

方知库
Eco-Environmental
Knowledge Web

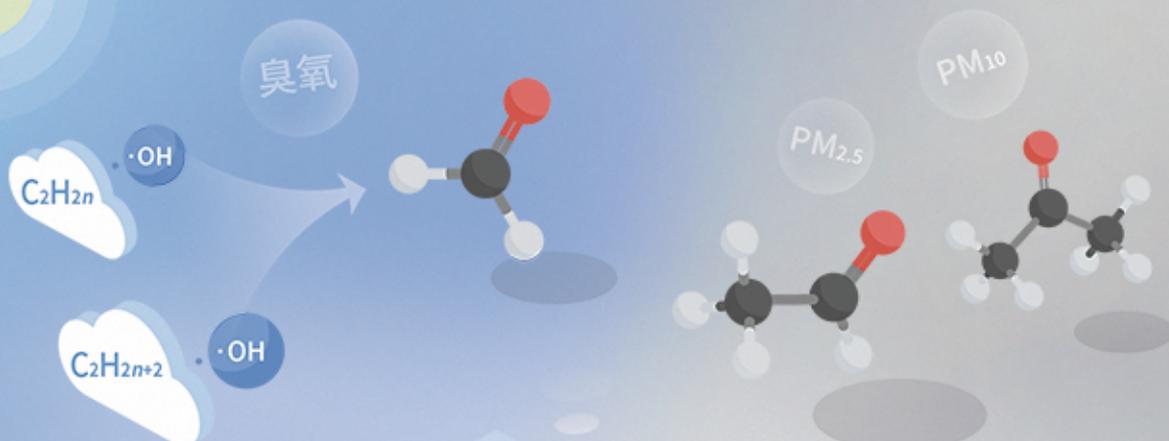
环境科学

ENVIRONMENTAL SCIENCE

ISSN 0250-3301 CODEN HCKHDV

HUANJING KEXUE

基于PMF和源示踪物比例法的大气羰基化合物来源解析：以南京市观测为例
胡崑，王鸣，王红丽，景盛翱，陈文泰，卢兴东



■ 主办 中国科学院生态环境研究中心

■ 出版 科学出版社



2021年1月

第42卷 第1期

Vol.42 No.1

目次

2019年国庆节前后北京气态氨和气溶胶铵盐浓度的同步观测 顾梦娜, 潘月鹏, 宋琳琳, 李萍, 田世丽, 武岳洋, 杨婷婷, 李浩洋, 石生伟, 吐莉尼沙, 吕雪梅, 孙倩, 方运霆 (1)

基于无人机探空和数值模拟天津一次重污染过程分析 杨旭, 蔡子颖, 韩素芹, 史静, 唐颖潇, 姜明, 邱晓滨 (9)

中原城市群典型城市秋冬季大气 PM_{2.5} 污染特征及溯源 苗青青, 姜楠, 张瑞芹, 赵孝因, 齐静文 (19)

沈阳市冬季大气 PM_{2.5} 中水溶性离子污染特征及来源解析 王国祯, 任万辉, 于兴娜, 侯思宇, 张毓秀 (30)

保定地区 PM_{2.5} 中重金属元素的污染特征及健康风险评价 雷文凯, 李杏茹, 张兰, 徐静, 赵文吉, 刘子锐 (38)

基于 PMF 和源示踪物比例法的大气羰基化合物来源解析: 以南京市观测为例 胡崑, 王鸣, 王红丽, 景盛翔, 陈文泰, 卢兴东 (45)

2019年天津市挥发性有机物污染特征及来源 高璟璇, 肖致美, 徐虹, 李立伟, 李鹏, 唐逸, 杨宁, 李源, 毕温凯, 陈魁 (55)

柳州市春季大气挥发性有机物污染特征及源解析 刘齐, 卢星林, 曾鹏, 于爽 (65)

天津市郊夏季的臭氧变化特征及其前体物 VOCs 的来源解析 罗瑞雪, 刘保双, 梁丹妮, 毕晓辉, 张裕芬, 冯银厂 (75)

2017年春夏期间南京地区臭氧污染输送影响及潜在源区 谢放尖, 陆晓波, 杨峰, 李文青, 李浩, 谢轶嵩, 王艳, 刘益和, 王庆九, 胡建林 (88)

2006~2019年珠三角地区臭氧污染趋势 赵伟, 高博, 卢清, 钟志强, 梁小明, 刘明, 马社霞, 孙家仁, 陈来国, 范绍佳 (97)

大型石化企业邻近区域大气沉降中多环芳烃赋存特征及源解析 李大雁, 齐晓宝, 吴健, 黄沈发, 王敏, 沙晨燕, 沈城 (106)

叶片大气颗粒物滞纳能力评估方法的定量对比 岳晨, 李广德, 席本野, 曹治国 (114)

东江流域敌敌畏的排放量估算及归趋模拟 张冰, 张芊芊, 应光国 (127)

松花江哈尔滨段及阿什河抗生素的分布规律与生态风险评估 杨尚乐, 王旭明, 王伟华, 胡雪莹, 高立伟, 孙兴滨 (136)

东北小兴凯湖沉积物 POPs 污染特征及生态风险评估 李慧, 李捷, 宋鹏, 程云轩, 焦立新, 杨亚铮 (147)

河南省地表水源中 PPCPs 分布及生态风险评估 周颖, 吴东海, 陆光华, 姚晶晶, 魏磊, 韩枫 (159)

无锡-常州地下水水中内分泌干扰物的赋存特征和健康风险评估 王淑婷, 饶竹, 郭峰, 刘成海, 战楠, 王娅南, 彭洁, 杨鸿波 (166)

清江流域地表水重金属季节性分布特征及健康风险评估 刘昭, 周宏, 曹文佳, 刘伟, 兰圣涛 (175)

会仙岩溶湿地丰平枯时期地下水金属元素污染与健康风险 李军, 赵一, 邹胜章, 蓝美宁, 樊连杰, 谢浩, 秦月, 朱丹滢 (184)

三峡库区城镇化影响下河流 DOM 光谱特征季节变化 陈昭宇, 李思悦 (195)

不同植物覆盖下黄河三角洲湿地土壤中微塑料的分布 岳俊杰, 赵爽, 程昊东, 段鑫越, 石洪华, 汪磊, 端正花 (204)

基于宏基因组学探讨东平湖水库的菌群结构、耐药基因谱及其公共健康风险 张红娜, 崔娜, 申红妙 (211)

分层型水库藻类季相演替的细菌种群驱动机制 闫苗苗, 张海涵, 黄廷林, 宗容容, 刘凯文, 苗雨甜, 杨尚业, 黄鑫, 王娜 (221)

丹江口库区浮游真菌组成与功能及其影响因素 郑保海, 王晓宇, 李英军, 陈彦, 李百炼, 李玉英, 陈兆进 (234)

太湖出流河道藻颗粒变化及其水质效应 郭宇龙, 许海, 陈旭清, 郑建中, 詹旭, 朱广伟, 朱梦圆 (242)

石盘丘小流域不同土地利用方式下土壤氮磷流失形态及通量 邓华, 高明, 龙翼, 黎嘉成, 王盛燕, 王子芳 (251)

前期干旱天数对生物滞留系统除氮性能的影响 陈焱, 李欣芮, 郑爽, 刘臻, 余雪花, 程启洪 (263)

浒苔生物炭对雨水径流中氨氮的吸附特性及吸附机制 陈友媛, 李培强, 李闲驰, 孙萍, 赵新月, 李洁, 李晋, 辛至然 (274)

填料对潮汐流人工湿地中 CANON 作用强化的影响 刘冰, 郑煜铭, 秦会安, 古励 (283)

FeMnNi-LDHs 对水中 As(III) 的吸附性能与机制 廖玉梅, 余杰, 魏世强, 蒋珍茂 (293)

硝酸钙添加和铅改性膨润土覆盖联用控制底泥中磷释放的效果及机制 张宏华, 林建伟, 詹艳慧, 俞阳, 张志斌 (305)

某市污水厂抗生素和抗生素抗性基因的分布特征 颜亚玮, 於驰晟, 李菲菲, 姚鹏城, 刘宏远 (315)

不同污泥在微波预处理-厌氧消化过程中抗性基因分布及菌群结构演替 李慧莉, 武彩云, 唐安平, 佟娟, 魏源送 (323)

天然富硒土地划定的富硒阈值 王惠艳, 曾道明, 郭志娟, 成晓梦, 彭敏, 孙跃 (333)

融合自然-人为因子改进回归克里格对土壤镉空间分布预测 高中原, 肖荣波, 王鹏, 邓一荣, 戴俊杰, 刘楚藩 (343)

南方典型水稻土镉(Cd)累积规律模拟 戴雅婷, 傅开道, 杨阳, 王美娥, 陈卫平 (353)

闽西南土壤-水稻系统重金属生物可给性及健康风险 林承奇, 蔡宇豪, 胡恭任, 于瑞莲, 郝春莉, 黄华斌 (359)

干湿交替灌溉制度下纳米修复材料对杂交水稻籽粒 Cd 累积及产量的影响 杨茹, 陈馨睿, 张颖, 崔俊义, 武立权, 马友华, 廖江, 何海兵 (368)

三元复合调理剂对土壤镉赋存形态和糙米镉累积的调控效应 蒋毅, 刘雅, 辜娇峰, 杨世童, 曾雄, 王轩宇, 周航, 廖柏寒 (378)

风化煤组配改良剂结合水分管理对水稻根际土壤与稻米甲基汞含量的影响 郑顺安, 吴泽赢, 杜兆林, 倪润祥, 姚启星 (386)

不同施肥措施对水稻土壤微生物抗性的影响 郑开凯, 马志远, 孙波, 梁玉婷 (394)

