

李世杰,张 晖,冯微微,等.融合污染源解析的矿区土壤重金属空间建模 [J]. 中国环境科学, 2025,45(3):1444-1455.

Li S J, Zhang H, Feng H H, et al. Spatial modeling of soil heavy metals in mining areas incorporating pollution source analysis [J]. China Environmental Science, 2025,45(3):1444-1455.

融合污染源解析的矿区土壤重金属空间建模

李世杰^{1,2,3},张 晖^{1,4},冯微微^{1,2*},王 珍² (1.自然资源部城市国土资源监测与仿真重点实验室,广东 深圳 518000; 2.中南大学地球科学与信息物理学院,湖南 长沙 410083; 3.国家林业和草原局中南调查规划院,湖南 长沙 410083; 4.深圳市自然资源和不动产评估发展研究中心,广东 深圳 518000)

摘要: 以某典型矿区为例,结合数理统计分析以及 PMF 源解析等手段,定性定量识别区域重点污染源及其贡献特征.在此基础上,筛选主导环境变量和最佳空间尺度,研究构建顾及污染源空间特征和主导环境因子的矿区土壤重金属空间模型.研究结果表明,研究区的重金属污染来源包括自然源、废气排放源、废渣排放源、废水排放源和交通源,综合贡献率分别为 8.40%、9.55%、1.73%、55.37%、24.99%,大气沉降($q=0.113$)和土壤淋溶($q=0.097$)是主要的重金属输入和输出路径.不同建模策略的土壤重金属模拟结果差异较大,综合考虑污染源空间特征与环境变量的模型预测精度最高,其次为基于主导环境因子的模型,基于污染源空间特征的模型预测效果相对较差;在建模方法上,地理加权回归克里格(GWRK)模型在不同数据聚合下展现了较高的预测精度($mRadius=0.2916$).本研究结果为扩展矿区土壤污染风险区识别的新思路提供了科学依据,强化了对土壤重金属污染影响因素与含量之间生态环境效应的认识,并为分区防治工作提供了有效的参考.

关键词: 土壤重金属; 重点污染源; 地理探测器; 空间预测

中图分类号: X53 文献标识码: A 文章编号: 1000-6923(2025)03-1444-12

Spatial modeling of soil heavy metals in mining areas incorporating pollution source analysis. LI Shi-jie^{1,2,3}, ZHANG Hui^{1,4}, FENG Hui-hui^{1,2*}, WANG Zhen² (1.Key Laboratory of Urban Land Resources Monitoring and Simulation, Ministry of Natural Resources, Shenzhen 518000, China; 2.School of Earth Science and Information Physics, Central South University, Changsha 410083, China; 3.Central South Survey and Planning Institute, National Forestry and Grassland Administration, Changsha 410083, China; 4.Development Research Center for Natural Resource and Real Estate Assessment, Shenzhen 518000, China). *China Environmental Science*, 2025,45(3): 1444~1455

Abstract: Taking a typical mining area as an example, statistical methods and Positive Matrix Factorization (PMF) were integrated to qualitatively and quantitatively identify key regional pollution sources and their contributors. A spatial model was further constructed, considering the spatial heterogeneity of soil heavy metal pollution and its dominant environmental drivers, with the best environmental variables and spatial scale being selected. The results revealed that the sources of soil heavy metal pollution were natural sources, exhaust gas emission sources, slag emission sources, wastewater emission sources, and transportation sources, with contributions of 8.40%, 9.55%, 1.73%, 55.37%, and 24.99% of the total pollution, respectively. Notably, atmospheric deposition ($q = 0.113$) and soil leaching ($q=0.097$) were identified as the primary input and output pathways for heavy metals. Among various spatial modeling strategies, the model that integrated both spatial pollution source characteristics and environmental variables demonstrated the highest predictive accuracy, outperforming the model based solely on dominant environmental factors or pollution source characteristics. The importance of incorporating spatial information to enhance model performance was highlighted by this finding. In particular, the Geographically Weighted Regression Kriging (GWRK) model was found to achieve superior predictive accuracy ($mRadius=0.2916$) when multiple data sources were integrated. Overall, a scientific foundation was provided for identifying high-risk soil pollution zones in mining regions, the understanding of ecological and environmental interactions between influencing factors and heavy metal contamination was enhanced, and valuable insights were offered for spatially targeted pollution control strategies.

Key words: soil heavy metals; key pollution sources; geographical detector; spatial prediction

土壤污染已成为严峻的环境问题,严重威胁着区域的生态环境安全和农业生产.其中土壤重金属污染因其危害大、降解难等特征,成为我国最严重的土壤污染类型.开展区域土壤重金属监测以及污染

收稿日期: 2024-08-22

基金项目: 国家重点研发计划(2022YFD1700100);自然资源部城市国土资源监测与仿真重点实验室开放基金资助项目(KF-2022-07-021);湖南省自然科学基金杰出青年项目(2024JJ2071)

* 责任作者, 教授, hhfeng@csu.edu.cn

源识别,成为准确把握区域土壤重金属污染状况,辅助开展相关治理与规划的重要前提^[1]。

传统地面调查方法虽然精度较高,但费时费力,加之有限站点的监测数据难以反映区域大范围重金属和污染源的空间差异性。另一方面,土壤重金属影响因素复杂,既有污染源等排放特征的影响^[2-3],同时也受气象、地形、土地利用等的影响呈现复杂的扩散特征,不同因素间存在复杂的交互作用,导致解析与厘清各因子的影响方式与贡献特征依然具有较大挑战。以上问题导致重金属污染依然存在“污染现状不清楚、污染来源不明确”等瓶颈,严重制约了矿区土壤重金属精准防治策略的制定与实施。为此,国内外研究学者从定性和定量的角度进行污染源解析,前者通过多元统计分析^[4-5]、机器学习^[6]、地统计分析^[7-8]和地球化学特征分析^[9]等方法,深入了解污染来源、迁移和转化过程,定性识别并确定土壤中重金属的主要污染源。后者则是利用受体模型^[10-11]和示踪技术^[12],定量识别不同污染源对土壤重金属含量的贡献率^[13]。同时土壤重金属的空间分布存在复杂多变的相关性与变异性,对土壤重金属的空间分布作定量精准化的描述相当困难^[14-15]。相较于前人研究多集中于城市^[16-17]、农田^[18-19]或大范围区域^[20-21],本文聚焦典型矿区^[22]这一特殊区域,系统地研究其土壤重金属污染特征与来源,针对矿区复杂的污染源组合及其脆弱的生态环境开展分析。

基于此,本文以湖南省某典型矿区为研究区,提出了顾及污染源空间特征与多尺度地理环境变量的矿区综合空间预测模型,探究污染源贡献率空间特征、区域主导环境因子及其交互作用关系,结合地统计插值、多元线性回归和机器学习等方法,对比分析不同情景下以及不同数据聚合情况下建模精度,进一步揭示污染源空间特征对土壤重金属建模作用效果及精度变化,以期为典型矿区土壤重金属污染治理和风险管控提供科学依据与支撑。

1 材料与方法

1.1 研究区概况

矿区总体面积 30.98km²(图 1),地势南高北低,东西南三面群山簇立,沟谷纵横,北面为丘陵,地势开阔。地表水系呈树枝状分布,主干河流东河自南向北穿流而过并汇入东江。矿区内矿产资源类型

多样、储量丰富,拥有多个采选冶工厂、尾矿库、露天矿场、废石场及历史遗留的各类固废堆场等,地表类型以工矿用地及未利用地为主,农用地较少。常年的采矿活动同时也造成该矿区多种重金属随着地面径流等因素向四周迁移扩散,并在沿线土壤、河道累积,使得矿区及周边整体土壤污染状况不容乐观。

