

基于 SOM-PMF 模型的北京市密怀顺回补区 地下水硝酸盐污染源解析

刘会会, 余红*, 臧永歌

中国环境科学研究院, 生态环境部地下水污染模拟与控制重点实验室, 北京 100012

摘要: 近年来, 北京市地下水硝酸盐污染问题日益凸显, 对当地水资源安全和居民健康构成潜在威胁。该研究以北京市密怀顺平原区为对象, 基于 2010—2019 年 24 个浅层地下水监测点的水质数据, 结合地理数据绘图软件 (ArcGIS、Surfer)、自组织映射神经网络 (SOM) 和正定矩阵因子分解 (PMF) 模型等, 分析南水北调工程引发的地下水位变化对硝酸盐的驱动效应及其污染来源。结果表明: ①南水北调工程通水后北京市密怀顺平原区地下水位显著回升, 62.5% 的监测点地下水位呈上升趋势, 水位变幅最大达 30 m。硝酸盐污染空间格局随之发生明显变化, 污染重心发生迁移, 高浓度区范围有所收缩。②SOM 聚类分析显示研究区呈现三类污染空间格局, 即低污染背景区、农业面源主导的污染区以及受生活污水与畜禽养殖废水影响的混合污染区, 各类区域的污染程度和来源特征存在明显差异。③PMF 定量解析显示, 农业活动是导致硝酸盐污染的主要来源, 贡献率约 91%, 这表明农业面源污染仍然是硝酸盐污染的最主要因素; 混合污染源 (6.3%) 和畜禽养殖废水与生活污水 (2.5%) 也对硝酸盐的存在有一定贡献; 此外, 地下水回补产生的“驱替-稀释”效应, 也是影响硝酸盐分布特征的重要因素, 反映出大型调水工程对地下水环境质量的重要影响。基于研究发现, 建议北京市密怀顺平原区应重点管控农业面源污染, 优化施肥和灌溉管理措施, 以有效减少硝酸盐污染的风险。

关键词: 地下水位; 硝酸盐; 自组织映射神经网络; 正定矩阵因子分解; 污染源解析

中图分类号: X523

文章编号: 1001-6929(2026)03-0751-13

文献标志码: A

DOI: 10.13198/j.issn.1001-6929.2025.12.19

Source Apportionment of Nitrate Pollution in Groundwater of Miyun-Huairou-Shunyi Recharge Area, Beijing, Using SOM-PMF Model

LIU Huihui, YU Hong*, ZANG Yongge

Key Laboratory of Groundwater Pollution Simulation and Control of Ministry of Ecology and Environment, Chinese Research Academy of Environmental Sciences, Beijing 100012, China

Abstract: In recent years, groundwater nitrate pollution has become increasingly prominent in Beijing, posing potential threats to water resource security and public health. Based on the water quality data from 24 shallow groundwater monitoring sites collected between 2010 and 2019, and combined with geographic data mapping software (ArcGIS, Surfer), self-organizing map (SOM) neural network, and positive matrix factorization (PMF) model, this study investigated the influence of groundwater-level changes induced by the South-to-North Water Diversion Project on nitrate (NO_3^-) distribution and its pollution sources. The results showed that: (1) Following the operation of the South-to-North Water Diversion Project, groundwater levels in the Miyun-Huairou-Shunyi Plain rose significantly, with 62.5% of the monitoring sites showing an upward trend and a maximum increase of 30 m. Correspondingly, the spatial pattern of nitrate pollution changed markedly, as reflected by a shifted pollution centroid and a contraction of high-concentration areas. (2) SOM cluster analysis identified three distinct spatial pollution patterns: a low-pollution background zone, an agricultural non-point-source-dominated zone, and a mixed pollution zone affected by domestic sewage and livestock wastewater, each displaying clear differences in pollution levels and source characteristics. (3) PMF quantitative analysis indicated that agricultural activities were the dominant source of nitrate pollution,

收稿日期: 2025-09-29 修订日期: 2025-12-24

作者简介: 刘会会(2002-), 女, 河南信阳人, liuhuihui_aa@126.com

* 责任作者: 余红(1981-), 女, 四川眉山人, 正高级工程师, 博士, 主要从事环境规划管理、新污染物环境效应研究和土壤地下水调查与修复研究, yuhong807@126.com

基金项目: 国家重点研发计划项目 (No.2024YFC3713800); 国家自然科学基金项目 (No.42207081)

Supported by National Key Research and Development Program of China (No.2024YFC3713800); National Natural Science Foundation of China (No.42207081)

accounting for approximately 91% of total contributions, while mixed sources (6.3%) and livestock-domestic wastewater (2.5%) made smaller contributions. In addition, the ‘displacement-dilution’ effect caused by groundwater recharge significantly affected nitrate distribution, underscoring the substantial impact of large-scale water diversion on groundwater environmental quality. Based on these findings, it is recommended that nitrate pollution control in the Miyun-Huairou-Shunyi Plain prioritize the reduction of agricultural non-point-source pollution through optimized fertilization practices and improved irrigation management.

Keywords: groundwater level; nitrate; self-organizing map; positive matrix factorization; pollution source analysis

地下水是我国北方地区宝贵的稀缺饮用水源和战略水资源^[1],在快速城市化背景下,地下水水质安全关乎区域生态安全与公众健康^[2]。硝酸盐(NO_3^-)是地下水中常见且迁移性较强的污染物,其主要来源包括农业施肥、生活污水、工业废水以及大气沉降等^[3]。过量硝酸盐不仅可引起水体富营养化,还能通过饮用水途径对人体健康构成直接威胁。因此,精准识别 NO_3^- 污染源并量化其贡献,是实现地下水污染精准防治与水资源可持续管理的重要基础。

近年来,大规模跨流域调水工程已成为缓解区域水资源短缺状况的重要手段。南水北调工程通水后,通过河道入渗等方式对北京市密怀顺等典型区域进行生态补水,促使地下水位显著回升,提升了区域水资源储备能力。然而,外来补水也改变了区域原有的水动力场与水文地球化学环境^[4],可能加剧包气带及含水层中污染物的迁移与转化过程,导致 NO_3^- 的来源构成以及空间分布更趋复杂。这一新背景下,污染溯源工作对传统方法提出了更大挑战。

传统线性方法[如主成分分析(PCA)和因子分析(FA)]难以有效处理水质数据中普遍存在的非线性与离散性特征,常导致源解析结果出现偏差。自组织映射(SOM)基于无监督神经网络,具备强大的非线性模式识别与聚类能力^[5],对数据分布要求宽松,可识别线性方法难以捕捉的源特征。正定矩阵因子分解模型(PMF)引入测量不确定性,对数据分布要求较低,并能直接处理低于检出限或缺失值,可靠性更高^[6]。将SOM与PMF耦合,可充分发挥前者在聚类与可视化方面的优势,以及后者在定量解析方面的能力,从而构建“数据降维—模式识别—源贡献量化”的完整解析链条,显著提升源解析的精度与可靠性。该耦合方法已成功应用于珠江流域PFAS污染解析^[7]、孙德尔班地区水化学特征及砷污染溯源^[8],以及某工业园区卤代烃来源解析^[9],展现出良好的适用性与可靠性,但在地下水回补区的应用中仍较为缺乏。

基于此,该研究以北京市密怀顺平原区为例,旨在揭示南水北调生态补水背景下浅层地下水的 NO_3^- 的污染源及其贡献。通过集成2010—2019年地下

水水质数据,借助ArcGIS与Surfer软件分析 NO_3^- 时空分布特征,并联合运用SOM与PMF模型识别主要污染源及其贡献率,以期大型调水工程影响区的地下水 NO_3^- 精准防控提供科学依据。

1 研究区域概况与研究方法

1.1 研究区域概况

密怀顺地区位于北京市东北部,地处潮白河流域,是典型的冲洪积扇平原区,也是北京市重要的生态屏障和水源涵养区^[10]。区域地势北高南低,自山前向平原过渡,整体呈现“三山一原”的地貌格局。气候属温带季风气候,多年平均降水量约650 mm。潮白河及其支流怀河共同构成该区域水系的骨干网络^[11]。潜水含水层埋深总体表现为自北向南逐渐增大,水位动态受降水、开采和人工回补共同影响。垂向上,含水结构可概化为潜水含水层、浅层与深层承压含水层及其间弱透水层^[12]。水平方向上,含水层岩性自北向南由砂砾卵石渐变为粗中砂、细砂,呈现典型的冲洪积扇沉积特征。区域地下水主要接受大气降水、山前侧向流、河流与渠系渗漏及人工回灌补给,整体流向自东北向西南径流,于顺义区附近转向南^[13]。天然排泄主要在冲洪积扇前缘以泉水或沼泽形式溢出,但当前仍以人工开采为主导排泄方式。2015—2019年,通过潮白河、雁栖河等路径实施了大规模地下水回补工程,有效促进了地下水位回升。研究区范围和监测点分布见图1。