氮添加影响下新疆天山雪岭云杉林土壤酶活性及其与环境因子的相关性 张涵, 贡璐, 刘旭, 邵康, 李昕竹, 李蕊希 (403)

黄土陵区撂荒农田土壤酶活性及酶化学计量变化特征 钟泽坤, 杨改河, 任成杰, 韩新辉 (411)

生物炭对土壤酶活性和细菌群落的影响及其作用机制 冯慧琳, 徐辰生, 何欢辉, 曾强, 陈楠, 李小龙, 任天宝, 姬小明, 刘国顺 (422)

植被恢复对刺萼龙葵根际土壤细菌群落结构与功能的影响 张瑞海, 宋振, 付卫东, 鄂玲玲, 高金会, 王然, 王忠辉, 张国良 (433)

黄壤稻田土壤微生物量碳氮及水稻品质对生物炭配施氮肥的响应 史登林, 王小利, 刘安凯, 侯再芬, 梁国太 (443)

等碳量添加秸秆和生物炭对土壤呼吸及微生物量碳氮的影响 何甜甜, 王静, 符云鹏, 符新妍, 刘天, 李亚坤, 李建华 (450)

秸秆与氮肥配比对农田土壤内外源碳释放的影响 孙昭安, 张轩, 胡正江, 王开永, 陈清, 孟凡乔 (459)

生物炭与化肥混合对氨挥发和磷固定的影响 杨文娜, 邓正昕, 李娇, 郑杰炳, 王子芳, 高明 (467)

氮肥减投条件下膜材料使用对稻田氨挥发排放的影响 俞映惊, 王梦凡, 杨根, 何世颖, 段婧婧, 杨林章, 薛利红 (477)

微塑料对斑马鱼胚胎孵化影响及其在幼鱼肠道中的积累 赵佳, 饶本强, 郭秀梅, 高进勇 (485)

无人机热红外支持下的城市微尺度热环境模拟 阳少奇, 冯莉, 田慧慧, 刘艳霞 (492)

基于人居尺度的中国城市热岛强度时空变化及其驱动因子解析 孙艳伟, 王润, 郭青海, 高超 (501)

《环境科学》征订启事(8) 《环境科学》征稿简则(220) 信息(233, 352, 421)

融合自然-人为因子改进回归克里格对土壤镉空间分布预测

高中原¹, 肖荣波^{1*}, 王鹏¹, 邓一荣², 戴伟杰¹, 刘楚藩¹

(1. 广东工业大学环境科学与工程学院, 广州 510006; 2. 广东省环境科学研究院, 广州 510045)

摘要: 掌握土壤重金属的空间分布对于科学制定土壤污染风险管控策略具有重要支撑作用. 针对目前重金属空间模拟较少考虑影响因素且平行变量间存在多重共线性, 导致预测精度较低问题, 选取自然-人为的 23 个影响因素, 采用 OK (普通克里格法)、NRK (仅基于自然因子的回归克里格法) 和 NARK (基于自然-人为因子的回归克里格法) 对土壤镉空间分布进行模拟, 评估预测精度, 以冶炼厂周边区域实证研究. 结果表明: 该区土壤镉点位超标率达 85.93%, 对土壤镉空间异质性的影响表现为冶炼厂大气排放 > 钢铁厂大气排放 > pH > 有机质 > 与道路的欧氏距离 > 与河流的欧氏距离. NARK 对土壤镉预测结果的均方根误差和平均绝对误差较 OK 法分别降低 26.86% 和 30.56%, 模型决定系数 R^2 由 0.78 提升到 0.88; 较 NRK 分别降低 24.15% 和 24.23%, R^2 由 0.81 提升到 0.88. 融合自然和人为因素的回归克里格模型明显提高了土壤镉空间分布模拟精度, 增加人为因素作为辅助变量对模型精度的提升贡献很大, 尤其是大气点源污染排放.

关键词: 土壤重金属; 回归克里格; 人为因素; 自然因素; 空间分布模拟

中图分类号: X53 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2021)01-0343-10 DOI: 10.13227/j.hjxx.202005139

Improved Regression Kriging Prediction of the Spatial Distribution of the Soil Cadmium by Integrating Natural and Human Factors

GAO Zhong-yuan¹, XIAO Rong-bo^{1*}, WANG Peng¹, DENG Yi-rong², DAI Wei-jie¹, LIU Chu-fan¹

(1. School of Environmental Science and Engineering, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China; 2. Guangdong Provincial Academy of Environmental Science, Guangzhou 510045, China)

Abstract: Mastering the spatial distribution of heavy metals in the soil plays an important supporting role in the scientific formulation of soil pollution risk management and control strategies. Few factors were considered and multiple collinearity between parallel variables existed, resulting in low prediction accuracy. OK (common Kriging method), NRK (regressive Kriging method based on natural factors only), and NARK (regressive Kriging based on natural-human factors) were used to simulate the spatial distribution of soil Cd by selecting 23 natural-artificial influencing factors. The prediction accuracy was evaluated based on an empirical study of the area around Shaoguan Qujiang smelter. The results showed that the above-standard rate of soil cadmium in this area reached 85.93%, and the effect on the spatial heterogeneity of soil cadmium was shown as air emissions from smelters > air emissions from steel plants > pH > organic matter > Euclidean distance to road > Euclidean distance to river. The root-mean-square error and average absolute error of NARK's prediction results for soil cadmium were 26.86% and 30.56% lower than that of the OK method, respectively. The model determination coefficient R^2 increased from 0.78 to 0.88. Compared with that of NRK, it was reduced by 24.15% and 24.23% and R^2 increased from 0.81 to 0.88. The NRK combining natural and human factors significantly improved the simulation accuracy of the spatial distribution of soil cadmium, and the addition of human factors as auxiliary variables, especially atmospheric point source pollution emissions, greatly contributed to the improvement of the model accuracy.

Key words: soil heavy metal; regression Kriging; human factors; natural factors; spatial distribution simulation

土壤镉具有高毒性、易累积和难降解的特点, 随着食物链进入人体积累, 引发多种疾病, 严重威胁人体健康. 土壤中的镉具有明显的空间异质性, 精准识别其空间分布对于土壤污染防治及农产品布局具有重要意义^[1]. 土壤镉空间分布的影响因素有很多, 可概括为两类: 一是自然因素, 主要包括成土母质^[2]和土壤的理化性质(如 pH 和有机质含量)等; 二是人为因素, 主要包括土地利用类型^[3]、工业污染^[4]、交通排放^[5]和农业生产等. 有研究表明, 人类活动对重金属空间分布的影响已经远远超过自然背景. Gay 等^[6]的研究显示, 镉是土壤重金属污染的主要污染物, 污染成因复杂, 精准模拟其空间分布面

面临着巨大挑战^[7].

空间插值法是模拟土壤重金属空间分布的重要手段. 普通克里格(ordinary Kriging, OK)作为最简单有效的空间插值方法, 近年来应用较广^[6], 但是, 该方法忽视了影响土壤重金属空间分布的环境要素, 其空间插值精度不高^[8]. 通过构建回归克里格(regression Kriging, RK)模型, 利用 OK 与回归分析

收稿日期: 2020-05-13; 修订日期: 2020-06-29

基金项目: 广东省重点研发领域研发计划项目(2019B110207001); 国家重点研发计划项目(2018YFC1800205)

作者简介: 高中原(1994~), 女, 硕士, 主要研究方向为空间模拟与生态修复, E-mail: 767956443@qq.com

* 通信作者, E-mail: ecoxiaorb@163.com

结合起来,将影响插值变量的环境因子作为辅助变量,建立插值变量与其影响因子之间的回归模型,可以克服 OK 不足,提高模拟精度^[9]. 例如, Mondal 等^[10]的研究基于亮度指数、绿色指数和归一化植被指数等 8 个辅助变量的 RK,估算了印度纳尔默达河流域的土壤有机碳的空间分布. 邵亚等^[11]利用海拔高度、坡度和坡向等多个地理环境因子作为辅助数据,构建了地理加权回归模型,该方法比 OK 相关系数提升了 59.38%. 杨顺华等^[12]的研究选取相对高程和汇流动力指数作为辅助变量构建模型,发现 RK 法插值结果的平均误差、平均绝对误差和均方根误差相较于 OK 法分别降低 39.2%、17.7% 和 20.6%. 但是,上述研究也存在一些问题,例如未充分考虑土壤重金属复杂的来源和迁移转化过程,特别是对于人为因素影响方面多只考虑土地利用,缺乏对点状和线性等污染源的关注^[13-15];此外,环境要素之间的相关性会导致多重共线性问题,降低回归函数的准确性^[16]. 因此,如何选取合适有效的环境变量,去除各因素的自相关性是提升回归克里格模型模拟精度有效途径.

鉴于此,本文从自然和人为两个方面选取 23 个影响因子,应用主成分分析改进的回归克里格模型,并考虑因子自相关性,构建 NRK(仅基于自然因子的回归克里格法)和 NARK(基于自然-人为因子的回归克里格法)重金属空间分布模拟框架以南方某市冶炼厂周边区域为实证区域,以期说明自然和人为因素对于区域土壤重金属分布模拟的影响.

1 材料与方 法

1.1 研究区概况

研究区所在市是我国典型的重工业城市,于 20 世纪五、六十年代先后建立了发电厂、冶炼厂和钢铁厂等大型重工业,有色金属加工成为主导产业. 伴随着工业和经济高速发展,由于重金属加工和电镀等产业发展方式较为粗放,早期污染物排放量较大,土壤作为污染物的最终受体,该区土壤重金属污染成为突出的问题,王其枫等^[17]和 Dong 等^[18]的研究数据显示,该地区土壤重金属镉污染情况严重. 选取钢铁厂、冶炼厂和发电厂交汇区为重点研究区域(112°50′~114°45′E、23°5′~25°31′N),聚焦重金属污染的时空分布. 该区属亚热带季风气候,盛行南北向风(图 1).

