.04
衡水	573	75.81	52.22	16	340	0.55	0.48	0.03	3.05
秦皇岛	1 057	43.25	31.42	7	191	0.51	0.59	0.01	3.27
石家庄	1 553	80.12	65.16	10	488	0.57	0.55	0.02	3.27
唐山	1 187	62.75	44.42	15	308	0.50	0.59	0.02	3.27
邢台	730	79.04	59.08	16	477	0.66	0.50	0.04	2.77
廊坊	826	53.41	46.95	9	360	0.46	0.50	0.03	3.04
张家口	1 093	30.92	24.66	4	331	0.23	0.21	0.02	1.56
总和	16 163	62.20	47.56	2	499	0.50	0.49	0.003	3.27

图 2 为 STLME 模型的各变量的直方图和描述性统计. 结果表明, 除地面气温外, 其余变量均近似正态分布. 其中, AOD 平均值为 0.50, 标准差为 0.49, 时空差异较大; $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 的范围为 2 ~ 499 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 标准差为 47.56 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 说明研究区内 PM_{2.5} 污染程度时空差异同样较大. $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 年均值

为 62.20 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 约是国家环境空气质量 (GB 3095-2012) 二级标准限值 (35 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) 的 1.8 倍, 表明京津冀地区 PM_{2.5} 污染较为严重.

2.2 模型诊断

图 3 为模型拟合结果的随机误差项诊断, LME 和 STLME 模型随机误差频率分布直方图均符合均

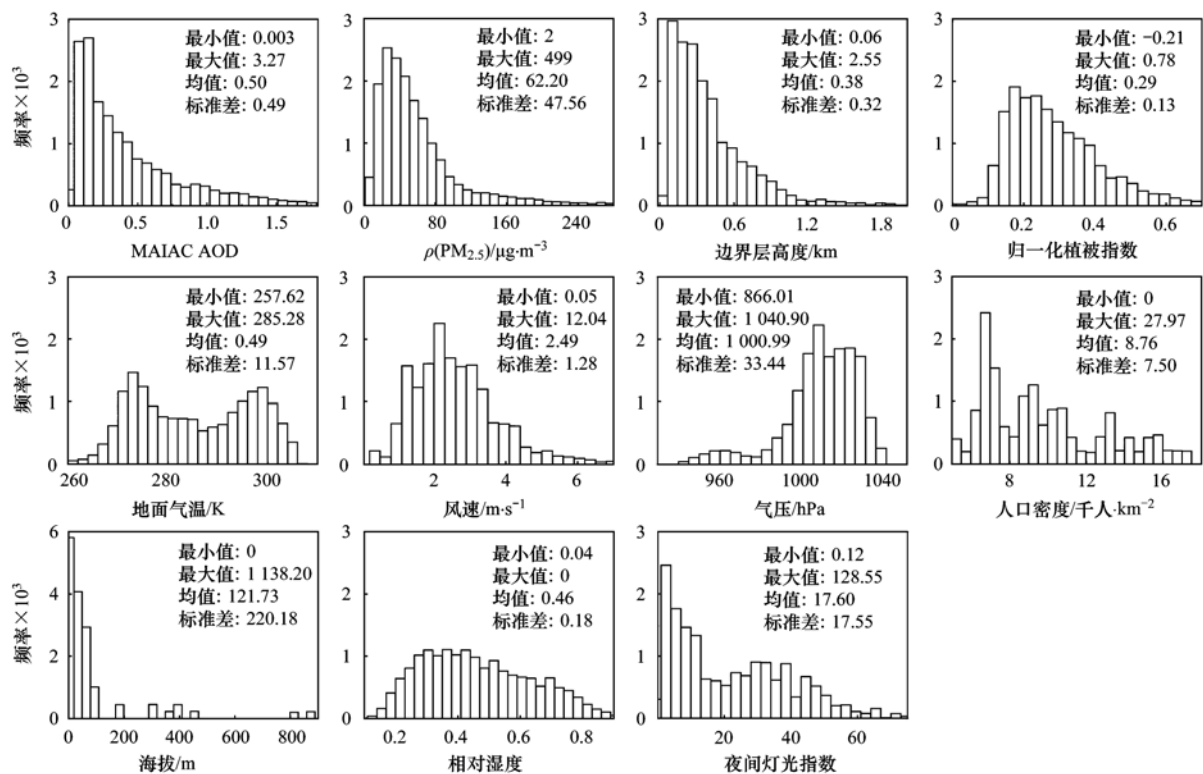


图2 京津冀地区2017年建模数据各参数的直方图和描述性统计

Fig. 2 Histograms and descriptive statistics of modeling data parameters for the Beijing-Tianjin-Hebei region in 2017

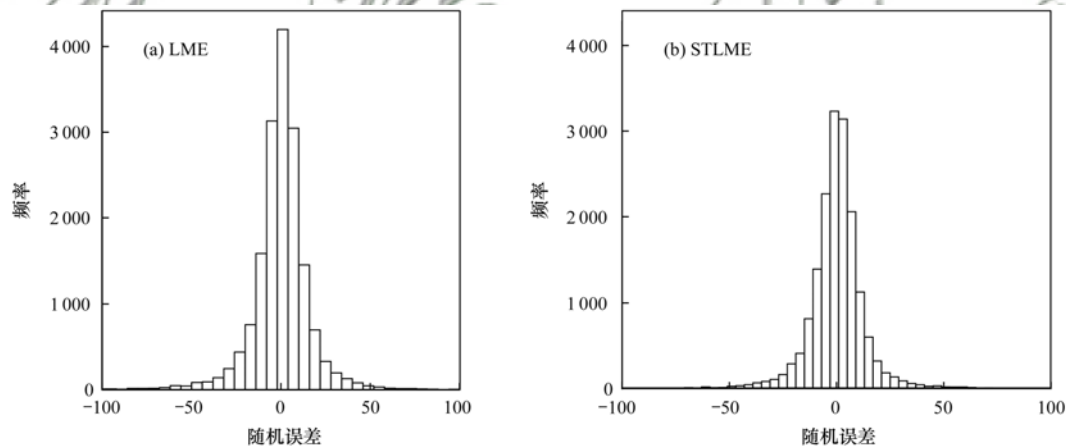


图3 LME和STLME模型拟合结果的随机误差项诊断

Fig. 3 Random error term diagnosis of the fitting results of the LME and STLME models

值为0的正态分布的要求,随机误差分布呈现随机性特征,说明模型模拟结果可靠。

表2为STLME模型固定效应的解,为使不同的变量具有相同的尺度,对原始数据进行标准化处理。固定效应(固定截距和固定斜率)表示全年内所有自变量对PM_{2.5}浓度的固定影响,其中MAIAC AOD固定斜率标准值为0.982,说明PM_{2.5}-AOD两者呈正相关,且两者相关关系显著;BLH、气压、风速和归一化植被指数等与PM_{2.5}浓度呈负相关;地面气温、相对湿度和海拔等与PM_{2.5}浓度呈正相关。其中,相对湿度、归一化植被指数、风速和地面气温等因子相关性显著。

表2 STLME模型固定效应的解				
Table 2 Fixed effects in the STLME model				
固定效应	估计值	标准值	t 检验值	P 值
固定截距	-140.301	-0.992	8.809	0.000
MAIAC AOD	45.156	0.982	66.476	0.000
边界层高度/km	-0.018	-0.024	-15.207	0.000
地面气温/K	0.150	0.420	-30.244	0.000
相对湿度	45.298	0.988	7.249	0.000
风速/m·s ⁻¹	-0.619	-0.527	-6.239	0.000
气压/hPa	-0.001	-0.0007	0.951	0.000
归一化植被指数	-1.835	-0.682	-2.263	0.000
夜间灯光	-0.943	-0.481	-0.591	0.035
人口密度/千人	-0.0001	-0.0006	6.284	0.000
海拔/m	0.114	0.352	-4.360	0.001

