

目次

基于机器学习的珠三角秋季臭氧浓度预测	陈镇, 刘润, 罗征, 薛鑫, 汪瑶, 赵志军 (1)
粤港澳大湾区大气PM _{2.5} 浓度的遥感估算模型	代园园, 龚绍琦, 张存杰, 闵爱莲, 王海君 (8)
典型输送通道城市冬季PM _{2.5} 污染与传输变化特征	代武俊, 周颖, 王晓琦, 齐鹏 (23)
郑州市夏季PM _{2.5} 中二次无机组分污染特征及其影响因素	和兵, 杨洁茹, 徐艺斐, 袁明浩, 翟诗婷, 赵长民, 王申博, 张瑞芹 (36)
重庆典型城区冬季碳质气溶胶的污染特征及来源解析	彭超, 李振亮, 向英, 王晓宸, 汪凌韬, 张晟, 翟崇治, 陈阳, 杨复沫, 翟天宇 (48)
2022年8月成渝两地臭氧污染差异影响因素分析	陈木兰, 李振亮, 彭超, 邓也, 宋丹林, 谭钦文 (61)
2020年“三连击”台风对我国东部地区O ₃ 污染的影响分析	花丛, 尤媛, 王峰, 张碧辉 (71)
北京城区夏季VOCs初始体积分数特征及来源解析	张博韬, 景宽, 王琴, 安欣欣, 鹿海峰, 王陈婧, 王友峰, 刘保献 (81)
机动车减排降碳综合评价体系综述	范朝阳, 佟惠, 梁晓宇, 彭剑飞 (93)
基于LEAP模型的长三角某市碳达峰情景	杨峰, 张贵驰, 孙佑, 谢放尖, 揣小伟, 孙瑞玲 (104)
广东省船舶二氧化碳排放驱动因素与减排潜力	翁淑娟, 刘颖颖, 唐凤, 沙青娥, 彭勃, 王辉嘉, 陈诚, 张雪驰, 李京洁, 陈豪琪, 郑君瑜, 宋献中 (115)
给水厂典型工艺碳排放特征与影响因素	张翔宇, 胡建坤, 马凯, 高欣慰, 魏月华, 韩宏大, 李克勋 (123)
中国饮用水中砷的分布特征及基于伤残调整寿命年的健康风险评价	窦殿程, 齐媛, 肖淑敏, 苏高新, 郭宇新 (131)
太湖水体和沉积物中有机磷酸酯的时空分布和风险评价	张成诺, 钟琴, 栾博文, 周涛, 顾帆, 李伟飞, 邹华 (140)
水产养殖环境中农兽药物的污染暴露水平及其风险影响评价	张楷文, 张海燕, 孔聪, 顾润润, 田良良, 杨光昕, 王媛, 陈凤, 沈晓盛 (151)
长江朱沱断面磷浓度与通量变化及来源解析	姜保峰, 谢卫民, 黄波, 刘旻璇 (159)
珠江河口地表水锰氧化物对磷的“载-卸”作用	李睿, 梁作兵, 伍祺瑞, 杨晨晨, 田帝, 高磊, 陈建耀 (173)
富春江水库浮游植物功能群变化的成因	张萍, 王炜, 朱梦圆, 国超旋, 邹伟, 许海, 朱广伟 (181)
合浦盆地西部地区地下水水化学特征及形成机制	陈雯, 吴亚, 张宏鑫, 刘怀庆 (194)
新疆车尔臣河流域绿洲带地下水咸化与污染主控因素	李军, 欧阳宏涛, 周金龙 (207)
京津冀地区生态系统健康时空演变及其影响因素	李魁明, 王悦燕, 姚罗兰 (218)
近30年辽河三角洲生态系统服务价值时空演变及影响因素分析	王耕, 张芙蓉 (228)
光伏电站建设对陆地生态环境的影响:研究进展与展望	田政卿, 张勇, 刘向, 陈生云, 柳本立, 吴纪华 (239)
大兴安岭林草交错带植被NDVI时空演变及定量归因	石淞, 李文, 曲琛, 杨子仪 (248)
西南地区不同类型植被NPP时空演变及影响因素探究	徐勇, 郑志威, 孟禹弛, 盘钰春, 郭振东, 张炎 (262)
不同海拔梯度下极端气候事件对松花江流域植被NPP的影响	崔嵩, 贾朝阳, 郭亮, 付强, 刘东 (275)
基于InVEST与CA-Markov模型的昆明市碳储量时空演变与预测	帕茹克·吾斯曼江, 艾东, 方一舒, 张益宾, 李牧, 郝晋琨 (287)
基于PLUS-InVEST模型的酒泉市生态系统碳储量时空演变与预测	石晶, 石培基, 王梓洋, 程番苑 (300)
长江下游沿江平原土壤发育过程中碳库分配动态	胡丹阳, 张欢, 宿宝巍, 张娅璐, 王永宏, 纪佳辰, 杨洁, 高超 (314)
漓江流域喀斯特森林土壤有机碳空间分布格局及其驱动因子	申楷慧, 魏识广, 李林, 储小雪, 钟建军, 周景钢, 赵毅 (323)
不同土地利用方式对岩溶区土壤有机碳组分稳定性的影响	陈坚淇, 贾亚男, 贺秋芳, 江可, 陈畅, 叶凯 (335)
紫色土丘陵区坡地柑橘园土壤碳氮的空间分布特征	李子阳, 陈露, 赵鹏, 周明华, 郑静, 朱波 (343)
氮添加与凋落物处理对橡胶林砖红壤有机碳组分及酶活性的影响	薛欣欣, 任常琦, 罗雪华, 王文斌, 赵春梅, 张永发 (354)
重庆化肥投入驱动因素、减量潜力及环境效应分析	梁涛, 赵敬坤, 李红梅, 王妍, 曹中华, 张务帅, 王孝忠, 郭超仪, 石孝均, 陈新平 (364)
中国土壤中全氟和多氟烷基物质的分布、迁移及管控研究进展	刘浩然, 邢静怡, 任文杰 (376)
基于多源辅助变量和随机森林模型的耕地土壤重金属含量空间分布预测	解雪峰, 郭炜炜, 濮励杰, 缪源卿, 蒋国俊, 张建珍, 徐飞, 吴涛 (386)
基于源导向的农用地土壤重金属健康风险评估及优先控制因子分析	马杰, 葛森, 王胜蓝, 邓力, 孙静, 蒋月, 周林 (396)
铜陵某废弃硫铁矿矿区土壤重金属污染特征及来源解析	李如忠, 刘宇昊, 黄言欢, 吴鸿飞 (407)
天水市主城区公交站地表灰尘重金属来源解析及污染评价	李春艳, 王新民, 王海, 吕晓斌 (417)
基于大田试验的土壤-水稻镉对不同调理剂的响应	唐乐斌, 刘新彩, 宋波, 马丽钧, 黄凤艳 (429)
腐殖质活性组分对土壤镉有效性的调控效应与水稻安全临界阈值	胡秀芝, 宋毅, 王天雨, 蒋珍芬, 魏世强 (439)
生物炭与铁钙材料对镉砷复合污染农田土壤的修复	吴秋产, 吴骥子, 赵科理, 连斌, 袁峰, 孙洪, 田欣 (450)
人体微塑料污染特征及健康风险研究进展	马敏东, 赵洋尘, 朱龙, 王伟平, 康玉麟, 安立会 (459)
聚苯乙烯微塑料联合镉污染对土壤理化性质和生菜(<i>Lactuca sativa</i>)生理生态的影响	牛佳瑞, 邹勇军, 简敏菲, 黄楚红, 李金燕, 穆霞, 刘淑丽 (470)
转录组分析植物促生细菌缓解高粱微塑料和重金属复合污染胁迫机制	刘泳岐, 赵超禹, 任学敏, 李玉英, 张英君, 张浩, 韩辉, 陈兆进 (480)
微塑料对土壤中养分和镉淋失的影响	赵群芳, 褚龙威, 丁原红, 王发园 (489)
微塑料和非对土壤化学性质、酶活性及微生物群落的影响	刘沙沙, 秦建桥, 吴贤格 (496)
民勤荒漠绿洲过渡带人工梭梭林土壤细菌群落结构及功能预测	王安林, 马瑞, 马彦军, 吕彦勋 (508)
不同灌溉水盐度下土壤真菌群落对生物炭施用的响应	郑志玉, 郭晓雯, 闵伟 (520)
厨余垃圾有机肥对土壤微生物活性及功能的影响	刘美灵, 汪益民, 金文豪, 王永冉, 王嘉和, 柴一博, 彭丽媛, 秦华 (530)
土壤真菌群落结构对辣椒长期连作的响应特征	陈芬, 余高, 王谢丰, 李廷亮, 孙约兵 (543)
叶面喷施硅肥对再生水灌溉水稻叶际细菌群落结构及功能基因的影响	梁胜贤, 刘春成, 胡超, 崔二苹, 李中阳, 樊向阳, 崔丙健 (555)
昌黎县海域细菌群落和抗生素抗性基因分析	王秋水, 程波, 刘悦, 邓婕, 徐岩, 孙朝徽, 袁立艳, 左嘉, 司飞, 高丽娟 (567)
基于高通量定量PCR与高通量测序技术研究城市湿地公园抗生素抗性基因污染特征	黄福义, 周曙屹, 潘婷, 周昕原, 苏建强, 张炯 (576)
城区第四系沉积柱中抗生素的垂向分布特征及环境影响因素	刘可, 童蕾, 甘翠, 王逸文, 张嘉越, 何军 (584)
氢氧化钾改性玉米秸秆生物炭对水中土霉素的吸附特性及机制	刘总堂, 孙玉凤, 费正皓, 沙新龙, 温小菊, 钱彬彬, 陈建, 谷成刚 (594)
CO ₂ 气氛热解与硝酸改性的生物炭Pb ²⁺ 吸附性能对比	江豪, 陈瑞芝, 朱自洋, 王琳, 段文斌, 陈芳媛 (606)

