

团 体 标 准

T/GDSES XX—2026

耕地土壤重金属污染溯源技术指南

Technical guideline for source tracing of heavy metals in farmland soil

2026-XX-XX 发布

2026-XX-XX 实施

目 次

前 言 II

1 范围 3

2 规范性引用文件 3

3 术语及定义 3

4 总则 4

5 工作程序 4

6 信息调查 6

7 布点采样与测试 7

8 溯源分析 10

9 报告编制 13

附 录 A 14

附 录 B 15

附 录 C 16

参 考 文 献 18

前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由广东省生态环境监测中心提出。

本文件由广东省环境科学学会归口。

本文件起草单位：广东省生态环境监测中心。

本文件主要起草人：

本文件为首次制定。

耕地土壤重金属污染溯源技术指南

1 范围

本文件提供了广东省耕地土壤重金属污染溯源的工作程序和技术内容。

本文件适用于水田、水浇地和旱地等耕地土壤中典型重金属污染溯源工作。其他类型土壤重金属污染溯源可参照执行。

2 规范性引用文件

本文件引用了下列文件或其中的条款。凡是注明日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本方法体系；凡是未注明日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本方法体系。

GB 15618 土壤环境质量 农用地土壤污染风险管控标准（试行）

GB/T 32722 土壤质量 土壤样品长期和短期保存指南

GB/T 36197 土壤质量 土壤采样技术指南

HJ/T 20 工业固体废物采样制样技术规范

HJ 91.1 污水监测技术规范

HJ 91.2 地表水环境质量监测技术规范

HJ 164 地下水环境监测技术规范

HJ/T 166 土壤环境监测技术规范

3 术语及定义

下列定义适用于本标准。

3.1

耕地土壤 cultivated soil

指耕地中位于陆地表层能够生长农作物的疏松多孔物质层。其中，耕地是指种植农作物的土地，包括水田、水浇地和旱地。

3.2

土壤重金属污染 heavy metal contamination in soil

在人类活动影响下，耕地土壤中重金属元素含量超过《土壤环境质量 农用地土壤污染风险管控标准（试行）》（GB 15618）规定的风险筛选值，可能对农产品质量安全、农作物生长或土壤生态环境造成风险的现象。

3.3

污染源识别 pollution source identification

对污染物的来源进行判别、解析与评价,简称源识别。

3.4

污染源解析 pollutant source apportionment

定性或定量识别不同污染来源对环境介质中污染物浓度贡献程度的过程。

3.5

正定矩阵因子分解模型 positive matrix factorization model(PMF)

将样本数据的 X 矩阵分解为因子贡献 G 矩阵和因子谱 F 矩阵，对因子谱 F 矩阵进行识别，并定量计算样本的因子贡献的一种多元因子分析类模型。

3.6

金属同位素组成 metal isotopic composition

指金属元素各同位素的相对含量，通常以比值或 δ 值等表示，如汞同位素（ $\delta^{202}\text{Hg}$ ）、镉同位素（ $\delta^{114}\text{Cd}$ ）、铬同位素（ $\delta^{53}\text{Cr}$ ）、铜同位素（ $\delta^{65}\text{Cu}$ ）、锌同位素（ $\delta^{66}\text{Zn}$ ）、铅同位素（ $^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 、 $^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$ ）、锑同位素（ $\delta^{123}\text{Sb}$ ）、铊同位素（ $\delta^{205}\text{Tl}$ ）等。

3.7

端元 end-member

具有独特且可辨识的同位素组成特征的污染物来源，如特定的工业污染源、农业活动源、自然地质背景等。

4 总则

4.1 科学性

遵循科学的调查方法和分析技术手段，严格依据本文件规定的调查内容、采样方法、测试方法和分析流程开展溯源工作，确保溯源成果的真实性、准确性和时效性。

4.2 系统性

按照“信息调查-布点采样与测试分析-溯源分析-报告编制”的系统流程，由初步到深入、由定性到定量，逐阶段推进溯源工作。各阶段工作有机衔接，前一阶段的成果作为后续工作的基础和依据。

4.3 可操作性

充分考虑广东省耕地土壤重金属污染特征、地理环境条件和实际工作条件，在保证科学性的前提下，合理选择调查范围、采样数量、测试指标和分析方法，确保技术方法具有实际可操作性。