1.2 数据来源

所用数据主要包括北京市密怀顺地区2010—2019年的浅层地下水水质数据、行政区划数据、高程数据与土地利用数据。水质数据由北京市地质环境监测所提供,共涵盖24个浅层地下水监测点,监测频率为每年1次,监测时间在每年12月。监测指标包含pH、 NO_3^- 、 NH_4^+ 、 NO_2^- 、 Cl^- 、总溶解性固体(TDS)和总硬度(TH)。监测点依据北京市平原区地下水环境监测网(2007—2009年建成)布设,覆盖主要水文地质单元与潜在污染源。高程数据来源于中国科学院地理空间数据云平台(Geospatial Data Cloud, GSCloud),空间分辨率为30 m。土地利用数据来源

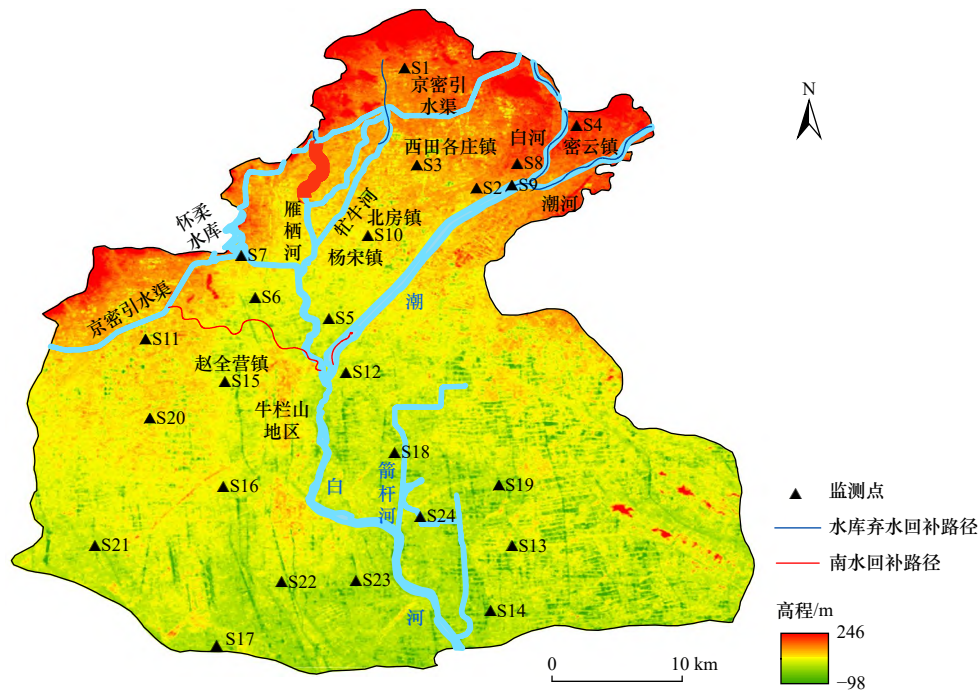


图1 密怀顺平原区高程及监测点分布

Fig.1 Elevation and distribution of monitoring points in the Miyun-Huairou-Shunyi Plain Area

于武汉大学黄昕教授团队发布的中国年度土地覆盖数据集 (<http://doi.org/10.5281/zenodo.4417809>), 分辨率为 30 m×30 m。

1.3 分析方法

本研究综合运用 Mann-Kendall (M-K) 趋势检验、克里金 (Kriging) 插值、自组织映射神经网络 (SOM) 与正定矩阵因子分解 (PMF) 模型, 用于分析地下水位动态趋势、 NO_3^- 时空分布及其定量解析其污染来源。

M-K 趋势检验用于识别地下水位变化的显著性趋势。该方法为非参数检验, 不要求数据服从特定分布, 其原假设 H_0 为数据没有趋势, 备选假设 H_1 为数据存在单调趋势。在给定的显著性水平 α 下, 通过统计量 Z 判断趋势方向与显著性 ($|Z| > Z_{1-\alpha/2}$ 时拒绝无趋势原假设)^[14]。

Kriging 插值法基于空间自相关理论, 通过利用已知数据的自相关性, 求解监测点与未知点的空间距离及变异函数, 实现对空间变异结构的精准建模^[15-16]。

SOM 神经网络用于对水质指标进行降维与聚类分析。本研究根据样本量确定输出层为 8×8 的神经元结构, 并采用 K-means 算法与戴维斯-博尔丁指数 (Davies-Bouldin 指数) 确定最佳聚类数, 从而识别不同的污染空间模式^[17-18]。

PMF 模型用于定量解析 NO_3^- 污染来源及其贡献率。该模型将观测矩阵分解为因子贡献矩阵与因子成分矩阵, 并考虑数据不确定性, 通过最小化目标函

数 Q 确定最优因子数及各源贡献率^[19]。该研究采用 PMF 5.0 软件进行求解。

2 结果与讨论

2.1 地下水位动态响应规律分析

2.1.1 M-K 趋势检验

以南水正式进京时间 (2014 年 12 月) 为界, 采用 M-K 趋势检验分析 2010—2019 年研究区浅层地下水位变化。结果显示, 工程运行后区域水位动态发生显著逆转: 通水前 58.3% 的监测点水位呈下降趋势; 通水后 62.5% 的监测点转为上升, 其中 25.0% 表现为显著上升 ($p < 0.05$), 最大升幅达 30 m (见图 2)。

水位回升在空间上呈现以工程回补区为核心的差异性特征。位于牛栏山段主河道回补区附近的 S5、S6、S7、S12、S18 等监测点, 水位趋势由“不显著下降”转为“显著上升” ($p < 0.05$), 体现了南水补给的直接效应。S1、S2、S3、S11、S14、S15 等监测点的地下水位趋势由“不显著下降”转为“不显著上升”, 表明其受地下径流补给的影响, 存在延迟与衰减, 其响应程度和效率均弱于直接补给区。此外, S4、S13、S16、S20、S22 五个监测点的地下水位趋势仍维持“不显著下降”趋势, 推测是由于距离主补给区较远或受持续高强度局部开采的影响, 导致南水补给未能有效到达或无法抵消本地开采压力。其中, 监测点 S4 位于东北部污染热点区, 其地下水位可能因人工开采而未有提升趋势。监测点 S20 和 S16 位于南部平原, 含水

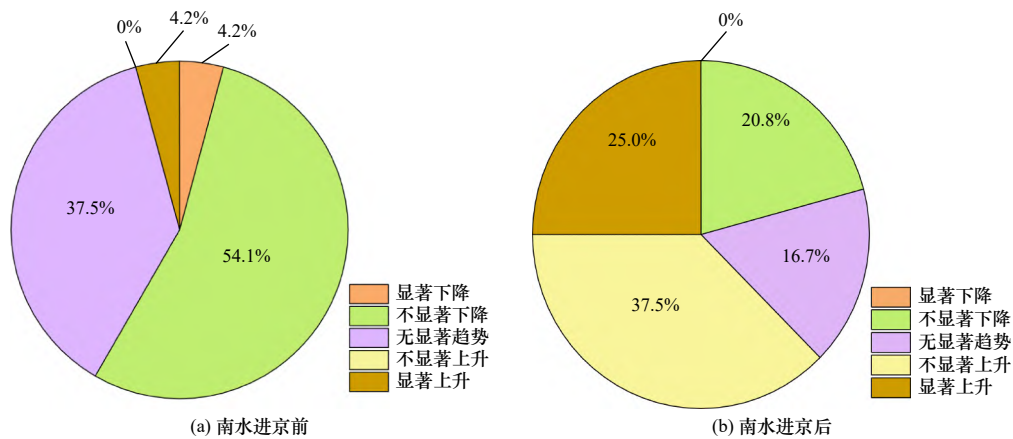


图 2 南水进京前后密怀顺平原区各监测点地下水位显著性对比

Fig.2 Significance comparison of groundwater levels at monitoring points in the Miyun-Huaiyuan-Shunyi plain area before and after the South-to-North Water Diversion Project operation

层渗透性差且城市化程度较高,开采活动削弱了补给效果。监测点 S13 和 S22 则因远离潮白河主回补区,补给效应随径流路径而显著衰减,导致南水未能有效抬升其地下水位。此外,《南水北调工程供水管理条例》指导下的“替代开采”措施(如机井封填与开采量压减)也为区域水位回升提供了制度保障。