基于机器学习的珠三角秋季臭氧浓度预测

陈镇¹, 刘润^{1,2*}, 罗征¹, 薛鑫¹, 汪瑶¹, 赵志军³

(1. 暨南大学环境与气候研究院, 广州 511443; 2. 粤港澳环境质量协同创新联合实验室, 广州 511443; 3. 复旦大学信息与工程学院, 上海 200438)

摘要: 基于2015~2022年珠三角地区的臭氧(O_3)日最大8 h浓度平均值[MDA8- O_3 , $\rho(O_3-8h)$]的观测数据和气象再分析数据, 运用支持向量回归(SVR)、随机森林(RF)、多层感知机(MLP)和轻量级梯度提升机(LG)这4种机器学习方法, 建立MDA8- O_3 预测模型. 结果表明, 对于全年MDA8- O_3 预测而言, SVR模型的效果最好, 决定系数(R^2)达0.86, 均方根误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE)分别为16.3 $\mu g \cdot m^{-3}$ 和12.3 $\mu g \cdot m^{-3}$; 对于秋季MDA8- O_3 预测而言, SVR模型的效果依然略优于LG和MLP, 其 R^2 、RMSE和MAE分别为0.88、19.8 $\mu g \cdot m^{-3}$ 和16.1 $\mu g \cdot m^{-3}$, RF模型在秋季的预测效果最差. 采用全年数据构建的模型对秋季MDA8- O_3 的预测效果比仅采用秋季数据构建的模型效果好, R^2 相差0.08~0.14.

关键词: 珠三角(PRD); 臭氧(O_3); 日最大8 h浓度平均值(MDA8- O_3); 机器学习; 预测

中图分类号: X515 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2024)01-0001-07 DOI: 10.13227/j.hj.kx.202302044

Prediction of Autumn Ozone Concentration in the Pearl River Delta Based on Machine Learning

CHEN Zhen¹, LIU Run^{1,2*}, LUO Zheng¹, XUE Xin¹, WANG Yao¹, ZHAO Zhi-jun³

(1. Institute for Environmental and Climate Research, Jinan University, Guangzhou 511443, China; 2. Guangdong-Hong Kong-Macau Joint Laboratory of Collaborative Innovation for Environmental Quality, Guangzhou 511443, China; 3. School of Information Science and Technology, Fudan University, Shanghai 200438, China)

Abstract: Based on the observation data of the daily maximum 8-hour ozone (O_3) average concentration [MDA8- O_3 , $\rho(O_3-8h)$] and meteorological reanalysis data in the Pearl River Delta Region from 2015 to 2022, four machine learning methods, i. e., support vector machine regression (SVR), random forest (RF), multi-layer perceptron (MLP), and lightweight gradient boosting machine (LG) were used to establish MDA8- O_3 prediction models. The results showed that the SVR model had the best prediction performance on MDA8- O_3 during the whole year, the coefficient of determination (R^2) reached 0.86, and the root mean square error (RMSE) and mean absolute error (MAE) were 16.3 $\mu g \cdot m^{-3}$ and 12.3 $\mu g \cdot m^{-3}$, respectively. The prediction performance of the SVR model in autumn was still slightly better than that of LG and MLP, with R^2 , RMSE, and MAE values of 0.88, 19.8 $\mu g \cdot m^{-3}$, and 16.1 $\mu g \cdot m^{-3}$, respectively. The RF model performed the worst in the autumn prediction. In addition, the models trained by data from the whole year had better prediction ability on autumn MDA8- O_3 than that of those only trained by autumn data, and the R^2 differed 0.08~0.14.

Key words: Pearl River Delta (PRD); ozone (O_3); daily maximum 8-hour average concentration (MDA8- O_3); machine learning; prediction

近地面臭氧(O_3)是由挥发性有机物(VOCs)和氮氧化物(NO_x)等一次污染物在阳光照射下发生光化学反应产生的二次污染物^[1]. 近地面高浓度的 O_3 会损伤人体呼吸系统, 影响人体健康^[2~6], 还会造成大豆和小麦等农作物减产^[7~10], 破坏森林植被^[11~14], 影响生态系统. 除此之外, O_3 也是一种温室气体, 能够影响大气的辐射收支平衡^[15].

自2013年《大气污染防治行动计划》实施以来, 中国环境空气质量明显改善, 但 O_3 污染仍严重^[16]. 2021中国生态环境状况公报显示^[17], 全国168个地级及以上城市以 O_3 为首要污染物的超标天数占总超标天数的41.6%, 居6项污染物之首. 珠三角作为我国最发达的三大城市群之一, 区域 O_3 日最大8 h浓度平均值[MDA8- O_3 , $\rho(O_3-8h)$]从2015年的83.5 $\mu g \cdot m^{-3}$ 上升至2022年的108.3 $\mu g \cdot m^{-3}$, 秋季 O_3 污染尤为严重, 一直都是珠三角空气质量保障工作的核心问题, 做好对 O_3 的预测是防治 O_3 污染的先决条件.

目前, 确定性方法和统计方法常被用于 O_3 污染

预测研究^[18,19]. 确定性方法如数值模型在模拟 O_3 污染需要控制其复杂的物理和化学过程, 计算量大且排放清单和参数化方案存在不确定性^[20]. 统计方法如传统的线性回归模型展示了自变量与因变量之间的线性关系, 这与 O_3 和其生成主要前体污染物(NO_x 和VOCs)以及气象变量之间的复杂非线性关系不一致, 有可能不能得到很好的预测结果^[21~23]. 机器学习方法适合处理预测因子间的非线性关系, 且计算快, 可以弥补以上两种方法的缺点^[24].

