

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

PM_{2.5} 化学组成

SO₄²⁻ NH₄⁺ NO₃⁻
元素碳 Cl⁻ 有机物 地壳元素

源解析

二次
颗粒物

机动车

扬尘

工业

燃煤

生物质
燃烧



■ 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} 载体金属元素污染特征、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氨挥发的影响	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)	

基于贝叶斯理论的小麦籽粒镉铅超标风险预测

王天齐^{1,2}, 李艳玲^{1,2}, 杨阳^{1*}, 牛硕^{1,3}, 王美娥¹, 陈卫平^{1,2}

(1. 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; 2. 中国科学院大学, 北京 100049; 3. 郑州大学河南先进技术研究院, 郑州 450003)

摘要: 对农作物污染风险进行预测具有重大意义. 基于贝叶斯定理及数据分布特征, 建立了贝叶斯风险预测模型, 并使用区域大田调查土壤-小麦重金属含量数据, 预测小麦籽粒 Cd 和 Pb 超标风险并验证该模型的准确度. 结果表明, 该模型预测小麦籽粒 Cd 超标风险时相对偏差较小, 以小麦籽粒 Cd 含量为变量的预测相对偏差仅为 $(2.66 \pm 1.87)\%$, 以土壤 DTPA-Cd 含量和土壤 Cd 全量为变量时预测相对偏差则分别为 $(5.11 \pm 3.77)\%$ 和 $(5.88 \pm 3.87)\%$, 3 个变量均能使预测结果与真实超标概率的平均相对偏差小于 10%. 预测小麦籽粒 Pb 超标风险时, 仅小麦籽粒 Pb 含量的预测相对偏差小于 10%. 数据来源、数据分布特征和变量的选择是影响贝叶斯风险预测模型预测相对偏差的重要因素. 该模型基于大田数据的先验分布, 能够有效反映大田生产条件下小麦籽粒重金属与土壤因子间的相互关系, 预测较准确, 具有应用潜力.

关键词: 贝叶斯理论; 预测模型; 小麦; 镉(Cd); 铅(Pb)

中图分类号: X171.5 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2022)05-2751-07 DOI: 10.13227/j.hjks.202109085

Risk Prediction of Cadmium and Lead in Wheat Grains Based on Bayes Theorem

WANG Tian-qi^{1,2}, LI Yan-ling^{1,2}, YANG Yang^{1*}, NIU Shuo^{1,3}, WANG Mei-e¹, CHEN Wei-ping^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Urban and Regional Ecology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; 3. Henan Institute of Advanced Technology, Zhengzhou University, Zhengzhou 450003, China)

Abstract: Wheat plants have been reported to accumulate high concentrations of potentially toxic trace elements such as cadmium (Cd) and lead (Pb). Such Cd-contaminated wheat grains present serious public health challenges for local populations in China. Therefore, it is necessary to establish a risk forewarning method for the accumulation of Cd and Pb in wheat grain caused by contaminated soils. In this study, a Bayesian risk prediction model was established based on Bayes theorem and the dataset from field investigations. The results indicated that the proposed model could accurately predict the probability of the concentration of Cd in wheat grain exceeding the national safety limit. The concentration of Cd in rice grain could be better estimated by using the soil total Cd, DTPA extractable Cd, and wheat grain Cd as the variables, with their predicted deviations of $(5.88 \pm 3.87)\%$, $(5.11 \pm 3.77)\%$, and $(2.66 \pm 1.87)\%$, respectively. Only the Pb in wheat grain showed better results with a low predicted deviation value of $(8.06 \pm 5.52)\%$. Soil total Pb and DTPA-Pb were not suitable for predicting the standard-exceeding risk of wheat grain Pb, with deviations of $(12.8 \pm 8.05)\%$ and $(13.8 \pm 7.09)\%$, respectively. The data source, data distribution characteristics, and selected variables were the key factors affecting the prediction accuracy of the Bayesian risk prediction model. Similar distributions of the prior and posterior data and high correlation coefficients between the soil variables and the concentrations of heavy metals in the wheat grain contents contributed to the minimization of model uncertainty. The proposed Bayesian risk prediction model was reliable and did not lead to over- or under-conservative predictions of the pollution of Cd and Pb in wheat grain caused by contaminated soils, which could be also extended to cover other contaminants and contaminated areas.

Key words: Bayes theorem; prediction model; wheat; cadmium (Cd); lead (Pb)

重金属镉(Cd)和铅(Pb)为生物非必需元素, 具有较强生物毒性, 并通过食物链对人体产生毒害^[1]. 近年来我国北方地区小麦 Cd 和 Pb 超标事件频发. 宝鸡市工业园区附近小麦籽粒 Cd 和 Pb 超标率分别达 22.6% 和 48.4%^[2]. 济源市部分地区小麦籽粒 Cd 和 Pb 超标率均达 100%^[3], Cd 致癌风险 100% 超过国际推荐安全值^[4]. 准确预测小麦籽粒 Cd 和 Pb 超标风险, 能够保障农产品质量安全, 维护区域民众健康, 有巨大的生态-社会-经济效益^[5].