2.1.2 地下水变幅插值

以 2014 年 12 月为时间节点,对比分析 2015—2019 年不同补给措施下潜水层水位的变化情况(见图 3)。2015—2017 年,补水集中在牛栏山段主河道,潜水层率先响应,地下水位升幅 ≥ 5 m 的“漏斗状回升区”沿河道辐射分布[见图 3(a)~(c)],标志着潮白河生态补水初见成效。2018 年,北京市水务局实施“五河联补”方案。根据《北京市水资源公报-2018》,2018 年北京市全市总供水量为 39.3 亿 m^3 ,其中南水北调水供水量为 9.3 亿 m^3 ,约占全市总供水量的 24%,回补量为历年最高。除牛栏山段外,雁栖河、潮河、白河及沙河同步接受间歇性漫溢补水,潜水层获得大范围“脉冲式”补给[见图 3(d)],升幅 ≥ 5 m 的区域向北扩展,越过怀柔至密云交界一带,并延伸至牯牛河及沙河回补区。牛栏山上游因包气带渗透系数大,形成强入渗带,最大升幅达 20 m。2019 年潜水层水位升幅 ≥ 5 m 的区域逐渐连片并扩展,位于潮白河牛栏山段以北的区域出现最大升幅(30 m);同时,下游怀柔、顺义平原区潜水位普遍升高 0~5 m[见图 3(e)]。截至 2019 年,研究区域平均地下水位较 1960 年末北京市平均地下水位下降 19.52 m,较 1998 年末下降 10.83 m,但 2015—2019 年地下水位持续回升,表明持续数十年的地下水位下降趋势得到有效逆转。综上,2015—2019 年潮白河片区通过“集中段补-多点

联补”的阶梯式回补措施,有效促进了潜水层补给,实现区域地下水位总体回升,最大升幅达 30 m。

2.2 硝酸盐时空分布特征分析

2.2.1 Getis-Ord G_i^* 空间热点分析

Getis-Ord G_i^* 空间热点分析表明,研究区 NO_3^- 污染热点比例在 2010—2019 年间稳定在 8.33%~12.50%,主要集中于 S2、S4、S7、S9 监测点,未出现显著“冷点”。全部 240 个水样中 NO_3^- 的平均浓度为 31.65 mg/L,最高值为 221.00 mg/L。参照《地下水质量标准》(GB/T 14848—2017)Ⅲ类中硝酸盐(以 N 计)限值(20 mg/L)^[20],研究区样品超标率为 40.25%,说明区域污染持续且本地浓度较高。

NO_3^- 浓度高值热点主要集中于 S2、S4、S7、S9 监测点,表明研究区内存在一个或数个持续的 NO_3^- 污染源。上述热点可能源于固定污染源,如密集的农业区、工业排污口、污水处理厂、垃圾填埋场等。根据生态环境部发布的《京津冀、长三角、珠三角等区域省级及以上工业集聚区水污染防治相关工作进展情况表》,研究区内工业污染源主要包括位于十里堡镇附近的密云经济开发区,以及位于北房镇与雁栖镇的雁栖经济开发区,二者均位于研究区中北部。总体上研究区内污染源数量多、密度大,主要分布在东北部和中西部。

从空间分布来看, NO_3^- 浓度高值区主要集中于研究区东北部的牛栏山以及潮白河以北区域。该区域东部和西部地势较高,而中部潮白河河床的整体地势较低,形成天然的低洼廊道^[21]。这样的地形格局在水文地质上构成阻隔效应,加之南部平原区含水层的渗透性较差,共同限制了北部 NO_3^- 污染物向南迁移,对潮白河以南区域起到了一定的隔离和保护作用。

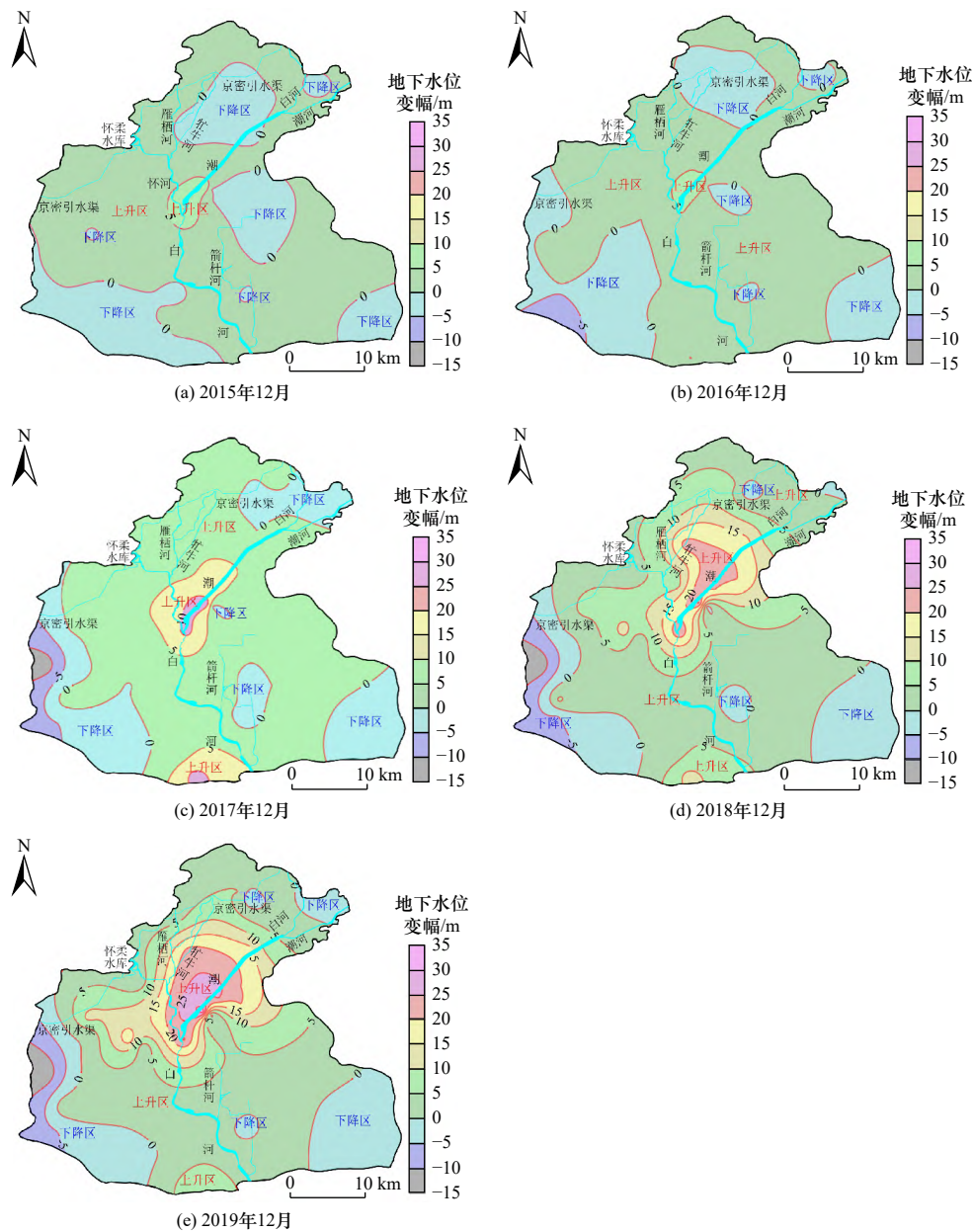


图3 2015—2019年密怀顺平原区补给措施下不同时期地下水位变幅分布

Fig.3 Spatical distribution of groundwater level variation at different recharge stages in the Miyun-Huaiyou-Shunyi Plain Area from 2015 to 2019

2.2.2 标准差椭圆与重心迁移

通过对研究区 2010—2019 年地下水 NO_3^- 浓度的标准差椭圆与重心迁移的分析, 揭示了南水北调生态补水对硝酸盐污染空间格局的驱动作用。通水前, 污染重心在东西与南北方向上摆动明显, 标准差椭圆面积亦呈现较大波动 (46.95~76.42 km^2)。该阶段污染高值区分布不稳定, 主要受局部排放以及降水淋滤等随机因素控制。

南水回补后, 污染空间格局发生系统性转变, 与地下水位回升呈现协同效应。生态补水引起监测点 S5、S6、S7 等回补区地下水位明显上升, 形成局部

“水丘”, 改变了原有水力梯度, 推动污染羽由回补中心向外迁移。具体表现为污染重心围绕核心回补区动态调整, 2017 年明显向西南偏移, 椭圆旋转角整体增大 (由 2016 年的 20.55° 增至 2019 年的 27.07°), 指示污染扩散主导方向随流场变化发生偏转。2017—2019 年, 椭圆面积呈收缩趋势 (由 65.99 km^2 降至 57.13 km^2), 说明新流场对原有污染团块具有驱散与稀释作用, 降低了高浓度区的聚集程度 (见图 4)。