当前支持向量回归(support vector machine regression, SVR)^[25,26]、随机森林(random forest, RF)^[27,28]、多层感知机(multi-layer perceptron, MLP)和轻量梯度提升机(light gradient boosting machine, LG)均已成功用于其他地区 O_3 浓度的预测, 且获得了

收稿日期: 2023-02-07; 修订日期: 2023-03-13

基金项目: 广州市科技项目(202002020065); 国家自然科学基金项目(91644222, 92044302)

作者简介: 陈镇(1999~), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为机器学习与大气环境, E-mail: chenchen121138@163.com

* 通信作者, E-mail: liurun@jnu.edu.cn

较好的预测结果^[29-32]。但利用机器学习方法针对珠三角地区MDA8-O₃的预测研究还较少,因此本研究利用上述4种机器学习方法对珠三角地区的MDA8-O₃进行预测,并进一步比较各模型的结果,得到最优的O₃预测模型,以期对珠三角O₃污染防治工作提供技术支持。

1 材料与方法

1.1 研究数据

本研究主要使用2015年1月1日至2022年12月31日污染物观测数据和再分析气象数据。在进一步数据分析前,剔除了异常值,并用前后1 d的平均值对缺失值进行补充,最终保留2 922 d数据进行分析。

污染物数据来自中国环境监测总站全国空气质量观测数据网(<http://www.cnemc.cn/>)的小时数据,并按照《环境空气质量标准》(GB 3095-2012)对污染物数据进行质量控制。本研究选取珠三角9个城市(广州、珠海、佛山、深圳、江门、肇庆、惠州、中山和东莞)2015~2022年的MDA8-O₃及PM_{2.5}、NO₂、CO和SO₂日平均值数据。当珠三角区域的 $\rho(\text{O}_3\text{-}8\text{h})$ 均值大于160 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,定义该天为区域O₃超标日。

气象数据采用欧洲中尺度天气预测中心(European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, ECMWF)提供的时间分辨率为1 h,空间分辨率为0.25°×0.25°的ERA5再分析数据,包括边界层高度、海平面气压、1 000 hPa相对湿度、2 m温度、总云量、10 m纬向风和经向风、总降水量和紫外辐射通量。10 m高度的风速和风向由10 m高度的经、纬向风计算得到。所有气象因子均选取珠三角区域(22°N~25°N, 110°E~115°E)范围内每日08:00~19:00共12 h的数据均值作为模型的输入气象数据。

为简化表达,将输入模型的变量名称采用缩写形式,见表1。

1.2 研究方法

Mann-Kendall(M-K)趋势检验法在气象、环境和生态等研究领域具有广泛的应用^[33-36],因此本研究使用该方法进行O₃污染趋势分析。为评估模型的泛化能力,本研究将2015~2021年2 045 d(80%)作为训练集用于训练模型,512 d(20%)作为测试集用于测试模型性能,2022年数据(365 d)作为验证集评估模型的泛化能力。为了提高模型的精度和训练速度,减少模型输入错误,对所有数据进行Max-Min归一化处理,所有输入数据符合标准正态分布。数据处理过程均采用Python中Sklearn和Pandas库实现。

M-K趋势检验法通过假设H₀是n个独立、随机

表1 模型中输入变量的缩写名称及其含义

Table 1 Abbreviations of input variables for the models and their descriptions

模式中缩写名称	含义	单位
MDA8-O ₃ -1d	预报时刻前1 d的MDA8-O ₃	$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
BLH	预报时刻的边界层高度	m
MSL	预报时刻的海平面气压	Pa
RH	预报时刻的相对湿度	%
T2M	预报时刻的2 m温度	°C
TCC	预报时刻的总云量	%
WD	预报时刻的风向	(°)
WS	预报时刻的风速	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
TP	预报时刻的总降水量	m
UVB	预报时刻的紫外辐射通量	$\text{kJ}\cdot\text{m}^{-2}$
PM _{2.5}	预报时刻的PM _{2.5} 浓度	$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
NO ₂	预报时刻的NO ₂ 浓度	$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
CO	预报时刻的CO浓度	$\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}$
SO ₂	预报时刻的SO ₂ 浓度	$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$

变量,同样本分布的时间序列数据 $X=x_1, \dots, x_n$;备择假设H₁是双边检验,对于所有的k, $j \leq n$,且 $k \neq j$, x_j 和 x_k 的分布并不相同,检验的统计变量S计算如下:

$$S = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=k+1}^n \text{sgn}(x_j - x_k) \quad (1)$$

其中,sgn()为符号函数,具体定义如下:

$$\text{sgn}(x_j - x_k) = \begin{cases} 1, & (x_j - x_k) > 0 \\ 0, & (x_j - x_k) = 0 \\ -1, & (x_j - x_k) < 0 \end{cases} \quad (2)$$

统计量S服从正态分布,其均值为0,方差Var(S)按下式计算:

$$\text{Var}(S) = \frac{n(n-1)(2n+5)}{18} \quad (3)$$

当 $n > 10$ 时,标准的正态统计变量通过下式计算:

$$Z = \begin{cases} \frac{S-1}{\sqrt{\text{Var}(S)}}, & S > 0, \\ 0, & S = 0, \\ \frac{S+1}{\sqrt{\text{Var}(S)}}, & S < 0. \end{cases} \quad (4)$$

双边趋势检验中,对于给定的 α 置信水平,若 $|Z| \geq Z_{(1-\alpha)/2}$,则原假设是不可接受的,即在 α 置信水平上,时间序列数据存在显著的上升或者下降趋势。对于统计变量Z,若大于0,则时间序列数据呈上升趋势;若小于0,则呈下降趋势。并用斜率 γ 衡量趋势大小,当 $\gamma > 0$ 时为上升趋势,反之亦然。斜率 γ 计算如下:

$$\gamma = \text{Median}\left(\frac{x_i - x_j}{i - j}\right), \quad \forall j < i, \quad 1 < j < i < n \quad (5)$$

式中,Median表示中位数。

1.2.1 机器学习算法

为了更加精确地模拟 MDA8-O₃, 本研究采用适合处理非线性问题的 SVR、RF、MLP 和 LG 算法探究珠三角 O₃ 预测最优模型。

SVR 模型^[37]将原本低维空间中的 x 利用非线性函数 φ 映射到一个高维特征空间 $\varphi(x)$, 在高维空间中寻求线性回归超平面从而解决低维空间中的非线性问题, 具有不易过拟合和泛化能力强等优点。高维特征空间中的线性函数可以构造为:

$$y = \langle W\varphi(x) \rangle + b \quad (6)$$

式中, y 为输出, $\langle W\varphi(x) \rangle$ 表示特征空间的内积, 权重向量 W 和偏置常数 b 可以通过最小化风险函数式得到。

$$Q = \frac{\|w\|^2}{2} + C \sum_{i=1}^N L_{\varepsilon}(x_i, y_i, f) \quad (7)$$

其中:

$$L_{\varepsilon}(x_i, y_i, f) = \begin{cases} |y_i - f(x_i)| - \varepsilon, & |y_i - f(x_i)| \geq \varepsilon, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (8)$$

式中, C 为预先设定的惩罚系数, 惩罚大于 ε 的误差; ε 为训练集和实际观测值之间的偏差。

核函数的选择在一定程度上会影响模型的性能, 因此本研究选择具有良好的学习能力且能够处理非线性数据的径向基核函数。

相比于 SVR 算法, RF 模型^[38]是一种集成学习算法, 操作简单、精度高, 具有良好的泛化性, 对于噪声点和离群值更加稳健。该算法利用随机采样方法生成多个采样集, 进行训练形成对应的多个弱学习器, 然后将其通过结合策略得到最终的模型输出。对于回归问题, 通常使用简单平均法, 对所有弱学习器得到的回归结果进行算术平均得到最终的模型输出, 其计算过程如下:

$$m_{ni} = y_i - f_{n-1}(x_i) \quad (9)$$

式中, m_{ni} 为残差, y_i 为第 i 个样本的实测值, $f_{n-1}(x_i)$ 为前一轮学习器的预测值。

对残差进行拟合, 得到一个拟合残差模型 $g_n(x)$, 并更新回归树:

$$f_n(x) = f_{n-1}(x) + g_n(x) \quad (10)$$

MLP 多层感知机^[39]也叫人工神经网络, 包括一个输入层、一个输出层和若干个隐藏层。输入层接收外界输入, 隐藏层和输出层利用激活函数负责对信号进行加工, 输出层输出最终的结果。通过对比不同实验结果发现 Tanh 函数结果最优, 因此本研究采用 Tanh 函数作为激活函数。MLP 的计算过程如下:

$$h_j = \sum_{i=0}^N W_{ij} x_{ij} \quad (11)$$

式中, h_j 为隐藏层神经元节点的所有输入加权之和, W_{ij} 为输入层神经元到隐藏层神经元的权重, x_{ij} 为输入值。

$$a_j = g(h_j) = g\left(\sum_{i=0}^N W_{ij} x_{ij}\right) \quad (12)$$

式中, a_j 为隐藏层神经元的输出值, $g(x)$ 为激活函数, $a_j = x_{jk}$, 即当前层神经元的输出值, 等于下一层神经元的输入值。

$$y = g(h_k) = g\left(\sum_{j=0}^N W_{jk} x_{jk}\right) \quad (13)$$

式中, y 为输出层的值, 即预测值, h_k 为输出层神经元节点的所有输入加权之和, W_{jk} 为隐藏层神经元到输出层神经元的权重。

LG 轻量梯度提升机是基于梯度提升决策树框架新开发的机器学习方法, 采用了梯度单边采样和互斥特征捆绑技术^[40]。LG 支持高效的并行训练, 解决了目前机器学习方法所面临的主要挑战, 即对于特征维数多且数据量大的样本计算效率低和泛化性差的问题^[41]。该方法可以处理分类和回归任务, 且具有训练速度快, 内存占用小和精度高等优点, 更适用于高维数据, 因此可应用于 MDA8-O₃ 预测。