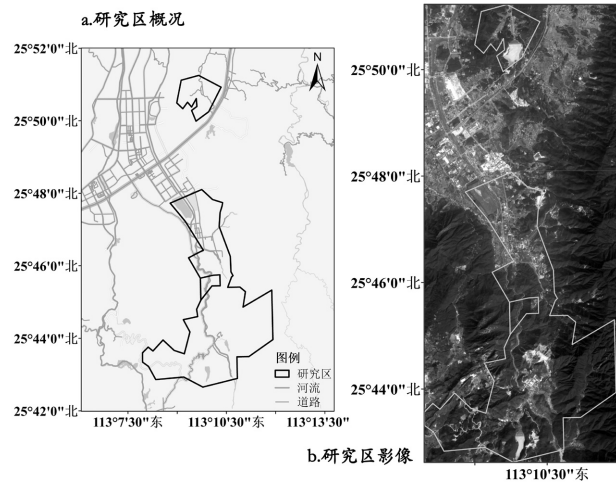


图 1 典型矿区概况

Fig.1 The spatial pattern of typical mining area

1.2 样品采集

基于研究区的地形地貌特性与研究目的,于 2021 年 9 月 16~30 日选取尾矿库、采选冶企业等污染源周边、河流水系周边、尾砂/矿渣交通运输路线等周边区域的未利用地和工业用地开展土壤样品采集实验,确保各个采样点的代表性(图 2)。实验过程严格遵守《土壤环境监测技术规范(HJ/T166-2004)》和预设实验方案,采用五点法收集每个采样位置表层大约 0~20cm 深度范围的土壤样本(不少于 2kg),并使用手持 GPS 在 WGS84 地理坐标系下记录采样点的经纬度坐标数据。最终在研究区范围内共采集土壤样品 288 个。根据研究需要,共测定了 Cd、As、Zn、Ni、Hg 和 Cr 等 6 种重金属含量数据。采集的土壤样本首先在干燥、通风和避光条件下自然风干,分离出植被和石头等较大的残留物。样品经研磨后,再通过孔径为 0.15mm 的 100 目尼龙筛剔除较小的杂质。继而,采用电感耦合等离子体质谱法(ICP-MS,7500a, Agilent Technologies, USA)测定了 Cd、As、Zn、Ni、Cr 等元素,采用冷原子吸收法(CVAAS, F732-VJ, PerkinElmer, USA)测定了 Hg 元素。

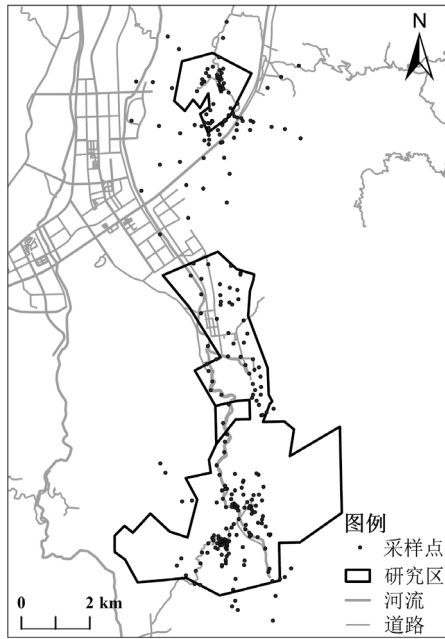


图2 土壤采样点空间分布

Fig.2 The spatial distribution of soil sampling points

1.3 污染源解析方法

PMF(Positive Matrix Factorization)是一种由Paatero和Tapper在1993年提出的数据分析技术,特别适用于处理环境科学中颗粒物来源解析的问题.其核心原理在于通过计算颗粒物中各化学组分的权重误差,并借助最小二乘法来识别主要污染源及其相应的贡献率,从而最小化目标函数 Q .该模型将采样数据矩阵(X)分解成因子贡献矩阵(G)、因子成分矩阵(F)和残差矩阵(E),以表示 X 与 G 、 F 之间的差异^[23].其公式如下:

$$X_{a \times b} = G_{a \times p} \cdot F_{p \times b} + E_{a \times b} \quad (1)$$

$$Q = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left(\frac{e_{ij}}{s_{ij}} \right)^2 \quad (2)$$

$$e_{ij} = x_{ij} - \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj} \quad (3)$$

式中: a 为土壤样本点个数; b 为测试的重金属类型; p 为主因子数(即主要源个数); s 为 X 的标准偏差; X 、 G 、 F 和 E 的矩阵元素分别为 x_{ij} 、 g_{ik} 、 f_{kj} 和 e_{ij} .

1.4 主导驱动变量识别方法

基于最优参数的地理检测器(OPGD)模型^[24]是由因子检测器、参数优化模块、交互作用检测器、风险评估器以及生态监测器组成.因子检测器作为该模型的核心,利用 q 统计量精准地识别并量化各解释变量在地理现象中的相

对重要性:

$$q_v = 1 - \frac{\sum_{j=1}^M N_{v,j} \sigma_{v,j}^2}{N_v \sigma_v^2} = 1 - \frac{WS}{WT} \quad (4)$$

式中: $j=1, \dots, M$ 为土壤重金属影响因素的分类或分区; $N_{v,j}$ 和 N_v 分别为该分类(区)和全区的数量; WS 和 WT 分别为区内方差之和和全区总方差.

1.5 空间建模方法

本研究分别采用普通克里格插值^[25]、经验贝叶斯克里格法插值^[26]、反距离加权插值^[27]、径向基函数插值^[28]、回归克里格^[29]、随机森林^[30]、多尺度地理加权回归模型^[31]等方法进行土壤重金属空间建模.基于引进的Yang等^[32]提出的Radius指标,提出了一种结合了误差特征的Radius指数和反映模型预测与实际值相关性的 R^2 指标的mRadius指数,对比不同类别模型预测精度.

$$\text{Radius} = 100 \sqrt{(\text{MEs})^2 + (\text{MAEs})^2 + (\text{RMSEs})^2} \quad (5)$$

$$\text{mRadius} = \left(\frac{130 - \text{Radius}}{100} \right) 0.5 + R^2 \cdot 0.5 \quad (6)$$

式中:Radius为Radius指数;mRadius为改进的Radius指数;MEs、MAEs、RMSEs是使用Z得分法进行标准化后的ME、MAE、RMSE;根据130为阈值调整Radius值,同时将其进行标准化和缩放后转换在特定范围内,更有利于精度间比较,该指数越大则说明模型效果越好.

2 结果与分析

2.1 土壤重金属统计性描述

由表1可见,Cd、Zn、Hg和Cr的平均浓度均超过湖南省相应背景值1.094~20.978倍.变异系数(CV)反映了样品数据波动特征的指标,除As以外,所有重金属元素的CV值均高于30%,空间变异性较强.

2.2 污染源识别与解析

Cd-Zn和Ni-Cr表现出显著的正相关性(图3),Pearson相关系数分别为0.31和0.27,表明这两对金属元素之间存在一定的线性同向关系.这意味着它们可能来自相同的污染源,或在相似的环境下有着共同的累积和迁移机制.Zn-Cr之间表现出显著的负相关性(相关系数为-0.34),两者可能来自不同的污染源或在土壤中有着不同的分布和迁移路径.

表 1 土壤重金属统计性描述
Table 1 Statistical description of soil heavy metals

	土壤中的元素浓度(mg/kg)					
	Cd	As	Zn	Ni	Hg	Cr
最大值	15.743	19.057	1841.744	54.306	1.477	130.329
最小值	0.074	2.698	24.637	0.590	0.173	0.648
中值	1.357	8.706	176.715	21.574	0.630	64.454
平均值	2.727	8.796	314.062	20.946	0.664	62.664
标准差	3.515	2.608	375.681	9.792	0.231	23.074
变异系数(%)	128.902	29.647	119.620	46.749	34.851	36.822
背景值	0.13	15	94.4	24.9	0.12	57.3
筛选值*	0.3	30	250	100	2.4	200
管控值*	3.0	120	—	—	4.0	1000

注:*选自《土壤环境质量农用地土壤污染风险管控标准》(GB 15618—2018)中6.5<pH≤7.5范围的标准。

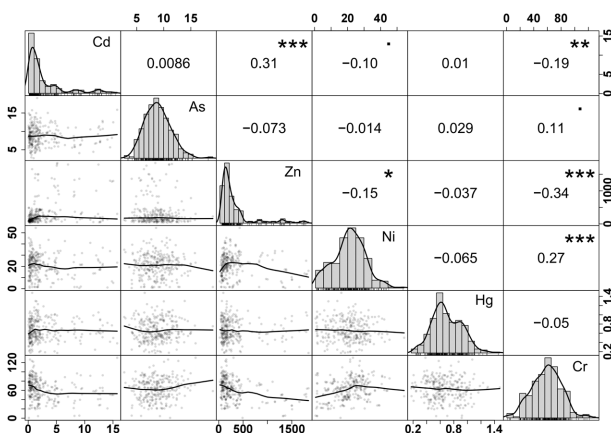


图 3 土壤重金属相关矩阵分析

Fig.3 Correlation matrix analysis of soil heavy metals

PMF 模型源解析结果如图 4 所示.因子 1 对 As 元素的贡献率尤为显著,高达 57.2%,同时在其他重金属元素上也展现出相对较高的贡献率.鉴于研究区域内 As 的平均含量低于湖南省土壤环境背景值,且超标率仅为 1.43%,这表明人为活动对其影响较小.因此倾向于将因子 1 识别为由成土母质影响下的自然源.

