

物种敏感性分布法拟合函数的拟合优度评价

董明伟, 牟力言, 秦莉, 安毅, 林大松

引用本文:

董明伟, 牟力言, 秦莉, 等. 物种敏感性分布法拟合函数的拟合优度评价[J]. *农业环境科学学报*, 2021, 40(3): 544–551.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11654/jaes.2020-1122>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[基于物种敏感性分布法预测芘对白菜毒害的生态风险阈值](#)

杨肖松, 刘月仙, 解小凡, 张萌, 王伟

*农业环境科学学报*. 2018, 37(10): 2127–2134 <https://doi.org/10.11654/jaes.2018-0235>

[不同烟草对Cd吸收的敏感性分布及烟草中Cd的结合形态](#)

雷丽萍, 刘彬, 陈世宝, 李宁, 郑涵

*农业环境科学学报*. 2015(10): 1858–1864 <https://doi.org/10.11654/jaes.2015.10.004>

[镉砷在线蚓中的毒物–毒效动力学过程及定量模拟](#)

李敏, 龚冰, 黄雪莹, 肖雪, 何尔凯, 仇荣亮

*农业环境科学学报*. 2020, 39(7): 1451–1459 <https://doi.org/10.11654/jaes.2020-0209>

[La和Fe改性木芙蓉和龙牙花树枝粉对畜禽废水中磷的吸附](#)

曾溱瑶, 张世熔, 王新月, 冯灿, 王亚婷

*农业环境科学学报*. 2020, 39(8): 1828–1836 <https://doi.org/10.11654/jaes.2020-0167>

[基于典型污灌区土壤筛选耐盐、Cd低吸收小麦品种](#)

孟楠, 安平, 王萌, 陈莉, 郑涵, 陈世宝

*农业环境科学学报*. 2018, 37(3): 409–414 <https://doi.org/10.11654/jaes.2017-1237>



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

董明, 卞力言, 秦莉, 等. 物种敏感性分布法拟合函数的拟合优度评价[J]. 农业环境科学学报, 2021, 40(3): 544–551.

DONG Ming-ming, MOU Li-yan, QIN Li, et al. Evaluation of the goodness of fit of the species sensitivity distribution fitting function[J]. Journal of Agro-Environment Science, 2021, 40(3): 544–551.



开放科学 OSID

## 物种敏感性分布法拟合函数的拟合优度评价

董明, 卞力言, 秦莉\*, 安毅, 林大松

(农业农村部环境保护科研监测所, 天津 300191)

**摘要:**为明确物种敏感性分布(SSD)法适用于酸性土壤条件下的最优拟合函数,以均方根(RMSE)和残差平方和(SSE)为评价指标,系统分析了不同pH和累积概率条件下5种常见拟合函数(Log-logistic、Gamma、Log-normal、Weibull和Burr III)的拟合优度。研究表明:两种pH条件(pH 5.5 和 pH 6.5)下5种拟合函数的拟合优度无明显差异,其中Log-logistic、Burr III函数的SSE值分别为0.021、0.024和0.169、0.191,RMSE值分别为0.038、0.040和0.106、0.113,两者拟合效果较好;但不同累积概率条件下拟合函数的拟合优度存在一定差异,其中低累积概率( $p \leq 20\%$ )条件下Log-logistic与Gamma的SSE值分别为 $2.45 \times 10^{-4}$ 和 $2.46 \times 10^{-4}$ ,RMSE值分别为 $4.04 \times 10^{-3}$ 和 $4.05 \times 10^{-3}$ ,两者拟合效果较好;中累积概率( $20\% < p \leq 80\%$ )条件下Log-logistic与Log-normal的SSE值分别为0.018和0.021,RMSE值分别为0.034和0.037,两者拟合效果较好;而高累积概率( $p > 80\%$ )条件下Burr III与Log-logistic的SSE值分别为0.151和0.203,RMSE值分别为0.100和0.116,两者拟合效果较好。研究表明,酸性土壤( $\text{pH} \leq 6.5$ )中低、中累积概率( $0 \leq p \leq 80\%$ )条件下优先推荐使用Log-logistic拟合函数,而高累积概率( $p > 80\%$ )条件下优先推荐使用Burr III拟合函数。

**关键词:**酸性土壤;镉;物种敏感性分布;拟合函数;拟合优度

中图分类号:X825 文献标志码:A 文章编号:1672-2043(2021)03-0544-08 doi:10.11654/jaes.2020-1122

### Evaluation of the goodness of fit of the species sensitivity distribution fitting function

DONG Ming-ming, MOU Li-yan, QIN Li\*, AN Yi, LIN Da-song

(Agro-Environmental Protection Institute, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Tianjin 300191, China)

**Abstract:** To utilize the optimal fitting function of the species sensitivity distribution (SSD) method for acidic soil conditions, this study uses the root mean square error (RMSE) and the sum of squares for error (SSE) as evaluation indicators to systematically analyze the goodness of fit of five common fitting functions (i.e., Log-logistic, Gamma, Log-normal, Weibull, and Burr III) under conditions of cumulative probability and different pH. The study have shown that there is no significant difference in the goodness of fit of the five fitting functions under two pH conditions ( $\text{pH}=5.5$  and  $\text{pH}=6.5$ ), among which the SSE values of Log-logistic and Burr III functions are 0.021, 0.024 and 0.169, 0.191, respectively, whereas RMSE values of the two functions are 0.038, 0.040 and 0.106, 0.113, respectively, the fitting effect for the two functions is better. But the goodness of fit of the fitting function under different cumulative probability conditions is different, under conditions of low cumulative probability ( $p \leq 20\%$ ), the SSE values of Log-logistic and Gamma are  $2.45 \times 10^{-4}$  and  $2.46 \times 10^{-4}$ , and the RMSE values of the two functions are  $4.04 \times 10^{-3}$  and  $4.05 \times 10^{-3}$ , respectively, and the fitting effect for the two functions is better. Under conditions of cumulative probability ( $20\% < p \leq 80\%$ ), the SSE values of Log-logistic and Log-normal are 0.018 and 0.021, and the RMSE values are 0.034 and 0.037, respectively, and the fitting effect of the two functions is better. Under conditions of high cumulative probability ( $p > 80\%$ ), the SSE values of Burr III and Log-logistic are 0.151 and 0.203, and the RMSE values of the two functions are 0.100 and 0.116, respectively, and the fitting effect of the two functions is better. Based on the above results, the Log-logistic fitting function is