1.2.2 模型评估指标

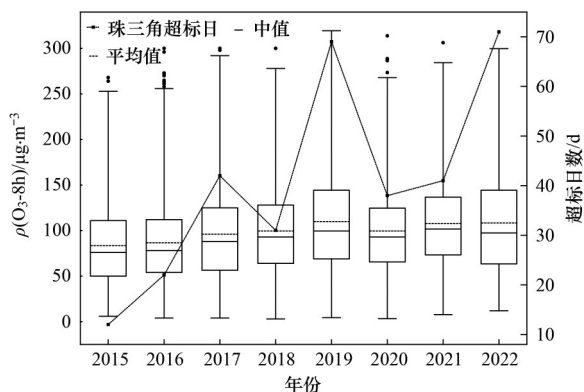
对于预测模型的性能的评价, 本研究使用决定系数 (R^2)、均方根误差 (RMSE) 和平均绝对误差 (MAE) 进行评估。每一个评价指标从不同角度对模型精度进行衡量, 并且有效比较不同模型的预测准确率。

2 结果与讨论

2.1 珠三角 MDA8-O₃ 变化特征

2015 ~ 2022 年珠三角地区 MDA8-O₃ 和超标日的变化情况如图 1 所示, 2019 年和 2022 年 O₃ 污染为较为严重, 2019 年 MDA8-O₃ 最高, $\rho(\text{O}_3\text{-8h})$ 年均值高达 $109.9 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 共有 69 d O₃ 超标日。2022 年 O₃ 超标日最高, $\rho(\text{O}_3\text{-8h})$ 年均值达 $108.3 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 共有 71 d O₃ 超标日。通过 M-K 检验得到 MDA8-O₃ 和珠三角超标日数的增长速率分别为 $3.4 \mu\text{g}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{a})^{-1}$ 和 $5.5 \text{d}\cdot\text{a}^{-1}$, 且上升趋势显著 ($P = 0.01$ 和 $P = 0.04$)。

珠三角地区 MDA8-O₃ 和超标日具有明显的季节分布特征 (图 2), 2015 ~ 2022 年珠三角 $\rho(\text{O}_3\text{-8h})$ 呈现秋季高 ($122.9 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), 夏季 ($94.8 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) 略高于春季 ($94.2 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), 冬季低 ($83.6 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) 的特点。秋季超标日数最多, 共 174 d, 显著高于其他季节。值得注意的是, 2015 ~ 2022 年珠三角春季和秋季 MDA8-O₃ 的增长速率分别为 $5.4 \mu\text{g}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{a})^{-1}$ 和 $4.9 \mu\text{g}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{a})^{-1}$, 且均有显著上升趋势 ($P = 0.02$ 和 P



箱体的上下限分别表示数据的上四分位数和下四分位数, 箱子上方和下方的线分别表示数据的最大值和最小值, 黑色圆点表示异常值

图1 2015~2022年珠三角MDA8-O₃年分布特征和超标情况

Fig. 1 Annual characteristics and exceedances of MDA8-O₃ in the PRD from 2015 to 2022

=0.04).

2.2 模型因子选择

温度、太阳紫外辐射通量和风速等气象变量对臭氧生成和传输具有重要影响^[42-44], 并且已有研究发现预报时刻前几小时的历史O₃浓度对预报时刻O₃浓度影响较大^[45], 本研究分析历史MDA8-O₃与现在时刻的MDA8-O₃关系(表2)发现, 离预报时刻越近的MDA8-O₃的相关系数越高, 因此将预报时刻前1 d的MDA8-O₃浓度作为模型的输入变量, 可以在一定程度上提高模型预报性能。

表2 MDA8-O₃与历史MDA8-O₃的相关系数¹⁾

Table 2 Correlation coefficient between MDA8-O₃ and historical MDA8-O₃

项目	MDA8-O ₃ -1d	MDA8-O ₃ -2d	MDA8-O ₃ -3d	MDA8-O ₃ -4d	MDA8-O ₃ -5d
MDA8-O ₃	0.80	0.59	0.45	0.37	0.32

1) 相关系数均通过99%置信度显著性检验

为简化输入模型参数, 剔除不重要变量, 本研究使用RF模型获得不同变量特征的相对重要性(图3). 其中, MDA8-O₃-1d对MDA8-O₃预测结果影响最大, 高达55%, 其他污染物因子中只有PM_{2.5}的影响稍大, 其余因子影响很小. 气象因子中UVB、WS、RH、BLH、TCC和T2M对MDA8-O₃预测影响较大, 同时这6个气象因子与MDA8-O₃的相关系数分别为0.73、-0.32、-0.60、0.71、-0.63和0.46, 在一定程度上印证了相对重要性的结果. 为提高模型的计算效率, 本研究最终选取MDA8-O₃-1d、UVB、WS、RH、BLH、TCC、T2M和PM_{2.5}这8个变量作为模型输入因子。

2.3 模型性能分析与对比

采用MAE、RMSE和R²作为4种机器学习模型的评估指标, 对2015~2022年全年样本(2922 d)和秋季样本(728 d)模型进行性能评估(表3). 对于全年样本, 测试集中4种模型的R²均高于0.85, 并且它们的R²、MAE、RMSE非常接近, 4种预测模型性能相当, 原因可能是构建的全年样本多, 模型有足够的数

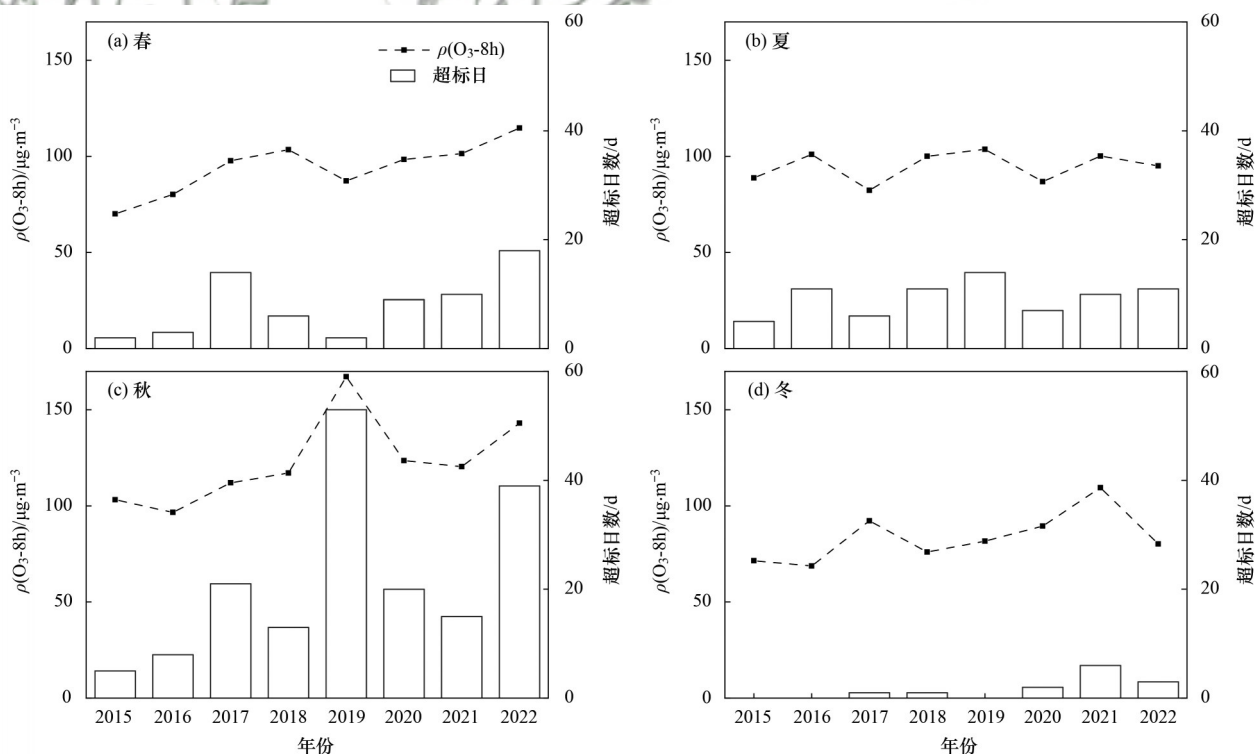


图2 2015~2022年珠三角各季节MDA8-O₃分布特征和超标情况

Fig. 2 Seasonal characteristics and exceedances of MDA8-O₃ in the PRD from 2015 to 2022