当前内梅罗指数法^[6]、潜在生态风险指数法^[7]、地累积指数法^[8]和健康风险评价模型^[9,10]等多种方法在农田污染风险评价研究中应用, 然而土壤-农作物系统重金属累积过程复杂, 影响因子较多, 以上方法难以准确预测农作物重金属超标风险. 近年来, 基于多元回归分析方法的经验模型

(Extended Freundlich 模型等)和基于反映过程的机制模型(自由离子活度模型 FIAM、生物配体模型 BLM 等)受到广泛关注^[11~14]. 其中经验模型计算较简便, 但变量较简单, 缺乏普适性; 机制模型能够有效解释重金属在农田环境中的环境行为, 但数据要求高、参数较多且建模难度大, 难以推广应用^[15~17]. 另外, 经验模型与机制模型所用参数常常基于温室实验或小区实验, 实验环境较为单一, 涉及土壤因子较少, 模型运行结果存在很大不确定性, 难以反映真实田间情况^[18,19]. 如何基于现有大田观测

收稿日期: 2021-09-09; 修订日期: 2021-09-27

基金项目: 国家自然科学基金项目(41907353); 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项目(SKLURE2020-2-5)

作者简介: 王天齐(1992~), 男, 博士研究生, 主要研究方向为小麦降镉技术, E-mail: tqwang_st@rcees.ac.cn

* 通信作者, E-mail: yyang@rcees.ac.cn

数据进行农作物污染风险预测具有重大意义。

贝叶斯理论重视先验数据的收集和信息挖掘,通过先验数据的分布特征进行统计推断,提高统计推断的准确性,能够有效解决小麦籽粒重金属与土壤因子间的多因素非线性相应关系,且能够充分利用已有调查数据,适用性强,易于推广^[20]。基于贝叶斯理论的模型已在生态风险评价和人体健康风险评价等领域开展应用^[21~24],但在农作物重金属累积风险方面应用较少^[25]。本研究基于区域大田调查土壤-小麦重金属含量数据,结合贝叶斯定理和数据分布特征,建立小麦籽粒重金属含量的贝叶斯风险预测模型,并探讨不同变量下该模型准确度及其影响因素。

1 材料与方法

1.1 区域大田调查

区域大田调查地点位于河南省济源市东部平原。济源市位于河南省西北部,是亚洲最大的铅锌深加工基地,也是我国重要小麦产区^[26]。工矿企业活动导致该地土壤 Cd 和 Pb 等重金属长期积累,并对当地小麦安全生产造成严重影响,引发研究人员广泛关注^[27,28]。

2017 年冬小麦成熟期前,在济源市市区周边农田采集 113 对冬小麦籽粒-根际土壤样品。区域大田调查点位见文献^[4]。采样时,收集冬小麦植株的麦穗部分并采集对应的耕作层根部土壤(0~20 cm)。

1.2 样品分析

将小麦麦穗用自来水洗净后,去离子水反复清洗 3~5 遍,105℃杀青 30 min 后 65℃烘至恒重,脱壳后粉碎过 40 目筛,混匀备用。土壤经风干后,分别过 2 mm 和 100 目筛后混匀待用。土壤 pH 使用电极法测定,土水比为 1:2.5。使用 HNO₃-HClO₄ 法消解植物样品^[29],HCl-HNO₃-HF-HClO₄ 四酸法消解土壤样品^[30]以测定样品 Cd 和 Pb 含量;使用 DTPA 提取剂(0.005 mol·L⁻¹ DTPA-0.01 mol·L⁻¹ CaCl₂-0.1 mol·L⁻¹ TEA,pH=7.3,固液比 1:2)浸提以测定土壤 DTPA 提取态 Cd 和 Pb 含量^[31]。上述测定过程中均设置试剂空白和平行样(≥10%)进行质量控制。应用 ICP-MS(7500A,安捷伦,美国)和 ICP-OES(Optima 8300,珀金埃尔默,美国)分别测定 Cd 和 Pb 含量。样品全量测定过程中应用标准物质(GBW 10046 河南小麦,GBW 07427 华北平原土壤)设置质量控制,测得空白加标回收率为 87.7%~106%。

1.3 基于贝叶斯理论的风险预测模型

贝叶斯定理如公式(1)所示,用于计算随机事

件 B 发生的情况下随机事件 A 发生的条件概率 $P(A_i | B)$:

$$P(A_i | B) = \frac{P(B | A_i)P(A_i)}{\sum_{j=1}^n P(B | A_j)P(A_j)} \quad (1)$$

($i, j = 1, 2, \dots, n$)

式中, $P(A)$ 为随机事件 A 发生的先验概率, $P(B | A)$ 为事件 A 发生后随机事件 B 发生的条件概率, $P(A | B)$ 为事件 B 发生后随机事件 A 发生的条件概率,即随机事件 A 发生的后验概率。

基于贝叶斯理论,以土壤因子 C 为变量预测小麦籽粒重金属 M 超标风险概率方法为:①依据数据分布类型,对其进行适当转换以使其呈正态分布;本研究中数据呈偏态分布,因此对数据进行对数转换以使其呈正态分布;②随机取 n 对根际土壤-小麦籽粒样本作为先验数据,其余样本作为后验数据;按照小麦籽粒重金属 M 含量是否超标,将先验数据 n 对样本分为达标样品 n_1 个和超标样品 ($n - n_1$) 个,并将其作为贝叶斯模型先验分布;③建立先验数据的正态分布密度函数,计算超标条件和达标条件下土壤 Cd 含量平均值和标准差;④根据先验数据的分布密度函数,建立贝叶斯风险预测模型:

$$P = \left[\frac{n - n_1}{n} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \times \exp - \frac{(x - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \right] \div \left[\frac{n_1}{n} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \times \exp - \frac{(x - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{n - n_1}{n} \times \frac{2}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \times \exp - \frac{(x - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \right] \quad (2)$$