综上, 标准差椭圆的演变分析表明, 南水回补通过“驱替-稀释”双重机制重塑了 NO_3^- 的空间分布, 研究区污染格局由自然随机驱动转向受人工调水所控

制的水文地球化学过程主导,深刻揭示了大型调水工程对地下水环境质量空间格局的重塑效应。

2.2.3 NO_3^- 动态响应规律分析

2015—2019年 NO_3^- 浓度变幅呈现明显的时空分异(见图5)。其中,2015年 NO_3^- 浓度变幅(-10~5 mg/L)较小,反映出该时期地下水水质相对稳定,污染波动较小。2016—2017年, NO_3^- 浓度变幅呈明显上升趋势,整体处在10~20 mg/L的较高区间,空间异质性增强;其中,北小营、密云城区、北房以及杨宋等地 NO_3^- 浓度变幅尤为显著(>20 mg/L),可能与水位上升增强的水动力迁移作用有关。至2019年, NO_3^- 浓度高变幅区转移至北石槽、赵全营一带,局部变幅高达100 mg/L。赵全营位于弱回补影响区域,其浓度激增可能是水动力驱动污染羽侧向迁移以及硝化作用所致。北石槽属于水位稳定或局部下降区, NO_3^- 浓度的变化特征反映出存在“浓缩-活化”机制,即较弱的水动力条件导致污染物富集,同时水位波动活化了包气带中的历史残留氮素,进而通过硝化作用输入含水层。典型监测点S10的数据进一步显示,水位持续上升与 NO_3^- 浓度在2017年达到峰值后逐渐下降呈负相关,印证了局部区域地下水位抬升对 NO_3^- 污染具有稀释缓解效应。

综上,潮白河中段回补区在地下水位明显抬升后, NO_3^- 浓度反而有所下降,下游高水位与高 NO_3^- 浓度的组合则可能反映出地表污染对地下水水质的持续

影响。以监测点S10为例,2015—2019年间其地下水位持续上升,而 NO_3^- 浓度在2017年出现峰值后逐步下降,说明在局部区域地下水位抬升通过稀释与驱替作用有利于缓解 NO_3^- 污染。上述分析主要从含水层尺度揭示了水位变幅与 NO_3^- 浓度的响应关系,但在垂向上,包气带岩性及其溶滤过程同样对 NO_3^- 的迁移与累积起着重要控制作用。

研究区为典型冲洪积扇沉积体,包气带岩性自北向南由砂砾卵石逐渐过渡为中细砂,孔隙结构与渗透性存在显著空间差异。北部粗颗粒砂砾卵石层渗透性高、有效孔隙大,降雨或生态补水入渗后形成的下渗水可较快穿越包气带,使得该区在水位抬升阶段表现出“历史污染再释放”的特征。南部平原区中细砂等较细颗粒沉积物渗透性较弱减缓了垂向淋滤速率,并增强了对铵态氮等氮素形态的吸附与缓释作用,形成了“缓冲层”效应。结合上述时空演变特征,南水北调后,北部强入渗带表现为 NO_3^- 的“释放源”,而南部平原区则通过减速淋滤和滞留 NO_3^- ,缓解了污染对浅层地下水的冲击。这种由包气带岩性差异所驱动的溶滤与释放过程,与2.1.2节揭示的水位变幅和2.2.3节中 NO_3^- 浓度变幅的空间分异相互印证。

2.3 浅层地下水 NO_3^- 的来源分析

该研究选取 NH_4^+ 、 NO_3^- 、 NO_2^- 、 Cl^- 、TDS和TH六项关键水质指标,结合SOM与PMF模型解析 NO_3^- 来源。其中, NO_3^- 作为目标污染物; NH_4^+ 和 NO_2^-

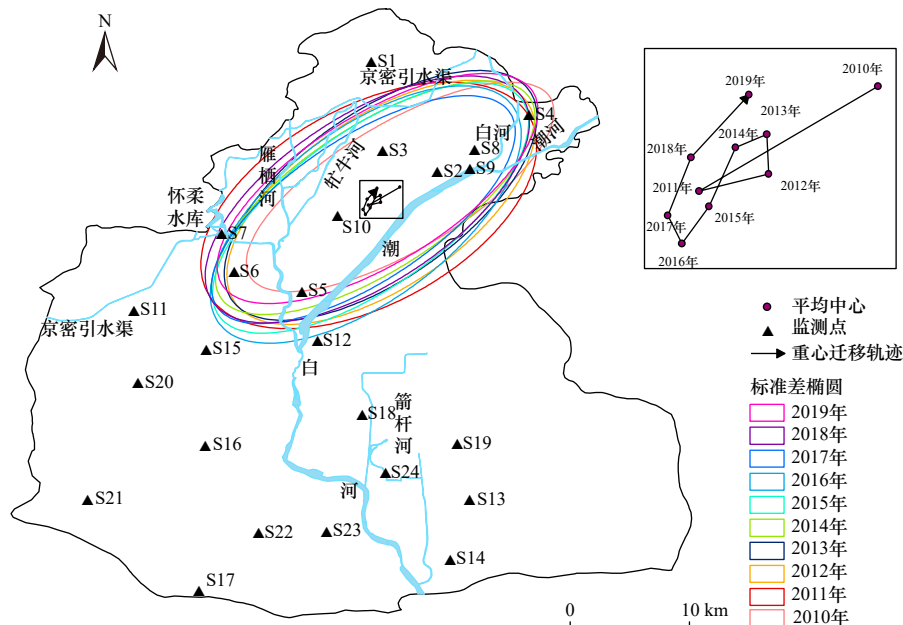


图4 2010—2019年密怀顺平原区地下水 NO_3^- 标准差与椭圆变化特征

Fig.4 Spatiotemporal variation of NO_3^- concentration and standard deviation ellipse in Miyun-Huairou-Shunyi plain area from 2010 to 2019

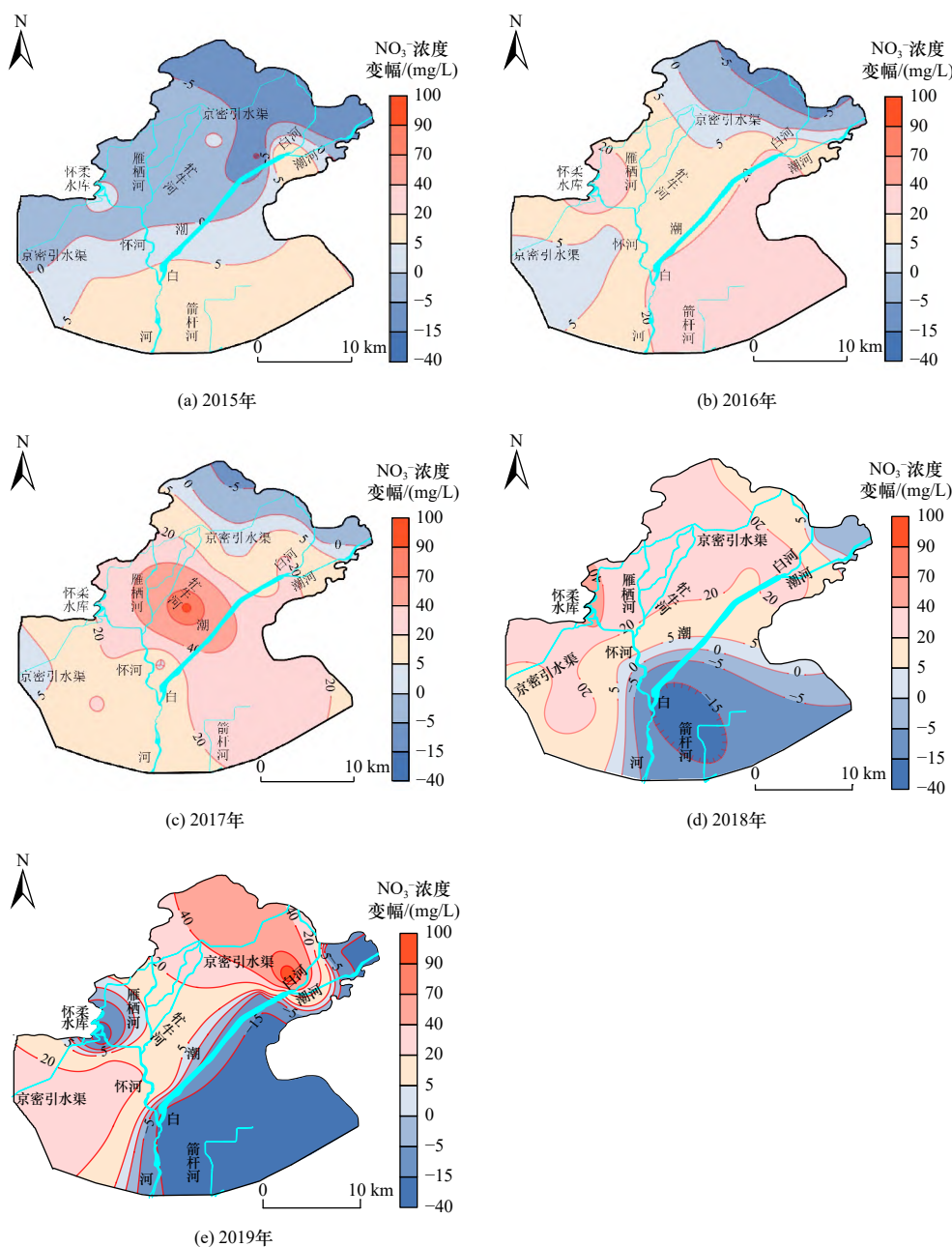


图5 2015—2019年潮白河冲洪积扇中上部不同时期 NO₃⁻浓度变幅

Fig.5 Variation range of NO₃⁻ concentration in the middle-upper Chaobai River alluvial fan in different periods from 2015 to 2019