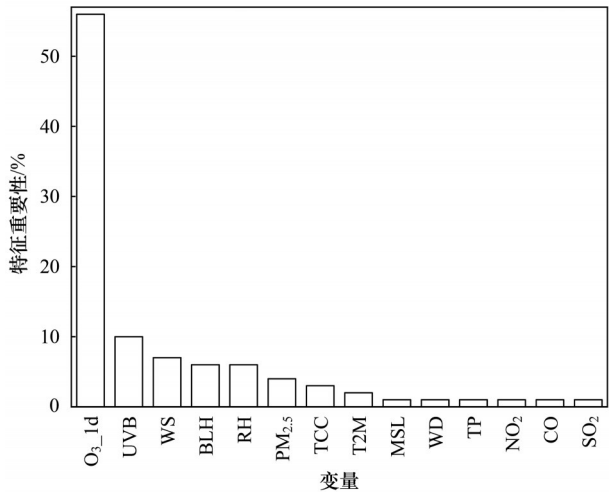


图3 RF预测模型中特征重要性

Fig. 3 Feature importance in the RF model for prediction

据量去学习数据的规律,因此可以很好捕捉数据规律. 其中SVR模型 R^2 最高(0.86)、RMSE($16.3 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)和MAE($12.3 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)最小,SVR模型的预测性能最好. 在2022年验证集中4个模型的 R^2 在0.86~0.89之间,均略高于测试集. 其中LG模型在验证集的 R^2 最大(0.89),在测试集中性能最优的SVG模型 R^2 也略有提升(0.88),因此SVR模型的泛化能力较好.

对于秋季样本,在测试集中LG模型的 R^2 最高(0.84)、RMSE($17.8 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)和MAE($13.9 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)最小,LG模型的预测性能最好. 然而,测试集中4种模型的 R^2 、MAE和RMSE评估指标均不如全年样本的模型评估指标,4种预测模型性能均变差,原因可能是构建的秋季样本少和每年秋季 O_3 污染程度变化

表3 2015~2022年全年和秋季不同模型预测结果¹⁾
Table 3 Evaluation indicators of different models for the whole year and autumn from 2015 to 2022

时间	模型	测试集			验证集		
		MAE / $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	RMSE / $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	R^2	MAE / $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	RMSE / $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	R^2
全年	SVR	12.3	16.3	0.86	13.3	17.7	0.88
	RF	12.9	17.1	0.85	14.4	19.2	0.86
	MLP	12.9	16.8	0.85	14.6	18.8	0.87
	LG	13.4	17.5	0.85	13.4	17.6	0.89
秋季	SVR	16.2	20.6	0.82	23.5	27.6	0.76
	RF	15.6	19.7	0.84	25.0	29.4	0.73
	MLP	18.5	23.0	0.78	26.3	30.6	0.71
	LG	13.9	17.8	0.84	22.6	27.1	0.77

1)验证集数据为2022年数据

大,没有足够的数量去学习数据的规律,预测模型因此性能变差. 在2022年验证集中,4个模型的 R^2 在0.71~0.77之间,MLP模型 R^2 最低且MAE和RMSE最大,模型预测性能最差,说明神经网络适合大样本量的预测,在少样本的情况下表现不佳.LG模型 R^2 最大且MAE和RMSE较小,分别为 0.77 、 $22.6 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 、 $27.1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,对于污染最严重的秋季LG模型优于其他机器学习模型,预测性能最好.

为了更好地评估4种模型对珠三角秋季MDA8- O_3 的预测效果,将4种模型全年样本建模得到的2022年预测结果中秋季数据与观测值做进一步对比(表4),4种模型的 R^2 在0.81~0.88之间,高于仅用秋季样本建模的结果(表3),全年样本构建的模型预测精度较高,能有效捕捉 O_3 污染最为严重的秋季数据.MAE和RMSE也明显偏低. 因此扩大时间段构建数

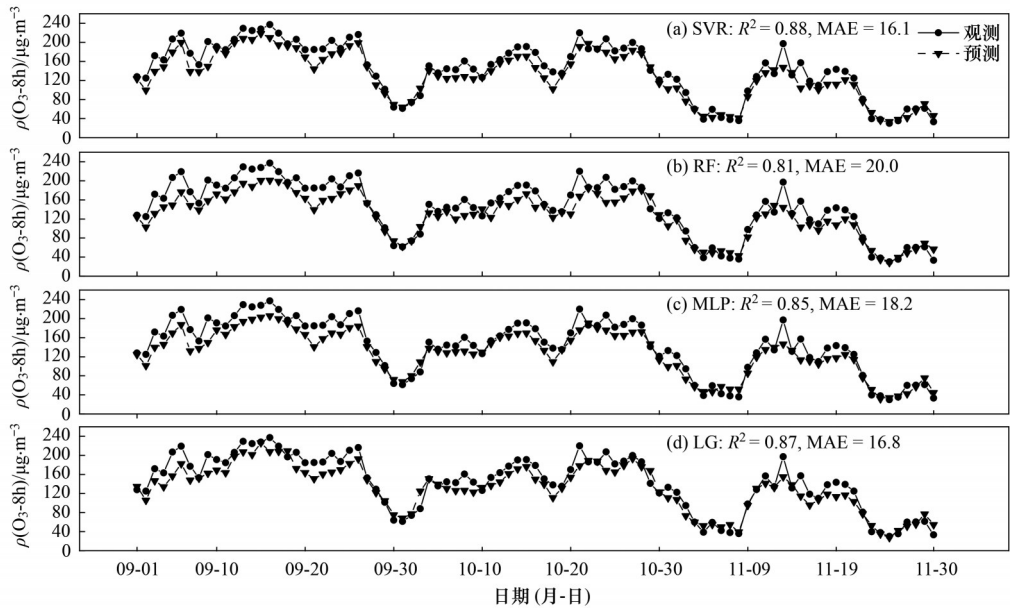


图4 SVR、RF、MLP和LG模型预测的2022年秋季MDA8- O_3

Fig. 4 Predicted autumn MDA8- O_3 in 2022 by the SVR, RF, MLP, and LF models

据集,增加数据样本量,能更好地捕捉数据规律,有效提高预测性能,发挥预报效果。

表4 全年数据训练的模型预测2022年秋季MDA8-O₃的效果评估

Table 4 Evaluation indicators for the autumn MDA8-O₃ in 2022 obtained from models trained by the whole year data

模型	MAE/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	RMSE/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	R^2
SVR	16.1	19.8	0.88
RF	20.0	24.6	0.81
MLP	18.2	21.8	0.85
LG	16.8	20.7	0.87

此外,由4种模型在全年样本建模阶段的预测秋季MDA8-O₃结果可知(图4),4个模型中RF模型预测性能差,预测值与观测值之间的差异波动较大,同时RF模型未能很好捕捉到MDA8-O₃高值。SVR模型的预测效果最好,其次是LG和MLP模型,这3种模型均能很好地捕捉秋季MDA8-O₃总体趋势,SVR在捕捉MDA8-O₃高值方面效果较好。

3 结论

(1) 2015 ~ 2022 年珠三角地区 MDA8-O₃ ($P=0.01$) 和超标日 ($P=0.04$) 上升趋势显著,平均增长速率分别为 $3.4 \mu\text{g}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{a})^{-1}$ 和 $5.5 \text{d}\cdot\text{a}^{-1}$ 。珠三角地区 MDA8-O₃ 呈现明显的季节变化特征,其中秋季 O₃ 污染尤为严重, O₃ 超标日集中在秋季和夏季。此外,珠三角地区春季和秋季 MDA8-O₃ 均有显著上升趋势,春季增长速率 [$(5.4 \mu\text{g}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{a})^{-1})$] 略高于秋季 [$(4.9 \mu\text{g}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{a})^{-1})$]。