5 工作程序

耕地土壤重金属污染溯源工作分为信息调查、布点采样与测试分析、溯源分析和报告编制四个阶段。各阶段主要工作内容及衔接关系见图 1。

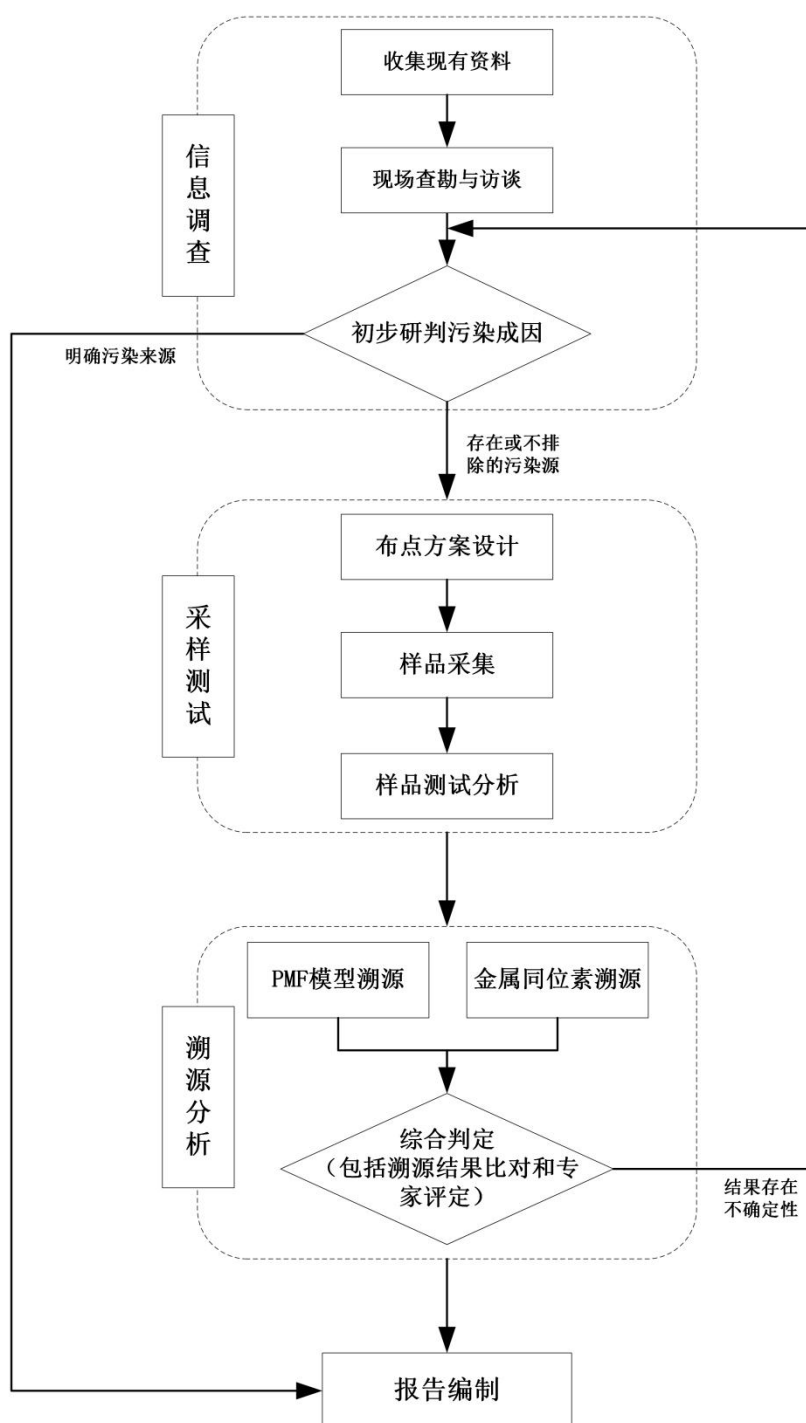


图 1 工作技术流程图

a) 信息调查阶段：通过收集现有资料、现场查勘与访谈，初步研判污染成因类型，核实潜在污染源，为后续布点采样与测试分析提供依据。

b) 布点采样与测试分析阶段：根据信息调查结论，制定布点方案，系统采集土壤样品（含背景样品）和潜在污染源样品，开展重金属浓度测试和金属同位素组成测试。

c) 溯源分析阶段：分别利用正定矩阵因子分解模型（PMF）和金属同位素方法进行溯源分析，计

算不同污染源的贡献比例，并对两种方法的溯源结果进行对比验证。

d) 报告编制阶段：汇总各阶段工作成果，编制耕地土壤重金属污染溯源分析报告。

6 信息调查

6.1 资料收集

根据溯源进展分阶段收集，内容包括：自然地理与土地利用资料、水系分布、历史及在产工矿企业清单与排污信息、尾矿库和废渣堆存点分布、区域土壤及农产品重金属监测数据、农业投入品（化肥、有机肥、农用污泥等）来源与施用量、环境污染事故记录与历史遥感影像等。推荐资料清单见附录 A，可根据实际情况增减。

6.2 现场查勘与访谈

重点赴受污染农用地所在乡镇和行政村，现场查勘潜在污染源（废渣堆存点、企业排污口、污水灌溉渠道、道路遗撒等）、农用地环境和水系状况。访谈对象包括乡镇及村干部、熟悉本村历史情况的村民和涉事企业相关人员，了解历史污染活动、灌溉水源变化和农业投入品使用情况，做好记录并留存影像资料。

6.3 污染成因类型研判与初步核实

基于收集的资料和现场调查结果，研判污染成因。若历史与当前均不存在人为污染源证据，可结束溯源；否则按表 1 判定污染成因类型，并分类开展初步核实。

表 1 污染成因研判与初步核实情况表

| 污染成因类型 | 关键判定条件 | 初步核实要点 |
|-----------------|---|--|