2.3 模型次区域划分方案拟合及交叉验证

为了识别不同分区方案模型拟合结果差异,确定最优分区方案,在保持京津和河北省 11 个地级市行政区划完整的基础上,共选取了 4 种方案. 方案一:将京津冀地区按地理条件和发展水平差异划分成京津(北京、天津)、河北山地(承德、张家口)、河北内陆(石家庄、保定、衡水、廊坊、邢台、邯郸)和河北沿海(秦皇岛、唐山、沧州)这 4 个次区域;方案二:按照地貌类型和发展水平差异把京津冀分成京津平原(北京、天津)、河北平原(石家庄、保定、衡水、廊坊、邢台、邯郸、皇岛、唐山、沧州)和山地(承德、张家口)这 3 个次区域;方案三:按扩散条件差异将京津冀分成沿海(秦皇岛、唐山、沧州和天津)、内陆平原(石家庄、保定、衡水、廊坊、邢台、邯郸、北京)和内陆山地(承德、张家口)这 3 个次区域;方案四:按照地貌类型差异将京津冀划分成山地(承德、张家口)和平原(石家庄、保定、衡水、廊坊、邢台、邯郸、北京、秦皇岛、唐山、沧州和天津)这 2 个次区域. 从图 4 可知,4 种分区方案的 STLME 模型拟合 R^2 分别为 0.94、0.93、0.93 和 0.92, RMSE 分别为 11.90、14.09、13.91 和 15.08 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$;经十折交叉验证(CV)后 R^2 分别为 0.91、0.90、0.90 和 0.90, RMSE 分别为 14.43、16.49、16.12 和 16.19 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. 上述结果表明:不同分区方案影响 STLME 模型的预测精度,其中,方案一模拟效果最好,精度最高,因此本文采用方案一的次区域划分方案.

2.4 LME 模型和 STLME 模型比较

为了更深入了解 STLME 模型对区域因子的敏感性,图 5 为 LME 模型拟合与交叉验证结果. 结果表明:当随机效应中只有时间效应时, LME 模型拟合及交叉验证后的斜率分别是 0.90 和 0.87, 决定系数 R^2 分别为 0.91 和 0.87, RMSE 分别为 15.59 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 和 19.23 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, RPE 分别为 25.92% 和 31.52%, 精度较高;当加入空间随机效应后, STLME 模型(图 4 中方案一)的拟合及交叉验证的 R^2 分别提高到 0.94 和 0.91. 反映出 STLME 模型优于 LME 模型, LME 模型只能校正 PM_{2.5}-AOD 关系的时间差异,而 STLME 模型既能校正时间差异,又能校正空间差异,提高了模型精度.

LME 及 STLME 模型时空维统计结果表明(表 3), LME 模型时间 CV R^2 为 0.99, 空间 CV R^2 为 0.87, 空间 CV RMSE 为 6.20 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; STLME 模型时间 CV R^2 为 0.99, 空间 CV R^2 为 0.91, 空间 CV RMSE 为 4.96 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. 可以看出在模型中加入区域因子后, 空间 R^2 有所提高, 空间 RMSE 和时间

RMSE 有所降低,说明 STLME 模型能够揭示 PM_{2.5}-AOD 关系的时空异质性.

表 3 2017 年 LME 及 STLME 模型时空维统计结果

Table 3 Spatiotemporal dimensional statistical results of LME and STLME models in 2017

模型	R^2		RMSE/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	
	时间	空间	时间	空间
LME	0.99	0.91	0.90	5.71
STLME	0.99	0.94	0.51	4.54
CV LME	0.99	0.87	4.59	6.20
CV STLME	0.99	0.91	3.57	4.96

为比较两种模型在站点尺度上的预测精度,图 6 为 LME 和 STLME 模型站点预测误差空间分布. 其中, STLME 和 LME 模型预测误差范围分别为 -8.56 ~ 10.24 和 -15.19 ~ 13.08, 从中可以看出, STLME 模型预测误差相对较小, 预测精度更高. 并且, 在站点预测误差的空间分布上, LME 模型表现为非随机性, 张家口、承德和秦皇岛等低值区为正误差, 保定和石家庄等高值区为负误差; 而 STLME 模型预测误差空间分布则呈现随机性特征, 说明 STLME 模型预测精度和稳健性更高.

图 7 为 STLME 模型交叉验证后, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 的预测值和实测值在月、季和年尺度上的拟合状况. 月、季和年尺度的 R^2 都是 0.95; RMSE 分别是 6.095、4.848 和 3.791 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; RPE 分别是 10.19%、8.194% 和 6.243%. 从结果上看, 随着时间尺度的增大, 模型的 RMSE 和 RPE 逐渐减小, 预测精度升高.

2.5 次区域边界平滑结果

从图 8(a)(对照)和图 8(b)可以看出, STLME 模型出现“断崖式”差异问题主要分布在京津与河北平原、唐秦与承德的交界处. 因此本文重点对上述界线两侧创建缓冲区, 缓冲区内采用相邻两个区域 PM_{2.5} 浓度预测结果的算数平均值消除界线两侧“断崖式”差异. 以 LME 模型预测结果在次区域界线两侧的变化趋势为参照, 尝试不同的缓冲区范围, 最终选择与背景参照变化趋势相匹配的宽度 90km 的缓冲区方案[图 8(c)], 较好展现了次区域界线两侧预测结果的渐变特征.

2.6 京津冀 PM_{2.5} 浓度时空分布

图 9 为基于 STLME 模型预测京津冀地区 PM_{2.5} 浓度年均值分布, 2017 年京津冀全域 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 年均值为 62.20 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. 低值区主要分布在北部燕山山区与西部太行山区, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 年均值在 25 ~ 35 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间; 次低值区为北京和天津等地, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 年均值在 35 ~ 50 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间; 而高值区主要分布在河北南部, 以石家庄、邢台和邯郸为主,