收稿日期:2020-09-24 录用日期:2020-11-10

作者简介:董明(1995—),女,山东潍坊人,硕士研究生,研究方向为土壤污染物生态安全阈值。E-mail:mmdongql@163.com

\*通信作者:秦莉 E-mail:ql-tj@163.com

基金项目:国家自然科学基金项目(41877403)

Project supported: The National Natural Science Foundation of China (41877403)

preferred under acidic soil conditions ( $\text{pH} \leq 6.5$ ) with low and medium cumulative probability ( $0 \leq p \leq 80\%$ ), and Burr III fitting function is preferred under conditions of high cumulative probability ( $p > 80\%$ ).

**Keywords:** acid soil; cadmium; species sensitivity distribution; fitting function; goodness of fit

土壤生态安全阈值是土壤质量评价、控制和标准制定的重要依据,对防治土壤污染、保护生态环境和人体健康具有重要意义<sup>[1]</sup>。目前,土壤生态安全阈值的确定方法主要有生态环境效应法、物种敏感性分布(Species sensitivity distribution, SSD)法和评估因子(Assessment factor, AF)法等,其中SSD法因其考虑到物种敏感性、土壤理化性质和生物有效性等因素,使推导出的土壤生态安全阈值更具科学性、合理性和实用性,已被美国和欧盟等多个国家确立为推导生态安全阈值的标准方法<sup>[2-3]</sup>。SSD法主要基于不同物种对同一污染物的敏感性差异提出,利用多个物种受某一污染物胁迫的急性或慢性毒性数据构建统计分布模型,应用合适的概率分布函数进行拟合,从而获得某一暴露浓度水平下的物种潜在受影响比例和保护[1- $p$ (累积概率)%]的物种不受影响的情况下所允许的最大环境有害浓度值,定量反映污染物的风险水平<sup>[4]</sup>。

一般认为,应用SSD法推导土壤生态安全阈值的步骤主要分为:(1)确定敏感物种的种类及数量,收集和筛选相应的毒性数据;(2)确定最优拟合函数;(3)构建物种敏感性分布曲线;(4)根据已构建的物种敏感性分布曲线计算危害浓度( $\text{HC}_p$ )值<sup>[5-6]</sup>。不同拟合函数得到的 $\text{HC}_p$ 值不同,因此会对所推导的土壤生态安全阈值的准确性产生较大影响。然而,目前关于拟合函数的选取尚未有统一论,如美国环境保护署(EPA)推荐使用Log-normal函数,澳大利亚和新西兰则推荐使用Burr III函数<sup>[7]</sup>。此外,大量研究表明,拟合函数拟合优度的影响因素主要包括累积概率与函数类型等自因和土壤pH、重金属种类与数据量等外因<sup>[8-12]</sup>。如王小庆等<sup>[8-9]</sup>认为计算较高的物种保护比例时,拟合函数在较低的累积概率条件下的拟合优度较为重要;而蒋宝<sup>[10]</sup>研究表明,中性、非石灰碱性和石灰碱性土壤中Burr III的拟合效果较好,但在酸性土壤中Weibull函数的拟合效果更好;刘克<sup>[11]</sup>认为酸性土壤中Burr III的拟合效果较好。综上,本研究以原农业部环境监测总站对我国南方水稻产地的例行监测数据为基础,以均方根(Root mean square error, RMSE)和残差平方和(Sum of squares for error, SSE)作为评价指标,主要探讨了不同pH和累积概率条件

下5种常见拟合函数(Log-logistic、Gamma、Log-normal、Weibull和Burr III)的拟合优度,以期为我国土壤环境质量基准及标准的完善和细化提供参考依据。

## 1 材料与方法

### 1.1 数据来源

本研究数据来源于原农业部环境监测总站对我国南方水稻产地的例行监测数据,包含湖南、湖北、四川、安徽、广西及广东6个水稻产地15个水稻品种的526组数据,共筛选出450条有效数据。有效数据的筛选原则如下:(1)必须来自于土壤和水稻的点对点协同监测;(2)水稻品种必须在当地大面积种植;(3)必须具有必要的土壤理化性质参数。

### 1.2 模型方法

#### 1.2.1 生物富集系数及生物有效性模型

生物富集系数(Bio-concentration factor, BCF)定义为水稻镉含量与土壤镉含量之比,其公式如下:

$$\text{BCF} = C_{\text{rice}} / C_{\text{soil}} \quad (1)$$

式中: $C_{\text{rice}}$ 为水稻镉含量, $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ;  $C_{\text{soil}}$ 为土壤总镉含量, $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

大量研究表明,土壤镉形态及含量和土壤理化性质对水稻镉富集的影响较为显著,但受其提取方法、提取液以及外界环境等因素的影响,土壤有效态镉极其不稳定,严重影响模型的准确性和适用性<sup>[14]</sup>。而土壤理化性质中以土壤pH、土壤有机质(Soil organic matter, SOM)和阳离子交换量(Cation exchange capacity, CEC)的影响最为显著<sup>[15-17]</sup>,因此,将土壤pH、SOM和CEC与水稻镉的BCF进行相关性分析,得到三者对水稻富集镉的影响均达到了极显著水平( $P < 0.01$ )。所以,选择土壤pH、SOM和CEC构建土壤-水稻体系中镉的生物有效性模型。