是氮循环的中间产物,其浓度以及比例可有效反映硝化与反硝化作用的强度以及污染形成的时间;Cl⁻为保守示踪离子,其与NO₃⁻的比值有助于区分生活源污染和农业源污染;TDS综合反映水体的矿化程度;TH则表征钙、镁矿物的溶解状况。通过上述指标的组合分析,可系统识别农业施肥、生活污水、畜禽养殖等主要污染源的“指纹”。

该研究重点关注含水层中NO₃⁻的分布特征以及来源解析,但并未深入探讨包气带污染物在“水位上升”过程中的活化效应。主要原因包括:①分析基于

地下水水质监测数据,反映的是污染物经含水层运移和转化后的综合结果;②南水北调生态补水引起的水位回升为区域性缓变过程,其对包气带的“驱替效应”在时空尺度上可能弱于持续污染源输入以及含水层内部水动力-地球化学过程的主导作用。

2.3.1 SOM神经网络分析

采用SOM神经网络对研究区域2010—2014年、2015—2019年24个监测点的水质指标(NH₄⁺、NO₃⁻、NO₂⁻、Cl⁻、TDS和TH)进行聚类分析。数据经标准化,根据神经元数量的计算公式 $M = \sqrt{5N}$ (其中M为

神经元总数, N 为样本数) 确定神经元数量为 64 个 (8×8)。基于 K-means 算法的 Davies-Bouldin 指数结

果显示, 两个时段最佳样本聚类数均为 3。各聚类对应的水质特征与空间分布如图 6、图 7 所示。

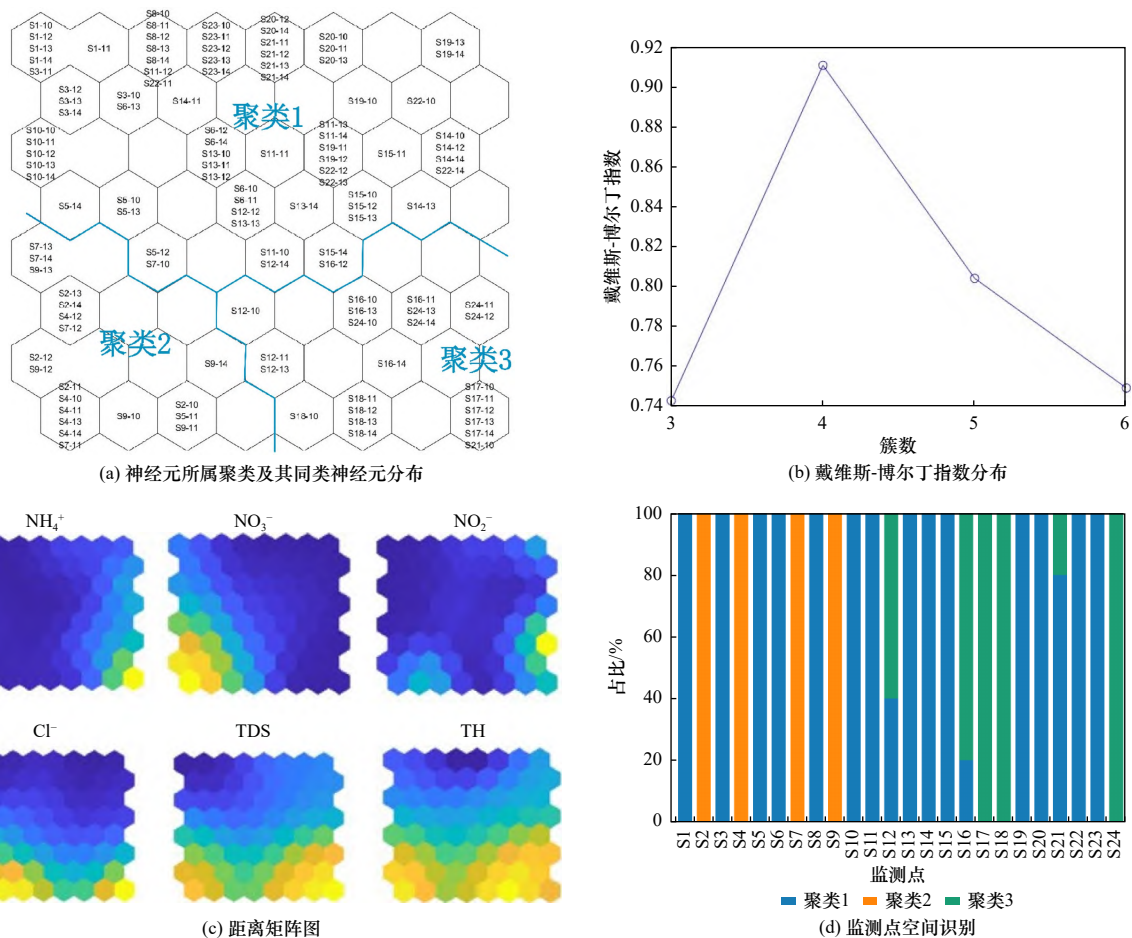


图 6 2010—2014 年地下水样品的 SOM 神经网络矩阵图及监测点聚类

Fig.6 SOM matrix and clustering results of groundwater monitoring sites from 2010 to 2014

2.3.1.1 2010—2014 年 (南水北调通水前) 聚类特征

聚类 1 主要包括监测点 S1、S3、S5、S6、S8、S10、S11、S13、S14、S15、S19、S20、S21、S22 和 S23 [见图 6(d)], 为分布最广、包含监测点最多的类别, 表征了研究区域背景地下水化学特征。该类群各项化学指标 (如 NH_4^+ 、 NO_2^- 、 NO_3^- 、 Cl^- 、TDS 和 TH) 均较低, 反映出人为污染影响轻微。空间上该类监测点主要位于研究区南部, 而污染热点则位于其下游 (北部) 区域。受区域地下水流向由南向北驱动, 天然水力梯度形成逆向屏障, 可有效阻隔北部污染向南扩散。

聚类 2 主要包括监测点 S2、S4、S7 和 S9 [见图 6(d)], 以高 NO_3^- 、高 Cl^- 、高 TDS、高 TH 为特征。高 NO_3^- 与高 Cl^- 的组合是农业面源污染的典型标志, 常源于化肥过量施用。此外, 粪肥施用以及含有 Cl^- 的肥料或灌溉水也可能贡献部分离子^[22]。该类监测点主要位于研究区边缘或上游, 水力梯度较大, 污染

物入渗路径短且滞留时间短。周边土地利用方式存在集约农业, 生活污水 (如化粪池渗漏) 也可能对临近居民区的监测点贡献部分 NO_3^- 和 Cl^- ^[23], 但影响范围通常小于农业源。高 TH 主要反映含水层富钙镁矿物的地质背景, 农业活动可能通过促进矿物溶解进一步加剧硬度升高。

聚类 3 主要包括监测点 S12、S16、S17、S18 和 S24 [见图 6(d)], 其水质表现为高 NH_4^+ 、高 NO_2^- 、高 TDS 与高 TH 的组合模式。 NH_4^+ 和 NO_2^- 的积累指示地下水处于缺氧环境, 硝化作用受阻, 常由大量有机污染物耗氧导致。高 TDS 和高 TH 说明污染水与含水层介质发生了显著的相互作用 (如矿物溶解), 或者污染源本身含有高盐分。综上, 该类监测点受生活污水、畜禽粪便或类似富含有机氮废物污染显著, 潜在来源包括化粪池泄漏、污水管渗漏、养殖场排放和垃圾渗滤液。