(2) 在4种机器学习模型中,SVR模型能较好预测珠三角地区秋季MDA8-O₃,模型性能略优于LG和MLP,RF模型性能最差。SVR、LG、MLP和RF模型的 R^2 分别为0.88、0.87、0.85和0.81, RMSE分别为19.8、20.7、21.8和24.6 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 。

(3) 与使用秋季数据集相比,采用全年数据集,会稍提高模型预测秋季MDA8-O₃的预测性能, R^2 提升0.08 ~ 0.14,这可能与训练集数据量大能够更好捕捉数据规律有关。

参考文献:

- [1] Tan Z F, Lu K D, Jiang M Q, *et al.* Exploring ozone pollution in Chengdu, southwestern China: a case study from radical chemistry to O₃-VOC-NO_x sensitivity [J]. *Science of the Total Environment*, 2018, **636**: 775-786.
- [2] Lu X, Zhang L, Wang X L, *et al.* Rapid increases in warm-season surface ozone and resulting health impact in China since 2013 [J]. *Environmental Science & Technology Letters*, 2020, **7** (4): 240-247.
- [3] Zheng X Y, Orellano P, Lin H L, *et al.* Short-term exposure to ozone, nitrogen dioxide, and sulphur dioxide and emergency department visits and hospital admissions due to asthma: a systematic review and meta-analysis [J]. *Environment International*, 2021, **150**, doi: 10.1016/j.envint. 2021.106435.
- [4] Wang Y L, Wild O, Chen X S, *et al.* Health impacts of long-term ozone exposure in China over 2013-2017 [J]. *Environment International*, 2020, **144**, doi: 10.1016/j.envint. 2020.106030.
- [5] Maji K J, Namdeo A. Continuous increases of surface ozone and associated premature mortality growth in China during 2015-2019 [J]. *Environmental Pollution*, 2021, **269**, doi: 10.1016/j.envpol. 2020.116183.
- [6] Liu H, Liu S, Xue B R, *et al.* Ground-level ozone pollution and its health impacts in China [J]. *Atmospheric Environment*, 2018, **173**: 223-230.
- [7] Zhao H, Zheng Y F, Zhang Y X, *et al.* Evaluating the effects of surface O₃ on three main food crops across China during 2015-2018 [J]. *Environmental Pollution*, 2020, **258**, doi: 10.1016/j.envpol. 2019.113794.
- [8] Peng J L, Shang B, Xu Y S, *et al.* Effects of ozone on maize (*Zea mays* L.) photosynthetic physiology, biomass and yield components based on exposure- and flux-response relationships [J]. *Environmental Pollution*, 2020, **256**, doi: 10.1016/j.envpol. 2019.113466.
- [9] Schauburger B, Rolinski S, Schaphoff S, *et al.* Global historical soybean and wheat yield loss estimates from ozone pollution considering water and temperature as modifying effects [J]. *Agricultural and Forest Meteorology*, 2019, **265**: 1-15.
- [10] Ghosh A, Agrawal M, Agrawal S B. Effect of water deficit stress on an Indian wheat cultivar (*Triticum aestivum* L. HD 2967) under ambient and elevated level of ozone [J]. *Science of the Total Environment*, 2020, **714**, doi: 10.1016/j.scitotenv. 2020.136837.
- [11] Ainsworth E A, Lemonnier P, Wedow J M. The influence of rising tropospheric carbon dioxide and ozone on plant productivity [J]. *Plant Biology*, 2020, **22**(S1): 5-11.
- [12] Feng Z Z, Agathokleous E, Yue X, *et al.* Emerging challenges of ozone impacts on Asian plants: actions are needed to protect ecosystem health [J]. *Ecosystem Health and Sustainability*, 2021, **7**(1), doi: 10.1080/20964129.2021.1911602.
- [13] Emberson L. Effects of ozone on agriculture, forests and grasslands [J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2020, **378**(2183), doi: 10.1098/rsta.2019.0327.
- [14] Paoletti E, Feng Z Z, De Marco A, *et al.* Challenges, gaps and opportunities in investigating the interactions of ozone pollution and plant ecosystems [J]. *Science of the Total Environment*, 2020, **709**, doi: 10.1016/j.scitotenv. 2019.136188.
- [15] IPCC. Climate Change 2013: The physical science basis. Contribution of working Group I to the Fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
- [16] Li K, Jacob D J, Shen L, *et al.* Increases in surface ozone pollution in China from 2013 to 2019: anthropogenic and meteorological influences [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2020, **20**(19): 11423-11433.
- [17] 中华人民共和国生态环境部. 2021 中国生态环境状况公报 [EB/OL]. <https://www.mee.gov.cn/hjzl/sthjzk/zghjzkghb/202205/P020220608338202870777.pdf>, 2022-05-27.
- [18] 陈婉莹, 陈懿昂, 褚晰晰, 等. 珠三角地区臭氧来源特征的数值模拟研究 [J]. *环境科学学报*, 2022, **42**(3): 293-308.

Chen W Y, Chen Y A, Chu Y X, *et al.* Numerical simulation of ozone source characteristics in the Pearl River Delta region [J].