| 水力输移型（水输入型） | 农用地沿地表水系分布，且： ①周边存在涉重金属废渣（超 GB 15618 筛选值），存在经雨水冲刷进入农用地的可能；或 ②水系底泥重金属超标且不排除外来污染源，存在引用灌溉或洪水淹没历史 | 排查水系上游及地块周边废渣（原则≥5 km） 系统监测底泥重金属污染 排查周边企业（原则≥1 km） |
| 大气重金属沉降型（大气输入型） | 满足以下之一： ①长时序监测数据显示区域土壤重金属含量呈明显上升趋势 ②周边 5 km（可扩大）范围历史或当前存在排放涉重金属大气污染物的企业（大型有色冶炼企业影响范围可达数十公里） | 排查周边涉气排放企业（原则≥5 km） 分析企业周边土壤重金属变化趋势 必要时开展大气沉降监测 |
| 交通污染型 | 农用地处于道路两侧，且历史或当前存在道路运输矿石或废渣 | 确认当前是否仍有道路遗撒 |
| 事故污染型 | 曾发生溃坝、尾矿库泄漏或交通事故导致含重金属污染物进入农用地 | 确认风险是否已有效管控 |

表 1 污染成因研判与初步核实情况表（续表）

| | | |
|----------|--|-----------------------------------|
| 废水污染型 | 农用地毗邻工矿企业，且存在： ①生产废水、厂区初期雨水、污染地块侧渗废水等直接或间接进入农用地；或 ②矿山酸性废水污染水体因洪水或灌溉进入农用地 | 排查周边企业及矿山酸性废水排放源 确认废水是否已得到有效整治 |
| 农业投入品污染型 | 历史上存在： ①磷矿渣等工业固废作为肥料施用；或 ②施用的化肥、有机肥、畜禽粪污等重金属含量超相关标准 | 确认当前农业投入品重金属含量是否仍超标 |
| 混合型 | 同时属于上述 2 种及以上类型 | 根据具体类型分类核实 |

注 1：核实中如确认当前无继续污染风险，可排除该途径；否则列入后续布点采样和溯源分析重点。
注 2：当受污染农用地周边未发现明显污染线索时，重点研判大气沉降和农业投入品污染的可能性。

7 布点采样与测试

7.1 布点方案设计

布点方案在信息调查结论的基础上制定，遵循以下原则：

7.1.1 采样范围

采样范围包括受污染区（耕地超标地块及周边农用地）、对照区（与受污染区土壤类型相似、无明显污染源影响的区域）和潜在污染源所在区域。对照区和潜在污染源所在区域参照信息调查结论确定。