式中, P 为小麦籽粒重金属 M 含量超标的贝叶斯风险概率; n_1/n 和 $(n - n_1)/n$ 分别为先验数据中小麦籽粒重金属 M 含量达标率和超标率; μ_1 和 σ_1 分别为先验数据中小麦籽粒重金属 M 含量达标条件下土壤因子 C 的平均值和标准差; μ_2 和 σ_2 分别为先验数据中小麦籽粒重金属 M 含量超标条件下土壤因子 C 的平均值和标准差; x 为后验数据中土壤因子 C 数据。

1.4 数据处理

使用 Pearson 相关系数进行相关性分析;应用 K-S 检验数据的正态分布。使用 Microsoft Excel 2016、SPSS Statistics 21 和 Origin 2018 进行数据统计、分析和制图等处理。

2 结果与讨论

2.1 区域大田调查小麦籽粒 Cd 和 Pb 污染状况

区域大田调查小麦籽粒和各项土壤因子数据如表 1 所示。研究区内小麦籽粒 $\omega(\text{Cd})$ 平均值为

0.200 mg·kg⁻¹, 高于《食品安全国家标准 食品中污染物限量 (GB 2762-2012)》限值 (0.1 mg·kg⁻¹)^[32], 超标率达 57.5% (65/113); 籽粒 ω(Pb) 平均值为 0.177 mg·kg⁻¹, 低于标准 (GB 2762-2012) 限值 (0.2 mg·kg⁻¹), 超标率为 44.2% (50/113). 各项数据均呈偏态分布.

Pearson 相关系数分析结果如表 2 所示. 小麦籽粒 Cd 与土壤 pH 显著负相关, 这与前人的研究结果相似, 即碱性环境能够抑制 Cd²⁺ 活性, 降低其生物有效性和移动性, 进而减少 Cd 在小麦籽粒中积累^[33,34]. 小麦籽粒重金属含量与土壤重金属含量显著 ($P < 0.01$) 相关, 其中小麦籽粒 Cd 与土壤重金属含量的相关性高于籽粒 Pb 与土壤重金属的相关性. 小麦籽粒 Cd 与土壤 Cd 全量 Pearson 相关系数为 0.895 ($P < 0.01$), 略高于与 DTPA-Cd 含量相关系数 ($r = 0.884$, $P < 0.01$), 即小麦籽粒 Cd 与土壤 Cd 全

量相关性更高^[35,36]. 小麦籽粒 Pb 与土壤 Pb 全量的 Pearson 相关系数为 0.504 ($P < 0.01$), 略高于与 DTPA-Pb 含量相关系数 ($r = 0.499$, $P < 0.01$), 即小麦籽粒 Pb 与土壤 Pb 全量相关性更高, 这与 Cd 类似.

研究区部分点位 Pb 大气沉降通量高达 $1.08 \times 10^3 \text{ mg} \cdot (\text{m}^2 \cdot \text{a})^{-1}$ ^[37], 是全国农田土壤 Pb 大气沉降输入通量均值^[38] [$22.0 \text{ mg} \cdot (\text{m}^2 \cdot \text{a})^{-1}$] 的 53.5 倍. 李艳玲等^[39]的研究指出 Cd 和 Pb 污染主要来源于铅锌企业废气排放, 降尘中 Pb 有效性高于 Cd 有效性^[40]. Pb 同位素分析则进一步表明, 研究区大气沉降对小麦籽粒 Pb 含量的贡献率高达 77%, 而土壤的贡献率仅为 23%^[41], 即小麦籽粒更易受到大气沉降 Pb 的影响. 综上可知, 由于研究区大气 Pb 沉降污染特性, 小麦籽粒 Pb 含量与土壤重金属含量相关性不高, 受土壤因子影响较小; 而小麦籽粒 Cd 含量与土壤 Cd 含量高度相关, 受土壤因子影响更大.

表 1 区域大田调查样品 pH 和重金属含量

Table 1 Sample pH and heavy metal contents from the regional field investigation							
项目	土壤 pH	$\omega/\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$					
		土壤 Cd	DTPA-Cd	土壤 Pb	DTPA-Pb	籽粒 Cd	籽粒 Pb
平均值	7.80	1.42	0.981	92.7	21.7	0.200	0.177
标准差	0.232	1.98	1.38	66.8	22.4	0.171	0.102
最小值	6.88	0.200	0.049 4	23.1	1.24	0.021 6	0.020 1
最大值	8.37	17.8	11.7	379	132	0.947	0.420
变异系数/%	2.98	139	140	72.1	103	85.2	57.4

表 2 小麦籽粒 Cd 和 Pb 含量与土壤因子的相关关系¹⁾

Table 2 Relationship between wheat grain Cd, Pb, and soil factors		
	小麦籽粒 Cd 含量	小麦籽粒 Pb 含量
土壤 pH	-0.347 **	0.054 1
土壤 Cd 全量	0.895 **	0.336 **
土壤 DTPA-Cd 含量	0.884 **	0.388 **
土壤 Pb 全量	0.852 **	0.504 **
土壤 DTPA-Pb 含量	0.870 **	0.499 **
小麦籽粒 Cd 含量	—	0.476 **
小麦籽粒 Pb 含量	0.476 **	—

1) ** 为 $P < 0.01$ (双侧)