- Acta Scientiae Circumstantiae, 2022, **42**(3): 293-308.
- [19] Abdullah S, Ahmad Nasir N H, Ismail M, *et al.* Development of ozone prediction model in urban area[J]. International Journal of Innovative Technology and Exploring Engineering, 2019, **8** (10), doi: 10.35940/ijtee.J1127.0881019.
- [20] Abdi-Oskoue M, Carmichael G, Christiansen M, *et al.* Sensitivity of meteorological skill to selection of WRF-Chem physical parameterizations and impact on ozone prediction during the Lake Michigan Ozone Study (LMOS)[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2020, **125**(5), doi: 10.1029/2019JD031971.
- [21] Arsić M, Mihajlović I, Nikolić D, *et al.* Prediction of ozone concentration in ambient air using multilinear regression and the artificial neural networks methods[J]. Ozone: Science & Engineering, 2020, **42**(1): 79-88.
- [22] 何琰, 林惠娟, 曹舒娅, 等. 城市臭氧污染特征与高影响气象因子: 以苏州为例[J]. 环境科学, 2023, **44**(1): 85-93.
He Y, Lin H J, Cao S Y, *et al.* Characteristics of ozone pollution and high-impact meteorological factors in urban cities: a case of Suzhou[J]. Environmental Science, 2023, **44**(1): 85-93.
- [23] 刘建, 吴兑, 范绍佳, 等. 前体物与气象因子对珠江三角洲臭氧污染的影响[J]. 中国环境科学, 2017, **37**(3): 813-820.
Liu J, Wu D, Fan S J, *et al.* Impacts of precursors and meteorological factors on ozone pollution in Pearl River Delta[J]. China Environmental Science, 2017, **37**(3): 813-820.
- [24] Cheng Y, He L Y, Huang X F. Development of a high-performance machine learning model to predict ground ozone pollution in typical cities of China[J]. Journal of Environmental Management, 2021, 299, doi: 10.1016/j.jenvman.2021.113670.
- [25] Luna A S, Paredes M L L, De Oliveira G C G, *et al.* Prediction of ozone concentration in tropospheric levels using artificial neural networks and support vector machine at Rio de Janeiro, Brazil[J]. Atmospheric Environment, 2014, **98**: 98-104.
- [26] 苏筱倩, 安俊琳, 张玉欣, 等. 支持向量机回归在臭氧预报中的应用[J]. 环境科学, 2019, **40**(4): 1697-1704.
Su X Q, An J L, Zhang Y X, *et al.* Application of support vector machine regression in ozone forecasting[J]. Environmental Science, 2019, **40**(4): 1697-1704.
- [27] Jiang N B, Riley M L. Exploring the utility of the random forest method for forecasting ozone pollution in Sydney[J]. Journal of Environment Protection and Sustainable Development, 2015, **1** (5): 245-254.
- [28] Silibello C, Carlino G, Stafoggia M, *et al.* Spatial-temporal prediction of ambient nitrogen dioxide and ozone levels over Italy using a Random Forest model for population exposure assessment[J]. Air Quality, Atmosphere & Health, 2021, **14** (6): 817-829.
- [29] Chelani A B. Prediction of daily maximum ground ozone concentration using support vector machine[J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2010, **162**(1): 169-176.
- [30] Zhan Y, Luo Y Z, Deng X F, *et al.* Spatiotemporal prediction of daily ambient ozone levels across China using random forest for human exposure assessment[J]. Environmental Pollution, 2018, **233**: 464-473.
- [31] Wang D, Lu W Z. Forecasting of ozone level in time series using MLP model with a novel hybrid training algorithm[J]. Atmospheric Environment, 2006, **40**(5): 913-924.
- [32] 朱珈莹, 安俊琳, 冯悦欣, 等. 基于轻量级梯度提升机的南京大气臭氧浓度预测[J]. 环境科学, 2023, **44**(7): 3685-3694.
- Zhu J Y, An J L, Feng Y Z, *et al.* Prediction of atmospheric ozone concentration in Nanjing based on lightweight gradient elevator[J]. Environmental Science, 2023, **44**(7): 3685-3694.
- [33] Hipel K W, McLeod A I. Time series modelling of water resources and environmental systems[M]. Amsterdam: Elsevier, 1994.
- [34] Libiseller C, Grimvall A. Performance of partial Mann-Kendall tests for trend detection in the presence of covariates[J]. Environmetrics, 2002, **13**(1): 71-84.
- [35] Xiao X, Li C Q, Ma J, *et al.* Analysis of Variation in Runoff of the Yi River Main Stream and Its Influencing Factors During 1955-2013[A]. 见: 面向全球变化的水系统创新研究——第十五届中国水论坛论文集[C]. 深圳: 中国水利水电出版社, 2017. 11-10.
- [36] Gocic M, Trajkovic S. Analysis of changes in meteorological variables using Mann-Kendall and Sen's slope estimator statistical tests in Serbia[J]. Global and Planetary Change, 2013, **100**: 172-182.
- [37] Vapnik V N. Introduction: four periods in the research of the learning problem[A]. In: Vapnik V N (Ed.), The Nature of Statistical Learning Theory[M]. New York: Springer, 2000. 1-15.
- [38] Breiman L. Random forests[J]. Machine Learning, 2001, **45** (1): 5-32.
- [39] Delashmit W H, Manry M T. Recent developments in multilayer perceptron neural networks[A]. In: Proceedings of the Seventh Annual Memphis Area Engineering and Science Conference[C]. Memphis: MAESC, 2005. 1-15.
- [40] Ke G L, Meng Q, Finley T, *et al.* LightGBM: A highly efficient gradient boosting decision tree[A]. In: Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems[C]. Long Beach: ACM, 2017. 123-142.
- [41] Wei J, Li Z Q, Pinker R T, *et al.* Himawari-8-derived diurnal variations in ground-level PM_{2.5} pollution across China using the fast space-time Light Gradient Boosting Machine (LightGBM)[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2021, **21**(10): 7863-7880.
- [42] 周学思, 廖志恒, 王萌, 等. 2013-2016年珠海地区臭氧浓度特征及其与气象因素的关系[J]. 环境科学学报, 2019, **39** (1): 143-153.
Zhou X S, Liao Z H, Wang M, *et al.* Characteristics of ozone concentration and its relationship with meteorological factors in Zhuhai during 2013-2016[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2019, **39**(1): 143-153.
- [43] 陈漾, 张金谱, 黄祖照. 广州市近地面臭氧时空变化及其与气象因子的关系[J]. 中国环境监测, 2017, **33**(4): 99-109.
Chen Y, Zhang J P, Huang Z Z. Spatial-temporal variation of surface ozone in Guangzhou and its relations with meteorological factors[J]. Environmental Monitoring in China, 2017, **33**(4): 99-109.
- [44] 赵伟, 高博, 刘明, 等. 气象因素对香港地区臭氧污染的影响[J]. 环境科学, 2019, **40**(1): 55-66.
Zhao W, Gao B, Liu M, *et al.* Impact of meteorological factors on the ozone pollution in Hong Kong[J]. Environmental Science, 2019, **40**(1): 55-66.
- [45] Yafouz A, Aldahoul N, Birima A H, *et al.* Comprehensive comparison of various machine learning algorithms for short-term ozone concentration prediction[J]. Alexandria Engineering Journal, 2022, **61**(6): 4607-4622.