另一方面,因子 2 在 Hg 上的贡献率最为突出,达到了 64.1%,随后是 Cr(24.9%)、Ni(23.4%)和 Zn(5.7%)等元素.考虑到我国主要的汞排放源来自有色金属冶炼、燃煤和汞矿开采等工业活动,并且工业生产中的焚烧和电镀等工艺也常伴随着 Ni 与 Cr 的废气排放,废气中的颗粒物或挥发性物质通过大气沉降和降雨等途径沉积至土壤中,因此因子 2 可被认定为工业废气排放源.

因子 3 对 Cd 的贡献率最高,为 80.7%,其余几种重金属元素占比相对较少.Cd 主要受重金属尾矿、

冶炼废渣和矿渣堆放等因素的影响,因此将因子 3 识别为工业生产过程中废渣排放源.

因子 4 以 Zn 元素贡献为主(72.5%),其次为 As(6.4%)、Cd(5.0%)等,金属加工、冶炼与电镀工业以含 Zn 元素废水排放为主,而 Cd、As、Ni 和 Cr 也是其重要污染物.因此,将因子 4 识别为工业生产过程中废水排放源.

因子 5 对 6 种重金属元素的贡献率均不同,其中 Ni 的贡献率最高,达到 70.5%,其次是 Cr,贡献率为 63.0%.上文中相关性研究表明 Ni 和 Cr 这两种元素在含量上呈现出较强的相关性,表明它们可能具有部分相同的来源或形成机制.Cr 作为燃油中的常见成分,它们可能通过尾气排放进入空气中,随后沉降到土壤中.同时车辆在道路行驶过程中产生的磨损和摩擦也会释放 Ni 等重金属颗粒物.因此,将因子 5 识别为交通源.

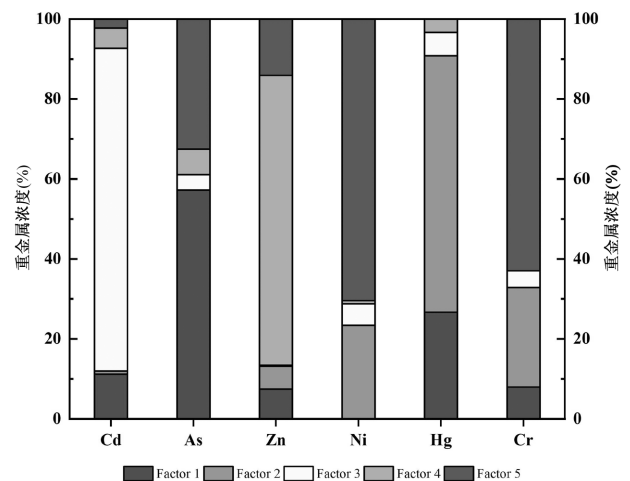


图 4 PMF 污染源解析

Fig.4 PMF pollution source analysis

污染源贡献率空间分布如图5所示,因子1是自然源,该源对整个研究区的土壤样品均具有较大的贡献,贡献率大多在25%以上,其高值区则主要分布在研究区边缘地区,受人类活动影响较小;因子2代表工业源中的废气排放源,作为迁徙源具有明显的区域聚集性,其对大部分地区的影响较小,贡献率大多低于20%.高值区则主要分布在研究区北部,主要地形为山地,南部邻近区域有大量的矿山开采和重金属冶炼企业;因子3代表工业源中的废渣排放源,主要集中在研究区的中部和南部少数地区,并呈现出明显的空间聚集性,这些特定区域受到了工矿企业活动的显著影响,人为污染问题相对严重;因子4代表工业源中废水排放源,该源的高值点主要沿研究区内河流分布,附近工业活动产生的污水进入河流,同时水的径流效应使得周围土壤的重金属浓度上升;研究区北部是因子5贡献率的高值区域,总体而言,该因子对绝大多数区域的影响较为有限,其贡献率大多数情况下不超过17%.

主要集中在研究区的中部和南部少数地区,并呈现出明显的空间聚集性,这些特定区域受到了工矿企业活动的显著影响,人为污染问题相对严重;因子4代表工业源中废水排放源,该源的高值点主要沿研究区内河流分布,附近工业活动产生的污水进入河流,同时水的径流效应使得周围土壤的重金属浓度上升;研究区北部是因子5贡献率的高值区域,总体而言,该因子对绝大多数区域的影响较为有限,其贡献率大多数情况下不超过17%.

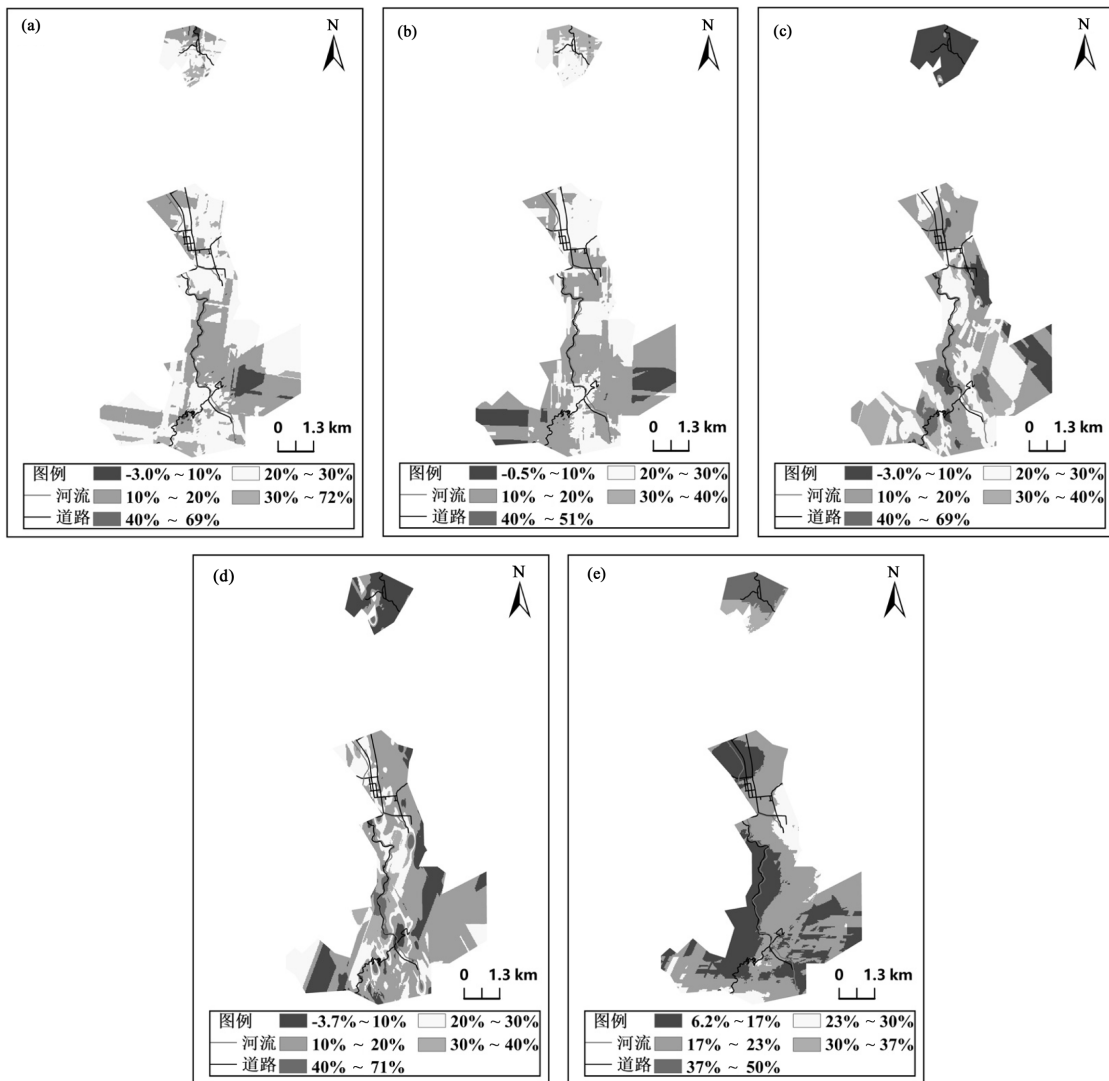


图5 污染源贡献率空间分布
 Fig.5 Spatial distribution of pollution source contributions
 (a)自然源;(b)废气排放源;(c)废渣排放源;(d)废水排放源;(e)交通源)