生物有效性模型,利用SPSS 25.0将BCF与土壤理化性质进行多元回归分析,基本形式如下:

$$\lg \text{BCF} = a \times \text{pH} + b \times \lg \text{SOM} + c \times \lg \text{CEC} + k \quad (2)$$

式中:BCF为生物富集系数;pH为土壤pH;SOM为土壤有机质, $\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ ;CEC为土壤阳离子交换量, $\text{cmol} \cdot \text{kg}^{-1}$ ;a、b、c均为无量纲参数,表示土壤理化性质对生物富集系数的影响程度;k为方程的截距,表示作物富集重金属镉的固有敏感性。

由表1可知,将土壤pH、SOM、CEC依次引入回归方程后,方程的确定系数不断提高且均达到极显著水平( $P<0.01$ )。因此,本研究采用三因子生物有效性模型( $\lg BCF=-0.449 \text{ pH}+2.822 \lg \text{SOM}-1.917 \lg \text{CEC}+0.670, n=450, P<0.01, R^2=0.643$ )对水稻镉的BCF进行归一化。

表1 土壤-水稻体系中镉的生物有效性模型

Table 1 Bioavailability model of cadmium in soil-rice system

影响因子 Impact factor	生物有效性模型 Bioavailability model	$R^2$	$P$
单因子	$\lg BCF=-0.702 \text{ pH}+3.739$	0.522	<0.01
双因子	$\lg BCF=-0.616 \text{ pH}+3.011 \lg \text{SOM}-0.728$	0.559	<0.01
三因子	$\lg BCF=-0.449 \text{ pH}+2.822 \lg \text{SOM}-1.917 \lg \text{CEC}+0.670$	0.643	<0.01

## 1.2.2 归一化处理

由于研究区域空间跨度大,土壤理化性质差异明显,为降低其对水稻富集镉的影响<sup>[18-19]</sup>,需要将不同理化性质条件下水稻镉的BCF归一化到标准土壤情景下。依据研究区域的基本理化性质,设定两种标准土壤情景:SS1, pH 5.5、SOM 20 g·kg<sup>-1</sup>、CEC 10 cmol·kg<sup>-1</sup>;SS2, pH 6.5、SOM 20 g·kg<sup>-1</sup>、CEC 10 cmol·kg<sup>-1</sup>。

## 1.2.3 SSD曲线拟合

利用5种常见的拟合函数(Burr III、Log-normal、Log-logistic、Weibull及Gamma)构建不同水稻品种对镉的SSD曲线,其公式见表2。

## 1.2.4 拟合优度评价

拟合优度评价是用于检验总体中的一类数据其分布是否与某种理论分布相一致的统计方法。对于参数模型,拟合优度的评价指标主要有RMSE和SSE,两者越趋于0,表明拟合函数的拟合优度越好,具体公式见表3。

## 1.3 数据处理分析

采用Excel 2019进行数据的整理分析,采用SPSS 25.0进行土壤理化性质与水稻镉BCF的相关性分析及多元回归分析,使用Origin 2017和Burrlioz 2.0

表2 物种敏感性分布法中的5种常见拟合函数

Table 2 Five common fitting functions in species sensitivity distribution method

名称 Name	函数公式 Function formula	符号含义 Significance of symbol
Burr III	$y = \frac{1}{\left[ 1 + \left( \frac{b}{x} \right)^c \right]^k}$	$y$ 为累积概率,% $x$ 为毒性值,mg·kg <sup>-1</sup> $b, c, k$ 为函数参数
Log-normal	$y = \Phi\left(\frac{\ln x - \mu'}{\sigma}\right)$	$y$ 为累积概率,% $x$ 为毒性值,mg·kg <sup>-1</sup> $\mu'$ 和 $\sigma$ 为函数参数
Log-logistic	$y = \frac{1}{1 + \left( \frac{\beta}{x - \gamma} \right)^a}$	$y$ 为累积概率,% $x$ 为毒性值,mg·kg <sup>-1</sup> $\alpha, \beta, \gamma$ 为函数参数
Weibull	$y = 1 - e^{-\left(\frac{x}{\beta}\right)^a}$	$y$ 为累积概率,% $x$ 为毒性值,mg·kg <sup>-1</sup> $\alpha, \beta$ 为函数参数
Gamma	$y = \frac{\Gamma_{x/\beta}(\alpha)}{\Gamma(\alpha)}$	$y$ 为累积概率,% $x$ 为毒性值,mg·kg <sup>-1</sup> $\alpha, \beta$ 为函数参数

软件进行SSD曲线的拟合。

## 2 结果与分析

### 2.1 水稻镉的BCF与土壤理化性质的统计分析

由表4可知,研究区域土壤pH的范围为4.60~6.93,平均值为 $5.73 \pm 0.47$ ,整体为酸性,变异系数为8.24%,属弱变异程度;SOM的范围为18.00~28.00 g·kg<sup>-1</sup>,平均值为 $(20.96 \pm 1.59)$  g·kg<sup>-1</sup>,变异系数为7.59%,属弱变异程度;CEC的范围为7.00~17.00 cmol·kg<sup>-1</sup>,平均值为 $(12.78 \pm 2.26)$  cmol·kg<sup>-1</sup>,变异系数为17.66%,属中等变异程度;BCF范围是0.01~3.26,平均值为 $0.78 \pm 0.66$ ,变异系数为83.18%,属中等变异程度。