1.2 样品采集与分析

依据《土壤环境质量监测技术规范》(HJ/T

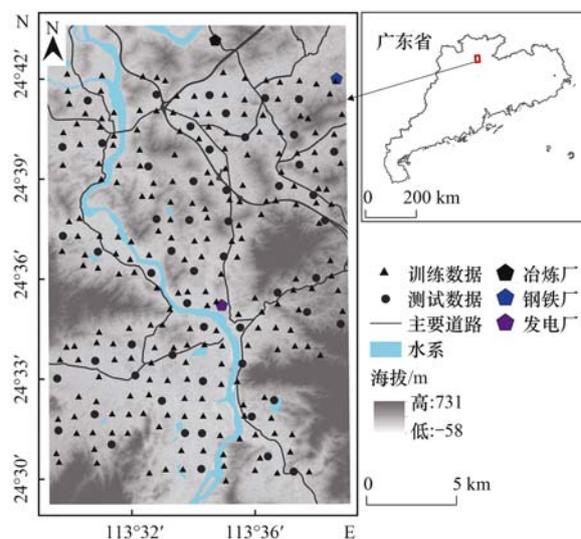


图 1 研究区域与样点分布示意

Fig. 1 Location of the study area and spatial distribution of the soil samples

166-2004)要求,综合考虑成土母质和土地利用的情况,采用均匀布点和系统布点相结合的方法,于 2019 年 4 月采集了 271 个点位土壤表层样品(0~20 cm). 土壤样品采集后经自然风干,去除杂物,研磨过 100 目筛后,采用 HCl-HNO₃-HF-HClO₄ 法消解土壤样品,经电感耦合等离子体光谱仪(ICP-OES, PerkinElmer Optima 8300, USA)测定镉元素. 采用玻璃电极法测定土 pH,采用重铬酸钾氧化-分光光度法(HJ 615-2011)法测定土壤有机碳. 分析过程中采用的试剂均为优级纯,重金属的加标回收率为 86.4%~110%之间,同时进行空白试验,测试的准确度和精密度符合国家一级标准物质 GSS-4 质量控制要求. 使用全球定位系统(GPS)标记采样点位,样点分布见图 1.

1.3 影响因素和数据处理

1.3.1 影响因素

自然状态下,成土母质是土壤镉的主要来源,镉的活性和迁移速率受到土壤环境参数(酸碱度、有机质)、地形地貌和河流运移的影响. 人为污染源是该市土壤镉的重要来源,工业和交通布局对其空间分布影响很大. 因此,考虑到该区域土壤镉的多种来源,且受自然和人为环境因素影响较大,镉污染空间分布存在较大异质性特点,综合选取了 23 个影响因素,详见表 1.

其中地形数据来自于地理空间数据云(<http://www.gscloud.cn>),空间精度为 30 m;土地利用类型数据来源于地理资源与生态专业知识服务平台(网址),分辨率为 30 m;取 1:25 万地质图来源于 Local Space(图 2). 风频数据来源于中国气象网多年统计数据(2015~2018 年). 成土母质和土地利用 2 个类

表 1 土壤重金属镉空间分布影响因素
Table 1 Influencing factors used in this study

因素	指标	衡量指标
自然	酸碱度	pH
	有机质	TOC
	成土母质	碎屑岩、沉积岩、岩浆岩和碳酸盐岩
	地形因子	高程、粗糙度、平面曲率、剖面曲率、曲率、坡度和坡向
	河流	样点与河流的欧氏距离(EDC_B)
人为	交通	样点与主要交通干道的欧氏距离(EDC_A)
	土地利用类型	草地、湿地、耕地、林地和建设用地
	工业企业	通过样点与工业企业距离和样点方向上风频计算(FD_i)

型变量采用哑变量变换参与计算; 工业大气排放对样点的影响通过样点与企业的距离和样点相对工业企业风向上风频表达, 用 FD_i 表示:

$$FD_i = D_k / F_k \quad (1)$$

式中, FD_i 是指不同样点受到工业企业的影响, 即工业企业影响因子; F_k 是指样点位于工业企业风向上的风频; D_k 是指样点距离工业企业的相邻距离; i 为 A、B 和 C 分别表示发电厂、钢铁厂和冶炼厂。

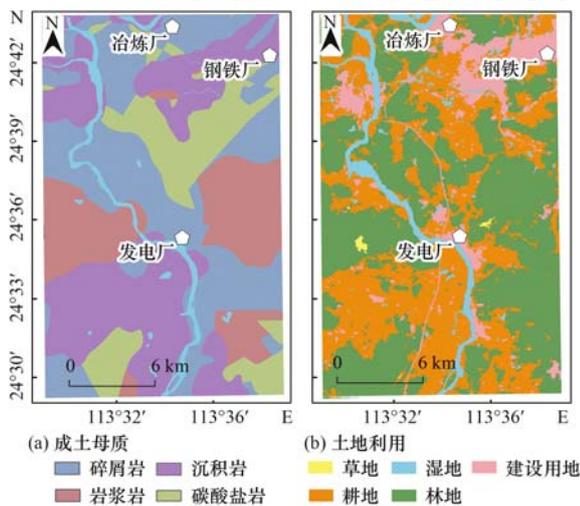


图 2 研究区域成土母质和土地利用分布

Fig. 2 Distribution of land use and parent materials in the study

1.3.2 模型构建

利用 SPSS 22.0 的双变量相关分析、主成分分析、多元线性逐步回归和 Origin 2020 的方差分析功能, 结合 Arcgis 10.2 的空间分析功能, 分析土壤镉含量与环境变量之间的相关性; 通过分析土壤镉在不同类型变量上的显著性差异提取主要影响因素; 再利用主成分分析, 提取主控环境因子, 构建基于主成分的改进回归克里格模型 (RK), 并将其与普通克里格模型 (OK) 进行对比。

为了对比分析自然因素、人为因素以及人为因素中的大气排放 (考虑到大气排放是本区域重金属分布最为重要因素) 对土壤中重金属空间模拟的影

响, 构建了仅基于自然因子的回归克里格法 (nature regression Kriging, NRK)、基于自然-人为因子的回归克里格法 (natural anthropology regression Kriging, NARK) 以及不考虑大气排放影响的回归克里格法 (no atmospheric emission regression Kriging, NAERK) 这种模型。

1.3.3 普通克里格

普通克里格 (OK) 是一种常用的空间插值方法^[19], 假设区域变量的平均值在整个研究区域中是未知常数。通过基于无偏预测和最小方差的半变异函数确定加权因子, 计算公式如下^[20]:

$$Z(x_0) = \sum_{i=1}^N \lambda_i Z(x_i) \quad (2)$$

式中, $Z(x_0)$ 表示未知点的值, $Z(x_i)$ 表示未知样点周围已知样本点的值, N 表示已知样本点的个数, λ_i 表示第 i 个样本点的权重。

1.3.4 利用主成分分析改进的回归克里格

回归克里格模型中观测值被视为漂移和残差之和, 它是 OK 模型的扩展^[21]。漂移是由环境因素引起的综合影响, 通常使用多元线性回归进行拟合。残差在空间上是固定的, 理论上呈正态分布。因此, 在非采样位置 X_0 处的预测值是回归测量的漂移与 OK 模型估计的残差和, 计算公式如下^[22, 23]:

$$Z(s) = m_s + e_s \quad (3)$$

$$Z^*(s_0) = m_{(s_0)} + e_{(s_0)} = \beta_0 +$$

$$\sum_{i=1}^n \beta_i \times x_i + \sum_{j=1}^n w_j \times e(s_j) \quad (4)$$

式中, $Z(s)$ 是区域化变量的观测数据集; m_s 是相对应的漂移数据集; e_s 是残差数据集。 $Z^*(s_0)$ 是位置样点的预测值; β_i 是回归函数的回归系数; x_i 是独立变量; w_j 是普通克里格法的权重; $e(s_j)$ 是样点 s_j 处的残差。

有研究表明, 环境因子之间具有较强的相关性, 在回归中可能产生多重共线的问题^[16]。因此, 本文采用主成分分析和多元线性回归结合的方式建立回归方程^[24]。作为多变量分析方法, 最大方差旋转方法可以有效减少每个组件上的高负荷变量的数量^[25], 取特征值大于 1 的主要成分 (PCs, $s = 1, 2, \dots, n$)。在获得 PC 之后建立回归方程, 将多元线性回归方程应用到回归克里格中。

1.3.5 模型精度验证

选择平均绝对误差 (MAE), 均方根误差 (RMSE)、测量值标准偏差与均方根误差的比值 (RPD) 和 R^2 作为模型精度评价指标, R^2 越大, MAE 和 RMSE 越小, 则模型精度越高^[26], 当 $1.5 \leq RPD < 2.0$ 时表明模型只能进行粗略估计, 当 $2.0 \leq RPD <$

2.5 时表明模型具有较好地预测能力,当 $2.5 \leq \text{RPD} < 3.0$ 时表明模型具有很好地预测能力,当 $\text{RPD} \geq 3.0$ 时表明模型具有极好地预测能力^[12]. 用 RI 表示两个模型之间预测精度的差异^[27].

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |O_i - P_i| \quad (5)$$

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

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \quad (7)$$

$$\text{RPD} = \text{STD}/\text{RMSE} \quad (8)$$

$$\text{RI} = (\text{RMSE}_n - \text{RMSE}_{\text{ref}})/\text{RMSE}_{\text{ref}} \times 100\% \quad (9)$$

式中, n 是数量的样本, σ_i^2 样点克里格的方差, O_i 是样点观测值, \bar{O} 是样点观测值的平均值, P_i 是样点

的预测值. RMSE_{ref} 表示参比模型的 RMSE. 通常一个较好的模型都是具有较低的 MAE 和 RMSE 以及较高的 R^2 .