7.1.2 点位布设要求

按照受污染区和潜在污染源的分布，结合重金属污染物迁移途径（水流方向、主导风向、地形坡度等），采用系统随机抽样方式布设采样点。点位布设符合以下要求：

- a) 受污染区土壤样品：在耕地超标地块内及其周边，沿污染物可能迁移方向按网格或断面布设。采样点位数量根据调查区域面积和污染复杂程度确定，原则上不少于 10 个，每个点位应能代表该区域土壤的总体状况。
- b) 背景样品：在对照区采集与受污染区相同土壤类型的土壤样品，作为区域自然背景参考。原则上不少于 3 个。
- c) 潜在污染源样品：针对信息调查识别出的各类型潜在污染源（如废渣、尾矿、底泥、灌溉水、大气沉降尘、化肥、有机肥等），分别采集代表性样品。每种污染源类型原则上不少于 3 个，对于样品均匀性好的情况可适当减少。
- d) 对于面积较大或污染状况复杂的区域，可适当增加采样点位数量，确保数据具有统计学意义。

7.1.3 采样深度

土壤样品一般采集表层土壤（0 cm~20 cm），对于可能受深层污染影响的情况（如长期污灌历

史），可根据需要增采深层土壤样品（20 cm～60 cm 或至母质层）。背景样品采样深度应与受污染区保持一致。

7.2 样品采集与保存

7.2.1 土壤样品采集

土壤样品的采集工作参照 GB/T 36197 和 HJ/T 166 执行。

7.2.2 潜在污染源样品采集

根据不同污染源类型分别采集：

- a) 固体废物（废渣、尾矿、底泥等）：参照 HJ/T 20 执行，多点采集混合样品；
- b) 灌溉水：参照 HJ 91.2 和 HJ 493 执行，采集瞬时水样；
- c) 大气沉降尘：参照 HJ 194 执行，采用被动沉降或主动采样方式；
- d) 农业投入品（化肥、有机肥、畜禽粪污、农用污泥等）：参照相应产品采样标准执行。

7.2.3 样品保存与运输

土壤和固体废物样品的保存参照 GB/T 32722 执行，水样保存参照 HJ 493 执行。样品采集后使用密封袋或洁净容器封装，贴附唯一性标签，低温（4℃以下）避光保存，尽快（一般不超过 7 天）送达实验室进行前处理。运输过程中要有完整的样品流转记录。

7.3 重金属浓度分析

7.3.1 测试指标

根据信息调查结论和溯源需求确定测试重金属元素种类，一般包括：镉（Cd）、汞（Hg）、砷（As）、铅（Pb）、铬（Cr）、铜（Cu）、锌（Zn）、镍（Ni），必要时增加锑（Sb）、铊（Tl）及其他辅助判源元素。

7.3.2 测试方法

重金属浓度的检测推荐方法见表 2。

表 2 重金属浓度的检测方法汇总

| 序号 | 元素 | 推荐检测方法 | 方法标准编号 |
|----|-------|-----------------|------------|
| 1 | 镉（Cd） | 石墨炉原子吸收分光光度法 | GB/T 17141 |
| | | 电感耦合等离子体质谱法 | HJ 1315 |
| 2 | 汞（Hg） | 微波消解/原子荧光法 | HJ 680 |
| | | 催化热解-冷原子吸收分光光度法 | HJ 923 |
| 3 | 砷（As） | 微波消解/原子荧光法 | HJ 680 |
| | | 电感耦合等离子体质谱法 | HJ 1315 |
| 4 | 铅（Pb） | 石墨炉原子吸收分光光度法 | GB/T 17141 |
| | | 火焰原子吸收分光光度法 | HJ 491 |
| 5 | 铬（Cr） | 火焰原子吸收分光光度法 | HJ 491 |
| | | 波长色散 X 射线荧光光谱法 | HJ 780 |

| 序号 | 元素 | 推荐检测方法 | 方法标准编号 |
|----|--------|----------------------------|------------------------------|
| 6 | 铜 (Cu) | 火焰原子吸收分光光度法 电感耦合等离子体质谱法 | GB/T 17138, HJ 491 HJ 803 |
| 7 | 锌 (Zn) | 火焰原子吸收分光光度法 电感耦合等离子体质谱法 | GB/T 17138, HJ 491 HJ 803 |
| 8 | 镍 (Ni) | 火焰原子吸收分光光度法 电感耦合等离子体质谱法 | GB/T 17139, HJ 491 HJ 803 |
| 9 | 锑 (Sb) | 微波消解/原子荧光法 电感耦合等离子体质谱法 | HJ 680 HJ 1315 |
| 10 | 钴 (Co) | 电感耦合等离子体质谱法 | HJ 1315 |