### 2.2 不同pH条件下拟合函数的拟合优度

不同pH条件下拟合函数的拟合优度如表5所示,可以看出,pH 5.5和pH 6.5时两个评价指标得出的结果一致,均为Log-logistic函数的拟合优度最佳,而Weibull函数的拟合优度较差,不同pH条件下5种

表3 拟合优度评价指标及其公式

Table 3 Evaluation indexes of goodness of fit and their formulas

名称 Name	公式 Formula	符号含义 Significance of symbol	说明 Instruction
均方根 Root mean square errors (RMSE)	$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}$	$y_i$ 为第 <i>i</i> 种物种的实测毒性值,μg·L <sup>-1</sup> $\hat{y}_i$ 为第 <i>i</i> 种物种的预测毒性值,μg·L <sup>-1</sup> <i>n</i> 为毒性数据数量	RMSE越接近于0,说明模型拟合的精确度高
残差平方和 Sum of squares for error (SSE)	$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$	$y_i$ 为第 <i>i</i> 种物种的实测毒性值,μg·L <sup>-1</sup> $\hat{y}_i$ 为第 <i>i</i> 种物种的预测毒性值,μg·L <sup>-1</sup> <i>n</i> 为毒性数据数量	SSE越接近于0,说明模型拟合的随机误差效应越低

拟合函数的拟合优度并无明显差异。

### 2.3 不同累积概率条件下拟合函数的拟合优度

除土壤 pH 外,累积概率可能也会影响拟合函数的拟合优度,因此,设定  $p \leq 20\%$  为低累积概率,  $20\% < p \leq 80\%$  为中等累积概率,  $p > 80\%$  为高累积概率,比较分析 5 种拟合函数在不同累积概率条件下的拟合优度,结果见表 6。可以看出,不同累积概率条件下拟合函数的拟合优度存在一定差异,结合 2.2 节中的研究结果可得,低 pH( $\text{pH} \leq 6.5$ )、低中累积概率( $0 \leq P \leq 80\%$ )条件下优先推荐使用 Log-logistic 拟合函数;低 pH( $\text{pH} \leq 6.5$ )、高累积概率( $P > 80\%$ )条件下优先推

荐使用 Burr III 拟合函数。

## 3 讨论

### 3.1 生物有效性模型的准确性分析

因研究区域空间跨度大,土壤理化性质差异明显,会影响水稻对镉的富集。因此,将土壤理化性质与水稻镉的 BCF 构建的生物有效性模型进行归一化处理,以降低土壤理化性质对水稻镉 BCF 的影响。由表 1 可知,本研究所得的三因子生物有效性模型确定系数(0.643)略低于盆栽试验结果,如宋文恩等<sup>[20]</sup>依据盆栽试验建立土壤理化性质与水稻镉毒性阈值预

表 4 土壤理化性质和 BCF 的统计分析

Table 4 Statistical analysis of soil physical and chemical properties and bio-concentration factor

指标 Indicator	最大值 Maximum	最小值 Minimum	平均值 Mean	中位数 Median	标准差 Standard deviation	变异系数 Coefficient of variation/%
pH	6.93	4.60	5.73	5.68	0.47	8.24
SOM/(g·kg <sup>-1</sup> )	28.00	18.00	20.97	21.38	1.59	7.59
CEC/(cmol·kg <sup>-1</sup> )	17.00	7.00	12.78	13.00	2.26	17.66
BCF	3.26	0.01	0.78	0.62	0.66	83.18

表 5 不同 pH 条件下拟合函数的拟合优度

Table 5 The goodness of fit of the fitting function under different pH conditions

pH	函数 Function	SSE	排序 Sorting	RMSE	排序 Sorting
5.5	Log-logistic	0.021	1	0.038	1
	Gamma	0.028	4	0.043	4
	Log-normal	0.026	3	0.041	3
	Weibull	0.036	5	0.049	5
	Burr III	0.024	2	0.040	2
6.5	Log-logistic	0.169	1	0.106	1
	Gamma	0.224	4	0.122	4
	Log-normal	0.204	3	0.117	3
	Weibull	0.283	5	0.137	5
	Burr III	0.191	2	0.113	2

表 6 不同累积概率条件下拟合函数的拟合优度

Table 6 The goodness of fit of the fitting function under different cumulative probability conditions