2.3 土壤重金属主导环境因子识别

结合土壤重金属积聚规律、专家知识以及研究区区域特点,选取土壤属性、人类活动、大气沉降、

土壤淋溶和植被富集为一级特征变量,具体包括23个二级特征变量(表2).其中土壤属性代表表层土壤富集与土壤的理化性质、人类活动和大气沉降代表

重金属主要输入途径,土壤淋溶和植被富集则作为主要的输出途径,可以实现对土壤重金属的来源、分布、迁移和累积的全面分析,有助于评估土壤重金属对环境和人类健康的潜在影响,以及采取适当的管理和修复措施。

地理探测器单因子探测结果表明,各因素解释力的排序为大气沉降因子(0.113)>土壤淋溶因子(0.097)>人类活动因子(0.078)>植被富集因子(0.070)>土壤属性因子(0.064),其中污染源贡献率、气温、风速、相对湿度和土壤黏粒占比对土壤 Cd 含量的驱动力较高分别为 0.147、0.144、0.141、0.139 和 0.121,是土壤 Cd 含量积累的主要环境因素,而夜间灯光指数和 pH 值的驱动力最小,均为 0.018。

利用交互作用探测器分析多种因子对重金属空间分布的交互影响程度,有利于精确揭示影响重金属空间分布的深层次驱动机制^[33-34]。结果如图 6 所示,RSEI、PM_{2.5}、风速、气温、相对湿度、降雨以及高程之间存在较强的相关性,其中高程与降雨量之间呈现出最大显著正相关(0.96),PM_{2.5}与 RSEI 呈现最大显著负相关(-0.92)。不同因素综合作用后皆增强对土壤重金属 Cd 的解释力,包括 114 对双因素增强和 186 对非线性增强,污染源贡献率与其余因子的组合影响力占主导地位,均值约为 0.289。其中“污染源贡献率-降雨量”的交互解释力最高为

0.376。气温、风速、相对湿度和土壤黏粒占比次之,交互作用均值分别为 0.219、0.219、0.139 和 0.121。

表 2 矿区土壤重金属影响因素指标体系

Table 2 Indicator system of soil heavy metal influencing factors in mining areas

一级变量	二级变量	详细描述
土壤属性	SOC	代表土壤内在性质
	TN	
	TP	
	TK	
	CEC	
	pH 值	
人类活动	土地利用	代表土地的开发程度和利用方式
	夜间灯光指数	代表城市化与经济发展程度
	污染源贡献率	代表重点污染企业影响程度
	生态环境状况指数	代表污染风险程度
大气沉降	PM _{2.5}	代表大气微粒密度
	风速	代表大气微粒沉降强度
	气温	代表大气微粒热运动程度
	相对湿度	代表大气中水蒸气含量
	距道路距离	代表道路汽车扬尘强度
	土壤淋溶	年降水量
距河流距离		
高程		
TWI		
土壤砂粒含量		
土壤粉粒含量		代表土壤保水能力强度
植被富集	土壤侵蚀因子	代表生物生存风险程度
	植被覆盖度	代表地表植被覆盖程度
	近地面地温	代表地表生物活性强度

表 3 矿区土壤重金属影响因素主导因子排序

Table 3 Ranking of dominant factors affecting soil heavy metals in mining areas

因素	q	排序	因素	q	排序		
土壤属性	SOC	0.044	20	大气沉降	PM _{2.5}	0.094	13
	TN	0.048	18		风速	0.141	3
	TP	0.080	17		气温	0.144	2
	TK	0.111	8		相对湿度	0.139	4
	CEC	0.081	16		距道路距离	0.046	19
	pH	0.018	24		土壤淋溶	年降水量	0.120
人类活动	土地利用	0.044	20	距河流距离		0.100	11
	夜间灯光指数	0.018	24	高程		0.109	9
	污染源贡献率	0.147	1	TWI		0.022	23
	生态环境状况指数	0.102	10	土壤砂粒含量		0.116	7
植被富集	土壤侵蚀因子	0.095	12	土壤粉粒含量		0.089	15
	植被覆盖度	0.024	22	土壤黏粒含量	0.121	5	
	近地面地温	0.091	14				

矿业活动作为重金属的主要输入源,直接增加土壤中 Cd 的含量,交通以及工业活动产生的尘埃和排放物可以通过大气传输并沉降到土壤中,而气温、

风速和相对湿度等因素会作为其中重要角色影响重金属颗粒的扩散、运输和沉降过程。另一方面,夜间灯光指数交互作用最弱,均值约为 0.147,其中“夜

间灯光指数-地形湿度指数”的交互解释力仅为0.061,其原因可能是由于夜间灯光指数不能很好的反映区域产业结构,经济及人口密集度.

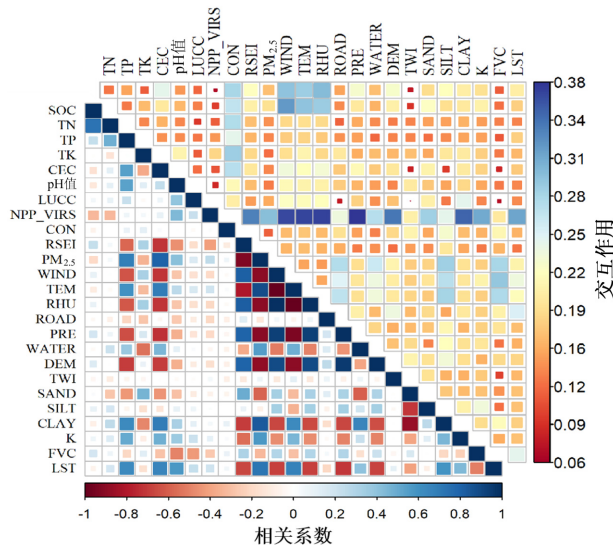


图6 环境因子相关系数及交互探测结果

Fig.6 Correlation coefficients and interaction detection results of environmental factors

表4 矿区土壤重金属最佳尺度分析

Table 4 Optimal scale analysis of heavy metals in mining soils

环境因素	30m	60m	90m	120m	150m
SOC	0.041	0.036	0.038	0.044	0.052
TN	0.053	0.060	0.047	0.048	0.052
TP	0.077	0.083	0.068	0.080	0.084
TK	0.103	0.101	0.095	0.111	0.100
CEC	0.097	0.094	0.091	0.081	0.080
pH 值	0.029	0.024	0.020	0.018	0.011
Lucc	0.011	0.008	0.011	0.044	0.028
NPP_VIRS	0.030	0.032	0.021	0.018	0.025
污染源贡献率	0.160	0.138	0.120	0.147	0.152
RSEI	0.104	0.104	0.110	0.102	0.110
PM _{2.5}	0.093	0.089	0.096	0.094	0.094
WIND	0.136	0.153	0.152	0.141	0.133
TEM	0.128	0.139	0.143	0.144	0.133
RHU	0.133	0.136	0.138	0.139	0.142
距道路距离	0.028	0.034	0.025	0.046	0.032
PRE	0.120	0.121	0.120	0.120	0.126
距河流距离	0.110	0.116	0.098	0.100	0.107
DEM	0.102	0.109	0.102	0.109	0.114
TWI	0.026	0.015	0.017	0.022	0.022
土壤砂砾占比	0.119	0.099	0.119	0.116	0.105
土壤粉粒占比	0.070	0.089	0.055	0.089	0.068
土壤黏粒占比	0.123	0.125	0.119	0.121	0.119
土壤可侵蚀性K因子	0.101	0.088	0.091	0.095	0.117
FVC	0.027	0.029	0.031	0.024	0.051
LST	0.098	0.098	0.094	0.091	0.091
q 的 90%分位数	0.1310	0.1372	0.1308	0.1402	0.1330

空间尺度优化旨在确定进行空间分层异质性分析的最佳尺度.在不同的空间尺度下,影响因素可能揭示出显著不同的地理特征.多数因素均随空间网格尺度的增大,q 值也随之变大且逐渐趋于稳定.在选择最佳空间尺度时,通常假设大多数解释变量在不同尺度下达到其最大值^[35].本研究计算了 30m、60m、90m、120m 和 150m 空间尺度下所有影响因素的 q 值的 90%分位数.结果表明,在这五种空间尺度中,q 值呈现波动变化趋势,特别是在 120m 空间网格时,其达到最大值 0.140.因此,在考虑的五种网格中,120m 网格最能有效地反映潜在变量对土壤重金属变化的影响.