2.3.1.2 2015—2019年(南水北调通水后) 聚类特征

通水后聚类结构发生明显变化(见图7),反映了生态补水对地下水环境的影响。聚类a主要包括监测点S1、S3、S8、S10、S11、S13、S18、S19、S20、S21、S22和S23[见图7(d)],为分布最广、包含监测点最多的类别,其空间特征与通水前的聚类1相似,可视

为人为污染影响较小、水质相对清洁的区域。聚类b主要包括监测点S16、S17和S24[见图7(d)],污染特征表现为NH₄⁺浓度较高、其他组分浓度较低,与通水前的聚类3污染特征相似,指示含水层处于缺氧环境,硝化作用受到抑制。该类污染可能来源于生活化粪池渗漏、垃圾填埋场渗滤液或畜禽沼液等厌氧有机氮输入,属于生活与工业混合污染类型。

聚类c主要包括监测点S2、S4、S5、S7、S9、S12和S15[见图7(d)],其水质以高NO₃⁻、高NO₂⁻、高TDS、高TH与高Cl⁻为特征,与通水前的聚类2污染组分相似,但涵盖监测点有所增加,反映出污染来源更为复杂。该聚类以农业面源污染为主,部分原属清洁类型的监测点(如S5、S15)因污染物迁移而转

为农业污染类型。

通水后,生态补水引起研究区地下水位明显上升,增强了含水层水力联系,从而影响监测点的聚类归属。地下水位上升促使污染物从农业密集区(如东北部、西部)向周边扩散,使部分原清洁监测点转为污染类型。同时回补水的稀释作用使某些监测点(如S18)污染程度减轻,由生活/畜禽污染型转为清洁类型。地下水位变化还局部改变氧化还原条件,促进硝化作用,使NO₃⁻浓度普遍提高。而在污染源持续输入的区域(如S2、S4、S7、S9附近)高NH₄⁺与高NO₂⁻特征及NO₃⁻聚集态势仍较为稳定。综上,地下水位的

2.3.2 PMF 模型分析

研究区2010—2014年与2015—2019年地下水NO₃⁻污染来源进行定量解析结果见图8。SOM神经网络聚类分析识别出三类污染模式(清洁背景型、农业污染主导型以及生活/畜禽污染型),为PMF模型

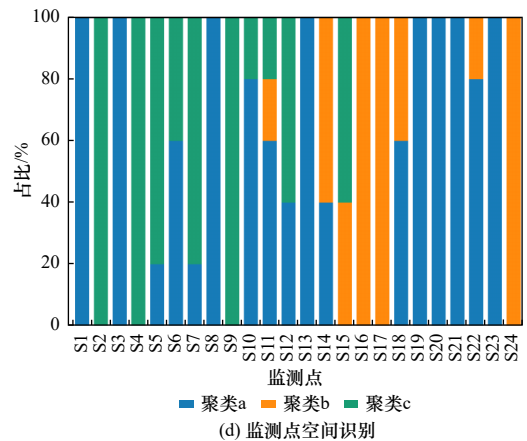
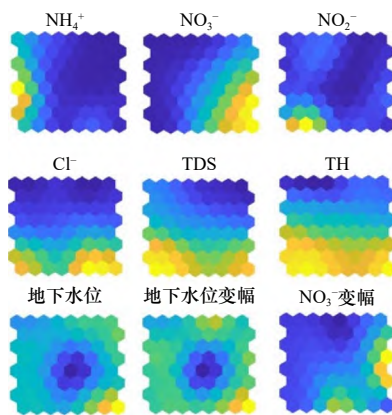
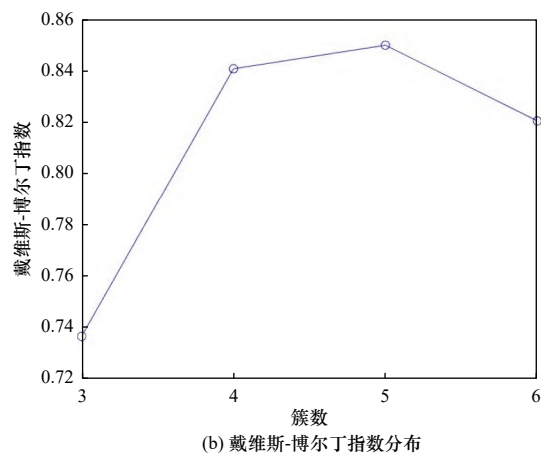
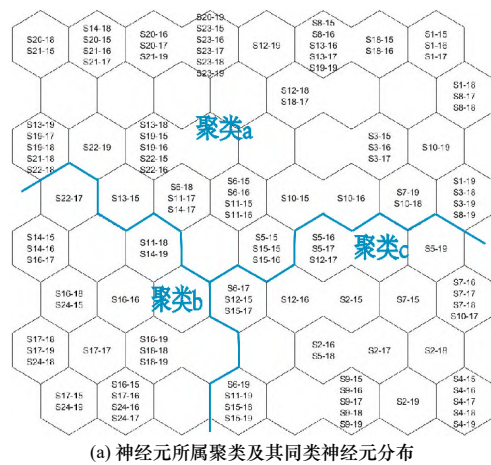


图7 2015—2019年地下水样品的SOM神经网络矩阵图及监测点聚类

Fig.7 SOM matrix and clustering results of groundwater monitoring sites from 2015 to 2019

的因子识别以及物理解释提供了关键依据,表明研究区的污染来源主要围绕上述三类。此外,SOM 聚类结果也有助于解析各因子主要贡献点位的水质特征与空间来源。后续 PMF 模型分析中,据此将因子数初步设定为 3~4 个进行调试。模型输入为样本浓度及相应不确定性,经多次因子数调试后,确定最优因子数均为 4,模型运行 20 次以确保稳定性。此时

Q_{Robust} 与 Q_{True} 比值趋近于 1.0,且全部样本残差均分布于 $[-3,3]$ 区间内,表明模型收敛良好。关键水质参数的拟合优度分析显示, NO_3^- 、 Cl^- 、TDS 及 TH 浓度的 R^2 值均高于 0.99, NH_4^+ 和 NO_2^- 浓度的 R^2 均高于 0.11。除 NH_4^+ 和 NO_2^- 外,其余参数均具有较高的预测精度,说明模型拟合效果理想,故选定 4 因子为最终解析结果。