7.3.3 质量保证与质量控制

每批样品（不超过 20 个）至少包含 1 个全程序空白样、1 个平行样和 1 个有证标准物质样品。平行样测定相对偏差小于 20%。标准物质测定值在认定值不确定度范围内。低于方法检出限的数据以“未检出”报出，并注明检出限数值。

7.4 金属同位素测试

7.4.1 适用条件

金属同位素测试适用于以下情形：

- 受污染土壤中存在两种及以上具有稳定同位素的金属元素（Pb、Cd、Zn、Cu、Hg、Cr、Sb、Tl 等），且这些同位素具有可测定的丰度差异；
- 可以获得潜在污染源样品的同位素丰度比值信息，或可通过文献资料获取同类型污染源的同位素特征数据；
- 不具备同位素测试条件或不满足上述适用条件的，可仅采用 PMF 模型方法进行溯源分析。

7.4.2 测试指标

根据受污染土壤中目标重金属元素种类及潜在污染源特征，选择具有源指示意义的金属同位素进行测定。常用金属同位素测试指标包括：

表 3 金属同位素测试指标

| 金属元素 | 同位素测试指标 | 仪器方法 |
|--------|---|-----------|
| 铅 (Pb) | $^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$ 、 $^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ | MC-ICP-MS |
| 镉 (Cd) | $\delta^{114}\text{Cd}$ ($^{114}\text{Cd}/^{110}\text{Cd}$) | MC-ICP-MS |
| 锌 (Zn) | $\delta^{66}\text{Zn}$ ($^{66}\text{Zn}/^{64}\text{Zn}$) | MC-ICP-MS |
| 铜 (Cu) | $\delta^{65}\text{Cu}$ ($^{65}\text{Cu}/^{63}\text{Cu}$) | MC-ICP-MS |
| 汞 (Hg) | $\delta^{202}\text{Hg}$ 、 $\Delta^{199}\text{Hg}$ 、 $\Delta^{200}\text{Hg}$ | MC-ICP-MS |

| 金属元素 | 同位素测试指标 | 仪器方法 |
|--------|---|-----------|
| 铬 (Cr) | $\delta^{53}\text{Cr}$ ($^{53}\text{Cr}/^{52}\text{Cr}$) | MC-ICP-MS |
| 锑 (Sb) | $\delta^{123}\text{Sb}$ ($^{123}\text{Sb}/^{121}\text{Sb}$) | MC-ICP-MS |
| 铊 (Tl) | $\delta^{205}\text{Tl}$ ($^{205}\text{Tl}/^{203}\text{Tl}$) | MC-ICP-MS |

7.4.3 样品前处理与测定

固体样品经干燥、研磨和过筛后，采用酸消解法或热解法制备成试样；液体样品经 0.45 μm 滤膜过滤后制成试样；废气样品通过酸消解法、热解法等制备成试样。试样采用离子交换柱色谱法、吹扫捕集法等进行分离纯化后，利用多接收电感耦合等离子体质谱仪（MC-ICP-MS）进行同位素组成测定。测定过程中采用有证标准物质进行校准和质量控制。样品前处理、测定及全过程质量保证与质量控制具体要求参照相关同位素分析测试标准规范执行。

8 溯源分析

溯源分析阶段分别采用正定矩阵因子分解模型（PMF）和金属同位素方法进行溯源分析，两种方法互相验证，综合确定污染来源及其贡献比例。

8.1 PMF 模型的溯源分析

8.1.1 模型原理

正定矩阵因子分解法（PMF）基于受体模型原理，假设耕地土壤中重金属的含量由多种来源混合而成。模型将受体样品中重金属浓度矩阵（X）分解为因子贡献矩阵（G）、因子源谱矩阵（F）和残差矩阵（E），通过最小化目标函数 Q 值进行迭代求解。模型限定 G 和 F 矩阵中的值均为非负值，并通过标识组分将各因子识别为具体的污染源类。