2.4 顾及污染源空间特征与环境变量影响的土壤重金属空间模拟

本研究将土壤样本按 4:1 的比例随机划分为训练集和验证集,对土壤 Cd 元素进行对数变换以满足正态分布假设的前提,同时根据 3Sigma 原则剔除离群值,这有助于将均值转化为更具代表性的中心度量.分别依照传统地统计方法(普通克里格 OK、经验贝叶斯克里格 EBK)和确定性方法(反距离加权 IDW 和径向基函数 RBF)进行空间插值.结果所示确定性方法明显高于地统计方法,而 R²均小于 0.4(表 5).

表5 传统空间插值方法预测精度

Table 5 Prediction accuracy of traditional spatial interpolation method

模型	平均误差 ME	平均绝对误差 MAE	均方根误差 RMSE	决定系数 R ²
OK	0.685	1.708	2.853	0.224
EBK	0.857	1.721	2.954	0.251
IDW	0.162	1.708	2.639	0.292
RBF	0.067	1.707	2.600	0.326

2.4.1 基于污染源空间特征的矿区土壤重金属空间建模 采用污染源贡献率作为辅助变量,结合协同克里格(CK)、反距离权重法、地理加权回归(GWR)及多尺度地理加权回归(MGWR),针对污染源空间特征进行建模,以精准反映Cd分布.鉴于矿区范围小且采样非均匀,120m 最优尺度内存在多采样点,增加了像元内空间异质性,可能影响特性真实反映.因此,本研究采用最大值、最小值和平均值三种聚合方法处理同像元内采样点数据.结果显示,引入污染源贡

献率显著提升了预测精度,尤其反距离权重法表现最优($R^2=0.418$, $RMSE=2.500$),随后依次为地理加权回归克里格、多尺度地理加权回归克里格和协同克

里格.然而,不同聚合方法均导致精度下降,归因于数据聚合简化了局部细节和小尺度变异,限制了模型对空间变异性的捕捉能力.

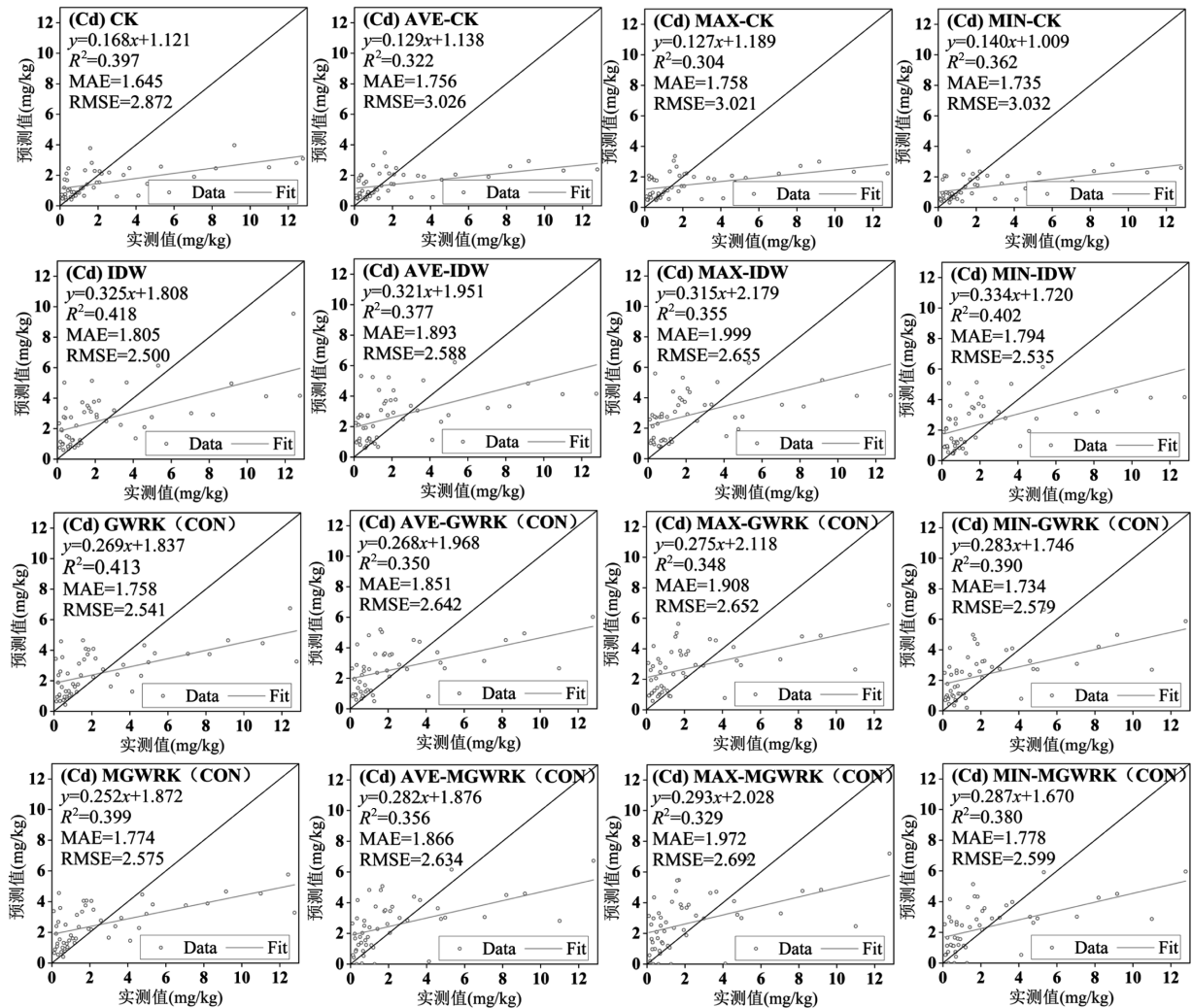


图7 基于污染源空间分布模型预测精度评价

Fig.7 Prediction accuracy evaluation based on pollution source spatial distribution model

2.4.2 基于环境变量影响的矿区土壤重金属 GIS 空间建模 基于主导环境因子,分别构建了逐步多元线性回归模型(MLA)与随机森林模型(RF),并对比了验证集上的 MAE、RMSE 及 R^2 .结果显示,随机森林模型预测精度优于线性模型,尤其是最小值聚合的随机森林模型表现最佳($R^2=0.464$, $RMSE=2.479$).精度差异归因于不同聚合方法对模型学习能力的影 响:平均值聚合减轻了极端值效应,适用于线性假设,而主成分分析降维导致信息损失,最大值聚合则更易受局部异常值干扰,不利于整体趋势预测.

2.4.3 耦合污染源特征与环境变量的矿区土壤重金

属综合建模 本文提出的综合污染源与主导环境因子空间建模方法,不仅整合了研究区关键环境协变量,还纳入了污染源贡献率的空间信息,有效克服了传统克里格模型在模拟环境因子影响方面的局限^[36].鉴于变量输入顺序对模型精度的重要影响,特别是在数据复杂或空间分布不均的情况下,本研究采用逐步回归策略,基于多元线性回归(MLR)筛选的核心变量,通过系统比较各变量加入后的模型 R^2 和 AICc 值,实现了多变量模型的优化构建.具体结果如表 6 所示,MWGR 模型展现了优越的建模性能,其预测精度显著高于 MLR 模型(MAE 降低 18.03%,RMSE 降低

12.98%, R^2 提升 17.87%),且相较于 GWR 模型也有显著提升(MAE 降低 2.93%, RMSE 降低 1.82%, R^2 提升 4.63%).这一结果表明,在小尺度空间内,MGWR 模型

通过融入污染源贡献率和主导环境因子,能够更加精准地反应土壤重金属 Cd 的空间分布特征,能够有效的揭示 Cd 的复杂空间变异关系.