2.2 预测小麦籽粒 Cd 超标风险

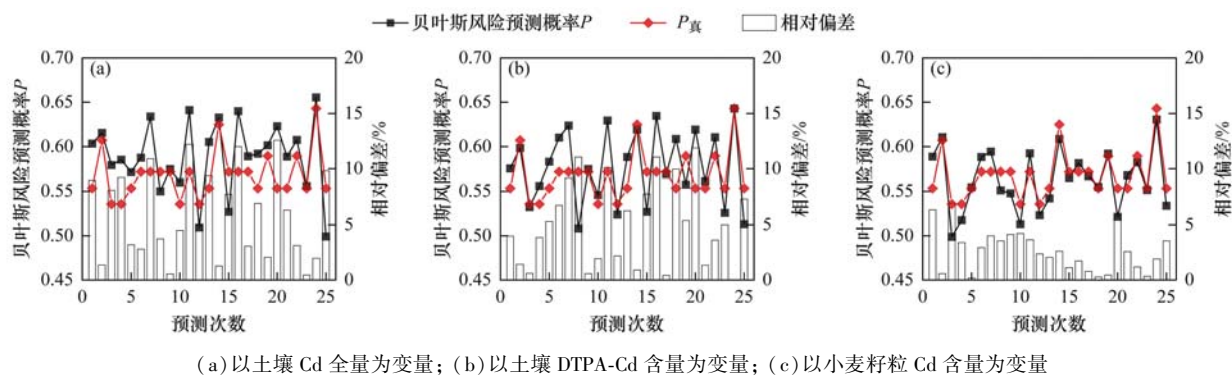
在先验数据满足正态分布 (经对数转换) 的前提下, 随机抽取 57 对样品作为先验数据, 其余 56 对为后验数据. 由于小麦籽粒 Cd 含量与土壤 Cd 全量和 DTPA-Cd 含量的相关性更高 (表 2), 因此筛选土壤 Cd 全量、土壤 DTPA-Cd 含量和小麦籽粒 Cd 含量这 3 个指标作为贝叶斯风险预测模型变量. 第一次随机抽样后, 根据先验数据计算得到贝叶斯风险预测模型的相关参数见表 3, 根据后验数据计算得到小麦籽粒 Cd 真实超标概率 $P_{\text{真}}$ 为 0.554. 将对应参数和后验数据代入公式 (2), 得到小麦籽粒 Cd 含量的预测超标风险概率 $P = 0.603$ (以土壤 Cd 全量为变量), 与小麦籽粒 Cd 真实超标概率 ($P_{\text{真}} =$

0.554) 对比, 相对偏差为 8.99% [图 1(a)]. 以土壤 DTPA-Cd 含量和小麦籽粒 Cd 含量为变量时, 相对偏差分别为 3.95% [图 1(b)] 和 6.34% [图 1(c)]. 可知以土壤 Cd 全量、DTPA-Cd 含量和小麦籽粒 Cd 含量为变量的贝叶斯风险预测较准确, 相对偏差均小于 10%.

对 113 对样品共进行 25 次不重复随机抽样, 并计算相应贝叶斯风险预测概率 (图 1). 以土壤 Cd 全量为变量时, 预测小麦籽粒 Cd 超标风险概率 (P) 变化范围为 0.499 ~ 0.655, 与真实超标概率 ($P_{\text{真}}$ 为 0.536 ~ 0.643) 相对偏差为 $(5.88 \pm 3.87)\%$ [图 1(a)]; 以土壤 DTPA-Cd 含量为变量时, 相对偏差为 $(5.11 \pm 3.77)\%$ [图 1(b)]; 以小麦籽粒 Cd 含量为变量时预测准确度最高, 相对偏差仅为 $(2.66 \pm 1.87)\%$ [图 1(c)]. 可见在应用贝叶斯风险模型预测时, 单次预测的相对偏差波动较大, 增加预测次数可提高预测稳定性; 3 个变量预测结果相对偏差由小及大排序为: 小麦籽粒 Cd 含量 < 土壤 DTPA-Cd 含量 < 土壤 Cd 全量.

2.3 预测小麦籽粒 Pb 超标风险

根据相关性分析结果 (表 2), 筛选土壤 Pb 全量、土壤 DTPA-Pb 含量和小麦籽粒 Pb 含量 3 个指



(a)以土壤 Cd 全量为变量; (b)以土壤 DTPA-Cd 含量为变量; (c)以小麦籽粒 Cd 含量为变量

图 1 贝叶斯风险预测模型预测的小麦籽粒 Cd 超标概率

Fig. 1 Results of the Bayesian risk prediction model on wheat grain Cd

表 3 第一次随机抽样后的贝叶斯 Cd 超标风险预测模型参数

Table 3 Parameters of the Bayesian risk prediction model for Cd after the first random sampling

模型参数	土壤 Cd 全量	土壤 DTPA-Cd 含量	小麦籽粒 Cd 含量
n_1/n	0.404 (23/57)	0.404 (23/57)	0.404 (23/57)
$(n - n_1)/n$	0.596 (34/57)	0.596 (34/57)	0.596 (34/57)
μ_1	-0.331	-0.635	-1.24
σ_1	0.185	0.277	0.162
μ_2	0.194	0.0435	-0.596
σ_2	0.309	0.371	0.245

标作为贝叶斯风险预测模型变量.第一次随机抽样后计算得模型相关参数如表 4 所示,根据后验数据计算得到小麦籽粒 Pb 真实超标概率 $P_{真}$ 为 0.411. 将对应参数和后验数据代入公式(2),预测小麦籽粒 Pb 含量超标风险概率为 0.484 (P ,以土壤 Pb 全量为变量),与后验数据中小麦籽粒 Pb 真实超标概率 0.411 ($P_{真}$)对比,相对偏差为 18.0% [图 2(a)];以土壤 DTPA-Pb 含量为变量时,第一次预测结果 $P=0.484$,相对偏差为 17.9% [图 2(b)];以小麦籽粒 Pb 含量为变量时,第一次预测结果 $P=0.438$,相对偏差为 6.65% [图 2(c)].参考 25 次随机抽样后的贝叶斯风险预测概率(图 2),可知仅有小麦籽粒 Pb 含量预测结果较准确,相对偏差小于 10% [(8.06 ± 5.52)%].土壤 Pb 全量[相对偏差(12.8

± 8.05)%]和土壤 DTPA-Pb 全量[相对偏差(13.8 ± 7.09)%]不适于预测小麦籽粒 Pb 超标风险.