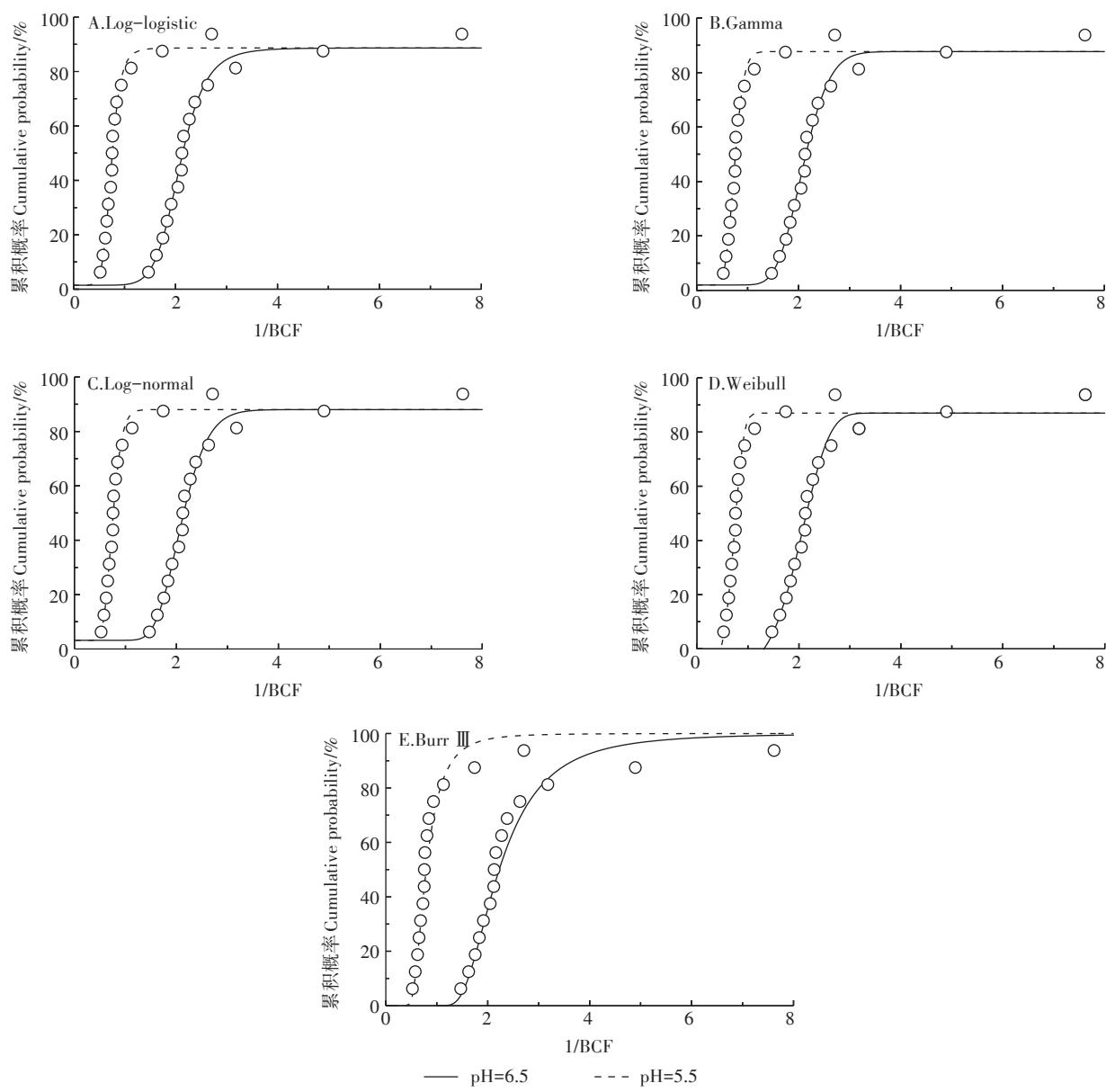
评价指标 Evaluation index	函数 Function	$p \leq 20\%$	排序 Sorting	$20\% < p \leq 80\%$	排序 Sorting	$p > 80\%$	排序 Sorting
SSE	Log-logistic	$2.45 \times 10^{-4}$	1	0.018	1	0.151	2
	Gamma	$2.46 \times 10^{-4}$	2	0.021	3	0.203	4
	Log-normal	$2.93 \times 10^{-4}$	3	0.020	2	0.184	3
	Weibull	$1.14 \times 10^{-3}$	4	0.026	4	0.256	5
	Burr III	$5.45 \times 10^{-3}$	5	0.174	5	0.012	1
RMSE	Log-logistic	$4.04 \times 10^{-3}$	1	0.034	1	0.100	2
	Gamma	$4.05 \times 10^{-3}$	2	0.037	3	0.116	4
	Log-normal	$4.42 \times 10^{-3}$	3	0.036	2	0.111	3
	Weibull	$8.71 \times 10^{-3}$	4	0.041	4	0.131	5
	Burr III	$1.91 \times 10^{-2}$	5	0.108	5	0.028	1

测模型的确定系数为0.941;和君强等<sup>[21]</sup>通过盆栽试验建立水稻土镉的临界值与土壤理化性质预测模型的确定系数为0.83。这可能是由于田间实际环境与盆栽试验所处环境差异较大,如水分、温度、光照、遮蔽物和耕作制度等,这种环境的差异会引起土壤理化性质、微生物群落以及水稻自身的一系列变化,进而导致模型确定系数的降低<sup>[22-23]</sup>。但与其他田间试验结果相比,本研究所得模型的确定系数相对较高,如王梦梦等<sup>[24]</sup>基于田间试验构建的稻米镉含量预测模型确定系数为0.509;汤丽玲<sup>[25]</sup>基于田间采样建立的

水稻镉含量预测模型确定系数为0.565。因此,本研究获得的生物有效性模型具有一定合理性,可用于水稻镉BCF的归一化处理。

### 3.2 不同pH和同一pH下拟合函数的拟合优度分析

拟合优度通常是指实测值在拟合曲线周围的离散程度,离散程度越小,表明拟合效果越好,反之亦然。本研究中两种不同pH条件下各水稻品种在5种拟合函数曲线周围的离散程度基本一致,但同一pH条件下各水稻品种在不同拟合函数曲线周围的离散程度存在差异(图1),这也解释了不同pH条件下5种



A:Log-logistic function SSD curve;B:SSD curve of Gamma function;C:Log-normal function SSD curve;  
D:SSD curve of Weibull function;E:Burr III function curve of SSD

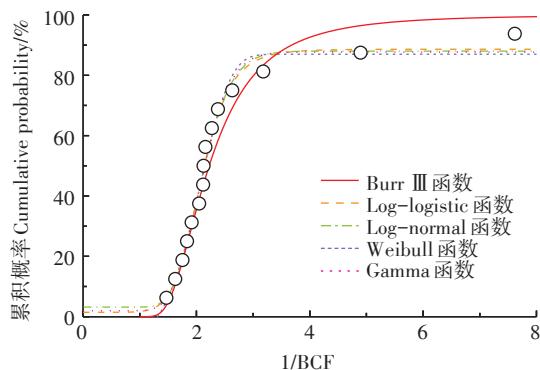
图1 不同土壤pH下5种累积概率分布函数的SSD曲线

Figure 1 SSD curves of five cumulative probability distribution functions under different soil pH values