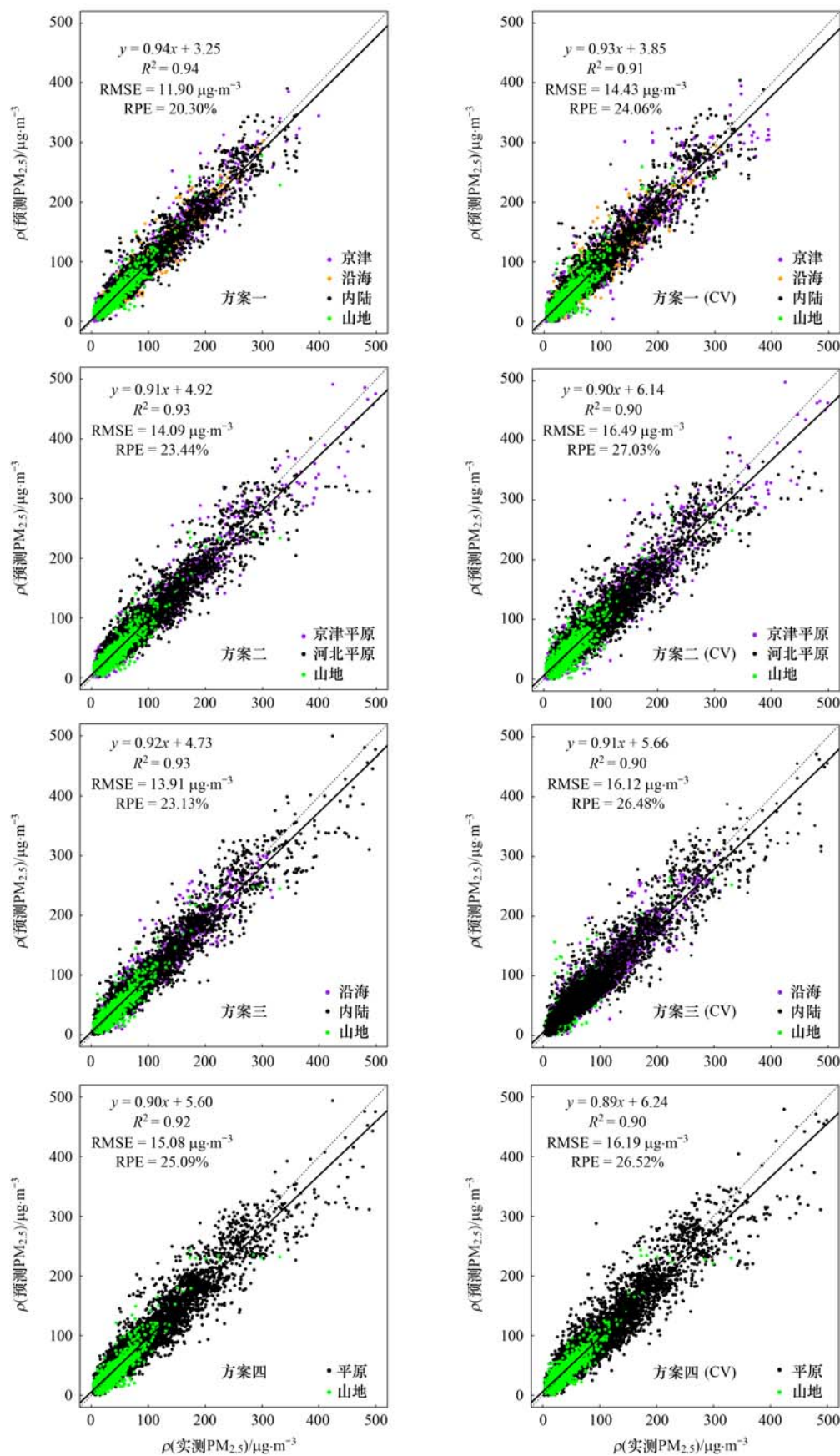


图4 不同分区方案拟合和交叉验证结果对比

Fig. 4 Comparison of the fitting and cross validation results of different regional division schemes

$\rho(\text{PM}_{2.5})$ 年均值高于 $70 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 又以邯郸污染最为严重.