2 结果与分析

2.1 土壤镉含量特征分析

土壤镉含量介于 $0.07 \sim 21.93 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 之间, 均值为 $3.55 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$, 按照土壤质量环境标准 (GB 15618-2018 和 GB 36600-2018) 划分, 点位超标率达到 85.93%, 土壤镉污染严重. 从成土母质来看, 镉平均值分布: 碳酸盐岩 > 碎屑岩 > 岩浆岩 > 沉积岩; 沉积岩中变异系数大于 100%, 为强变异, 其他母质类型均为中等变异; 从土地利用类型来看, 镉平均值大小排序为: 建设用地 > 草地 > 耕地 > 林地; 所有土地利用类型均呈现中等变异 (表 2).

表 2 不同成土母质和土地利用类型的描述性统计

Table 2 Descriptive statistics of Cd by parent materials and land use types

项目	类型	样本数	均值 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$	最大值 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$	最小值 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$	标准差 (SD)	变异系数 (CV)/%
成土母质	沉积岩	104	2.51	12.29	0.07	2.79	111.08
	碎屑岩	82	3.24	10.03	0.1	2.19	67.62
	碳酸盐岩	43	3.63	9.79	0.11	1.76	48.41
	岩浆岩	42	3.1	9.61	0.39	1.98	63.9
土地利用类型	草地	20	3.86	11.99	0.2	3.18	82.34
	耕地	118	3.24	12.29	0.1	2.83	87.6
	林地	120	2.5	6.85	0.07	1.45	57.87
	建设用地	13	4.19	8.67	1.67	2.58	61.6

2.2 土壤镉含量与影响因素之间的相关性

采用 Spearman 相关系数探讨土壤镉含量与环境因素之间的关系. 结果显示, 河流和道路的欧氏距离、冶炼厂大气排放、钢铁厂大气排放、土壤有机质含量和土壤 pH 与镉含量呈显著相关 (图 3), 各环境因素对土壤镉含量的影响程度由高到低呈现为冶炼厂大气排放 > 钢铁厂大气排放 > pH > 有机质 > 与道路的欧氏距离 > 与河流的欧氏距离.

2.3 土壤镉空间分布模拟模型

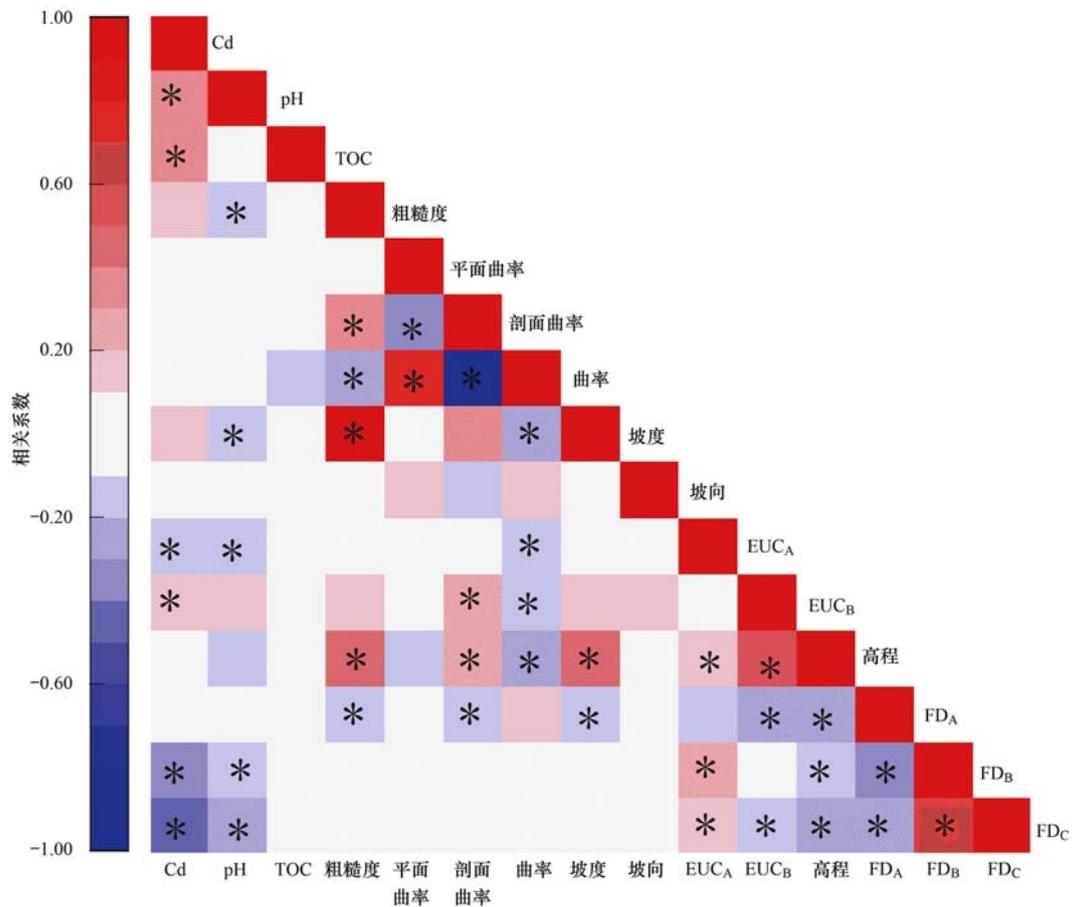
为避免自然影响因素之间较强的相关性 (图 3) 导致多元线性拟合过程出现较大的共线性, 采用主成分分析法处理数据. 经 KMO 检验值为 0.675, 大于 0.5, 球形度检验 P 为 0.017, 小于 0.05, 表明可采用主成分分析. 采用最大方差旋转 PCA, 选取特征值大于 1 的 6 个 PCs ($s = 1, 2, 3, 4, 5, 6$), 成分矩阵见表 3, 用于多元线性逐步回归方程. 选用的 6 个 PC 可以解释总方差分别为 23.68%、37.87%、48.86%、58.88%、67.54% 和 75.23% (表 3). 将成土母质和土地利用被转换成虚拟变量纳入计算^[28]. 以逐步回归的多元线性函数来量化土壤镉含量与不

同变量之间的关系, 逐步回归法每引入一个自变量都将对已输入的变量进行 F 检验, 以确保回归方程中只包含显著变量, 表 4 列出了土壤镉含量与不同变量的系数和回归函数的决定系数 R^2 . 从中可知, NARK 模型中的回归函数 R^2 最高, 解释能力最佳.

对多元线性函数的残差进行 K-S 检验, 用拉伊达法则 (平均值 \pm 标准差) 在剔除异常值后, 在显著性水平为 0.05 时符合正态分布假设 (H_0). 通过 GS+ 9.0 软件根据函数的最高 R^2 和最低残差平方和的原理, 确定 OK、NRK 残差和 NARK 残差的最佳拟合半变异函数, 其参数如表 5 所示. 根据块金效应的划分, 块基比 < 25% 为强空间变异, 25% ~ 75% 为中等空间变异, > 75% 为弱空间变异^[29], OK 模型、NRK 模型和 NAERK 模型的块金效应呈现中等空间变异, NARK 模型残差呈现强空间变异, NARK 模型的空间依赖性最强. NARK 模型空间自相关范围为 14.7 km, 显著高于前 3 种模型.

2.4 模型验证

应用 Arcgis 软件中的地统计分析模块基于随机性原则分别选取 217 和 54 个样本作为测试集和验



FD_A、FD_B 和 FD_C 分别表示发电厂、钢铁厂和冶炼厂的工业大气排放影响；EUC_A 和 EUC_B：表示点位距离主要路网和河流的欧氏距离；* 表示在 0.05 水平(双侧)上显著相关

图 3 镉含量与影响因素的 Spearman 相关性

Fig. 3 Spearman's correlation coefficients between Cd and the influential factors

表 3 自然因素的主成分分析矩阵¹⁾

Table 3 Principal component analysis matrix of natural factors

项目	成分					
	1	2	3	4	5	6
pH	-0.10	-0.30	0.09	0.28	0.12	0.68
有机碳含量	0.07	0.06	0.39	-0.41	0.21	0.26
粗糙度	0.49	0.62	0.05	-0.46	-0.03	0.20
平面曲率	-0.55	0.45	0.14	0.23	0.01	-0.12
剖面曲率	0.64	-0.44	-0.32	-0.05	0.01	0.04
曲率	-0.74	0.55	0.30	0.16	-0.01	-0.09
坡度	0.64	0.57	0.01	-0.37	-0.02	0.12
坡向	-0.04	0.31	0.22	0.32	0.09	0.46
EUC _B	0.56	-0.07	0.36	0.51	0.04	0.10
高程	0.72	0.10	0.20	0.30	-0.05	-0.01
碳酸盐岩	0.27	-0.08	0.34	0.01	0.80	-0.35
其他沉积岩	-0.55	-0.40	0.23	-0.42	-0.17	0.26
碎屑岩	0.01	0.44	-0.79	0.28	0.10	0.15
岩浆岩	0.41	0.01	0.39	0.16	-0.68	-0.19

1) EUC_B 表示点位距离主要河流的欧氏距离

证集,各占样本比例为 80% 和 20%^[10]. 验证效果表明(表 6):NARK 是 4 种模型中 MAE 和 RMSE 最小, R^2 和 RPD 最大的,说明结合人为因素和自然因素的回归克里格的模拟效果最好. 没有利用辅助因

素的 OK 模型只能粗略估计土壤镉空间分布情况, 而仅利用自然因素的 NRK 模型和没有考虑大气排放的 NAERK 模型的 RPD 分别为 2.02 和 2.17, 两个模型都具有较好地预测能力,利用自然和人为因

素的 NARK 模型具有很好地预测能力. NRK 模型较 OK 模型的 MAE 和 RMSE 分别降低 4.15% 和 8.35%, RPD 提升了 9.12%; 不考虑大气排放的 NAERK 模型较 OK 模型的 MAE 和 RMSE 降低了 10.93% 和 17.61%, RPD 提升了 21.38%; 融合了自然和人为因素的 NARK 模型较 OK 模型的 MAE 和 RMSE 分别降低 27.30% 和 30.56%, RPD 提升了 44.01%. 以上结果说明合理地利用多源辅助数据有利于提升改进回归克里格模型预测效果, 对大气污染源周边大气点源排放对该区域土壤镉空间模拟的精度提升有至关重要的作用.