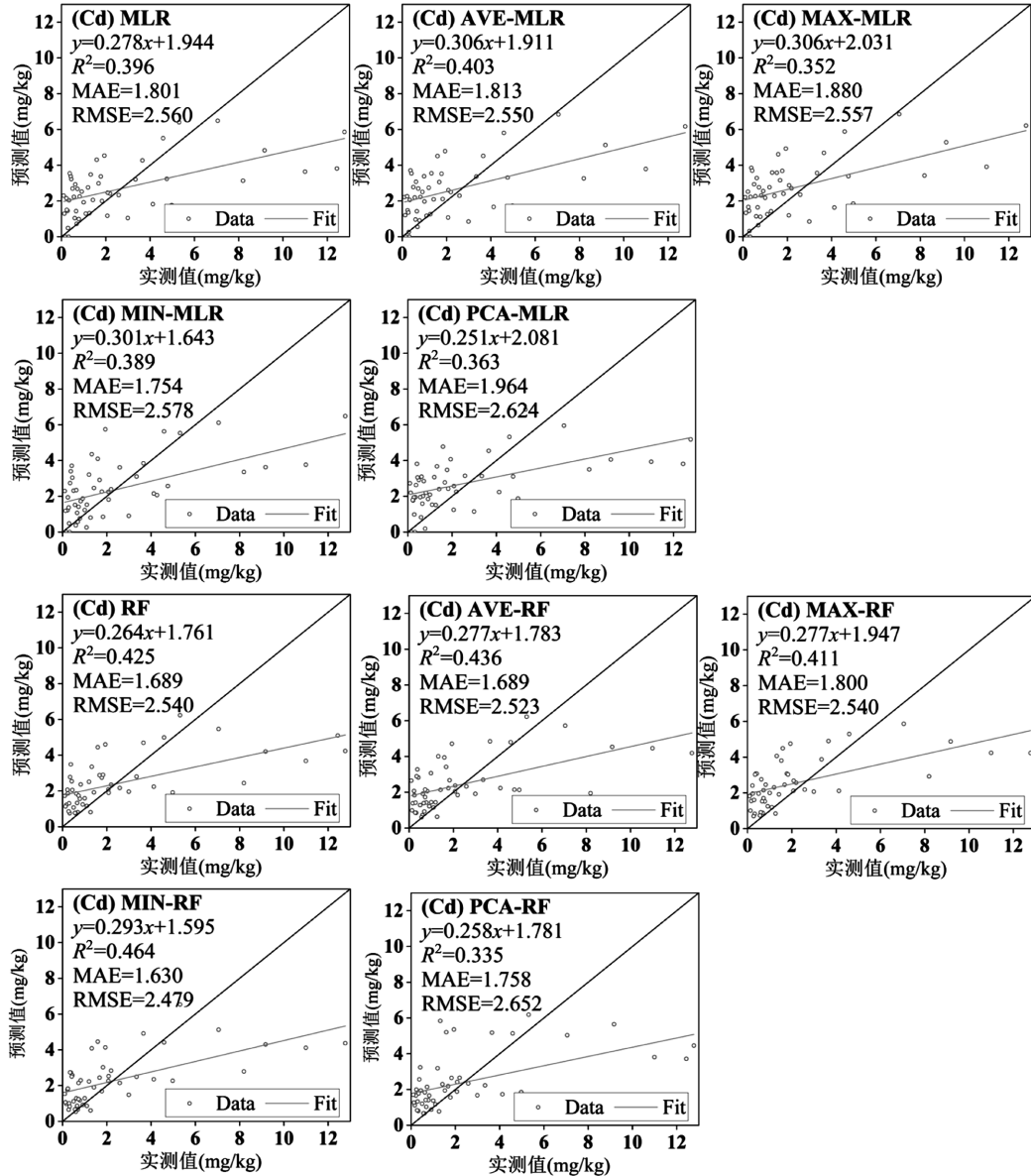


图 8 基于主导环境因子模型预测精度评价

Fig.8 Prediction accuracy evaluation based on dominant driving factor model

表 6 基于污染源空间特征与主导环境因子综合的建模精度对比

Table 6 Comparison of modeling accuracy based on the synthesis of pollution source spatial characteristics and dominant driving factors

模型	平均误差	平均绝对误差	均方根误差	决定系数
	ME	MAE	RMSE	R^2
MLR	-0.142	1.813	2.550	0.403
GWR	-0.018	1.581	2.298	0.454
MWGR	0.040	1.536	2.257	0.475

基于污染源贡献率与主导环境因子构建了回归克里格(RK)、地理加权回归克里格(GWRK)及多尺度地理加权回归克里格(MGWRK)模型,预测值与实测值散点分布以及预测精度参数如图 9 所示.通过交叉验证,对比了 MAE, RMSE 和 R^2 等指标,结果显示综合模型均具备良好空间预测能力.具体而言, GWRK 模型在平均值聚合下表现最优($R^2=0.523$, RMSE=2.461),其次为 RK ($R^2=0.499$, RMSE=2.460)和 MGWRK($R^2=0.491$, RMSE=