京津冀地区 $\text{PM}_{2.5}$ 污染具有季节性特征, 春(3~5月)、夏(6~8月)、秋(9~11月)和冬季(12

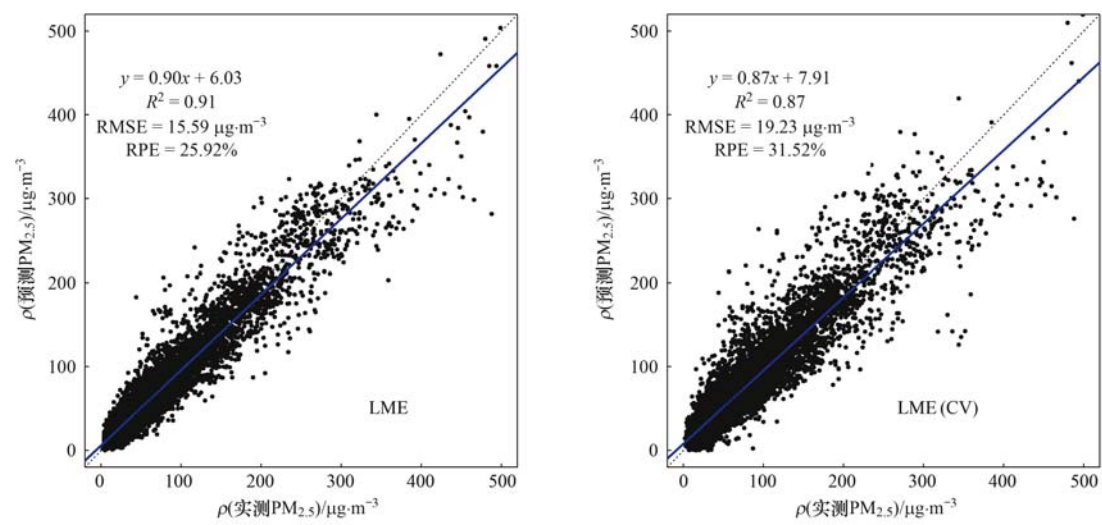


图5 2017 年 LME 模型拟合及交叉验证结果

Fig. 5 Results of LME model fitting and cross validation in 2017

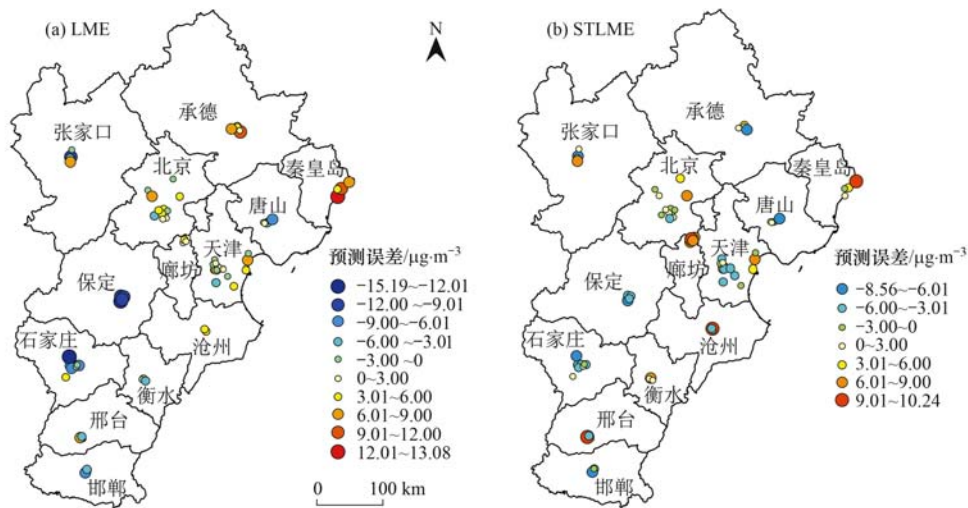


图6 LME 和 STLME 模型预测误差对比

Fig. 6 Comparison of prediction errors of the LME and STLME model

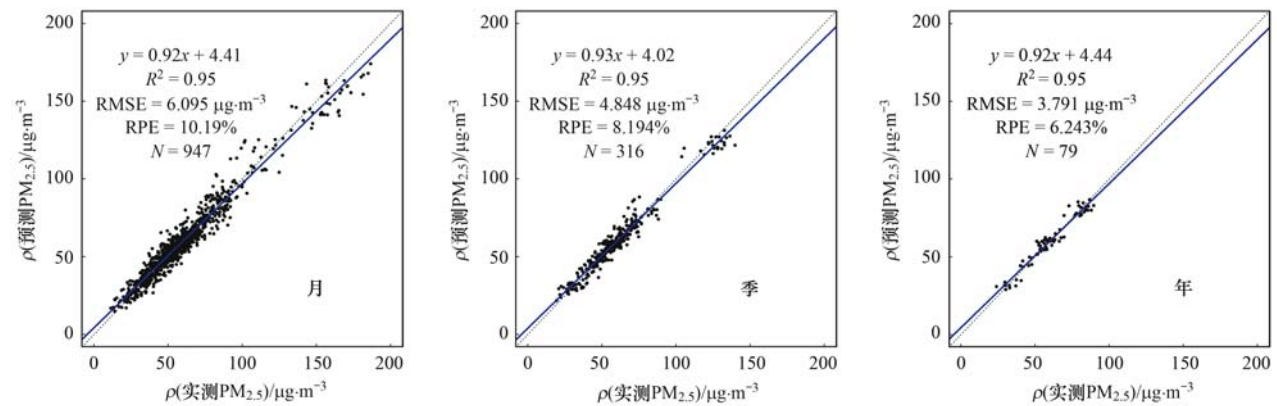


图7 基于 STLME 模型交叉验证结果在月、季和年尺度上站点的观测值和预测值拟合

Fig. 7 Fitting results between predicted and observed PM_{2.5} concentration on monthly, seasonal, and yearly scales based on the results of cross-validation in the STLME model

月~次年2月)的PM_{2.5}浓度平均值分布如图10。从中可以看出2017年京津冀地区PM_{2.5}浓度季均值差异明显,呈现“冬高夏低,春秋过渡”的特征。冬季

ρ(PM_{2.5})最高(74.52 μg·m⁻³),原因是由于冬季取暖增加了污染物排放和不利的天气条件(逆温和沙尘天气等);夏季污染最轻(42.72 μg·m⁻³),主要

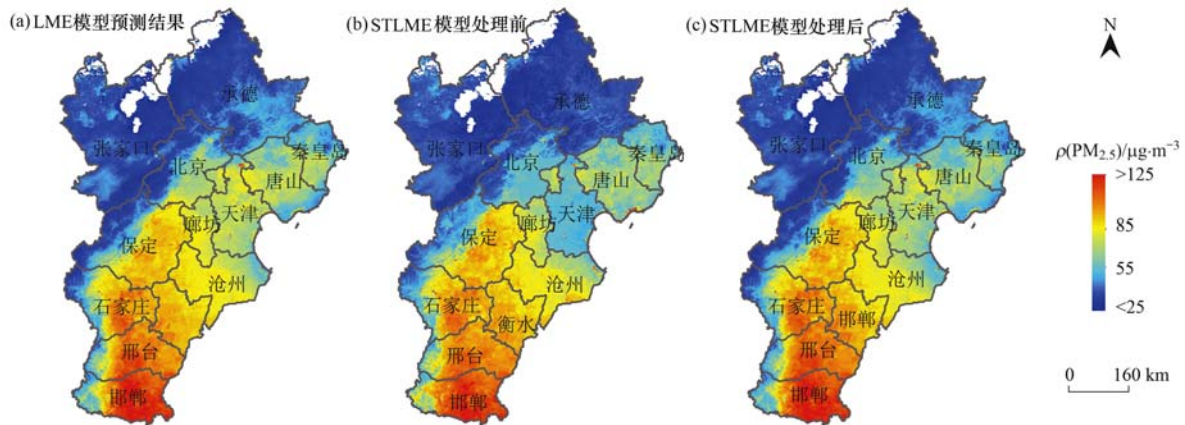


图8 2017年LME模型冬季 $PM_{2.5}$ 浓度预测结果和STLME模型平滑处理前后 $PM_{2.5}$ 浓度预测结果

Fig. 8 $PM_{2.5}$ estimations by the LME model, STLME model, and STLME model with smoothing treatment during winter in 2017

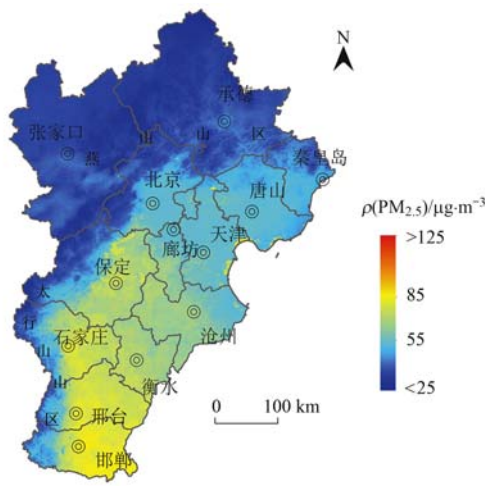


图9 2017年 $PM_{2.5}$ 浓度年均值分布

Fig. 9 Spatial distribution of annual mean $PM_{2.5}$ concentrations in 2017

源于大气扩散条件好和降水的清洁作用。

3 讨论

3.1 模型中分区方案与缓冲区设置

基于多个分区方案的 STLME 模型优化,不仅提高了模型的预测精度,也识别了影响 $PM_{2.5}$ -AOD 关系区域差异的主要因子,从而有利于京津冀地区大气污染治理的精准施策.从最优分区方案可以获得以下认识:气溶胶组成成分的区域差异是分区的重要因子,主要区分了京津次区域与河北省各个次区域的差异,后者仍然以煤烟型气溶胶成分为主,导致河北平原特别是南部平原 $PM_{2.5}$ 浓度明显高于京津地区;由大气扩散条件差异导致的边界层大气气溶胶垂直廓线结构的区域差异也是分区的重要因子,主要区分了河北内陆和河北沿海两大次区域的差

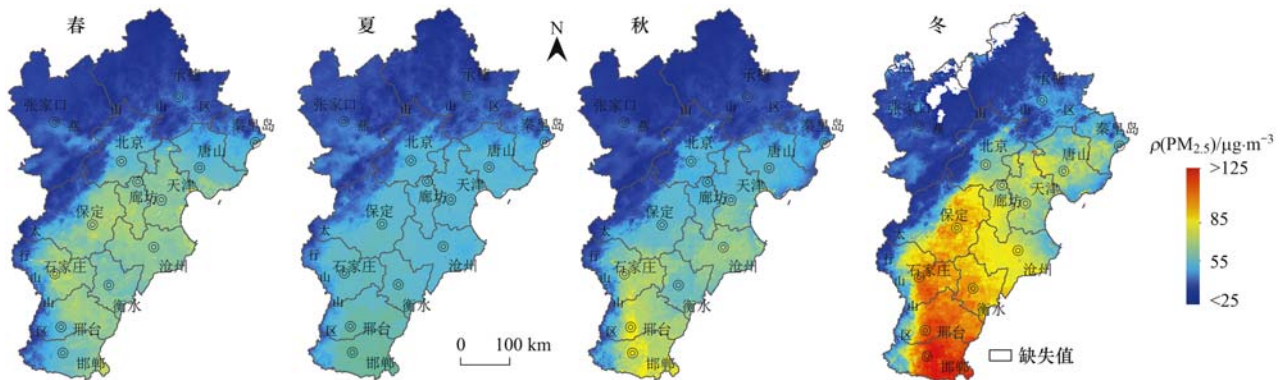


图10 2017年 $PM_{2.5}$ 浓度季均值空间分布

Fig. 10 Spatial distribution of seasonal mean $PM_{2.5}$ concentrations in 2017

异,其中,河北沿海由于海陆热力性质差异导致大气扩散条件较好,区域大气环境容量较大, $PM_{2.5}$ 浓度明显低于河北内陆次区域;而河北内陆恰好相反,由于西侧太行山地的阻挡和动力作用,该区域大气扩散条件差,冬季常常导致区域大气污染物的堆积,大气环境容量小,成为该区大气污染治理难度大的

主要原因之一。

STLME 模型由于同时校正了 $PM_{2.5}$ -AOD 关系的时空异质性,进一步提高了混合效应模型的预测精度.但该方法也存在一个技术性缺陷,即容易出现次区域边界两侧 $PM_{2.5}$ 浓度预测值的“断崖式”差异,这与实际情况相悖.本文提出的缓冲区平滑方法

消除了这一缺陷,完善了 STLME 模型.