2.5 土壤镉空间模拟结果比较

从空间分布可以看出(图4), 通过4种不同方法模拟的土壤镉含量空间分布呈现了相似的空间分布, 均出现了两个高值区域, 高低值的变化趋势也是相同的. 但是, 4种方法在局部有明显差异, 前3种

表4 不同模型关于变量的回归系数¹⁾

Table 4 Regression coefficients of the different models on variables

项目	NRK	NAERK	NARK
PC1	0	0	0
PC2	0	0	0
PC3	0	0	0
PC4	0	0	0
PC5	0.203	0.212	0
PC6	0.272	0.234	0.222
EUC _A	0	-0.19	-0.174
FD _A	0	0	0
FD _B	0	0	-0.102
FD _C	0	0	-0.617
湿地	0	0	0
林地	0	0	0
耕地	0	0.104	0
建设用地	0	0	0
R ²	0.105	0.135	0.245

1) EUC_A 表示点位距离主要公路的欧氏距离; FD_A、FD_B 和 FD_C 分别表示发电厂、钢铁厂和冶炼厂的工业大气排放影响

表5 利用不同类型影响因子4种模型的半方差函数和参数

Table 5 Semi-variograms and parameters of the four models

变量	OK	NRK 残差	NAERK 残差	NARK 残差
理论模型	指数函数	球形函数	球形函数	球形函数
块金值(C ₀)	3.91	1.28	1.25	0.032
基台值(C ₀ +C)	10.68	3.69	2.81	0.34
块基比[C ₀ /(C ₀ +C)]/%	36.61	34.57	44.31	9.44
变程/km	3.9	3.4	2.7	14.7
决定系数(R ²)	0.96	0.95	0.94	0.95
残差	1.69	1.63	1.67	0.02

表6 不同影响因素对模型精度的影响

Table 6 Influence of the different influence factors on the precision of the models

项目	OK	NRK	NAERK	NARK
平均绝对误差(MAE)	0.64	0.61	0.59	0.47
均方根误差(RMSE)	1.28	1.17	1.10	0.89
决定系数(R ²)	0.78	0.81	0.79	0.88
测量值标准偏差与均方根误差的比值(RPD)	1.85	2.02	2.17	2.67

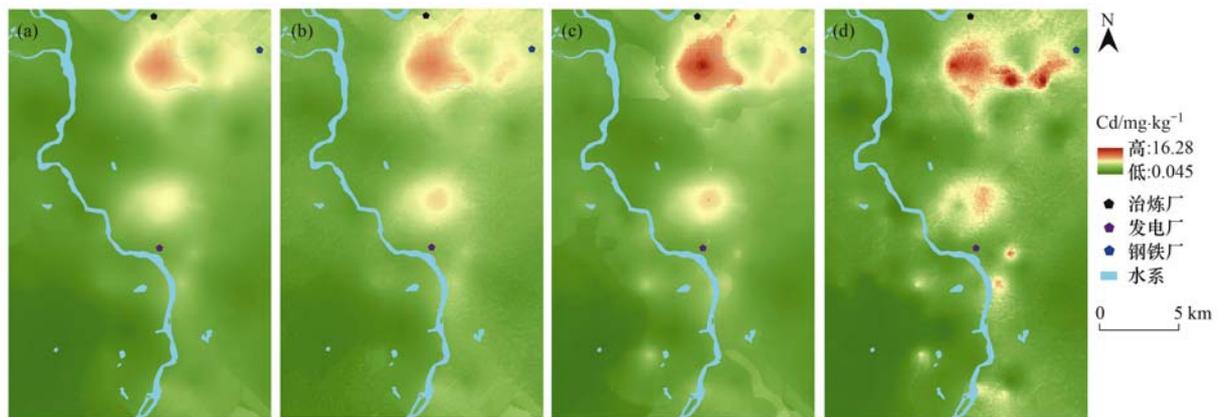
模型的空间分布更为接近, 高值区域相对集中且位置相同, 增加了大气点源排放影响 NARK 模型出现多个高值区域且较为分散. 首先 OK 法的模拟结果在空间上分布差异较小, 模拟结果更为平滑, 高值区域的镉含量相对较低, 捕捉到的局部异质性信息较少, 其拟合结果范围为 0.12 ~ 11.05 mg·kg⁻¹, 预测结果范围较小, 与实测值范围(0.07 ~ 21.93 mg·kg⁻¹)差异最大. 其中 NRK 模型与 OK 模型空间分布没有很大的区别, 其拟合结果范围为 0.10 ~ 15.32 mg·kg⁻¹, 较 OK 模型有小幅扩大, 但是空间分布仍然十分平滑, 高值区域没有明显的边界. 辅助因素增加了土地利用和主要交通干道后, NAERK 模型在空间上出现明显的块状高值区域, 高值区域

相对集中, 界线清晰, 出现了明显的斑块状分布, 在一定程度上克服了克里格的平滑效应, 但是小范围的空间异质性仍然没有得到明显地体现, 其拟合结果范围为 0.08 ~ 16.37 mg·kg⁻¹. NARK 应用了自然因素和人为因素作为辅助数据, 捕捉到的局部信息相对较多, 空间分布预测结果与其他 3 种模型有明显区别, 其空间分布较为突兀, 高低值呈斑块分布且较为离散, 体现了原始数据的波动性, 其拟合结果范围为 0.045 ~ 19.68 mg·kg⁻¹, 与原始数据范围最为接近.

3 讨论

3.1 环境辅助因子的有效性

本研究选取的部分指标与土壤镉含量显著相关. 对于自然因素来说, 土壤 pH 和有机碳含量与土壤镉含量呈正相关, 表明碱性土壤和高有机碳含量土壤有助于土壤中重金属的累积. 由于 pH 会影响土壤镉的迁移转化能力, 在 pH 较低的酸性土壤中, H⁺ 使镉离子从土壤颗粒中解吸出来, 从而增加了镉的活性和迁移转化能力^[16]. 有机碳含量是影响表层土壤镉含量的重要影响因素, 其可能是土壤中的有



(a) 普通克里格(OK); (b) 基于自然因素的回归克里格(NRK);
(c) 没有大气点源污染的回归克里格(NAERK); (d) 基于自然和人为因素的回归克里格(NARK)

图4 不同影响因素对空间分布的影响

Fig. 4 Influence of different factors on the spatial distribution

机质与其他物质相结合形成胶体,增大了土壤的表面积和表面活性,因此土壤吸附镉的能力随之增大,这与李树辉等^[30]的研究发现,菜地中土壤镉的含量与土壤有机碳呈正相关的结果一致。河流两岸为河流冲积物,受流水运输和泥沙吸附影响,河流冲积物土壤重金属含量本应相对较高,但是在本研究区域中样点距离河流的欧氏距离与土壤镉含量呈正相关^[31],这可能是由于土壤镉主要来源于工业污染源,工业区距离河岸较远^[32]。由于受到包括施肥、金属冶炼和大气扬尘等多种人为随机因素的影响,土壤镉含量在局部呈突变趋势^[33]。NRK模型仅在利用自然因素建立模型,空间分布趋势与OK模型结果相近,整体空间变化平缓,高值区域面积相对扩大,模型精度虽有小幅度的提升,但是空间突变刻画效果不佳,与土壤Cd实际分布存在较大差异。这表明,经过主成分分析提取的自然因素信息对研究区高值区域的模拟效果有所提升,但是提升幅度有限,自然因素不是本研究区土壤Cd含量空间分布的主控因素。

对于人为因素来说,土壤镉含量与样点距离道路和工业企业的距离呈显著负相关。这表明汽车汽油燃烧和含镉的汽车轮胎磨损过程排放的镉污染也是一个重要的污染源^[5]。经过主成分分析提取自然和人为因素信息后,NARK模型模拟效果出现明显提升,土壤Cd空间分布出现明显的突变趋势,模拟精度 R^2 达到最高。高值区域面积小且较为分散,较好地反映了原始数据的波动性。南部地区出现多个高值区域,空间模拟的高值区与重点污染源所在位置并不完全匹配,这可能是由于钢铁厂的南部、发电厂东南部和发电厂西部地形起伏较大,工业废气排放扩散过程中,污染物受风和地形综合影响,局部高山形成涡流,导致污染物运移受阻,下沉至地

面^[34~36]。本区域工业废气是以高架烟囱形式排放,基本符合稳定连续点源排放,大气污染物沉降也基本符合高架连续点源大气扩散模型分布特征,即在污染企业周边其大气沉降浓度趋近于零,之后一定范围内污染物浓度与距工业企业的距离正相关,出现峰值后浓度下降^[37~40]。