CONTENTS

Prediction of Autumn Ozone Concentration in the Pearl River Delta Based on Machine Learning	CHEN Zhen, LIU Run, LUO Zheng, <i>et al.</i> (1)
Remote Sensing Model for Estimating Atmospheric PM _{2.5} Concentration in the Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area	DAI Yuan-yuan, GONG Shao-qi, ZHANG Cun-jie, <i>et al.</i> (8)
Variation Characteristics of PM _{2.5} Pollution and Transport in Typical Transport Channel Cities in Winter	DAI Wu-jun, ZHOU Ying, WANG Xiao-qi, <i>et al.</i> (23)
Characteristics of Secondary Inorganic Ions in PM _{2.5} and Its Influencing Factors in Summer in Zhengzhou	HE Bing, YANG Jie-ru, XU Yi-fei, <i>et al.</i> (36)
Characteristics and Source Apportionment of Carbonaceous Aerosols in the Typical Urban Areas in Chongqing During Winter	PENG Chao, LI Zhen-liang, XIANG Ying, <i>et al.</i> (48)
Analysis of Influencing Factors of Ozone Pollution Difference Between Chengdu and Chongqing in August 2022	CHEN Mu-lan, LI Zhen-liang, PENG Chao, <i>et al.</i> (61)
Analysis of O ₃ Pollution Affected by a Succession of Three Landfall Typhoons in 2020 in Eastern China	HUA Cong, YOU Yuan, WANG Qian, <i>et al.</i> (71)
Characteristics and Source Apportionment of VOCs Initial Mixing Ratio in Beijing During Summer	ZHANG Bo-tao, JING Kuan, WANG Qin, <i>et al.</i> (81)
Review of Comprehensive Evaluation System of Vehicle Pollution and Carbon Synergistic Reduction	FAN Zhao-yang, TONG Hui, LIANG Xiao-yu, <i>et al.</i> (93)
Study of Peak Carbon Emission of a City in Yangtze River Delta Based on LEAP Model	YANG Feng, ZHANG Gui-chi, SUN Ji, <i>et al.</i> (104)
Driving Forces and Mitigation Potential of CO ₂ Emissions for Ship Transportation in Guangdong Province, China	WENG Shu-juan, LIU Ying-ying, TANG Feng, <i>et al.</i> (115)
Carbon Emission Characteristics and Influencing Factors of Typical Processes in Drinking Water Treatment Plant	ZHANG Xiang-yu, HU Jian-kun, MA Kai, <i>et al.</i> (123)
Distribution Characteristics of Arsenic in Drinking Water in China and Its Health Risk Based on Disability-adjusted Life Years	DOU Dian-cheng, QI Rong, XIAO Shu-min, <i>et al.</i> (131)
Spatiotemporal Occurrence of Organophosphate Esters in the Surface Water and Sediment of Taihu Lake and Relevant Risk Assessment	ZHANG Cheng-nuo, ZHONG Qin, LUAN Bo-wen, <i>et al.</i> (140)
Exposure Level and Risk Impact Assessment of Pesticides and Veterinary Drugs in Aquaculture Environment	ZHANG Kai-wen, ZHANG Hai-yan, KONG Cong, <i>et al.</i> (151)
Variation in Phosphorus Concentration and Flux at Zhutuo Section in the Yangtze River and Source Apportionment	LOU Bao-feng, XIE Wei-min, HUANG Bo, <i>et al.</i> (159)
“Load-Unload” Effect of Manganese Oxides on Phosphorus in Surface Water of the Pearl River Estuary	LI Rui, LIANG Zuo-bing, WU Qi-rui, <i>et al.</i> (173)
Factors Influencing the Variation in Phytoplankton Functional Groups in Fuchunjiang Reservoir	ZHANG Ping, WANG Wei, ZHU Meng-yuan, <i>et al.</i> (181)
Hydrochemical Characteristics and Formation Mechanism of Groundwater in the Western Region of Hepu Basin, Beihai City	CHEN Wen, WU Ya, ZHANG Hong-xin, <i>et al.</i> (194)
Controlling Factors of Groundwater Salinization and Pollution in the Oasis Zone of the Cherchen River Basin of Xinjiang	LI Jun, OUYANG Hong-tao, ZHOU Jin-long (207)
Spatial-temporal Evolution of Ecosystem Health and Its Influencing Factors in Beijing-Tianjin-Hebei Region	LI Kui-ming, WANG Xiao-yan, YAO Luo-lan (218)
Spatial and Temporal Evolution and Impact Factors Analysis of Ecosystem Service Value in the Liaohe River Delta over the Past 30 Years	WANG Geng, ZHANG Fu-rong (228)
Effects of Photovoltaic Power Station Construction on Terrestrial Environment: Retrospect and Prospect	TIAN Zheng-qing, ZHANG Yong, LIU Xiang, <i>et al.</i> (239)
Spatiotemporal Evolution and Quantitative Attribution Analysis of Vegetation NDVI in Greater Khingan Mountains Forest-Steppe Ecotone	SHI Song, LI Wen, QU Chen, <i>et al.</i> (248)
Spatio-temporal Variation in Net Primary Productivity of Different Vegetation Types and Its Influencing Factors Exploration in Southwest China	XU Yong, ZHENG Zhi-wei, MENG Yu-chi, <i>et al.</i> (262)
Impacts of Extreme Climate Events at Different Altitudinal Gradients on Vegetation NPP in Songhua River Basin	CUI Song, JIA Zhao-yang, GUO Liang, <i>et al.</i> (275)
Spatial and Temporal Evolution and Prediction of Carbon Storage in Kunming City Based on InVEST and CA-Markov Model	Paruke Wusimanjiang, AI Dong, FANG Yi-shu, <i>et al.</i> (287)
Spatial-Temporal Evolution and Prediction of Carbon Storage in Jiuquan City Ecosystem Based on PLUS-InVEST Model	SHI Jing, SHI Pei-ji, WANG Zi-yang, <i>et al.</i> (300)
Soil Carbon Pool Allocation Dynamics During Soil Development in the Lower Yangtze River Alluvial Plain	HU Dan-yang, ZHANG Huan, SU Bao-wei, <i>et al.</i> (314)
Spatial Distribution Patterns of Soil Organic Carbon in Karst Forests of the Lijiang River Basin and Its Driving Factors	SHEN Kai-hui, WEI Shi-guang, LI Lin, <i>et al.</i> (323)
Effect of Land Use on the Stability of Soil Organic Carbon in a Karst Region	CHEN Jian-qi, JIA Ya-nan, HE Qiu-fang, <i>et al.</i> (335)
Spatial Distribution Characteristics of Soil Carbon and Nitrogen in Citrus Orchards on the Slope of Purple Soil Hilly Area	LI Zi-yang, CHEN Lu, ZHAO Peng, <i>et al.</i> (343)
Effects of Experimental Nitrogen Deposition and Litter Manipulation on Soil Organic Components and Enzyme Activity of Latosol in Tropical Rubber Plantations	XUE Xin-xin, REN Chang-qi, LUO Xue-hua, <i>et al.</i> (354)
Analysis on Driving Factors, Reduction Potential, and Environmental Effect of Inorganic Fertilizer Input in Chongqing	LIANG Tao, ZHAO Jing-kun, LI Hong-mei, <i>et al.</i> (364)
Research Progress on Distribution, Transportation, and Control of Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Chinese Soils	LIU Hao-ran, XING Jing-yi, REN Wen-jie (376)
Prediction of Spatial Distribution of Heavy Metals in Cultivated Soil Based on Multi-source Auxiliary Variables and Random Forest Model	XIE Xue-feng, GUO Wei-wei, PU Li-jie, <i>et al.</i> (386)
Health Risk Assessment and Priority Control Factors Analysis of Heavy Metals in Agricultural Soils Based on Source-oriented	MA Jie, GE Miao, WANG Sheng-lan, <i>et al.</i> (396)
Contamination Characteristics and Source Apportionment of Soil Heavy Metals in an Abandoned Pyrite Mining Area of Tongling City, China	LI Ru-zhong, LIU Yu-hao, HUANG Yan-huan, <i>et al.</i> (407)
Source Appointment and Assessment of Heavy Metal Pollution in Surface Dust in the Main District Bus Stops of Tianshui City	LI Chun-yan, WANG Xin-min, WANG Hai, <i>et al.</i> (417)
Response of Cadmium in Soil-rice to Different Conditioners Based on Field Trials	TANG Le-bin, LIU Xin-cai, SONG Bo, <i>et al.</i> (429)
Regulation Effects of Humus Active Components on Soil Cadmium Availability and Critical Threshold for Rice Safety	HU Xiu-zhi, SONG Yi, WANG Tian-yu, <i>et al.</i> (439)
Using Biochar and Iron-calcium Material to Remediate Paddy Soil Contaminated by Cadmium and Arsenic	WU Qiu-chan, WU Ji-zi, ZHAO Ke-li, <i>et al.</i> (450)
Research Progress on Characteristics of Human Microplastic Pollution and Health Risks	MA Min-dong, ZHAO Yang-chen, ZHU Long, <i>et al.</i> (459)
Effects of Polystyrene Microplastics Combined with Cadmium Contamination on Soil Physicochemical Properties and Physiological Ecology of <i>Lactuca sativa</i>	NIU Jia-rui, ZOU Yong-jun, JIAN Min-fei, <i>et al.</i> (470)
Transcriptome Analysis of Plant Growth-promoting Bacteria Alleviating Microplastic and Heavy Metal Combined Pollution Stress in Sorghum	LIU Yong-qi, ZHAO Si-yu, REN Xue-min, <i>et al.</i> (480)
Effects of Microplastics on the Leaching of Nutrients and Cadmium from Soil	ZHAO Qun-fang, CHU Long-wei, DING Yuan-hong, <i>et al.</i> (489)
Effect of Microplastics and Phenanthrene on Soil Chemical Properties, Enzymatic Activities, and Microbial Communities	LIU Sha-sha, QIN Jian-qiao, WU Xian-ge (496)
Prediction of Soil Bacterial Community Structure and Function in Minqin Desert-oasis Ecotone Artificial <i>Haloxylon ammodendron</i> Forest	WANG An-lin, MA Rui, MA Yan-jun, <i>et al.</i> (508)
Response of Soil Fungal Community to Biochar Application Under Different Irrigation Water Salinity	ZHENG Zhi-yu, GUO Xiao-wen, MIN Wei (520)
Effects of Organic Fertilizer of Kitchen Waste on Soil Microbial Activity and Function	LIU Mei-ling, WANG Yi-min, JIN Wen-hao, <i>et al.</i> (530)
Response Characteristics of Soil Fungal Community Structure to Long-term Continuous Cropping of Pepper	CHEN Fen, YU Gao, WANG Xie-feng, <i>et al.</i> (543)
Effects of Foliar Application of Silicon Fertilizers on Phyllosphere Bacterial Community and Functional Genes of Paddy Irrigated with Reclaimed Water	LIANG Sheng-xian, LIU Chun-cheng, HU Chao, <i>et al.</i> (555)
Analysis of Bacterial Communities and Antibiotic Resistance Genes in the Aquaculture Area of Changli County	WANG Qiu-shui, CHENG Bo, LIU Yue, <i>et al.</i> (567)
High-throughput qPCR and Amplicon Sequencing as Complementary Methods for Profiling Antibiotic Resistance Genes in Urban Wetland Parks	HUANG Fu-yi, ZHOU Shu-yi-dan, PAN Ting, <i>et al.</i> (576)
Characteristics of Vertical Distribution and Environmental Factors of Antibiotics in Quaternary Sedimentary Column in Urban Areas	LIU Ke, TONG Lei, GAN Cui, <i>et al.</i> (584)
Adsorption Performance and Mechanism of Oxytetracycline in Water by KOH Modified Biochar Derived from Corn Straw	LIU Zong-tang, SUN Yu-feng, FEI Zheng-hao, <i>et al.</i> (594)
Comparison of Pb ²⁺ Adsorption Properties of Biochars Modified Through CO ₂ Atmosphere Pyrolysis and Nitric Acid	JIANG Hao, CHEN Rui-zhi, ZHU Zi-yang, <i>et al.</i> (606)