拟合函数的拟合优度无明显差异,但同一pH条件下5种拟合函数的拟合优度存在明显差异的原因。此外,有研究表明,数据量不足时Log-logistic函数更适用,当数据量较为充足时( $n>20$ ),Log-normal函数的适用性更高,而Burr III函数对数据量要求较低<sup>[11-12]</sup>。如蒋丹烈等<sup>[26]</sup>利用Log-logistic、Burr III和Log-normal函数拟合10~15组数据时认为,Log-logistic和Burr III函数的拟合效果优于Log-normal函数;张瑞卿等<sup>[27]</sup>拟合植物、无脊椎动物和脊椎动物等6组毒性数据时表明,Log-logistic函数的拟合效果最佳;刘昔等<sup>[28]</sup>研究得到Burr III函数在数据量较多或较少的情况下都具有较好的适用性。本研究物种数量 $n=15$ 所得酸性土壤环境中( $\text{pH}\leq 6.5$ )Log-logistic和Burr III函数的拟合优度要高于Log-normal函数,与上述研究相符。因此,造成同一pH条件下不同拟合函数拟合优度的差异可能与数据量的大小也存在一定的关系。

### 3.3 不同累积概率条件下拟合函数的拟合优度分析

利用SSD法确定土壤生态安全阈值时,常选用 $\text{HC}_5$ 值<sup>[29-30]</sup>,因此,低累积概率时拟合函数的拟合优度对土壤生态安全阈值的准确性具有重要意义。如肖鹏飞等<sup>[31]</sup>利用Log-logistic和Log-normal函数拟合稻田系统中毒死蜱的毒性数据推导其 $\text{HC}_5$ 、 $\text{HC}_{10}$ 和 $\text{HC}_{20}$ 值;王晓南等<sup>[32]</sup>利用Log-normal函数推导潮土中六价铬的 $\text{HC}_5$ 值为 $7.7 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。由2.3节可知,当 $p\leq 20\%$ 时,Log-logistic、Gamma和Log-normal函数的拟合优度较高,而Weibull和Burr III函数的拟合优度较低,这与Wheeler等<sup>[11]</sup>研究Log-logistic和Log-normal函数在SSD曲线较低部分时拟合效果较好的结论类似。由图2可知,水稻品种ST1、ST2和ST3几乎紧邻5种



图中水稻品种从曲线底部至顶部依次记为ST1~ST15  
Rice varieties in the figure are denoted as ST1~ST15 from the bottom to the top of the curve

图2 SS1情景下( $\text{pH} 6.5$ )5种累积概率分布函数的SSD曲线  
Figure 2 SSD curves of 5 cumulative probability distribution functions under SS1 scenario( $\text{pH} 6.5$ )

SSD曲线,仅有ST1距离Weibull和Burr III函数曲线较远,这可能是造成低累积概率条件下Weibull和Burr III函数拟合优度较低的主要原因。 $20\% < p \leq 80\%$ 时,ST4~ST12几乎都落在除Burr III函数外的4种函数曲线上,而ST12距离Log-logistic函数的曲线最近,这与2.3中得到 $20\% < p \leq 80\%$ 时Log-logistic函数拟合优度最高,而Burr III函数拟合优度最低的结论一致。 $p > 80\%$ 时,ST13与Burr III和Log-logistic函数距离较近,拟合效果较好,这可能是因为本研究数据上尾部趋于扁平,下尾部未趋于扁平。有研究表明,Burr III函数更适用于拟合呈扁态、厚尾型分布的数据,特别是在处理频率曲线尾部趋于水平的问题上具备较好的分析和预测功能<sup>[12]</sup>。如王印等<sup>[33]</sup>利用Burr III函数拟合DDT和林丹尾部较扁平的毒性数据时拟合效果较好;Ding等<sup>[34]</sup>运用Burr III函数拟合尾部趋于水平的毒性数据时拟合效果较好。

本研究数据来源于实际大田例行监测,较之于盆栽试验,受外界自然环境等因素的影响较大,且我国农作物种类/品种丰富,土壤和气候类型复杂多样,未来应因地制宜地对利用SSD法构建土壤生态安全阈值的科学性和合理性进行更为深入的研究和探讨。

## 4 结论

(1)酸性土壤环境中,不同pH条件下5种拟合函数的拟合优度无明显差异,均表现为Log-logistic>Burr III>Log-normal>Gamma>Weibull。

(2)不同累积概率条件下拟合函数的拟合优度存在一定差异,其中低累积概率( $p\leq 20\%$ )条件下Log-logistic和Gamma的拟合效果较好;中累积概率( $20\% < p \leq 80\%$ )条件下Log-logistic和Log-normal的拟合效果较好;而高累积概率( $p > 80\%$ )条件下Burr III和Log-logistic的拟合效果较好。

(3)综合土壤pH和累积概率可得,酸性土壤( $\text{pH} \leq 6.5$ )中,低中累积概率( $0 \leq p \leq 80\%$ )条件下优先推荐使用Log-logistic拟合函数,而高累积概率( $p > 80\%$ )条件下优先推荐使用Burr III拟合函数。

## 参考文献:

- [1]曾庆楠,安毅,秦莉,等.物种敏感性分布法在建立土壤生态阈值方面的研究进展[J].安全与环境学报,2018,18(3):1220-1224.  
ZENG Qing-nan, AN Yi, QIN Li, et al. Advances on species sensitivity distribution in deriving soil ecological thresholds[J]. Journal of Safety and Environment, 2018, 18(3):1220-1224.
- [2]孙聪,陈世宝,宋文恩,等.不同品种水稻对土壤中镉的富集特征及