对比图 1 和图 2 可知,贝叶斯风险预测模型能够准确预测小麦籽粒 Cd 超标风险,土壤 Cd 全量、土壤 DTPA-Cd 含量和小麦籽粒 Cd 含量这 3 个变量的预测结果与真实值的平均相对偏差均小于 10%,其中小麦籽粒 Cd 含量作为变量时预测相对偏差最小 [(2.66 ± 1.87)%];而预测小麦籽粒 Pb 含量时,仅小麦籽粒 Pb 含量预测相对偏差小于 10% [(8.06 ± 5.52)%],即使用小麦籽粒 Pb 含量作为变量预测籽粒 Pb 超标风险较为准确.

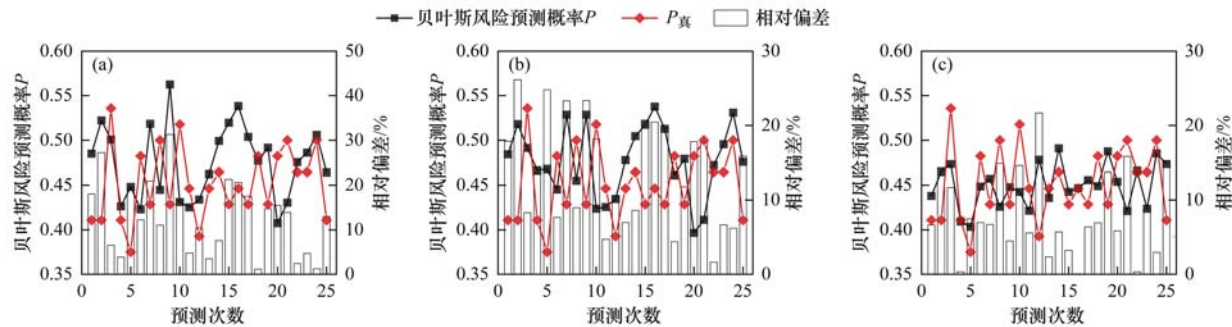
表 4 第一次随机抽样后的贝叶斯 Pb 超标风险预测模型参数

Table 4 Parameters of the Bayesian risk prediction model for Pb after the first random sampling

模型参数	土壤 Pb 全量	土壤 DTPA-Pb 含量	小麦籽粒 Pb 含量
n_1/n	0.526 (30/57)	0.526 (30/57)	0.526 (30/57)
$(n - n_1)/n$	0.474 (27/57)	0.474 (27/57)	0.474 (27/57)
μ_1	1.72	0.866	-1.04
σ_1	0.185	0.350	0.302
μ_2	2.05	1.40	-0.578
σ_2	0.280	0.440	0.093 5

2.4 贝叶斯风险预测模型准确度的影响因素

通过区域大田调查数据随机抽样分组、参数计算和模型预测,本文构建的贝叶斯风险预测模型能



(a)以土壤 Pb 全量为变量; (b)以土壤 DTPA-Pb 含量为变量; (c)以小麦籽粒 Pb 含量为变量

图 2 贝叶斯风险预测模型预测的小麦籽粒 Pb 超标概率

Fig. 2 Results of the Bayesian risk prediction model on wheat grain Pb

够准确预测小麦籽粒 Cd 和 Pb 超标概率,控制部分变量的预测相对偏差在 10% 以内,说明贝叶斯风险预测模型具有较大应用潜力。在模型构建和验证过程中,有多个因素影响贝叶斯风险预测模型的准确度和不确定性。

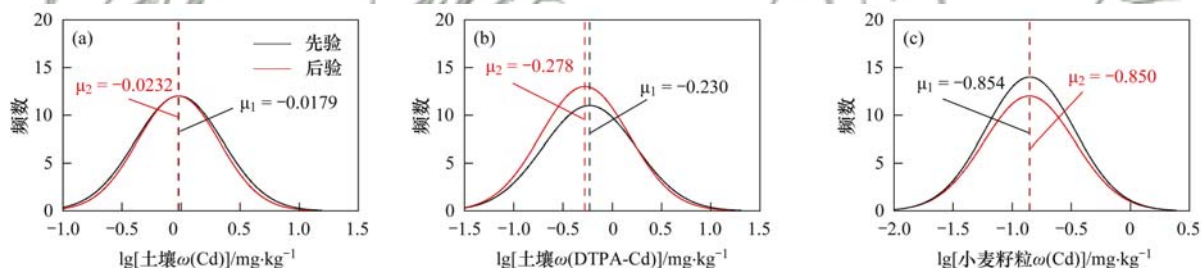
先验分布是贝叶斯统计方法的重要基础。Qing 等^[42]的研究应用贝叶斯模型结合相关研究建议的数据进行中国人群健康风险评估,发现模拟结果存在较大不确定性。而在筛选和优化先验数据来源后,预测偏差显著降低。本研究中数据来源为区域调查,样点数量较多且分布广泛,可有效反映实际情况,因此模型预测结果相对偏差较小。