3.2 模型预测精度国内外比较

与本研究使用相同或相近研究方法的研究案例中(表 4),STLME 模型优于 LME 模型,例如 Zheng 等^[30]使用 LME 模型($CV R^2$ 为 0.77)模拟京津冀地区 PM_{2.5} 浓度和 Ma 等^[43]在长江三角洲采用 LME 模型的研究($CV R^2$ 为 0.67).本模型的性能也超过了 Ma 等^[44]人使用的两阶段模型结果,其 R^2 (0.82) 和 $CV R^2$ (0.79)略低于 STLME 模型.与 Kloog 等^[36]使用相同模型研究 2003 ~ 2013 年以色列 PM_{2.5} 时空变化相比($CV R^2 = 0.72$), R^2 显著提高,时间 R^2 和空间 R^2 均显著提升,但是斜率稍有降低($CV Slope =$

0.99),可能由于京津冀地区比以色列大气污染严重致使 AOD 非随机缺失严重,从而使预测偏差加大.

随着人工智能的发展,许多机器学习模型被用于 PM_{2.5} 浓度预测.表 5 为本研究与京津冀区域内使用各种机器学习模型的研究结果对比,其中,最流行的机器学习模型是反向传播神经网络、人工神经网络、深度学习和随机森林等.相对于 STLME 模型,人工神经网络^[45,46] ($CV R^2 = 0.55$) 在估算 PM_{2.5} 浓度方面较差,决策树^[47] ($CV R^2 = 0.88$) 和随机森林^[48] ($CV R^2 = 0.86$) 模型表现出较好的性能,但本研究仍然表现出更高的模拟精度.

表 4 STLME 模型与相近或相同方法对 PM_{2.5} 浓度时空变化研究结果对比¹⁾

Table 4 Comparison between STLME model and similar or identical methods for the spatiotemporal variation in PM _{2.5} concentrations							
研究区域	模型	R^2	斜率	RMSE/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	时间 R^2	空间 R^2	文献
京津冀	STLME	0.91	0.93	14.43	0.99	0.91	本研究
以色列	时空混合模型	0.72	0.99	—	0.71	0.84	[36]
长三角	LME	0.67	0.67	15.82	—	—	[43]
中国	LME + GWR	0.79	0.79	27.42	—	—	[44]

1) “—”表示文献中没有相关数据

表 5 STLME 模型与机器学习模型对京津冀区域 PM_{2.5} 浓度时空变化研究结果对比

Table 5 Comparison between STLME model and machine learning model on spatiotemporal variation of PM _{2.5} concentrations in BTH						
研究年份	模型	R^2	斜率	RMSE/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	文献	
2021	STLME	0.91	0.93	14.43	本研究	
2019	深度神经网络	0.87	0.88	27.11	[46]	
2021	决策树	0.88	0.87	17.79	[47]	
2020	随机森林模型	0.86	0.82	23.48	[48]	

4 结论

(1)与传统 LME 模型相比,加入空间随机效应后构建的 STLME 模型在近地面 PM_{2.5} 浓度估算精度方面有了很大提升, $CV R^2$ 由 0.87 提升到 0.91,该模型在校正 PM_{2.5}-AOD 关系的时空异质性方面具有很大优势,可用于 PM_{2.5} 浓度预测研究.

(2)STLME 模型识别出京津冀 PM_{2.5}-AOD 关系的主要空间差异,表现为京津地区、河北山地区、河北内陆平原区和河北沿海平原区 4 个次区域差异.其中,京津地区与河北平原区差异的主要影响因子为产业结构与能源结构,河北沿海与内陆平原区差异的主要影响因子为大气扩散条件.

(3)2017 年京津冀地区 PM_{2.5} 浓度时空分布差异性较大,高值区主要分布在以石家庄、邢台和邯郸为中心的河北南部地区,低值区主要分布在燕山-太行山山区;冬季是 PM_{2.5} 污染最为严重的季节,其次是秋季和春季,夏季污染最轻.

参考文献:

[1] Zhang Y Q, Ding Z, Xiang Q Q, *et al.* Short-term effects of ambient PM₁ and PM_{2.5} air pollution on hospital admission for respiratory diseases: case-crossover evidence from Shenzhen, China[J]. International Journal of Hygiene and Environmental Health, 2020, **224**, doi: 10.1016/j.ijheh.2019.11.001.

[2] Lim J M, Jeong J H, Lee J H, *et al.* The analysis of PM_{2.5} and associated elements and their indoor/outdoor pollution status in an urban area[J]. Indoor Air, 2011, **21**(2): 145-155.

[3] Lelieveld J, Evans J S, Fnais M, *et al.* The contribution of outdoor air pollution sources to premature mortality on a global scale[J]. Nature, 2015, **525**(7569): 367-371.

[4] Feng H H, Zou B. Satellite-based estimation of the aerosol forcing contribution to the global land surface temperature in the recent decade[J]. Remote Sensing of Environment, 2019, **232**, doi: 10.1016/j.rse.2019.111299.

[5] Peng J, Chen S, Lü H L, *et al.* Spatiotemporal patterns of remotely sensed PM_{2.5} concentration in China from 1999 to 2011[J]. Remote Sensing of Environment, 2016, **174**: 109-121.

[6] He Q Q, Gu Y F, Zhang M. Spatiotemporal trends of PM_{2.5} concentrations in central China from 2003 to 2018 based on MAIAC-derived high-resolution data [J]. Environment International, 2020, **137**, doi: 10.1016/j.envint.2020.105536.