- 敏感性分布(SSD)[J]. 中国农业科学, 2014, 47(12): 2384–2394.
- SUN Cong, CHEN Shi-bao, SONG Wen-en, et al. Accumulation characteristics of cadmium by rice cultivars in soils and its species sensitivity distributions[J]. *Scientia Agricultura Sinica*, 2014, 47(12): 2384–2394.
- [3] 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 Wei-jiang, AN Yi, QIN Li, 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.
- [4] Yan S, Zhou Q, Gao J. Methodology for derivation of water quality criteria for protecting aquatic environment and future development[J]. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 2012, 23: 2471–2503.
- [5] 杜建国, 赵佳懿, 陈彬, 等. 应用物种敏感性分布评估中国近海和福建主要海湾水体重金属生态风险[J]. 生态毒理学报, 2013, 8(4): 554–560. DU Jian-guo, ZHAO Jia-yi, CHEN Bin, et al. Assessing ecological risks of heavy metals to marine organisms in Chinese offshore and Fujian main bays by species sensitivity distributions[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2013, 8(4): 554–560.
- [6] 文晨, 杨虹, 卢学强, 等. 基于物种敏感性分布法的生态风险评价研究进展[J]. 安全与环境学报, 2017, 17(1): 353–357. WEN Chen, YANG Hong, LU Xue-qiang, et al. Research advances in the ecological risk assessment based on the species sensitivity distributions[J]. *Journal of Safety and Environment*, 2017, 17(1): 353–357.
- [7] Wang B, Yu G, Huang J, et al. Development of species sensitivity distributions and estimation of HC<sub>s</sub> of organochlorine pesticides with five statistical approaches[J]. *Ecotoxicology*, 2008, 17(8): 716–724.
- [8] 王小庆, 韦东普, 黄占斌, 等. 物种敏感性分布法在土壤中铜生态阈值建立中的应用研究[J]. 环境科学学报, 2013, 33(6): 1787–1794. WANG Xiao-qing, WEI Dong-pu, HUANG Zhan-bin, et al. Application of species sensitivity distribution in deriving of ecological thresholds for copper in soils[J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2013, 33(6): 1787–1794.
- [9] 王小庆, 韦东普, 黄占斌, 等. 物种敏感性分布在土壤中镍生态阈值建立中的应用研究[J]. 农业环境科学学报, 2012, 31(1): 92–98. WANG Xiao-qing, WEI Dong-pu, HUANG Zhan-bin, et al. Application of species sensitivity distribution in deriving of ecological thresholds for nickel in soils[J]. *Journal of Agro-Environment Science*, 2012, 31(1): 92–98.
- [10] 蒋宝. 土壤铜镍长期老化行为及有效态生态阈值研究[D]. 北京: 中国农业大学, 2017: 89–92. JIANG Bao. Long-term aging behavior of soil added nickel and copper and ecological thresholds based on extractable copper in soils[D]. Beijing: China Agricultural University, 2017: 89–92.
- [11] Wheeler J R, Grist E P M, Leung K M Y, et al. Species sensitivity distributions: Data and model choice[J]. *Marine Pollution Bulletin*, 2002, 45(1): 192–202.
- [12] 陈瑾, 刘奕梅, 张建英. 基于物种敏感性分布的微囊藻毒素与氮污染水体生态风险评估[J]. 应用生态学报, 2014, 25(4): 1171–1180. CHEN Jin, LIU Yi-mei, ZHANG Jian-ying. Aquatic ecological risk assessment of microcystins and nitrogen pollution based on species sensitivity distribution[J]. *Chinese Journal of Applied Ecology*, 2014, 25(4): 1171–1180.
- [13] 刘克. 我国主要小麦产地土壤镉和铅的安全阈值研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2016: 46–58. LIU Ke. Soil threshold of cadmium and major Chinese wheat-producing areas[D]. Yangling: Northwest A&F University, 2016: 46–58.
- [14] 王秀梅. 基于二次判别模型(QDA)的土壤镉安全阈值判定[D]. 北京: 中国农业科学院, 2018: 1–8. WANG Xiu-mei. Determination of soil cadmium safety threshold based on quadratic discriminant analysis model[D]. Beijing: Chinese Academy of Agricultural Sciences, 2018: 1–8.
- [15] 陈楠, 张昊, 杨慧敏, 等. 土壤pH对土壤镉形态及稻米镉积累的影响[J]. 湖南农业大学学报(自然科学版), 2018, 44(2): 176–182. CHEN Nan, ZHANG Hao, YANG Hui-min, et al. Effects of soil pH on soil cadmium formations and its accumulation in rice[J]. *Journal of Hunan Agricultural University(Natural Sciences)*, 2018, 44(2): 176–182.
- [16] 杨定清, 李霞, 周娅, 等. 影响水稻吸收镉的环境因子分析[J]. 西南农业学报, 2016, 29(10): 2496–2500. YANG Ding-qing, LI Xia, ZHOU Ya, et al. Analysis of environmental factors affecting cadmium uptake in rice[J]. *Southwest China Journal of Agricultural Sciences*, 2016, 29(10): 2496–2500.
- [17] 廖启林, 刘聪, 王轶, 等. 水稻吸收Cd的地球化学控制因素研究——以苏锡常典型区为例[J]. 中国地质, 2015, 42(5): 1621–1632. LIAO Qi-lin, LIU Cong, WANG Yi, et al. Geochemical characteristics of rice uptake of cadmium and its main controlling factors: A case study of the Suxichang(Suzhou-Wuxi-Changzhou) typical area[J]. *Geology in China*, 2015, 42(5): 1621–1632.
- [18] Newman M C, Ownby D R, Mézin L C A, et al. Applying species-sensitivity distributions in ecological risk assessment: Assumptions of distribution type and sufficient numbers of species[J]. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2010, 19(2): 508–515.
- [19] Xu F, Li Y, Wang Y, et al. Key issues for the development and application of the species sensitivity distribution (SSD) model for ecological risk assessment[J]. *Ecological Indicators*, 2015, 54: 227–237.
- [20] 宋文恩, 陈世宝. 基于水稻根伸长的不同土壤中镉(Cd)毒性阈值(EC<sub>t</sub>)及预测模型[J]. 中国农业科学, 2014, 47(17): 3434–3443. SONG Wen-en, CHEN Shi-bao. The toxicity thresholds(EC<sub>t</sub>) of cadmium(Cd) to rice cultivars as determined by root-elongation tests in soils and its predicted models[J]. *Scientia Agricultura Sinica*, 2014, 47(17): 3434–3443.
- [21] 和君强, 贺前峰, 刘代欢, 等. 土壤镉食品卫生安全阈值影响因素及预测模型——以长沙某地水稻土为例[J]. 土壤学报, 2017, 54(5): 1181–1194. HE Jun-qiang, HE Qian-feng, LIU Dai-huan, et al. Major factors affecting threshold of soil Cd for food health safety and relevant prediction models: A case study of paddy soil in Changsha[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2017, 54(5): 1181–1194.
- [22] Cairns J. Are single species toxicity tests alone adequate for estimating environmental hazard? [J]. *Environmental Monitoring and Assessment*, 1984, 100: 47–57.