8.1.2 数据准备

- a) 数据质量要求：用于 PMF 分析的监测数据应采用国家、行业或地方方法标准获得。对于采样、运输、存储、分析失误所造成的离群数据应予以剔除。低于方法检出限的数据以"未检出"报出，并注明检出限。
- b) 数据格式要求：PMF 模型需输入两个数据文件-重金属元素质量浓度数据文件和浓度不确定度数据文件。数据格式符合所用模型软件的要求。
- c) 不确定度计算：当重金属浓度（Conc） \leq 方法检出限（MDL）时，不确定度 $\text{Unc} = 5/6 \times \text{MDL}$ ；当 $\text{Conc} > \text{MDL}$ 时， $\text{Unc} = \sqrt{[(\text{误差系数} \times \text{Conc})^2 + \text{MDL}^2]}$ 。误差系数一般取 0.1~0.6，浓度波动大或接近检出限时取较大值。
- d) 样品数量要求：参与 PMF 计算的土壤样品数量不少于 16 个，以满足统计学要求。

8.1.3 模型计算流程

PMF 模型计算流程包括以下步骤：

- a) 数据检验：通过浓度散点图和时间序列图等检验不同组分之间关系，剔除异常数据点；
- b) 数据计算权重选择：关键标识组分的计算权重设置为"强"（Strong），其他组分通常也设置为"

强", 测量不确定度较高的组分可设置为"弱" (Weak);

c) 因子个数确定: 基于潜在污染源清单、污染源普查数据、工业布局等信息初步确定因子个数范围, 通过设置不同因子个数进行尝试性计算, 综合 Q 值变化、残差分布和计算结果一致性确定最优因子个数;

d) 基础计算与结果判断: 执行 PMF 模型基础计算, 通过 Q 计算值 (Q_{True}) 与 Q 理论值 (Q_{Theo}) 的接近程度 (85%~115%)、观测值与预测值相关性、残差分析 (残差应在±3 以内) 和误差评估 (推荐 Bootstrap 方法) 判断计算结果的合理性;

e) 识别因子为污染源类: 通过分析因子源谱中标识组分的特征, 将各因子识别为具体的污染源类。标识组分不突出时, 可采用 F 矩阵峰值 (F_{peak}) 旋转计算使标识组分特征更加突出;

f) 源贡献计算: 通过模型直接输出或 G 矩阵多元线性回归分析, 计算各污染源对土壤重金属浓度的贡献比例。

8.1.4 结果合理性判断

PMF 溯源结果需同时满足模型计算要求和实际情况:

a) 模型计算合理性: 模型模拟计算出的各组分浓度与实测值接近, 主要标识组分残差在±3 以内, Q 计算值与 Q 理论值接近 (85%~115%), Bootstrap 误差评估中因子匹配率不低于 80%;

b) 实际情况合理性: 经识别的源谱特征与信息调查掌握的污染源特征一致, 源贡献排序与现场掌握的污染源影响强度一致, 与其他独立监测结果相互印证。

8.2 金属同位素的溯源分析

8.2.1 同位素特征信息获取

根据同位素分析检测结果, 获取受污染区环境样品、对照区环境样品和潜在污染源样品的同位素特征信息 (同位素丰度比值、 δ 值或 Δ 值)。对于无法采集潜在污染源样品的情况, 可通过文献资料获取同类端元的同位素特征数据, 注明数据来源并评估其适用性。

8.2.2 数据制图

根据端元数量和同位素类型, 选择以下方式绘制二维散点图:

- 两个端元、 δ 值差异明显时: 以元素浓度或浓度倒数为横坐标, 同位素 δ 值为纵坐标;
- 三个及以上端元时: 以两种元素浓度比值为横坐标, 同位素 δ 值为纵坐标;
- 铅同位素: 以 $^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$ 为横坐标、 $^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 为纵坐标, 或采用其他同位素丰度比值组合;
- 汞同位素: 以质量分馏 δ 值 (如 $\delta^{202}\text{Hg}$) 为横坐标、非质量分馏 Δ 值 (如 $\Delta^{199}\text{Hg}$) 为纵坐标;
- 多元同位素体系: 以不同元素的同位素 δ 值分别为横、纵坐标。