Wu 等^[43]的研究以土壤 Cd 全量为变量,应用贝叶斯模型预测了稻米 Cd 超标概率。本研究进一步发现土壤 Cd 全量、DTPA-Cd 含量和小麦籽粒 Cd 含量这 3 个变量先验和后验数据分布特征较为一致,因此均可有效预测小麦籽粒 Cd 超标概率(图 1),且数据分布越接近,预测相对偏差越小(图 3)。可见贝叶斯模型的准确度与数据分布特征显著相关。

变量选择对模型预测结果也有一定影响。成永霞等^[44]的研究指出大气沉降 Pb 是土壤 Pb 累积的

关键因素,即小麦籽粒 Pb 含量受土壤因子以外因素影响,这与相关性分析结果一致(表 2),因此本研究预测小麦籽粒 Pb 的相对偏差大于预测小麦籽粒 Cd [图 1(a)、1(b)和图 2(a)、2(b)],即相关性越高,表明小麦籽粒受相关因子的影响越大,以该因子为变量的贝叶斯风险预测模型就越准确。综上可知应用贝叶斯风险预测模型时,应当考虑区域污染因素,结合相关性分析筛选变量以降低预测的不确定性。

综上,数据来源、数据分布特征和变量的选择是影响贝叶斯风险预测模型相对偏差的重要因素。使用大田调查数据、选取与被预测量相关性较高的土壤因子为变量有助于提高贝叶斯风险预测模型的准确度,降低预测值与真实值的相对偏差。由于贝叶斯风险预测模型基于先验数据分布特征,这使得贝叶斯风险预测模型相较于经验模型和机制模型适用性更加广泛,能够充分利用已有大田调查数据,人为干扰低^[45],能够有效反映大田生产情况,具有较大的应用潜力。贝叶斯风险预测模型推广应用到其他区域时,需要注意以下前提:先验数据和后验数据来源于相似的环境条件^[43],具有相似的分布特征^[46],总体样本量较大并选择合适的变量^[47]。



(a) 以土壤 Cd 全量为变量; (b) 以土壤 DTPA-Cd 含量为变量; (c) 以小麦籽粒 Cd 含量为变量

图 3 第一次随机抽样时的先验和后验数据分布

Fig. 3 Prior and posterior data distribution characteristics of the first random sampling

3 结论

(1) 本研究基于贝叶斯定理和数据分布特征,建立并验证了贝叶斯风险预测模型的准确性。

(2) 该模型预测小麦籽粒 Cd 超标风险时,可选取土壤 Cd 全量、土壤 DTPA-Cd 含量和小麦籽粒 Cd 含量作为变量,预测结果与真实超标概率的平均相对偏差均小于 10%。预测小麦籽粒 Pb 超标风险时,仅有以小麦籽粒 Pb 含量为变量的模型能够准确预测,相对偏差小于 10%;土壤 Pb 全量和土壤 DTPA-Pb 含量不适于作为变量预测小麦籽粒 Pb 超标风险。

(3) 使用大田调查数据及变量与小麦籽粒 Cd 和 Pb 含量间良好的相关性有助于降低贝叶斯风险预测模型的预测相对偏差。

参考文献:

- [1] Zhao A Q, Tian X H, Lu W H, *et al.* Effect of zinc on cadmium toxicity in winter wheat[J]. *Journal of Plant Nutrition*, 2011, **34** (9): 1372-1385.
- [2] Zhang R, Chen T, Zhang Y, *et al.* Health risk assessment of heavy metals in agricultural soils and identification of main influencing factors in a typical industrial park in northwest China [J]. *Chemosphere*, 2020, **252**, doi: 10.1016/j.chemosphere.2020.126591.
- [3] Li L P, Zhang Y Q, Ippolito J A, *et al.* Lead smelting effects heavy metal concentrations in soils, wheat, and potentially humans[J]. *Environmental Pollution*, 2020, **257**, doi: 10.1016/j.envpol.2019.113641.
- [4] 李艳玲, 陈卫平, 杨阳, 等. 济源市平原区农田重金属污染特征及综合风险评估[J]. *环境科学学报*, 2020, **40** (6): 2229-2236.
- Li Y L, Chen W P, Yang Y, *et al.* Heavy metal pollution characteristics and comprehensive risk evaluation of farmland across the eastern plain of Jiyuan City [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2020, **40** (6): 2229-2236.