- [7] Cui Y Q, Sun Q H, Liu Z G. Ambient particulate matter exposure and cardiovascular diseases: a focus on progenitor and stem cells [J]. *Journal of Cellular and Molecular Medicine*, 2016, **20**(5): 782-793.
- [8] Ma Z W, Hu X F, Huang L, *et al.* Estimating ground-level PM_{2.5} in China using satellite remote sensing[J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, **48**(13): 7436-7444.
- [9] Zhang Y, Li Z Q. Remote sensing of atmospheric fine particulate matter (PM_{2.5}) mass concentration near the ground from satellite observation[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2015, **160**: 252-262.
- [10] Hu X F, Waller L A, Al-Hamdan M Z, *et al.* Estimating ground-level PM_{2.5} concentrations in the Southeastern U. S. using geographically weighted regression[J]. *Environmental Research*, 2013, **121**: 1-10.
- [11] Song W Z, Jia H F, Huang J F, *et al.* A satellite-based geographically weighted regression model for regional PM_{2.5} estimation over the Pearl River Delta region in China[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2014, **154**: 1-7.
- [12] Wu J S, Yao F, Li W F, *et al.* VIIRS-based remote sensing estimation of ground-level PM_{2.5} concentrations in Beijing-Tianjin-Hebei: a spatiotemporal statistical model[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2016, **184**: 316-328.
- [13] Lyapustin A, Wang Y J, Korkin S, *et al.* MODIS collection 6 MAIAC algorithm[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, **11**(10): 5741-5765.
- [14] Kloog I, Chudnovsky A A, Just A C, *et al.* A new hybrid spatio-temporal model for estimating daily multi-year PM_{2.5} concentrations across Northeastern USA using high resolution aerosol optical depth data[J]. *Atmospheric Environment*, 2014, **95**: 581-590.
- [15] Xie Y Y, Wang Y X, Zhang K, *et al.* Daily estimation of ground-level PM_{2.5} concentrations over Beijing using 3 km resolution MODIS AOD [J]. *Environmental Science & Technology*, 2015, **49**(20): 12280-12288.
- [16] Liang F C, Xiao Q Y, Wang Y J, *et al.* MAIAC-based long-term spatiotemporal trends of PM_{2.5} in Beijing, China[J]. *Science of the Total Environment*, 2018, **616-617**: 1589-1598.
- [17] Ni X L, Cao C X, Zhou Y K, *et al.* Spatio-temporal pattern estimation of PM_{2.5} in Beijing-Tianjin-Hebei region based on MODIS AOD and meteorological data using the back propagation neural network[J]. *Atmosphere*, 2018, **9**(3), doi: 10.3390/atmos9030105.
- [18] Zang L, Mao F Y, Guo J P, *et al.* Estimating hourly PM₁ concentrations from Himawari-8 aerosol optical depth in China [J]. *Environmental Pollution*, 2018, **241**: 654-663.
- [19] Wang P, Zhang H, Qin Z D, *et al.* A novel hybrid-garch model based on ARIMA and SVM for PM_{2.5} concentrations forecasting [J]. *Atmospheric Pollution Research*, 2017, **8**(5): 850-860.
- [20] Brokamp C, Jandarov R, Hossain M, *et al.* Predicting daily urban fine particulate matter concentrations using a random forest model[J]. *Environmental Science & Technology*, 2018, **52**(7): 4173-4179.
- [21] Engel-Cox J A, Holloman C H, Coutant B W, *et al.* Qualitative and quantitative evaluation of MODIS satellite sensor data for regional and urban scale air quality [J]. *Atmospheric Environment*, 2004, **38**(16): 2495-2509.
- [22] Gupta P, Christopher S A. Particulate matter air quality assessment using integrated surface, satellite, and meteorological products: multiple regression approach [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2009, **114**(D14), doi: 10.1029/2008JD011496.
- [23] 金团圀, 杨兴川, 晏星, 等. 京津冀及周边 MAIAC AOD 和 PM_{2.5} 质量浓度特征及相关性分析[J]. *环境科学*, 2021, **42**(6): 2604-2615.
- Jin J N, Yang X C, Yan X, *et al.* MAIAC AOD and PM_{2.5} mass concentrations characteristics and correlation analysis in Beijing-Tianjin-Hebei and surrounding areas [J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(6): 2604-2615.
- [24] Xin J Y, Zhang Q, Wang L L, *et al.* The empirical relationship between the PM_{2.5} concentration and aerosol optical depth over the background of north China from 2009 to 2011 [J]. *Atmospheric Research*, 2014, **138**: 179-188.
- [25] Gryparis A, Paciorek C J, Zeka A, *et al.* Measurement error caused by spatial misalignment in environmental epidemiology [J]. *Biostatistics*, 2009, **10**(2): 258-274.
- [26] Lee H J, Chatfield R B, Strawa A W. Enhancing the applicability of satellite remote sensing for PM_{2.5} estimation using MODIS Deep Blue AOD and land use regression in California, United States[J]. *Environmental Science & Technology*, 2016, **50**(12): 6546-6555.
- [27] 郝静, 孙成, 郭兴宇, 等. 京津冀内陆平原区 PM_{2.5} 浓度时空变化定量模拟[J]. *环境科学*, 2018, **39**(4): 1455-1465.
- Hao J, Sun C, Guo X Y, *et al.* Simulation of the spatio-temporally resolved PM_{2.5} aerosol mass concentration over the Inland Plain of the Beijing-Tianjin-Hebei region [J]. *Environmental Science*, 2018, **39**(4): 1455-1465.
- [28] 孙成, 王卫, 刘方田, 等. 基于线性混合效应模型的河北省 PM_{2.5} 浓度时空变化模型研究[J]. *环境科学研究*, 2019, **32**(9): 1500-1509.
- Sun C, Wang W, Liu F T, *et al.* Spatial-temporal simulation of PM_{2.5} concentration in Hebei Province based on linear mixed effects model[J]. *Research of Environmental Sciences*, 2019, **32**(9): 1500-1509.
- [29] Li R, Gong J H, Chen L F, *et al.* Estimating ground-level PM_{2.5} using fine-resolution satellite data in the megacity of Beijing, China[J]. *Aerosol and Air Quality Research*, 2015, **15**(4): 1347-1356.
- [30] Zheng Y X, Zhang Q, Liu Y, *et al.* Estimating ground-level PM_{2.5} concentrations over three megalopolises in China using satellite-derived aerosol optical depth measurements [J]. *Atmospheric Environment*, 2016, **124**: 232-242.
- [31] 杨晓辉, 宋春杰, 范丽行, 等. 京津冀地区高分辨率 PM_{2.5} 浓度时空变化模拟与分析[J]. *环境科学*, 2021, **42**(9): 4083-4094.
- Yang X H, Song C J, Fan L H, *et al.* High-resolution estimation of spatio-temporal variation in PM_{2.5} concentrations in the Beijing-Tianjin-Hebei region[J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(9): 4083-4094.
- [32] Hu X F, Waller L A, Lyapustin A, *et al.* Estimating ground-level PM_{2.5} concentrations in the Southeastern United States using MAIAC AOD retrievals and a two-stage model [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2014, **140**: 220-232.
- [33] Yao F, Wu J S, Li W F, *et al.* A spatially structured adaptive two-stage model for retrieving ground-level PM_{2.5} concentrations from VIIRS AOD in China[J]. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 2019, **151**: 263-276.
- [34] He Q Q, Huang B. Satellite-based high-resolution PM_{2.5} estimation over the Beijing-Tianjin-Hebei region of China using an improved geographically and temporally weighted regression model[J]. *Environmental Pollution*, 2018, **236**: 1027-1037.