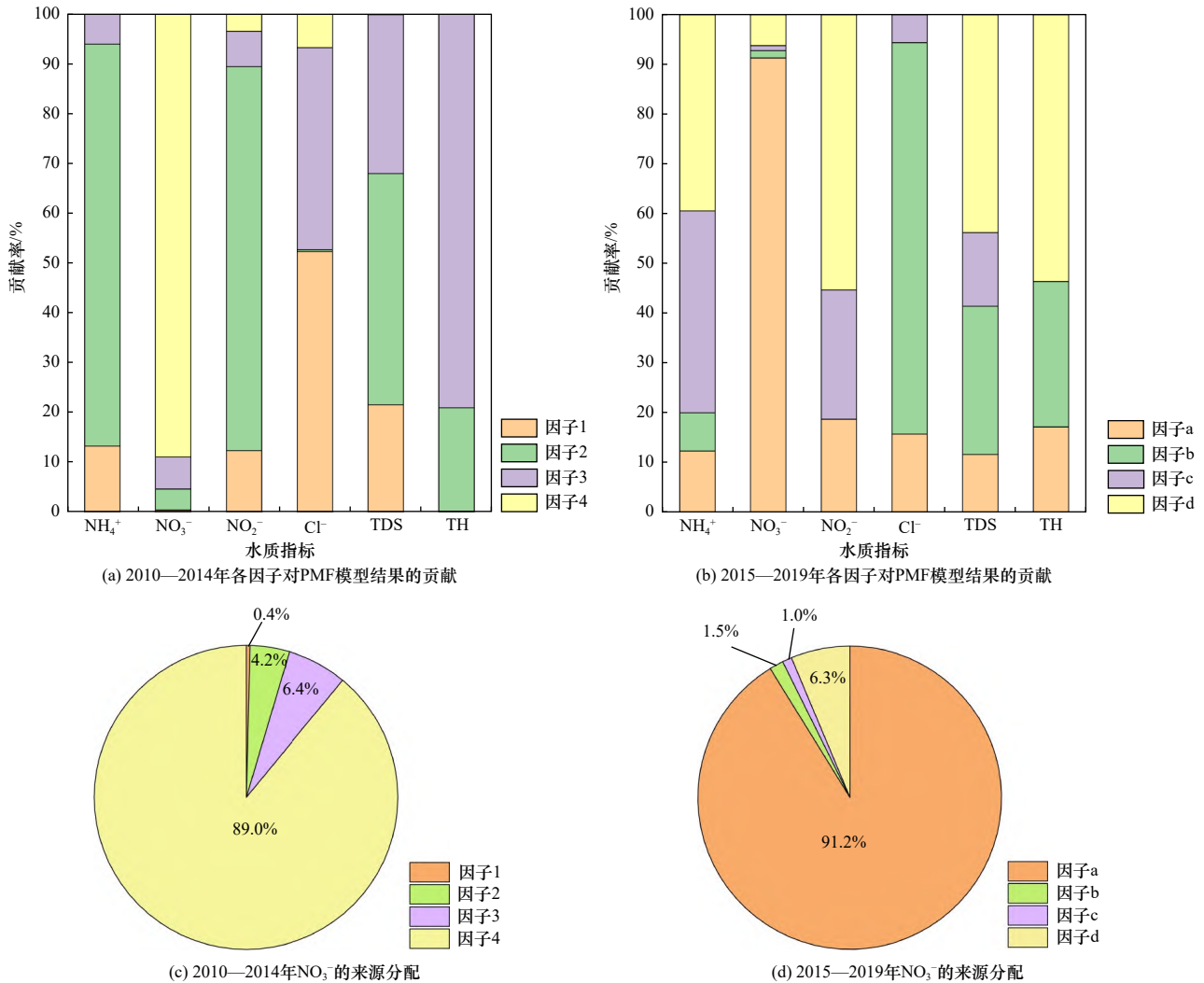


图 8 2010—2019 年地下水水质指标的因子贡献率及 NO_3^- 的来源分配

Fig.8 Factor contribution of groundwater quality indicators and source allocation of NO_3^- from 2010 to 2019

2.3.2.1 2010—2014 年(通水前)污染源解析

因子 1 以 Cl^- (52.3%) 为主要贡献组分,TDS、 NH_4^+ 和 NO_2^- 的贡献率分别为 21.5%、13.2% 和 12.3%。 Cl^- 作为保守离子,化学性质稳定,不易被吸附或沉淀,其在生活污水中含量较高,常来源于人类排泄物、洗涤剂、清洁剂和食品废弃物等。低 NO_3^- 表明该源不是典型的农业化肥或充分硝化的工业排放^[24]。TDS 的中等贡献进一步说明污水中包含了一定的可溶

性盐类与有机物。此外,结合 SOM 神经网络分析结果, Cl^- 浓度较高的监测点(如 S2、S4、S7 和 S9)位于雁栖经济开发区及密云经济开发区周围。土地利用数据分析(见图 9)显示,该因子主导的监测点主要分布在潮白河冲洪积扇中上部,周围存在相对密集的城镇、居民用地。因此,将因子 1 识别为生活污水和低污染强度的工业废水来源。

因子 2 表现为 NH_4^+ (80.7%) 与 NO_2^- (77.1%) 的显

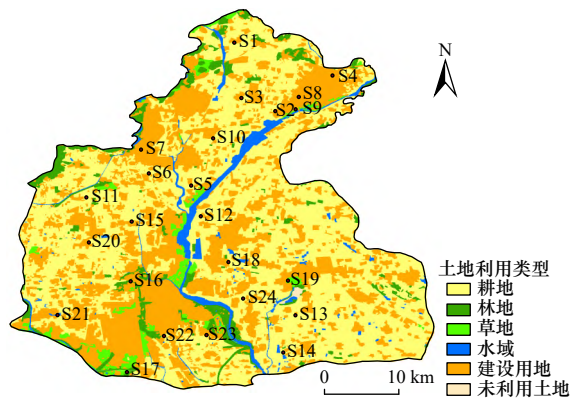


图9 2018年研究区土地利用类型

Fig.9 Land use type of the study area in 2018

著贡献, TDS 贡献率为 46.4%。在厌氧或缺氧环境下, 有机氮主要分解为 NH_4^+ , 仅部分转化为 NO_2^- ^[25], 该类特征常指示畜禽养殖废水或未完全处理的生活污水污染。同时, 废水中含洗涤剂和粪便中的可溶性盐类也会导致 TDS 升高^[26]。根据北京市农业农村局发布的养殖场数据, NH_4^+ 与 NO_2^- 高贡献监测点主要位于杨宋、北房等乡镇, 该区域是密怀顺地区传统的畜禽养殖集中区。因此, 将因子 2 识别为畜禽养殖废水来源或生活污水来源。

因子 3 以 TH(79.1%) 为主导, Cl^- 和 TDS 贡献率分别为 40.6% 和 31.9%。TH 升高主要源于含水层中钙和镁矿物的溶解属于自然过程^[27]。 Cl^- 和 TDS 的中等贡献说明地下水在运移过程中受到轻微人为盐分混入, 但自然来源仍占主导。因此, 将因子 3 识别为自然来源。

因子 4 对 NO_3^- 的贡献率高达 89.0%, 其他组分贡献较低。 NO_3^- 的高富集是农业面源污染典型标志^[28], 主要来源于氮肥和畜禽粪便的施用^[29], 经硝化作用转化后入渗含水层。 NO_3^- 独立贡献于单一因子, 且与 NH_4^+ 、 NO_2^- 无显著关联, 表明其污染发生在氧化环境, 且迁移路径短、转化过程快。因此, 将因子 4 识别为农业污染源。2015—2019 年(南水北调通水后)也解析出 4 个因子, 但污染源发生一定变化。

2.3.2.2 2015—2019 年(通水后)污染源解析

通水后同样识别出 4 个污染因子, 其来源结构发生一定变化。因子 a 与通水前因子 4 类似, 以 NO_3^- (91.2%) 为主, 其他组分贡献率均低于 20%, 反映出农业污染在氧化环境中持续存在, 且转换过程更为迅速。

因子 b 以 Cl^- (78.6%) 为主导, TDS(29.7%) 和 TH(29.2%) 次之, 氮化合物含量较低。该特征指示生活污水污染源^[30], 其高 Cl^- 和盐分特征与生活污水排放密切相关。

因子 c 以 NH_4^+ (40.5%) 和 NO_2^- (25.9%) 的贡献为主, TDS 贡献率为 14.8%, 强度低于通水前的因子 2, 反映出同类有机氮污染在稀释或转化后的特征, 可能来自分散性生活污水或小型养殖场, 其形成与南水北调工程引起的水文环境变化有关。

因子 d 中 NO_2^- (55.4%) 和 NH_4^+ (39.5%) 贡献显著, TDS(43.8%) 和 TH(53.7%) 贡献也较高。该因子具有混合污染特征, 可能由生活污水与小型养殖废水的复合渗漏所致。

本研究应用 SOM-PMF 耦合模型构建了从定性识别到定量解析的完整解析流程, 相较于单一模型具有明显优势。然而该方法也存在一定的局限性: ①模型的解析能力仍受限于输入水质指标的代表性与完整性; ②SOM 神经网络最佳聚类数需借助 Davies-Bouldin 指数等统计指标人为判定, 存在主观判断因子; ③该模型虽能有效识别污染源, 但对污染物在含水层中复杂的迁移与转化过程的直接刻画能力有限。后续研究可探索将耦合模型与水动力模型进行集成, 以更全面揭示污染物的运移机制。

南水北调工程通水前后研究区地下水污染结构发生明显变化。通水前污染来源以生活污水、低污染工业废水、畜禽养殖、自然来源、农业面源为主; 通水后农业污染仍占主导但转化加快, 生活源特征更加突出, 并出现局部还原性污染及混合污染类型。整体上, 调水工程通过稀释作用降低了一定污染负荷, 但因地下水位回升与氧化环境改变, 也使污染来源更趋多元与复杂。

综上, 建议密怀顺地区地下水 NO_3^- 污染治理应以农业面源污染控制为核心, 具体措施包括推广科学施肥技术、优化种植结构、加强农田氮素管理等; 同时, 应加强对城镇生活污水和畜禽养殖废弃物排放的管控, 并持续进行地下水水质监测。

3 结论

a) 南水北调工程对北京市密怀顺地区 2010—2019 年浅层区域地下水位动态具有显著影响。通水后(2015—2019 年), 研究区 62.5% 的监测点地下水位呈回升趋势, 其中 25% 的监测点上升趋势显著, 最大升幅达 30 m。地下水位回升空间分布呈现以生态回补区为核心的差异性特征, 直接回补区的地下水位响应最为明显。

b) NO_3^- 污染的空间格局发生相应变化。受地下水位上升产生的“驱替-稀释”效应影响, NO_3^- 分布特征发生改变, 污染重心发生迁移, 高浓度区范围收缩。Getis-Ord G_i^* 热点分析显示, 热点区比例稳定在