- [5] 陈卫平, 杨阳, 谢天, 等. 中国农田土壤重金属污染防治挑战与对策[J]. 土壤学报, 2018, **55**(2): 261-272.
Chen W P, Yang Y, Xie T, *et al.* Challenges and countermeasures for heavy metal pollution control in farmlands of China[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2018, **55**(2): 261-272.
- [6] 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.
- [7] Hakanson L. An ecological risk index for aquatic pollution control. a sedimentological approach [J]. *Water Research*, 1980, **14**(8): 975-1001.
- [8] Müller G. Index of geoaccumulation in sediments of the Rhine River[J]. *GeoJournal*, 1969, **2**(3): 109-118.
- [9] 肖冰, 薛培英, 韦亮, 等. 基于田块尺度的农田土壤和小麦籽粒镉铅污染特征及健康风险评价[J]. 环境科学, 2020, **41**(6): 2869-2877.
Xiao B, Xue P Y, Wei L, *et al.* Characteristics of Cd, As, and Pb in soil and wheat grains and health risk assessment of grain-Cd/As/Pb on the field scale[J]. *Environmental Science*, 2020, **41**(6): 2869-2877.
- [10] Jiang Y L, Ma J H, Ruan X L, *et al.* Compound health risk assessment of cumulative heavy metal exposure: a case study of a village near a battery factory in Henan Province, China[J]. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 2020, **22**(6): 1408-1422.
- [11] 王怡雯, 芮玉奎, 李中阳, 等. 冬小麦吸收重金属特征及与影响因素的定量关系[J]. 环境科学, 2020, **41**(3): 1482-1490.
Wang Y W, Rui Y K, Li Z Y, *et al.* Characteristics of heavy metal absorption by winter wheat and its quantitative relationship with influencing factors[J]. *Environmental Science*, 2020, **41**(3): 1482-1490.
- [12] 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.
- [13] 管伟豆, 肖然, 李荣华, 等. 土壤镉污染北方小麦生产阈值及产区划分初探[J]. 农业环境科学学报, 2021, **40**(5): 969-977.
Guan W D, Xiao R, Li R H, *et al.* Investigations on the derivation of a safe wheat-producing threshold of soil Cd content and classification of Cd contaminated wheat-producing areas in northern China[J]. *Journal of Agro-Environment Science*, 2021, **40**(5): 969-977.
- [14] Luo X R, Wang X D, Tang Y J, *et al.* Using quantitative ion character-activity relationship (QICAR) method in evaluation of metal toxicity toward wheat[J]. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2021, **221**, doi: 10.1016/j.ecoenv.2021.112443.
- [15] 孙晋伟, 黄益宗, 石孟春, 等. 土壤重金属生物毒性研究进展[J]. 生态学报, 2008, **28**(6): 2861-2869.
Sun J W, Huang Y Z, Shi M C, *et al.* The review of heavy metals biotoxicity in soil[J]. *Acta Ecologica Sinica*, 2008, **28**(6): 2861-2869.
- [16] 刘克, 和文祥, 张红, 等. 镉在小麦各部位的富集和转运及籽粒镉含量的预测模型[J]. 农业环境科学学报, 2015, **34**(8): 1441-1448.
Liu K, He W X, Zhang H, *et al.* Cadmium accumulation and translocation in wheat and grain Cd prediction[J]. *Journal of Agro-Environment Science*, 2015, **34**(8): 1441-1448.
- [17] 和君强, 刘代欢, 邓林, 等. 农田土壤镉生物有效性及暴露评估研究进展[J]. 生态毒理学报, 2017, **12**(6): 69-82.
He J Q, Liu D H, Deng L, *et al.* Bioavailability and exposure assessment of cadmium in farmland soil: a review[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2017, **12**(6): 69-82.
- [18] 曾希柏, 徐建明, 黄巧云, 等. 中国农田重金属问题的若干思考[J]. 土壤学报, 2013, **50**(1): 186-194.
Zeng X B, Xu J M, Huang Q Y, *et al.* Some deliberations on the issues of heavy metals in farmlands of China[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2013, **50**(1): 186-194.
- [19] Yang Y, Wang M E, Chang A C, *et al.* Inconsistent effects of limestone on rice cadmium uptake: results from multi-scale field trials and large-scale investigation [J]. *Science of the Total Environment*, 2020, **709**, doi: 10.1016/j.scitotenv.2019.136226.
- [20] 窦韦强, 安毅, 秦莉, 等. 农用地土壤重金属生态安全阈值确定方法的研究进展[J]. 生态毒理学报, 2019, **14**(4): 54-64.
Dou W Q, An Y, Qin L, *et al.* Research progress in determination methods of ecological safety thresholds for heavy metals in agricultural land[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2019, **14**(4): 54-64.
- [21] Voie Ø A, Johnsen A, Strömseng A, *et al.* Environmental risk assessment of white phosphorus from the use of munitions-a probabilistic approach[J]. *Science of the Total Environment*, 2010, **408**(8): 1833-1841.
- [22] Hayashi T I, Kashiwagi N. A Bayesian approach to probabilistic ecological risk assessment: risk comparison of nine toxic substances in Tokyo surface waters[J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2011, **18**(3): 365-375.
- [23] Jiménez-Oyola S, García-Martínez M J, Ortega M F, *et al.* Multi-pathway human exposure risk assessment using Bayesian modeling at the historically largest mercury mining district[J]. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2020, **201**, doi: 10.1016/j.ecoenv.2020.110833.
- [24] Li Z J. A theorem on a product of lognormal variables and hybrid models for children's exposure to soil contaminants [J]. *Environmental Pollution*, 2020, **263**, doi: 10.1016/j.envpol.2020.114393.
- [25] 徐晶晶, 吴波, 张玲妍, 等. 基于贝叶斯方法的湖南湘潭稻米 Cd 超标风险评估[J]. 应用生态学报, 2016, **27**(10): 3221-3227.
Xu J J, Wu B, Zhang L Y, *et al.* Risk assessment of cadmium in rice in Xiangtan, Hunan, China based on Bayesian method[J]. *Chinese Journal of Applied Ecology*, 2016, **27**(10): 3221-3227.
- [26] Guo G H, Lei M, Wang Y W, *et al.* Accumulation of As, Cd, and Pb in sixteen wheat cultivars grown in contaminated soils and associated health risk assessment [J]. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 2018, **15**(11), doi: 10.3390/ijerph15112601.
- [27] Li X F. Technical solutions for the safe utilization of heavy metal-contaminated farmland in China: a critical review [J]. *Land Degradation & Development*, 2019, **30**(15): 1773-1784.
- [28] 王天齐, 李艳玲, 杨阳, 等. 不同铁氧化物对小麦幼苗镉积累的影响[J]. 环境科学学报, 2021, **41**(4): 1511-1517.
Wang T Q, Li Y L, Yang Y, *et al.* Effects of different iron oxides on cadmium accumulation in wheat seedlings[J]. *Acta*