许多研究将高程、坡度、汇聚指数和有机质含量等自然因素作为辅助变量优化土壤重金属空间分布模型,结果表明自然因素对土壤重金属空间分布模型的优化是有限的。例如,Song等^[27]利用高程、坡度和地形湿度指数等18个自然影响因素预测土壤中重金属空间分布,砷、镉、铬、铅和锌的 R^2 分别为0.642、0.618、0.544、0.609和0.593,其拟合结果空间分布平滑,没有明显的边界,说明模型拟合精度仍然有待提高。李润林等^[41]分别以土壤有机质、pH、全氮、碱解氮、有效铁、有效铜、有效锰和高程数据为辅助变量,采用协同克里格插值方法预测土壤中锌含量空间分布,结果表明其较普通克里格仅有小幅度提升。在中小尺度上,土壤重金属含量可能会受到人为影响的作用更大。本文中相关性分析发现土壤镉含量与人为因素的相关系数大于自然影响因素,不同的耕作方式和施肥影响了土壤镉含量的空间分布,且研究区内存在电厂和冶炼厂等都是重要污染源,这些人为因素成为区域土壤镉的主要输入源头。因此,根据研究区域不同,综合考虑自然-人为等多源辅助变量的RK模型,可以有效提升土壤重金属空间分布预测精度。

3.2 改进的回归克里格模型对预测精度的影响

本研究利用主成分分析改进的回归克里格模型对土壤镉空间分布具有较好的模拟效果,主要原因可能是土壤Cd受到研究区内地形地貌差异的影响较小,受到土地利用方式和工业生产活动等随机因

素带来的影响较大,因此土壤镉变异特征在整个区域的空间上存在较大差异,这不满足克里格方法的固定假设^[42].在不满足固定假设的情况下,根据样本实测数据得到的半方差函数并不是无偏估计,基于半方差函数得到的加权因子会出现较大偏差,使得 OK 模型预测精度不高.本研究利用 OK 方法模拟的空间分布图,整体变化趋势平缓,高值区域边界模糊,只能粗略地估计污染较为严重的区域分布.这主要是因为土壤重金属含量与多源辅助数据之间呈现复杂的非线性关系^[43],简单的线性拟合会破坏土壤重金属固有的空间结构关系.传统的 RK 模型仅仅采用了多元线性回归计算土壤镉含量在空间上存在的漂移,预测效果较差.影响土壤镉的环境因素之间多存在相关性,利用主成分分析方法可以有效去除影响因素之间的重叠信息,有利于寻找土壤镉含量与影响因素之间的量化关系^[44].本文通过主成分分析法量化了系统内的漂移后,回归的残差在空间上呈现平稳和正态分布^[22],取得了很好地模拟效果.在本研究中,利用主成分分析方法改进的回归克里格方法模拟结果呈现明显的空间突变,真实地反映了原始数据的波动性,模拟效果达到最优.

4 结论

(1)研究区土壤 Cd 污染严重,点位超标率达到 85.93%,土壤镉含量介于 0.07 ~ 21.93 mg·kg⁻¹之间,均值为 3.55 mg·kg⁻¹;各环境因素对土壤镉含量的影响效果由大到小是:冶炼厂大气排放 > 钢铁厂大气排放 > pH > 有机质 > 与道路的欧氏距离 > 与河流的欧氏距离.

(2)综合自然-人为因子改进回归克里格模型可以系统提取预测辅助变量,极大提高了土壤镉预测精度,MAE 和 RMSE 分别达到 0.47 和 0.89,较 OK 法分别降低了 26.86% 和 30.56%; R² 达到 0.88,比普通克里格法提升了 0.1.工业污染源对该地区土壤镉模拟精度影响很大,开展工业污染源的普查,是支撑精准识别镉空间分布的重要工作基础.

参考文献:

[1] Sun L, Guo D K, Liu K, *et al.* Levels, sources, and spatial distribution of heavy metals in soils from a typical coal industrial city of Tangshan, China[J]. CATENA, 2019, **175**: 101-109.

[2] Wang S, Cai L M, Wen H H, *et al.* Spatial distribution and source apportionment of heavy metals in soil from a typical county-level city of Guangdong Province, China[J]. Science of the Total Environment, 2019, **655**: 92-101.

[3] 舒心,李艳,李锋,等.土壤重金属累积对土地利用与景观格局的响应[J].环境科学,2019, **40**(5): 2471-2482.

Shu X, Li Y, Li F, *et al.* Impacts of land use and landscape patterns on heavy metal accumulation in soil[J]. Environmental Science, 2019, **40**(5): 2471-2482.

[4] 李艳玲,卢一富,陈卫平,等.工业城市农田土壤重金属时空变异及来源解析[J].环境科学,2020, **41**(3): 1432-1439.

Li Y L, Lu Y F, Chen W P, *et al.* Spatial-temporal variation and source change of heavy metals in the cropland soil in the industrial city[J]. Environmental Science, 2020, **41**(3): 1432-1439.

[5] Leroy M C, Marcotte S, Legras M, *et al.* Influence of the vegetative cover on the fate of trace metals in retention systems simulating roadside infiltration swales[J]. Science of the Total Environment, 2017, **580**: 482-490.

[6] Gay J R, Korre A. Accounting for pH heterogeneity and variability in modelling human health risks from cadmium in contaminated land[J]. Science of the Total Environment, 2009, **407**(14): 4231-4237.

[7] El Khodrani N, Omrania S, Zouahri A, *et al.* Spatial distribution and mapping of heavy metals in agricultural soils of the Sfaaa region (Gharb, Morocco) [J]. Materials Today: Proceedings, 2019, **13**: 832-840.

[8] 罗梅,郭龙,张海涛,等.基于环境变量的中国土壤有机碳空间分布特征[J].土壤学报,2020, **57**(1): 48-59.

Luo M, Guo L, Zhang H T, *et al.* Characterization of spatial distribution of soil organic carbon in China based on environmental variables[J]. Acta Pedologica Sinica, 2020, **57**(1): 48-59.

[9] Pásztor L, Szabó K Z, Szatmári G, *et al.* Mapping geogenic radon potential by regression kriging[J]. Science of the Total Environment, 2016, **544**: 883-891.

[10] Mondal A, Khare D, Kundu S, *et al.* Spatial Soil Organic Carbon (SOC) prediction by regression kriging using remote sensing data[J]. The Egyptian Journal of Remote Sensing and Space Science, 2017, **20**(1): 61-70.

[11] 邵亚,王毅伟,蔡崇法,等.西南典型岩溶区土壤硒空间分布预测[J].农业工程学报,2016, **32**(22): 178-183.

Shao Y, Wang Y W, Cai C F, *et al.* Prediction on spatial distribution of soil selenium in typical karst area of Southwest China[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2016, **32**(22): 178-183.

[12] 杨顺华,张海涛,郭龙,等.基于回归和地理加权回归 Kriging 的土壤有机质空间插值[J].应用生态学报,2015, **26**(6): 1649-1656.

Yang S H, Zhang H T, Guo L, *et al.* Spatial interpolation of soil organic matter using regression Kriging and geographically weighted regression Kriging [J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2015, **26**(6): 1649-1656.

[13] Lv J S, Liu Y, Zhang Z L, *et al.* Factorial kriging and stepwise regression approach to identify environmental factors influencing spatial multi-scale variability of heavy metals in soils[J]. Journal of Hazardous Materials, 2013, **261**: 387-397.

[14] 李春芳,曹见飞,吕建树,等.不同土地利用类型土壤重金属生态风险与人体健康风险[J].环境科学,2018, **39**(12): 5628-5638.

Li C F, Cao J F, Lü J S, *et al.* Ecological risk assessment of soil heavy metals for different types of land use and evaluation of human health [J]. Environmental Science, 2018, **39**(12): 5628-5638.

[15] 李春芳,王菲,曹文涛,等.龙口市污水灌溉区农田重金属来源、空间分布及污染评价[J].环境科学,2017, **38**(3): 1018-1027.

Li C F, Wang F, Cao W T, *et al.* Source analysis, spatial distribution and pollution assessment of heavy metals in sewage