2.507)。相较于原始数据,模型解释力分别提升 7.4%、5.94%和 1.44%。研究表明,有效利用矿区污染源分布与

多源数据能显著提升空间模型预测精度,对矿区土壤 Cd 空间模拟的精度提升具有关键作用。

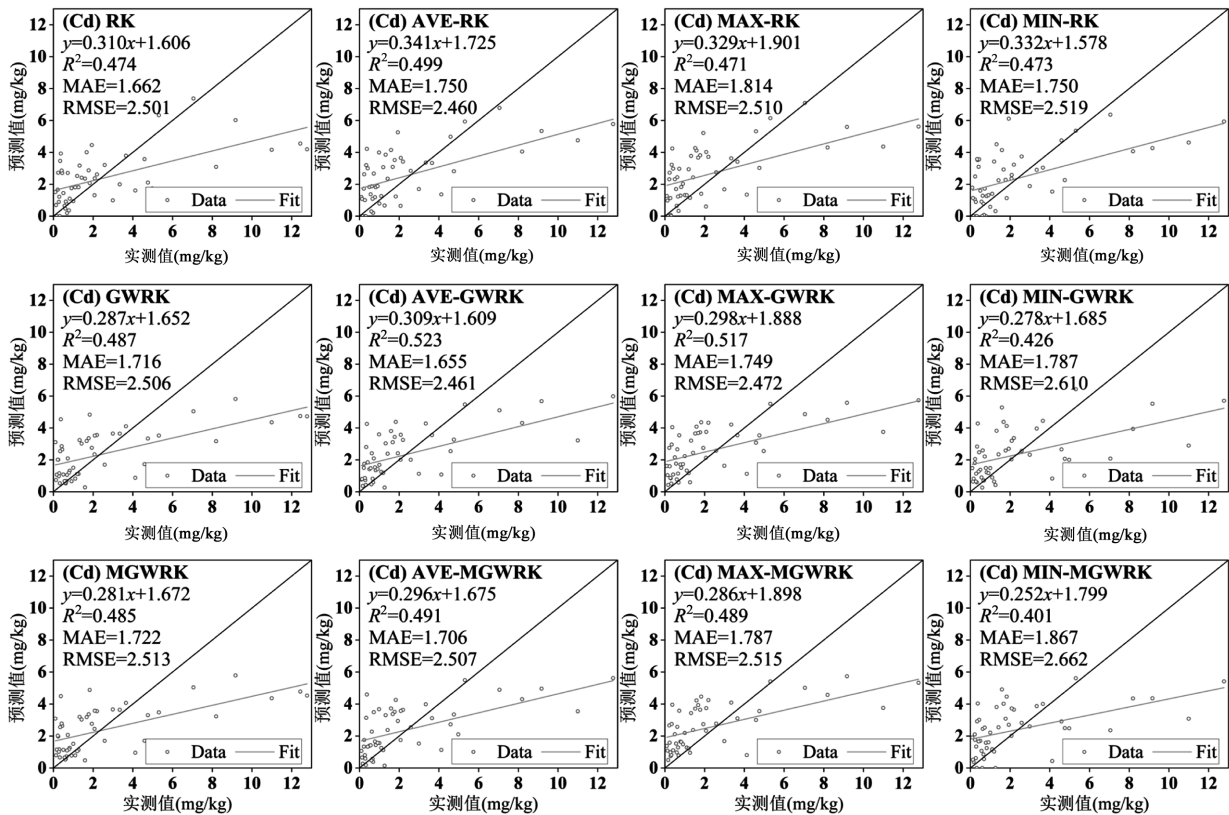


图9 基于主导环境因子模型预测精度评价

Fig.9 Prediction accuracy evaluation based on dominant driving factor model

2.5 模型精度综合对比分析

本文采用 mRadius 指数综合对比评估模型性能。结果表明,耦合污染源特征与环境变量的综合模型预测精度最高,其次为基于主导环境因素的模型,而仅基于污染源空间特征的模型表现相对较为逊色。土壤重金属 Cd 含量的结构性连续组分识别效果并不只由采样点数量决定,在采样策略中优化采样点的位置布局往往比单纯增加样点数量更为关键^[37]。具体来说,GWRK 模型在不同数据聚合下均展现出较高预测精度 (mRadius=0.2916,AVE_mRadius=0.3129,MAX_mRadius=0.3014,MIN_mRadius=0.2613),MGWRK、RF 和 RK 模型预测效果也相对较好。而 MGWR 模型的表现优于 GWR 模型,MGWRK 模型的表现却不及 GWRK 模型的现象,这归因于 MGWR 模型通过差异化带宽精准捕捉变量影响,但带宽差异也导致了残差空间分布不均,进而影响预测精度。相比之下,GWR 模型虽用统一带宽,但在处理空间

变异上更具适应性。

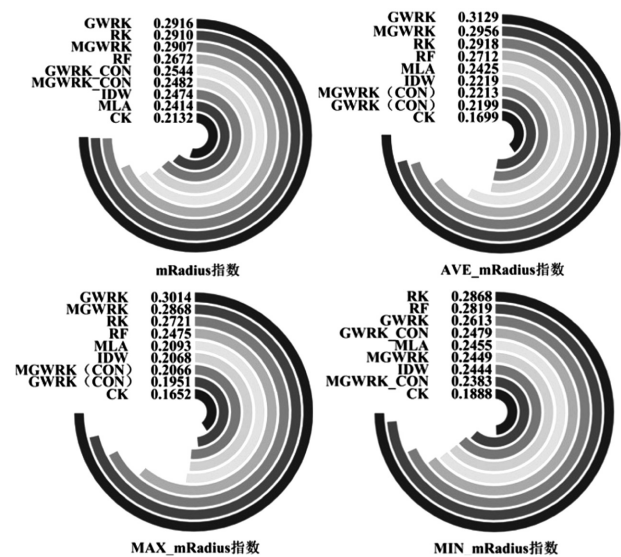


图10 各类模型精度综合比较分析

Fig.10 Comprehensive comparison and analysis of accuracy among various models

3 结论

3.1 相关性分析与 PMF 分析结果表明,研究区土壤重金属主要来自废气、废渣和废水排放源等工业源,综合贡献率分别为 9.55%、1.73%、55.37%,而自然源和交通源综合贡献率为 8.4%和 24.99%。

3.2 地理探测器结果表明,矿区土壤重金属 Cd 含量受大气沉降因子的影响最大($q=0.113$),其次是土壤淋溶因子($q=0.097$)、人类活动因子($q=0.078$)、植被富集因子($q=0.070$)和土壤属性因子($q=0.064$),其中污染源贡献率为主导驱动因子。

3.3 空间建模结果表明,综合模型通过耦合污染源空间特征与关键环境变量显著提升了预测精度,其中 GWRK 模型在多种数据聚合情况下均保持较高水平的预测精度($mRadius=0.2916$)。

参考文献:

- [1] 刘春早,黄益宗,雷鸣,等.湘江流域土壤重金属污染及其生态环境风险评价 [J]. 环境科学, 2012,33(1):260-265.
Liu C Z, Huang Y Z, Lei M, et al. Soil contamination and assessment of heavy metals of Xiangjiang River Basin [J]. Environmental Science, 2012,33(1):260-265.
- [2] 李岩.典型工业聚集区土壤重金属污染特征及成因研究 [D]. 北京:中国地质大学(北京), 2020.
Li Y. Study on the characteristics and causes of heavy metal pollution in typical industrial areas [D]. China University of Geosciences (Beijing), 2020.
- [3] 梁啸.电子废物拆解区典型污染农田的重金属空间分布特征及风险分析 [D]. 兰州:兰州交通大学, 2017.
Liang X. Spatial distribution characteristics and risk analysis of heavy metals in typical contaminated farmland in e-waste dismantling areas [D]. Lanzhou Jiaotong University, 2017.
- [4] Zhao L, Xu Y F, Hou H, et al. Source identification and health risk assessment of metals in urban soils around the Tanggu chemical industrial district, Tianjin, China [J]. Science of the Total Environment, 2014,468:654-662.
- [5] 吴子豪,刘耀林,冯向阳,等.基于多尺度地理加权回归的土壤镉污染局部影响因子分析 [J]. 地球信息科学学报, 2023,25(3):573-587.
Wu Z H, Liu Y L, Feng X Y, et al. Analysis of local influencing factors of cadmium pollution in soil by using multi-scale geographically weighted regression [J]. Journal of Earth Information Science, 2023, 25(3):573-587.
- [6] 解雪峰,郭炜炜,濮励杰,等.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 [J]. 环境科学, 2024,45(1):386-395.
Xie X F, Guo W W, Pu L J, et al. Prediction of spatial distribution of heavy metals in cultivated soil based on multi-source auxiliary variables and random forest model [J]. Environmental Science, 2024, 45(1):386-395.
- [7] Hamlett J M, Miller D A, Day R L, et al. Statewide GIS-based ranking of watersheds for agricultural pollution prevention [J]. Journal of Soil and Water Conservation, 1992,47(5):399-404.
- [8] 高梦绯.基于 GIS 的耕地土壤重金属污染评价与变化趋势研究 [D]. 河南理工大学, 2023.
Gao M F. Evaluation and change trend of heavy metal pollution in cultivated land based on GIS [D]. Henan Polytechnic University, 2023.
- [9] Karim Z, Qureshi B A, Mumtaz M, et al. Heavy metal content in urban soils as an indicator of anthropogenic and natural influences on landscape of Karachi-A multivariate spatio-temporal analysis [J]. Ecological Indicators, 2014,42:20-31.
- [10] 张晓晶,张圣微,卢俊平,等.煤矿聚集区土壤重金属污染风险及 PMF-HHR 模型溯源 [J]. 中国环境科学, 2024,44(11):6291-6301.
Zhang X J, Zhang S W, Lu J P, et al. Risks of heavy metal contamination in soils of coal mining community and traceability based on PMF-HHR model [J]. China Environmental Science, 2024, 44(11):6291-6301.
- [11] 刘楠,唐莹影,陈盟,等.基于 APCS-MLR 和 PMF 的铅锌矿流域土壤重金属来源解析 [J]. 中国环境科学, 2023,43(3):1267-1276.
Liu N, Tang Y Y, Chen M, et al. Source apportionment of soil heavy metals in lead-zinc area based on APCS-MLR and PMF [J]. China Environmental Science, 2023,43(3):1267-1276.
- [12] 宣斌,王济,段志斌,等.铅同位素示踪土壤重金属污染源解析研究进展 [J]. 环境科学与技术, 2017,40(11):17-21.
Xuan B, Wang J, Duan Z B, et al. Advances in application of lead isotope to tracing soil heavy metal pollution [J]. Environmental Science and Technology, 2017,40(11):17-21.
- [13] 黄颖.不同尺度农田土壤重金属污染源解析研究 [D]. 杭州:浙江大学, 2018.
Huang Y. The exploring of heavy metal pollution source apportionment in various scale of agricultural soils [D]. Zhejiang University, 2018.
- [14] 胡克林,张凤荣,吕貽忠,等.北京市大兴区土壤重金属含量的空间分布特征 [J]. 环境科学学报, 2004,(3):463-468.
Hu K L, Zhang F R, Lu Y Z, et al. Spatial distribution of concentrations of soil heavy metals in Daxing county, Beijing [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2004,(3):463-468.
- [15] 丁宁,王倩,孙英君.高斯序贯模拟与克里格插值 2 种土壤重金属污染分析方法的比较 [J]. 安徽农业科学, 2012,40(7):4162-4164.
Ding N, Wang Q, Sun Y J. Comparison between sequential Gaussian simulation and Kriging interpolation on soil heavy metal pollution [J]. Anhui Agricultural Sciences, 2012,40(7):4162-4164.
- [16] 赖涓涓,杨德钰,刘亮,等.银川市浅层表土重金属污染特征及源解析 [J]. 中国环境科学, 2024,44(8):4496-4506.
Lai J J, Yang D Y, Liu L, et al. Characteristics and source identification of heavy metal pollution in shallow topsoil in Yinchuan City [J]. China Environmental Science, 2024,44(8):4496-4506.
- [17] 殷雨竹,樊彦国,潘瑜春,等.北京地区大气重金属沉降污染特征与风险评估 [J]. 中国环境科学, 2023,43(6):2763-2776.
Yin Y Z, Fan Y G, Pan Y C, et al. Pollution characteristics and risk assessment of atmospheric heavy metal deposition in Beijing [J]. China Environmental Science, 2023,43(6):2763-2776.
- [18] 买买提·沙吾提,阿不都艾尼·阿不里,胡昕.干旱区绿洲农田土壤重金属含量高光谱反演 [J]. 中国环境科学, 2024,44(4):2208-2216.
Mamat S, Abdaini A B, Hu X. Hyperspectral inversion study of heavy metals content in soils of oasis farmland in arid region [J]. China Environmental Science, 2024, 44(4): 2208-2216.
- [19] 卢维宏,刘娟,张乃明,等.设施菜地土壤重金属累积及影响因素研究 [J]. 中国环境科学, 2022,42(6):2744-2753.
Lu W H, Liu J, Zhang N M, et al. Study on the accumulation of heavy