- [35] Fang X, Zou B, Liu X P, *et al.* Satellite-based ground PM_{2.5} estimation using timely structure adaptive modeling[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2016, **186**: 152-163.
- [36] Kloog I, Sorek-Hamer M, Lyapustin A, *et al.* Estimating daily PM_{2.5} and PM₁₀ across the complex geo-climate region of Israel using MAIAC satellite-based AOD data [J]. *Atmospheric Environment*, 2015, **122**: 409-416.
- [37] 陈辉, 厉青, 李营, 等. 京津冀及周边地区 PM_{2.5} 时空变化特征遥感监测分析[J]. *环境科学*, 2019, **40**(1): 33-43.
Chen H, Li Q, Li Y, *et al.* Monitoring and analysis of the spatio-temporal change characteristics of the PM_{2.5} concentration over Beijing-Tianjin-Hebei and its surrounding regions based on remote sensing[J]. *Environmental Science*, 2019, **40**(1): 33-43.
- [38] 郝静. 京津冀地区 PM_{2.5} 浓度时空变化定量模拟[D]. 石家庄: 河北师范大学, 2018.
- [39] He J, Yang K, Tang W J, *et al.* The first high-resolution meteorological forcing dataset for land process studies over China [J]. *Scientific Data*, 2020, **7**(1), doi: 10.1038/s41597-020-0369-y.
- [40] Yang K, He J, Tang W J, *et al.* On downward shortwave and longwave radiations over high altitude regions: observation and modeling in the Tibetan Plateau [J]. *Agricultural and Forest Meteorology*, 2010, **150**(1): 38-46.
- [41] De Hoogh K, H  ritier H, Stafoggia M, *et al.* Modelling daily PM_{2.5} concentrations at high spatio-temporal resolution across Switzerland [J]. *Environmental Pollution*, 2018, **233**: 1147-1154.
- [42] Stafoggia M, Schwartz J, Badaloni C, *et al.* Estimation of daily PM₁₀ concentrations in Italy (2006-2012) using finely resolved satellite data, land use variables and meteorology [J]. *Environment International*, 2017, **99**: 234-244.
- [43] Ma Z W, Liu Y, Zhao Q Y, *et al.* Satellite-derived high resolution PM_{2.5} concentrations in Yangtze River Delta region of China using improved linear mixed effects model [J]. *Atmospheric Environment*, 2016, **133**: 156-164.
- [44] Ma Z W, Hu X F, Sayer A M, *et al.* Satellite-based spatiotemporal trends in PM_{2.5} concentrations: China, 2004-2013 [J]. *Environmental Health Perspectives*, 2016, **124**(2): 184-192.
- [45] Gupta P, Christopher S A. Particulate matter air quality assessment using integrated surface, satellite, and meteorological products; 2. A neural network approach [J]. *Journal of Geophysical Research-atmospheres*, 2009, **114**(D20), doi: 10.1029/2008JD011497.
- [46] Wang X P, Sun W B. Meteorological parameters and gaseous pollutant concentrations as predictors of daily continuous PM_{2.5} concentrations using deep neural network in Beijing-Tianjin-Hebei, China [J]. *Atmospheric Environment*, 2019, **211**: 128-137.
- [47] Ding Y, Chen Z Q, Lu W F, *et al.* A catBoost approach with wavelet decomposition to improve satellite-derived high-resolution PM_{2.5} estimates in Beijing-Tianjin-Hebei [J]. *Atmospheric Environment*, 2021, **249**, doi: 10.1016/J.ATMOENV.2021.118212.
- [48] Zhao C, Wang Q, Ban J, *et al.* Estimating the daily PM_{2.5} concentration in the Beijing-Tianjin-Hebei region using a random forest model with a 0.01° × 0.01° spatial resolution [J]. *Environment International*, 2020, **134**, doi: 10.1016/j.envint.2019.105297.