- irrigation area farmland soils of Longkou city[J]. Environmental Science, 2017, **38**(3): 1018-1027.
- [16] 李雨, 韩平, 任东, 等. 基于地理探测器的农田土壤重金属影响因子分析[J]. 中国农业科学, 2017, **50**(21): 4138-4148.
- Li Y, Han P, Ren D, *et al.* Influence factor analysis of farmland soil heavy metal based on the geographical detector[J]. Scientia Agricultura Sinica, 2017, **50**(21): 4138-4148.
- [17] 王其枫, 王富华, 孙芳芳, 等. 广东韶关主要矿区周边农田土壤铅、镉的形态分布及生物有效性研究[J]. 农业环境科学学报, 2012, **31**(6): 1097-1103.
- Wang Q F, Wang F H, Sun F F, *et al.* Fractionation and bioavailability of Pb and Cd in agricultural soils around mining area in Shaoguan Guangdong province, China [J]. Journal of Agro-Environment Science, 2012, **31**(6): 1097-1103.
- [18] Dong X Q, Li C L, Li J, *et al.* A novel approach for soil contamination assessment from heavy metal pollution: a linkage between discharge and adsorption [J]. Journal of Hazardous Materials, 2010, **175**(1-3): 1022-1030.
- [19] Pajak M, Halecki W, Gašiorek M. Accumulative response of Scots pine (*Pinus sylvestris* L.) and silver birch (*Betula pendula* Roth) to heavy metals enhanced by Pb-Zn ore mining and processing plants: explicitly spatial considerations of ordinary kriging based on a GIS approach[J]. Chemosphere, 2017, **168**: 851-859.
- [20] Dai F Q, Zhou Q G, Lv Z Q, *et al.* Spatial prediction of soil organic matter content integrating artificial neural network and ordinary kriging in Tibetan Plateau [J]. Ecological Indicators, 2014, **45**: 184-194.
- [21] Ye H C, Huang W J, Huang S Y, *et al.* Effects of different sampling densities on geographically weighted regression kriging for predicting soil organic carbon [J]. Spatial Statistics, 2017, **20**: 76-91.
- [22] Giustini F, Ciotoli G, Rinaldini A, *et al.* Mapping the geogenic radon potential and radon risk by using Empirical Bayesian Kriging regression: a case study from a volcanic area of central Italy [J]. Science of the Total Environment, 2019, **661**: 449-464.
- [23] Hengl T, Heuvelink G B M, Stein A. A generic framework for spatial prediction of soil variables based on regression-kriging [J]. Geoderma, 2004, **120**(1-2): 75-93.
- [24] Guillén-Casla V, Rosales-Conrado N, León-González M E, *et al.* Principal Component Analysis (PCA) and Multiple Linear Regression (MLR) statistical tools to evaluate the effect of E-beam irradiation on ready-to-eat food [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2011, **24**(3): 456-464.
- [25] 徐尚平, 陶澍, 徐福留, 等. 内蒙土壤微量元素含量的空间结构特征[J]. 地理学报, 2000, **55**(3): 337-345.
- [26] Sun X L, Wu Y J, Zhang C S, *et al.* Performance of median kriging with robust estimators of the variogram in outlier identification and spatial prediction for soil pollution at a field scale [J]. Science of the Total Environment, 2019, **666**: 902-914.
- [27] Song Y Q, Zhu A X, Cui X S, *et al.* Spatial variability of selected metals using auxiliary variables in agricultural soils [J]. CATENA, 2019, **174**: 499-513.
- [28] Martin M P, Orton T G, Lacarce E, *et al.* Evaluation of modelling approaches for predicting the spatial distribution of soil organic carbon stocks at the national scale [J]. Geoderma, 2014, **223-225**: 97-107.
- [29] Zhang S W, Shen C Y, Chen X Y, *et al.* Spatial interpolation of soil texture using compositional Kriging and regression Kriging with consideration of the characteristics of compositional data and environment variables [J]. Journal of Integrative Agriculture, 2013, **12**(9): 1673-1683.
- [30] 李树辉, 曾希柏, 李莲芳, 等. 设施菜地重金属的剖面分布特征[J]. 应用生态学报, 2010, **21**(9): 2397-2402.
- Li S H, Zeng X B, Li L F, *et al.* Distribution characteristics of heavy metals in soil profile of facility vegetable fields [J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2010, **21**(9): 2397-2402.
- [31] 朱爱萍, 陈建耀, 高磊, 等. 北江上游水环境重金属污染及生态毒性的时空变化[J]. 环境科学学报, 2015, **35**(8): 2487-2496.
- Zhu A P, Chen J Y, Gao L, *et al.* Spatial and temporal variation of heavy metals and their association with ecotoxicity in the upper reaches of Wengjiang river in Beijiang Basin [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2015, **35**(8): 2487-2496.
- [32] 初娜, 赵元艺, 张光弟, 等. 江西省德兴铜矿矿区重金属元素的环境效应[J]. 地质学报, 2008, **82**(4): 562-576.
- [33] 王洋洋, 李方方, 王笑阳, 等. 铅锌冶炼厂周边农田土壤重金属污染空间分布特征及风险评估[J]. 环境科学, 2019, **40**(1): 437-444.
- Wang Y Y, Li F F, Wang X Y, *et al.* Spatial distribution and risk assessment of heavy metal contamination in surface farmland soil around a lead and zinc smelter [J]. Environmental Science, 2019, **40**(1): 437-444.
- [34] 谢南洪, 全纪龙, 刘明, 等. 地表参数设置对高架点源大气污染物扩散预测的影响研究[J]. 环境科学与管理, 2017, **42**(4): 32-36.
- Xie N H, Tong J L, Liu M, *et al.* Study on effect of surface parameter setting on air pollutant diffusion prediction in elevated point source [J]. Environmental Science and Management, 2017, **42**(4): 32-36.
- [35] 李山泉, 杨金玲, 阮心玲, 等. 南京市大气沉降中重金属特征及对土壤环境的影响[J]. 中国环境科学, 2014, **34**(1): 22-29.
- Li S Q, Yang J L, Ruan X L, *et al.* Atmospheric deposition of heavy metals and their impacts on soil environment in typical urban areas of Nanjing [J]. China Environmental Science, 2014, **34**(1): 22-29.
- [36] 罗莹华. 韶关某冶炼厂周边土壤重金属污染调查与生态风险评估[J]. 安徽农业科学, 2016, **44**(19): 133-136.
- Luo Y H. Investigation of soil pollution from heavy metals and assessment of its ecological risk around a smelting plant in Shaoguan [J]. Journal of Anhui Agricultural Sciences, 2016, **44**(19): 133-136.
- [37] 郭尚其, 周洁军, 农泽喜. 广西某铅锌矿水文地质调查与重金属迁移规律研究[J]. 矿产与地质, 2019, **33**(3): 567-572.
- [38] Yuan G L, Sun T H, Han P, *et al.* Environmental geochemical mapping and multivariate geostatistical analysis of heavy metals in topsoils of a closed steel smelter: capital iron & steel factory, Beijing, China [J]. Journal of Geochemical Exploration, 2013, **130**: 15-21.
- [39] Liu J, Wang J, Xiao T F, *et al.* Geochemical dispersal of thallium and accompanying metals in sediment profiles from a smelter-impacted area in South China [J]. Applied Geochemistry, 2018, **88**: 239-246.
- [40] 杨伟光, 王美娥, 陈卫平. 新疆干旱区某矿冶场对周围土壤重金属累积的影响[J]. 环境科学, 2019, **40**(1): 445-452.
- Yang W G, Wang M E, Chen W P. Effect of a mining and smelting plant on the accumulation of heavy metals in soils in arid

- areas in Xinjiang[J]. *Environmental Science*, 2019, **40**(1): 445-452.
- [41] 李润林, 姚艳敏, 唐鹏钦, 等. 县域耕地土壤锌含量的协同克里格插值及采样数量优化[J]. *土壤通报*, 2013, **44**(4): 830-838.
- [42] 韩杏杏, 陈杰, 王海洋, 等. 基于随机森林模型的耕地表层土壤有机质含量空间预测——以河南省辉县市为例[J]. *土壤*, 2019, **51**(1): 152-159.
- [43] 吴健生, 谢舞丹, 李嘉诚. 土地利用回归模型在大气污染时空分异研究中的应用[J]. *环境科学*, 2016, **37**(2): 413-419.
- Wu J S, Xie W D, Li J C. Application of land-use regression models in spatial-temporal differentiation of air pollution[J]. *Environmental Science*, 2016, **37**(2): 413-419.
- [44] Keskin H, Grunwald S. Regression Kriging as a workhorse in the digital soil mapper's toolbox[J]. *Geoderma*, 2018, **326**: 22-41.

《环境科学》连续 9 次荣获 “中国最具国际影响力学术期刊”称号

2020 年 12 月 17 日,中国学术期刊(光盘版)电子杂志社(CNKI)等机构发布“2020 中国最具国际影响力学术期刊”评选结果.《环境科学》荣获“2020 中国最具国际影响力学术期刊”称号,是唯一入选的环境科学与资源科学类中文期刊,也是自首次评选以来连续 9 次获此殊荣.评选以期刊国际影响力指数进行排序,遴选出排名前 5% (Top5%) 的期刊获评“中国最具国际影响力学术期刊”.