8.33%~12.5%, 主要分布在研究区域东北部。

c) SOM神经网络聚类识别出三类污染模式, 分别为清洁背景型、农业污染主导型和生活/畜禽污染型。南水北调工程通水后, 部分监测点因水力联系增强和污染羽迁移而导致聚类属性发生变化, 反映出污染格局对水文条件改变具有动态响应特性。

d) PMF模型定量解析结果表明, 农业源是 NO_3^- 的最主要来源, 其次为生活源与混合源。通水后, 污染源构成趋于复杂, 混合型污染贡献呈现, 印证了水文条件变化会加剧污染来源的多样性。

参考文献 (References):

- [1] VOUDOURIS K,KAZAKIS N,VOUDOURIS K,et al. Groundwater quality and groundwater vulnerability assessment[J]. *Environments*,2021,8(10):100.
- [2] 邹一飞,许明家,丁爱中,等.地下水生态系统健康评价研究进展[J].*环境科学研究*,2024,37(11):2341-2351.
ZOU Y F,XU M J,DING A Z,et al.Research progress in groundwater ecosystem health assessment[J].*Research of Environmental Sciences*,2024,37(11):2341-2351.
- [3] 范祖金,魏兴,周育琳,等.典型山地农业区浅层地下水硝酸盐来源及转化过程解析[J].*环境科学研究*,2023,36(10):1946-1956.
FAN Z J,WEI X,ZHOU Y L,et al.Analysis of nitrate sources and transformation processes in shallow groundwater in typical mountainous agricultural area[J].*Research of Environmental Sciences*,2023,36(10):1946-1956.
- [4] 贾永锋,尚长健,廉新颖,等.地下水回补环境污染风险研究进展[J].*环境科学研究*,2023,36(9):1643-1653.
JIA Y F,SHANG C J,LIAN X Y,et al.Environmental pollution risks related to managed aquifer recharge:a review[J].*Research of Environmental Sciences*,2023,36(9):1643-1653.
- [5] GAO L,ZHANG W T,LIU Q Y,et al.Machine learning based on the graph convolutional self-organizing map method increases the accuracy of pollution source identification:a case study of trace metal(loid)s in soils of Jiangmen City,South China[J]. *Ecotoxicology and Environmental Safety*,2023,250:114467.
- [6] VESTENIUS M,HOPKE P K,LEHTIPALO K,et al.Assessing volatile organic compound sources in a boreal forest using positive matrix factorization (PMF)[J].*Atmospheric Environment*,2021, 259:118503.
- [7] ZENG J W,LIU K,LIU X,et al.Driving factor,source identification, and health risk of PFAS contamination in groundwater based on the self-organizing map[J].*Water Research*,2024,267:122458.
- [8] JANNAT J N,ISLAM A R M T,MIA M Y,et al.Using unsupervised machine learning models to drive groundwater chemistry and associated health risks in Indo-Bangla Sundarban region[J].*Chemosphere*,2024,351:141217.
- [9] YANG X,DU J Y,JIA C,et al.Groundwater pollution risk,health effects and sustainable management of halocarbons in typical industrial parks[J].*Environmental Research*,2024,250:118422.
- [10] 于威,何宝南,郭敏丽,等.密怀顺地区生态补水对地下水水化学的影响分析[J].*北京水务*,2023(增刊2):16-22.
YU W,HE B N,GUO M L,et al.Analysis on the influence of ecological replenishment on groundwater hydrochemistry in Mihuishun area[J].*Beijing Water*,2023(Suppl 2):16-22.
- [11] 王鑫,李炳华,潘兴瑶,等.南水北调水回补对北京密怀顺河道回补区地下水水质影响[J].*环境科学研究*,2022,35(8):1935-1944.
WANG X,LI B H,PAN X Y,et al.Influence of South-to-North Transfer Water Recharge by river infiltration on groundwater quality in Mi-Huai-Shun Area,Beijing[J].*Research of Environmental Sciences*,2022,35(8):1935-1944.
- [12] 王聪,黄勇.应急水源地运行期间地下水水位变化及环境影响评价[J].*水力发电*,2022,48(6):23-26.
WANG C,HUANG Y.Groundwater level change of emergency water source site during operation period and environmental impact assessment[J].*Water Power*,2022,48(6):23-26.
- [13] 夏绮文,李炳华,何江涛,等.潮白河再生水生态补给河道区浅层地下水氮转化[J].*环境科学研究*,2021,34(3):618-628.
XIA Q W,LI B H,HE J T,et al.Nitrogen transformation of shallow groundwater in river area of ecological recharge of reclaimed water in Chaobai River[J].*Research of Environmental Sciences*, 2021,34(3):618-628.
- [14] ESIT M.Investigation of innovative trend approaches (ITA with significance test and IPTA) comparing to the classical trend method of monthly and annual hydrometeorological variables:a case study of Ankara region,Turkey[J].*Journal of Water and Climate Change*,2023,14(1):305-329.
- [15] FISCHER A,LEE M K,OJEDA A S,et al.GIS interpolation is key in assessing spatial and temporal bioremediation of groundwater arsenic contamination[J].*Journal of Environmental Management*, 2021,280:111683.
- [16] FU C B,WANG P,ZHAO L,et al.A distance correlation-based Kriging modeling method for high-dimensional problems[J]. *Knowledge-Based Systems*,2020,206:106356.
- [17] JIANG W J,MENG L S,LIU F T,et al.Distribution,source investigation,and risk assessment of topsoil heavy metals in areas with intensive anthropogenic activities using the positive matrix factorization (PMF) model coupled with self-organizing map (SOM)[J].*Environmental Geochemistry and Health*,2023,45(8): 6353-6370.
- [18] 冉泽宇.基于水化学和多元统计学方法的地下水污染源解析:以河北省某地区为例[D].北京:中国地质大学(北京),2023.
- [19] LIU L,XU X H,HAN J L,et al.Heavy metal(loid)s in agricultural soils in the world's largest barium-mining area:pollution characteristics,source apportionment,and health risks using PMF model and Cd isotopes[J].*Process Safety and Environmental Protection*,2022,166:669-681.
- [20] 国家质量监督检验检疫总局,中国国家标准化管理委员会.地下水质量标准:GB/T 14848—2017[S].北京:中国标准出版社,2017.
- [21] 张洁,杨庆,肖寒,等.北京典型地区地下水硝酸盐氮污染特征解析[J].*北京水务*,2022(3):25-30.

- ZHANG J,YANG Q,XIAO H,et al.Analysis of nitrate nitrogen pollution characteristics of groundwater in Typical Areas of Beijing[J].Beijing Water,2022(3):25-30.
- [22] ABASCAL E,GÓMEZ-COMA L,ORTIZ I,et al.Global diagnosis of nitrate pollution in groundwater and review of removal technologies[J].Science of the Total Environment,2022,810: 152233.
- [23] 王会霞,史浙明,姜永海,等.地下水污染识别与溯源指示因子研究进展 [J].环境科学研究,2021,34(8):1886-1898.
- WANG H X,SHI Z M,JIANG Y H,et al.Research progress on indicator of groundwater pollution identification and traceability [J].Research of Environmental Sciences,2021,34(8):1886-1898.
- [24] KWON E,PARK J,PARK W B,et al.Nitrate contamination of coastal groundwater:sources and transport mechanisms along a volcanic aquifer[J].Science of the Total Environment,2021,768: 145204.
- [25] ZHANG Y,CAI Z C,ZHANG J B,et al.The controlling factors and the role of soil heterotrophic nitrification from a global review [J]. Applied Soil Ecology,2023,182:104698.
- [26] 韩聪,高宗军,刘久潭,等.郟城地区地下水化学特征及针对硝酸盐的健康风险评价 [J].地球与环境,2021,49(4):436-446.
- HAN C,GAO Z J,LIU J T,et al.Chemical characteristics of groundwater and health risk assessment of nitrate in Tancheng area[J].Earth and Environment,2021,49(4):436-446.
- [27] YU S P,WANG T Y,BAI X M,et al.Hydrochemical characteristics and formation mechanisms of groundwater in the Nanmiao emergency groundwater source area,Yichun,western Jiangxi,China [J].Water,2025,17(14):2063.
- [28] CHAUDHARY I J,CHAUHAN R,KALE S S,et al.Groundwater nitrate contamination and its effect on human health:a review [J]. Water Conservation Science and Engineering,2025,10(1):33.
- [29] GAO H B,WANG G,FAN Y R,et al.Tracing groundwater nitrate sources in an intensive agricultural region integrated of a self-organizing map and end-member mixing model tool [J].Scientific Reports,2024,14:16873.
- [30] KAMMOUN S,TRABELSI R,RE V,et al.Coastal aquifer salinization in semi-arid regions:the case of grombalia (Tunisia) [J].Water,2021,13(2):129.

(责任编辑:周巧富)