CONTENTS

Chemical Characteristics and Source Apportionment of PM _{2.5} in Urban Area of Beijing	AN Xin-xin, CAO Yang, WANG Qin, <i>et al.</i> (2251)
Modeling of PM _{2.5} Concentrations in the Beijing-Tianjin-Hebei Region Using a Space-time Linear Mixed Effects Model	FAN Li-hang, YANG Xiao-hui, SONG Chun-jie, <i>et al.</i> (2262)
Spatio-temporal Evolution Patterns of PM _{2.5} and Relationship with Urban Expansion in Beijing-Tianjin-Hebei Urban Agglomeration from 2000 to 2018	ZHAO An-zhou, XIANG Kai-zheng, LIU Xian-feng, <i>et al.</i> (2274)
Characteristics and Source Analysis of PM _{2.5} in Qingdao in Winter Under the Action of Sea-Land-Atmosphere Convergence	TUO Xiong, YANG Ling-xiao, ZHANG Wan, <i>et al.</i> (2284)
Impacts of Heterogeneous Uptake Pathway on Sulfate Formation: A Case Study in Shanghai Based on WRF-Chem	ZHANG Ru-han, ZHANG Hao-ran, FENG Wei-hang, <i>et al.</i> (2294)
Source Apportionment and Seasonal Changes in PM _{2.5} Chemical Components from Different Functional Areas of a Provincial Capital City	SUN You-min, FAN Jing, XU Biao, <i>et al.</i> (2304)
Chemical Compositions, Light Extinction Effect, and Oxidative Potential of PM _{2.5} Under Different Pollution Levels During Winter in Taiyuan	REN Jiao, ZHAO Rong-rong, WANG Ming, <i>et al.</i> (2317)
Source Apportionment and Health Risk Assessment of Metal Elements in Ambient PM _{2.5} in the Winter of Zhengzhou	YAO Sen, WANG Qian-heng, XUE Yan, <i>et al.</i> (2329)
Characteristics, Ecological Risk Assessment, and Sources of the Polluted Metallic Elements in PM _{2.5} During Winter in Zibo City	BAI Wen-yu, XU Bo, GUO Li-yao, <i>et al.</i> (2336)
Seasonal Distribution Characteristics, Source Analysis, and Health Risk Evaluation of PAHs in PM _{2.5} in Chengde	HE Bo-wen, NIE Sai-sai, LI Yi-lin, <i>et al.</i> (2343)
Pollution Level and Regional Migration of PCDD/Fs in Ambient Air from Pearl River Delta, China	FU Jian-ping, XIE Dan-ping, HUANG Jin-qiong, <i>et al.</i> (2355)
Concentrations and Sources of Black Carbon Aerosols in Rural Areas of Southern North China Plain	ZHANG Ling, KONG Shao-fei, ZHENG Huang, <i>et al.</i> (2363)
Research on Causes of Severely Polluted Weather in Tianjin Based on Process Analytical Technology	HAO Jian, CAI Zi-ying, HAN Su-qin, <i>et al.</i> (2373)
Classification Control of Volatile Organic Compounds (VOCs) Emission Pollution Sources Based on Emission Amounts and Atmospheric Reactivity	CHEN Peng, ZHANG Yue, XING Min, <i>et al.</i> (2383)
Complex Networks Reveal the Characteristics of Ozone in China	YING Na, CHEN Jian-hua, LI Dong, <i>et al.</i> (2395)
Ozone Simulation of Lanzhou City Based on Multi-scenario Emission Forecast of Ozone Precursors in the Summer of 2030	CHEN Tian-lei, WU Min, PAN Cheng-ke, <i>et al.</i> (2403)
Improvement of Environmental Model Prediction Based on Inversion and Aerosol Assimilation	CAI Zi-ying, TANG Miao, XIAO Zhi-mei, <i>et al.</i> (2415)
Method of Identifying Air Pollution from Iron and Steel Industry Based on Ambient Air Quality Monitoring Data Analysis	SHI Yao-peng, HU Jing-nan, CHU Yang-xi, <i>et al.</i> (2427)
Assessment of "Differentiated Response Requirement Based on Performance Grading" Policy During Heavy Air Pollution Alert	ZENG Jing-hai, WANG Can (2436)
Risk Zoning of Water Pollution in the Yellow River Basin	ZHOU Xia-fei, CAO Guo-zhi, YU Fang, <i>et al.</i> (2448)
Emission Characteristics of Industrial Water Pollutants in Gansu Section of the Yellow River Basin	LI Xue-ying, YANG Xi, QIAO Qi, <i>et al.</i> (2459)
Spatial-temporal Distribution and Pollution Assessment of Heavy Metals in Sediments of the Yellow River	WANG Tao-yi, PAN Bao-zhu, HAN Xu, <i>et al.</i> (2467)
APCS-MLR Combined with PMF Model to Analyze the Source of Metals in Sediment of Xinglin Bay Suburban Watershed, Xiamen	SHEN Chen-yu, YAN Yu, YU Rui-lian, <i>et al.</i> (2476)
Spatial Differentiation Characteristics and Response Relationship of DOM, Nutrients, and Heavy Metals in River Sediments	XIAO Yan-chun, YU Hui-bin, SONG Yong-hui (2489)
Distribution Characteristics, Evaluation, and Source Analysis of Heavy Metals in Soils of Fenhe Riparian Zone in Taiyuan City	HU Jie, ZHAO Xin-yu, WANG Ting-ting, <i>et al.</i> (2500)
Binding Affinity Between Heavy Metal Hg and Dissolved Organic Matter in Hongze Lake	HU Bin, WANG Pei-fang, ZHANG Nan-nan, <i>et al.</i> (2510)
Ecosystem Evolutionary Trajectory of Lake Xiliang over the Past Century Driven by Eutrophication	ZHENG Jia-nan, XU Min, ZHENG Wen-xiu, <i>et al.</i> (2518)
Sediment Release and Pollution Source Analysis of Typical Reservoirs in the Upper Reaches of the Yellow River Based on DGT Technology	MA Yu-shen, ZHU Xiang, PANG Qing-qing, <i>et al.</i> (2527)
Differential Characteristics and Source Identification of Water Quality of the Rivers in Northern Henan Before and After Rainstorm	ZHANG Yan, ZOU Lei, LIANG Zhi-jie, <i>et al.</i> (2537)
Adsorption and Interception Effects of <i>Eichhornia crassipes</i> on Microplastics in Water of the Poyang Lake Basin	LI Wen-gang, WU Xi-en, JIAN Min-fei, <i>et al.</i> (2548)
Spatiotemporal Distribution and Ecological Risk Assessment of Plastic Additives in Taihu Lake	LIU Shu-jiao, DING Jian-nan, SHI Jun-zhe, <i>et al.</i> (2557)
Distribution Characteristics, Sources, and Storage of Microplastics in Surface Sediments of Luoma Lake	YAO Ming-xuan, BAI Xue, XU Zhen-jia, <i>et al.</i> (2566)
Pollution Characteristics of Phosphorus in Different Media in Taihu Lake and Its Treatment Enlightenment	CAI Mei, LU Zhi-hua, WANG Yuan-yuan, <i>et al.</i> (2575)
Analysis on Diversity and Structure of Microbial Community in River Sediment of Siping Section of Liaohe River	LI Peng-yang, AN Qi-rui, WANG Xin-hao, <i>et al.</i> (2586)
Non-point Source Pollution (NPSP) Induces Structural and Functional Variation in Bacterial Communities in Sediments of Jialing River	XUE Yu-qin, XU Fei, LIU Kun-he, <i>et al.</i> (2595)
Effects of Microplastics on Bacterial Community Composition and Diversity in Sediments	LI Wen-lu, WANG Zhi-chao, YANG Wen-huan, <i>et al.</i> (2606)
Vertical Distribution Characteristics and Community Construction of Aerobic Denitrification Bacteria from the Sediments of Baiyangdian Lake During the Winter Freezing Period	ZHANG Tian-na, CHEN Zhao-ying, ZHANG Zi-wei, <i>et al.</i> (2614)
Effect of Induced Mixing on Bacterial Community Structure and Metabolic Activity in Reservoir	GAO Yue, HUANG Ting-lin, LI Nan, <i>et al.</i> (2624)
Distribution Characteristics of Microplastics in <i>Bellamyia aeruginosa</i> in Typical Area of Poyang Lake	JIANG Wei-qun, HU Qi-wu, JIAN Min-fei, <i>et al.</i> (2633)
Electrocatalytic Oxidation of Bisphenol A by Porous Ti/SnO ₂ -Sb-Ni Electrode Loaded with Multi-wall Carbon Nanotubes	FU Yuan-hang, LIU An-di, HUANG Wei-bin, <i>et al.</i> (2640)
Efficiency and Mechanism of Degradation of Methylene Blue with H ₂ O ₂ Catalyzed by Magnetic Mn _{0.4} Zn _{0.4} Fe ₂ O ₄ @SiO ₂	XU Dong-ying, YU Jing, HAO Qi, <i>et al.</i> (2650)
Effect of Two Types of Nanoparticles on the Adsorption of Ciprofloxacin on Zeolite	JIANG Lan-cui, MENG Zhao-fu, LIU Xian, <i>et al.</i> (2662)
Adsorption Mechanisms and Effect Factors of As(V) by AMD Sludge Composite Material	ZHANG Ya-hui, ZHANG Rui-xue, WU Pan, <i>et al.</i> (2673)
Shifts in Microbial Community and Variation in Functional Genes for Nitrification and Denitrification in Activated Sludge Affected by Triclosan and Its Transformed Intermediates	LU Ying-yuan, DONG Xiao-qi, PENG Xing-xing, <i>et al.</i> (2685)
Construction of Sustainability Evaluation Index System for Contaminated Site Risk Management and Analysis on Key Influential Factors	LI Xiao-nuo, YI Shi-yi, CHEN Wei-ping (2699)
Construction and Empirical Analysis of a Comprehensive Evaluation Method of Coastal Wetland Soil Quality Based on Ecological Functions	ZHANG Xue, KONG Fan-long, JIANG Zhi-xiang (2709)
Source Analysis and Pollution Assessment of Heavy Metals in Farmland Soil Around Tongshan Mining Area	CHEN Hang, WANG Ying, WANG Shu (2719)
Effects of Typical Iron and Manganese Minerals on Arsenic Speciation and Enzyme Activities in Paddy Soil	ZHOU Yi-min, HUANG Ya-yuan, LIU Kai, <i>et al.</i> (2732)
Phytoremediation Efficiency of Two Cultivars of <i>Brassica napus</i> L. Under Water-soluble Chitosan Treatment in Typical Pb-contaminated Farmland Soils	MENG Xiao-fei, ZHENG Guo-di, CHEN Tong-bin, <i>et al.</i> (2741)
Risk Prediction of Cadmium and Lead in Wheat Grains Based on Bayes Theorem	WANG Tian-qi, LI Yan-ling, YANG Yang, <i>et al.</i> (2751)
Interannual Variation Characteristics of Nitrogen Loss Under Rapeseed/Maize Rotation in Purple Soil Sloping Field	XU Man, GAO Ming, YU Luo, <i>et al.</i> (2758)
Physicochemical Properties of Biochars Prepared from Different Feedstocks and Evaluation of Its Potential as A Slow-release Carriers for Biochar-based Fertilizers	XING Li-bin, CHENG Jie, GENG Zeng-chao, <i>et al.</i> (2770)
Effects of Combined Application of Wood Vinegar-Acidified Biochar and Nitrogen on Active Nitrogen and Ammonia Volatilization in Saline Soil	SHEN Shu-wei, ZHANG Dan-dan, WANG Min-ge, <i>et al.</i> (2779)
Effects of Biodegradable Plastic Film Mulching on Greenhouse Gas Emissions Under Wheat-Maize Rotation System in the Guanzhong Plain	GUO Yi-ting, LUO Xiao-qi, WANG Rui, <i>et al.</i> (2788)
Forest Soil Microbial Community Structure Characteristics and Its Influencing Factors at Different Elevations on the Southern Slope of Daiyun Mountain	HE Zhong-sheng, WANG Zi-wei, ZHU Jing, <i>et al.</i> (2802)
Effects of Simulated Warming and Increased Precipitation on Soil Extracellular Enzyme Activity and Enzymatic Stoichiometry of Abandoned Grassland	WANG Xing, ZHONG Ze-kun, JIAN Jun-nan, <i>et al.</i> (2812)
Contribution of Urbanization to Local Warming in Major Cities of China	LI Yu, ZHOU De-cheng, YAN Zhang-mei, <i>et al.</i> (2822)