环 境 科 学

CONTENTS

Concurrent Collection of Ammonia Gas and Aerosol Ammonium in Urban Beijing During National Celebration Days Utilizing an Acid-Coated Honeycomb Denuder in Combination with a Filter System	GU Meng-na, PAN Yue-peng, SONG Lin-lin, <i>et al.</i> (1)
Heavy Pollution Episode in Tianjin Based on UAV Meteorological Sounding and Numerical Model	YANG Xu, CAI Zi-ying, HAN Su-qin, <i>et al.</i> (9)
Characteristics and Sources of PM _{2.5} Pollution in Typical Cities of the Central Plains Urban Agglomeration in Autumn and Winter	MIAO Qing-qing, JIANG Nan, ZHANG Rui-qin, <i>et al.</i> (19)
Characteristics and Sources of Water-soluble Ion Pollution in PM _{2.5} in Winter in Shenyang	WANG Guo-zhen, REN Wan-hui, YU Xing-na, <i>et al.</i> (30)
Pollution Characteristics and Health Risk Assessment of Heavy Metals in PM _{2.5} Collected in Baoding	LEI Wen-kai, LI Xing-ru, ZHANG Lan, <i>et al.</i> (38)
Source Apportionment of Ambient Carbonyl Compounds Based on a PMF and Source Tracer Ratio Method: A Case Based on Observations in Nanjing	HU Kun, WANG Ming, WANG Hong-li, <i>et al.</i> (45)
Characterization and Source Apportionment of Atmospheric VOCs in Tianjin in 2019	GAO Jing-yun, XIAO Zhi-mei, XU Hong, <i>et al.</i> (55)
Characteristics and Source Apportionment of Ambient VOCs in Spring in Liuzhou	LIU Qi, LU Xing-lin, ZENG Peng, <i>et al.</i> (65)
Characteristics of Ozone and Source Apportionment of the Precursor VOCs in Tianjin Suburbs in Summer	LUO Rui-xue, LIU Bao-shuang, LIANG Dan-ni, <i>et al.</i> (75)
Transport Influence and Potential Sources of Ozone Pollution for Nanjing During Spring and Summer in 2017	XIE Fang-jian, LU Xiao-bo, YANG Feng, <i>et al.</i> (88)
Ozone Pollution Trend in the Pearl River Delta Region During 2006-2019	ZHAO Wei, GAO Bo, LU Qing, <i>et al.</i> (97)
Distribution Characteristics and Source Apportionment of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Atmospheric Deposition in Areas Adjacent to a Large Petrochemical Enterprise	LI Da-yan, QI Xiao-bao, WU Jian, <i>et al.</i> (106)
Quantitative Comparison of Methods to Assess the Airborne Particulate Matter Retention Capacity of Leaves	YUE Chen, LI Guang-de, XI Ben-ye, <i>et al.</i> (114)
Emission Estimation and Fate Simulation of Dichlorvos in the Dongjiang River Watershed	ZHANG Bing, ZHANG Qian-qian, YING Guang-guo (127)
Distribution and Ecological Risk Assessment of Antibiotics in the Songhua River Basin of the Harbin Section and Ashe River	YANG Shang-le, WANG Xu-ming, WANG Wei-hua, <i>et al.</i> (136)
Characteristics and Ecological Risk Assessment of POPs Pollution in Sediments of Xiaoxingkai Lake in the Northeast China	LI Hui, LI Jie, SONG Peng, <i>et al.</i> (147)
Distribution and Ecological Risk Assessment of PPCPs in Drinking Water Sources of Henan Province	ZHOU Ying, WU Dong-hai, LU Guang-hua, <i>et al.</i> (159)
Occurrence Characteristics and Health Risk Assessment of Endocrine Disrupting Chemicals in Groundwater in Wuxi-Changzhou	WANG Shu-ting, RAO Zhu, GUO Feng, <i>et al.</i> (166)
Seasonal Distribution Characteristics and Health Risk Assessment of Heavy Metals in Surface Water of Qingjiang River	LIU Zhao, ZHOU Hong, CAO Wen-jia, <i>et al.</i> (175)
Metal Pollutions and Human Health Risks in Groundwater from Wet, Normal, and Dry Periods in the Huixian Karst Wetland, China	LI Jun, ZHAO Yi, ZOU Sheng-zhang, <i>et al.</i> (184)
Seasonal Variation of DOM Spectral Characteristics of Rivers with Different Urbanization Levels in the Three Gorges Reservoir Area	CHEN Zhao-yu, LI Si-yue (195)
Distribution of Micro-plastics in the Soil Covered by Different Vegetation in Yellow River Delta Wetland	YUE Jun-jie, ZHAO Shuang, CHENG Hao-dong, <i>et al.</i> (204)
Metagenomic Analysis Provides Insights into Bacterial Communities, Antibiotic Resistomes, and Public Health Risks in the Dongping Lake Reservoir	ZHANG Hong-na, CUI Na, SHEN Hong-miao (211)
Mechanism of Algal Community Dynamics Driven by the Seasonal Water Bacterial Community in a Stratified Drinking Water Reservoir	YAN Miao-miao, ZHANG Hai-han, HUANG Ting-lin, <i>et al.</i> (221)
Community Structure, Function, and Influencing Factors of Planktonic Fungi in the Danjiangkou Reservoir	ZHENG Bao-hai, WANG Xiao-yu, LI Ying-jun, <i>et al.</i> (234)
Changes in Algal Particles and Their Water Quality Effects in the Outflow River of Taihu Lake	GUO Yu-long, XU Hai, CHEN Xu-qing, <i>et al.</i> (242)
Characteristics of Soil Nitrogen and Phosphorus Losses Under Different Land-use Schemes in the Shipanqiu Watershed	DENG Hua, GAO Ming, LONG Yi, <i>et al.</i> (251)
Influence of Antecedent Dry Days on Nitrogen Removal in Bioretention Systems	CHEN Yao, LI Xin-rui, ZHENG Shuang, <i>et al.</i> (263)
Effect of <i>Enteromorpha prolifera</i> Biochar on the Adsorption Characteristics and Adsorption Mechanisms of Ammonia Nitrogen in Rainfall Runoff	CHEN You-yuan, LI Pei-qiang, LI Xian-chi, <i>et al.</i> (274)
Effect of Filter Medium on the Enhancement of Complete Autotrophic Nitrogen Removal over Nitrite Process in a Tidal Flow Constructed Wetland	LIU Bing, ZHENG Yu-ming, QIN Hui-an, <i>et al.</i> (283)
Adsorption Effect and Mechanism of Aqueous Arsenic on FeMnNi-LDHs	LIAO Yu-mei, YU Jie, WEI Shi-qiang, <i>et al.</i> (293)
Combined Use of Zirconium-Modified Bentonite Capping and Calcium Nitrate Addition to Control the Release of Phosphorus from Sediments	ZHANG Hong-hua, LIN Jian-wei, ZHAN Yan-hui, <i>et al.</i> (305)
Distribution Characteristics of Antibiotics and Antibiotic Resistance Genes in Wastewater Treatment Plants	XIE Ya-wei, YU Chi-sheng, LI Fei-fei, <i>et al.</i> (315)
Occurrence of Antibiotic Resistance Genes and Bacterial Community Structure of Different Sludge Samples During Microwave Pretreatment-Anaerobic Digestion	LI Hui-li, WU Cai-yun, TANG An-ping, <i>et al.</i> (323)
Selenium Threshold for the Delimitation of Natural Selenium-Enriched Land	WANG Hui-yan, ZENG Dao-ming, GUO Zhi-juan, <i>et al.</i> (333)
Improved Regression Kriging Prediction of the Spatial Distribution of the Soil Cadmium by Integrating Natural and Human Factors	GAO Zhong-yuan, XIAO Rong-bo, WANG Peng, <i>et al.</i> (343)
Simulation Cadmium (Cd) Accumulation in Typical Paddy Soils in South China	DAI Ya-ting, FU Kai-dao, YANG Yang, <i>et al.</i> (353)
Bioaccessibility and Health Risks of the Heavy Metals in Soil-Rice System of Southwest Fujian Province	LIN Cheng-qi, CAI Yu-hao, HU Gong-ren, <i>et al.</i> (359)
Effects of Nano Material on Cadmium Accumulation Capacity and Grain Yield of Indica Hybrid Rice Under Wetting-drying Alternation Irrigation	YANG Ru, CHEN Xin-rui, ZHANG Ying, <i>et al.</i> (368)
Regulation Control of a Tribasic Amendment on the Chemical Fractions of Cd and As in Paddy Soil and Their Accumulation in Rice	JIANG Yi, LIU Ya, GU Jiao-feng, <i>et al.</i> (378)
Combined Effect of Weathered Coal Based Amendments and Soil Water Management on Methylmercury Accumulation in Paddy Soil and Rice Grains	ZHENG Shun-an, WU Ze-ying, DU Zhao-ling, <i>et al.</i> (386)
Effects of Fertilization Strategies on the Cadmium Resistance of Paddy Soil Microorganisms	ZHENG Kai-kai, MA Zhi-yuan, SUN Bo, <i>et al.</i> (394)
Soil Enzyme Activity in <i>Picea schrenkiana</i> and Its Relationship with Environmental Factors in the Tianshan Mountains, Xinjiang	ZHANG Han, GONG Lu, LIU Xu, <i>et al.</i> (403)
Effects of Farmland Abandonment on Soil Enzymatic Activity and Enzymatic Stoichiometry in the Loess Hilly Region, China	ZHONG Ze-kun, YANG Gai-he, REN Cheng-jie, <i>et al.</i> (411)
Effect of Biochar on Soil Enzyme Activity & the Bacterial Community and Its Mechanism	FENG Hui-lin, XU Chen-sheng, HE Huan-hui, <i>et al.</i> (422)
Effects of Vegetation Restoration on the Structure and Function of the Rhizosphere Soil Bacterial Community of <i>Solanum rostratum</i>	ZHANG Rui-hai, SONG Zhen, FU We-dong, <i>et al.</i> (433)
Response of Microbial Biomass Carbon and Nitrogen and Rice Quality in a Yellow Soil Paddy Field to Biochar Combined with Nitrogen Fertilizer	SHI Deng-lin, WANG Xiao-li, LIU An-kai, <i>et al.</i> (443)
Effects of Adding Straw and Biochar with Equal Carbon Content on Soil Respiration and Microbial Biomass Carbon and Nitrogen	HE Tian-tian, WANG Jing, FU Yun-peng, <i>et al.</i> (450)
How Different Ratios of Straw Incorporation to Nitrogen Fertilization Influence Endogenous and Exogenous Carbon Release from Agricultural Soils	SUN Zhao-an, ZHANG Xuan, HU Zheng-jiang, <i>et al.</i> (459)
Effect of Biochar and Chemical Fertilizer Mixture on Ammonia Volatilization and Phosphorus Fixation	YANG Wen-na, DENG Zhen-xin, LI Jiao, <i>et al.</i> (467)
Effects of Film Materials on Ammonia Volatilization Emissions from a Paddy System After Reducing Nitrogen Fertilizer Application	YU Ying-liang, WANG Meng-fan, YANG Bei, <i>et al.</i> (477)
Effects of Microplastics on Embryo Hatching and Intestinal Accumulation in Larval Zebrafish <i>Danio rerio</i>	ZHAO Jia, RAO Ben-qiang, GUO Xiu-mei, <i>et al.</i> (485)
Urban Micro-Scale Thermal Environment Simulation Supported by UAV Thermal Infrared Data	YANG Shao-qi, FENG Li, TIAN Hui-hui, <i>et al.</i> (492)
Estimation of the Urban Heat Island Intensity Change and Its Relationships with Driving Factors Across China Based on the Human Settlement Scale	SUN Yan-wei, WANG Run, GUO Qing-hai, <i>et al.</i> (501)