- Scientiae Circumstantiae, 2021, **41**(4): 1511-1517.
- [29] Wang M E, Chen W P, Peng C. Risk assessment of Cd polluted paddy soils in the industrial and township areas in Hunan, Southern China[J]. Chemosphere, 2016, **144**: 346-351.
- [30] Yang Y, Chang A C, Wang M E, *et al.* Assessing cadmium exposure risks of vegetables with plant uptake factor and soil property[J]. Environmental Pollution, 2018, **238**: 263-269.
- [31] HJ 804-2016, 土壤 8 种有效态元素的测定 二乙三胺五乙酸浸提-电感耦合等离子体发射光谱法[S].
- [32] GB 2762-2017, 食品安全国家标准 食品中污染物限量[S].
- [33] 孟晓飞, 郭俊梅, 杨俊兴, 等. 河南省典型工业区周边农田土壤重金属分布特征及风险评价[J]. 环境科学, 2021, **42**(2): 900-908.
- Meng X F, Guo J M, Yang J X, *et al.* Spatial distribution and risk assessment of heavy metal pollution in farmland soils surrounding a typical industrial area of Henan Province [J]. Environmental Science, 2021, **42**(2): 900-908.
- [34] 陈洁, 王娟, 王怡雯, 等. 影响不同农作物镉富集系数的土壤因素[J]. 环境科学, 2021, **42**(4): 2031-2039.
- Chen J, Wang J, Wang Y W, *et al.* Influencing factors of cadmium bioaccumulation factor in crops [J]. Environmental Science, 2021, **42**(4): 2031-2039.
- [35] Xing W Q, Cao E Z, Scheckel K G, *et al.* Influence of phosphate amendment and zinc foliar application on heavy metal accumulation in wheat and on soil extractability impacted by a lead smelter near Jiyuan, China[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2018, **25**(31): 31396-31406.
- [36] Xing W Q, Zheng Y L, Scheckel K G, *et al.* Spatial distribution of smelter emission heavy metals on farmland soil [J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2019, **191**(2), doi: 10.1007/s10661-019-7254-1.
- [37] Qiu K Y, Xing W Q, Scheckel K G, *et al.* Temporal and seasonal variations of As, Cd and Pb atmospheric deposition flux in the vicinity of lead smelters in Jiyuan, China[J]. Atmospheric Pollution Research, 2016, **7**(1): 170-179.
- [38] Luo L, Ma Y B, Zhang S Z, *et al.* An inventory of trace element inputs to agricultural soils in China[J]. Journal of Environmental Management, 2009, **90**(8): 2524-2530.
- [39] 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.
- [40] 马闯, 刘福勇, 苏沛沛, 等. 不同大气沉降区 Pb 化学形态及风险评估[J]. 生态环境学报, 2018, **27**(8): 1466-1471.
- Ma C, Liu F Y, Su P P, *et al.* Chemical speciation and risk assessment of Pb in different Pb sedimentation area[J]. Ecology and Environment Sciences, 2018, **27**(8): 1466-1471.
- [41] Ma C, Liu F Y, Hu B, *et al.* Quantitative analysis of lead sources in wheat tissue and grain under different lead atmospheric deposition areas [J]. Environmental Science and Pollution Research, 2019, **26**(36): 36710-36719.
- [42] Qing Y, Yang J Q, Zhang Q, *et al.* Bayesian toxicokinetic modeling of cadmium exposure in Chinese population [J]. Journal of Hazardous Materials, 2021, **413**, doi: 10.1016/j.jhazmat.2021.125465.
- [43] Wu B, Guo S H, Zhang L Y, *et al.* Risk forewarning model for rice grain Cd pollution based on Bayes theory[J]. Science of the Total Environment, 2018, **618**: 1343-1349.
- [44] 成永霞, 赵宗生, 王亚洲, 等. 河南省某铅冶炼厂附近农田土壤重金属污染特征[J]. 土壤通报, 2014, **45**(6): 1505-1510.
- Cheng Y X, Zhao Z S, Wang Y Z, *et al.* Soil heavy metals pollution in the farmland near a lead smelter in Henan Province [J]. Chinese Journal of Soil Science, 2014, **45**(6): 1505-1510.
- [45] Zhao J, Jin J L, Guo Q Z, *et al.* Forewarning model for water pollution risk based on Bayes theory[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2014, **21**(4): 3073-3081.
- [46] Yang J, Zhao C, Yang J X, *et al.* Discriminative algorithm approach to forecast Cd threshold exceedance probability for rice grain based on soil characteristics[J]. Environmental Pollution, 2020, **261**, doi: 10.1016/j.envpol.2020.114211.
- [47] Golpour P, Ghayour-Mobarhan M, Saki A, *et al.* Comparison of support vector machine, naïve Bayes and logistic regression for assessing the necessity for coronary angiography[J]. International Journal of Environmental Research and Public Health, 2020, **17**(18), doi: 10.3390/ijerph17186449.

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 (NPS) 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)