- [23] Giesy J P, Graney R L. Recent developments in and intercomparisons of acute and chronic bioassays and bioindicators[M]//Environmental Bioassay Techniques and Their Application. Holland: Kluwer Academic Publishers, 1989:67–77.
- [24] 王梦梦,何梦媛,苏德纯.稻田土壤性质与稻米镉含量的定量关系[J].环境科学,2018,39(4):1918–1925. WANG Meng-meng, HE Meng-yuan, SU De-chun. Quantitative relationship between paddy soil properties and cadmium content in rice grains[J]. *Environmental Science*, 2018, 39(4):1918–1925.
- [25] 汤丽玲.作物吸收Cd的影响因素分析及子实Cd含量的预测[J].农业环境科学学报,2007,26(2):699–703. TANG Li-ling. Effects of soil properties on crop Cd uptake and prediction of Cd concentration in grains[J]. *Journal of Agro-Environment Science*, 2007, 26(2): 699–703.
- [26] 蒋丹烈,胡霞林,尹大强.应用物种敏感性分布法对太湖沉积物中多环芳烃的生态风险分析[J].生态毒理学报,2011,6(1):60–66. JIANG Dan-lie, HU Xia-lin, YIN Da-qiang. Ecological risk assessment on polycyclic aromatic hydrocarbons of sediment in Taihu Lake using species sensitivity distributions[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2011, 6(1):60–66.
- [27] 张瑞卿,吴丰昌,李会仙,等.应用物种敏感度分布法研究中国无机汞的水生生物水质基准[J].环境科学学报,2012,32(2):440–449. ZHANG Rui-qing, WU Feng-chang, LI Hui-xian, et al. Deriving aquatic water quality criteria for inorganic mercury in China by species sensitivity distributions[J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2012, 32(2):440–449.
- [28] 刘昔,王智,王学雷,等.应用物种敏感性分布评价中国湖泊水体中重金属污染的生态风险[J].湖泊科学,2018,30(5):1206–1217. LIU Xi, WANG Zhi, WANG Xue-lei, et al. Ecological risks assessment of selected heavy metals in the waters of Chinese lakes based on species sensitivity distributions[J]. *Journal of Lake Sciences*, 2018, 30(5):1206–1217.
- [29] 吴丰昌,冯承莲,张瑞卿,等.我国典型污染物水质基准研究[J].中国科学:地球科学,2012,42(5):665–672. WU Feng-chang, FENG Cheng-lian, ZHANG Rui-qing, et al. Derivation of water quality criteria for representative water-body pollutants in China[J]. *Science China:Earth Science*, 2012, 42(5):665–672.
- [30] 丁昌峰,李孝刚,王兴祥.我国两种典型土壤汞的安全阈值研究——以根茎类蔬菜为例[J].土壤,2015,47(2):427–434. DING Chang-feng, LI Xiao-gang, WANG Xing-xiang. Food safety thresholds of mercury for two typical soils of China: A case study for rootstalk vegetables[J]. *Soils*, 2015, 47(2):427–434.
- [31] 肖鹏飞,林晓雅,刘毅华,等.基于物种敏感性分布法的毒死蜱对稻田生态系统生态风险评价[J].生态毒理学报,2017,12(3):398–407. XIAO Peng-fei, LIN Xiao-ya, LIU Yi-hua, et al. Application of species sensitivity distribution in aquatic ecological risk assessment of chloryrifos for paddy ecosystem[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2017, 12(3):398–407.
- [32] 王晓南,刘征涛,王婉华,等.重金属铬(VI)的生态毒性及其土壤环境基准[J].环境科学,2014,35(8):3155–3161. WANG Xiao-nan, LIU Zheng-tao, WANG Wan-hua, et al. Ecotoxicological effect and soil environmental criteria of the heavy metal chromium (VI)[J]. *Environmental Science*, 2014, 35(8):3155–3161.
- [33] 王印,王军军,秦宁,等.应用物种敏感性分布评估DDT和林丹对淡水生物的生态风险[J].环境科学学报,2009,29(11):2407–2414. WANG Yin, WANG Jun-jun, QIN Ning, et al. Assessing ecological risks of DDT and lindane to fresh water organisms by species sensitivity distributions[J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2009, 29 (11): 2407–2414.
- [34] Ding C F, Ma Y B, Li X G, et al. Derivation of soil thresholds for lead applying species sensitivity distribution: A case study for root vegetables[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2016, 303:21–27.