- metals and influencing factors in the soil of facility vegetable fields [J]. *China Environmental Science*, 2022,42(6):2744-2753.
- [20] 王诚煜,李玉超,于成广,等. 葫芦岛东北部土壤重金属分布特征及来源解析 [J]. *中国环境科学*, 2021,41(11):5227-5236.
Wang C Y, Li Y C, Yu C G, et al. Distribution characteristics and sources of soil heavy metals in soils in the area of northeastern Huludao City [J]. *China Environmental Science*, 2021,41(11):5227-5236.
- [21] 韩志轩,王学求,迟清华,等. 珠江三角洲冲积平原土壤重金属元素含量和来源解析 [J]. *中国环境科学*, 2018,38(9):3455-3463.
Han Z X, Wang X Q, Chi Q H, et al. Occurrence and source identification of heavy metals in the alluvial soils of Pearl River Delta region, south China [J]. *China Environmental Science*, 2018,38(9):3455-3463.
- [22] 盛溢,薛玮真,应迪文,等. 场地土壤镉污染排放清单与溯源——以铜冶炼厂为例 [J]. *中国环境科学*, 2024,44(8):4462-4474.
Sheng Y, Xue W Z, Ying D W, et al. Constructing soil cadmium discharge inventory for source analysis—— a case study in copper smelter [J]. *China Environmental Science*, 2024,44(8):4462-4474.
- [23] 袁鸣蔚,吴亦潇,牛志华,等. 基于科技论文产出的源解析受体模型 CMB、PMF 比较综述. [C]//中国环境科学学会. 2014 中国环境科学学会学术年会(第六章). 武汉大学资源与环境科学学院, 2014.
Yuan M W, Wu Y X, Niu Z H, et al. A comparative review of source apportionment receptor models CMB and PMF based on scientific paper output [C]//Chinese Society of Environmental Sciences. 2014 China Environmental Science Society Academic Annual Conference (Chapter 6). School of Resources and Environmental Sciences, Wuhan University, 2014:6.
- [24] Song Y, Wang J, Ge Y, et al. An optimal parameters-based geographical detector model enhances geographic characteristics of explanatory variables for spatial heterogeneity analysis: cases with different types of spatial data [J]. *Giscience & Remote Sensing*, 2020, 57(5):593-610.
- [25] 李黎,王永刚. 地质统计学应用综述 [J]. *勘探地球物理进展*, 2006,(3):163-9,4.
Li L, Wang Y G. Review of applications of geostatistics. [J]. *Progress in Exploration Geophysics*, 2006,(3):163-169,4.
- [26] 李晓军,李培楠,朱合华,等. 基于贝叶斯克里金的地下空间多源数据建模 [J]. *同济大学学报(自然科学版)*, 2014,42(3):406-412.
Li X J, Li P N, Zhu H H, et al. Geomodeling with integration of multi-source data by Bayesian Kriging in underground space [J]. *Journal of Tongji University (Natural Science Edition)*, 2014,42(3):406-412.
- [27] 张锦明,郭丽萍,张小丹. 反距离加权插值算法中插值参数对 DEM 插值误差的影响 [J]. *测绘科学技术学报*, 2012,29(1):51-56.
Zhang J M, Guo L P, Zhang X D. Effects of interpolation parameters in inverse distance weighted method on DEM accuracy [J]. *Journal of Surveying Science and Technology*, 2012,29(1):51-56.
- [28] 叶明亮. 基于 GIS 与机器学习的铜陵市土壤重金属空间分析与预测 [D]. 安徽农业大学, 2019.
Ye M L. Spatial Analysis and Prediction of Heavy Metals in Soil of Tongling City based on GIS and Machine Learning [D]. Anhui Agricultural University, 2019.
- [29] 赵永存,于东升,赵彦锋,等. 不同方法预测河北省土壤有机碳密度空间分布特征的研究 [J]. *土壤学报*, 2005,(3):379-385.
Zhao Y C, Yu D S, Zhao Y F, et al. Different methods for prediction of spatial patterns of soil organic carbon density in Hebei Province, China [J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2005,(3):379-385.
- [30] 方匡南,吴见彬,朱建平,等. 随机森林方法研究综述 [J]. *统计与信息论坛*, 2011,26(3):32-38.
Fang K N, Wu J B, Zhu J P, et al. A Review of technologies on random forests [J]. *Statistical and Information Forum*, 2011,26(3):32-38.
- [31] 卢宾宾,葛咏,秦昆,等. 地理加权回归分析技术综述 [J]. *武汉大学学报(信息科学版)*, 2020,45(9):1356-1366.
Lu B B, Ge Y, Qin K, et al. A review on geographically weighted regression [J]. *Journal of Wuhan University (Information Science Edition)*, 2020,45(9):1356-1366.
- [32] Yang S H, Liu F, Song X D, et al. Mapping topsoil electrical conductivity by a mixed geographically weighted regression kriging: A case study in the Heihe River Basin, northwest China [J]. *Ecological Indicators*, 2019,102:252-264.
- [33] 张军,高煜,王国兰,等. 典型河谷城市土壤重金属含量空间分异及其影响因素 [J]. *生态环境学报*, 2021,30(6):1276-1285.
Zhang J, Gao Y, Wang G L, et al. Spatial differentiation and influencing factors of heavy metal content in soils of typical river valley city [J]. *Ecological Environment Science*, 2021,30(6):1276-1285.
- [34] 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]. *Chinese Agricultural Sciences*, 2017,50(21):4138-4148.
- [35] Chen Q, Mcroberts R E, Wang C W, et al. Forest aboveground biomass mapping and estimation across multiple spatial scales using model-based inference [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2016,184:350-360.
- [36] 高中原,肖荣波,王鹏,等. 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 [J]. *环境科学*, 2021,42(1):343-352.
Gao Z Y, Xiao R B, Wang P, et al. Improved regression Kriging prediction of the spatial distribution of the soil cadmium by integrating natural and human Factors [J]. *Environmental Science*, 2021,42(1):343-352.
- [37] 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):1649-1956.
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):1649-1956.

作者简介: 李世杰(1997-),男,湖南岳阳人,硕士,主要从事资源与环境方面研究. 发表论文 4 篇. lsjsyghr@163.com.