8.2.3 污染源同位素特征对比分析

在二维散点图上标示受损区环境样品和不同端元数据点的分布范围, 根据数据点的分布情况和接近程度, 判定受损区环境样品中污染物与潜在污染源的同源性:

a) 受损区环境样品数据点在两端元间呈线性 (横坐标为浓度倒数) 或双曲线 (横坐标为元素浓度) 趋势时, 表明这两个端元均为污染来源;

b) 受损区环境样品数据点呈离散分布, 且位于以三个 (或多个) 端元为顶点的三角形 (或多边

形)区域内时,表明这些端元均为污染来源;

c) 铅同位素体系中,受损区环境样品在多个端元间呈现线性趋势时,表明这些端元均为污染来源;

d) 不存在上述规律时,表明污染不主要来源于这些端元,需重新审视潜在污染源清单。

8.3 污染源贡献率计算

8.3.1 PMF 模型贡献率计算

PMF 模型在计算中直接输入重金属元素质量浓度数据,可直接计算得到各污染源对土壤重金属的来源贡献结果($\mu\text{g/kg}$ 或 mg/kg)和贡献分担率(%)。还可将 G 矩阵(源贡献矩阵)与重金属元素质量浓度进行多元线性拟合,进一步细化各污染源的贡献比例。

8.3.2 金属同位素贡献率计算

基于同位素质量平衡原理,建立 n 个端元($n \geq 2$)的贡献率统一计算模型:

设受污染区样品有 n 个潜在污染来源(端元),各端元对该样品的贡献率为 f_i ($i = 1, 2, \dots, n$),满足以下基本方程:

$$\sum_{i=1}^n f_i = 1 \quad (\text{质量守恒约束, } f_i \geq 0)$$

$$\sum_{i=1}^n f_i \cdot R_i = R_s \quad (\text{同位素组成守恒})$$

式中: R_s 为受污染区样品的同位素特征值(δ 值或同位素丰度比值), R_i 为第 i 个端元的同位素特征值。当利用 m 种同位素($m \geq 1$)进行联合约束时,第二个方程为 m 维联立方程。

模型求解方法取决于端元数 n 与同位素约束条件数 m 的关系:

a) $n \leq m + 1$ 时,方程组有唯一解或最小二乘解,可直接求解(如 $n=2$ 、 $m=1$ 的经典二元混合模型闭合解: $f_1 = (R_2 - R_s) / (R_2 - R_1)$, $f_2 = 1 - f_1$);

b) $n > m + 1$ 时,方程组为欠定系统,采用基于马尔可夫链蒙特卡洛(MCMC)采样的贝叶斯混合模型(如 MixSIAR、SIAR 等)求解各端元贡献率的概率分布,取概率密度最大值为贡献率,以分位数区间表示不确定度。

铅同位素计算时, R_s 、 R_i 以同位素丰度比值($^{208}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 、 $^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$ 等)代入。汞同位素计算时,可引入非质量分馏 Δ 值($\Delta^{199}\text{Hg}$ 、 $\Delta^{200}\text{Hg}$ 等)作为额外的同位素约束维度,提高多源解析能力。

对各端元不同平行样品数据取平均值后代入模型,以各采样点位贡献率的均值作为该端元的最终贡献度。

8.4 综合判定

综合判定是在 PMF 模型和金属同位素两种方法溯源结果的基础上,结合信息调查和专家经验进行的最终溯源结论确认。综合判定包括溯源结果比对和专家评定两个环节。

8.4.1 溯源结果比对

将 PMF 模型溯源结果与金属同位素溯源结果进行系统比对,比对内容包括:

- 污染源类型比对:两种方法识别出的污染源类型是否一致;
- 污染源数量比对:两种方法识别出的主要污染源数量是否一致;
- 贡献率比对:两种方法计算的各污染源贡献比例偏差是否在可接受范围内。

当 PMF 方法识别的污染源类型与金属同位素方法识别的端元类型基本一致，且各主要污染源贡献率偏差在 $\pm 30\%$ 以内时，判定两种方法溯源结果一致，以两种方法贡献率的均值作为定量溯源结论。当结果不一致时，按照数据质量复核、信息调查复核、补充监测、重新分析的顺序进行处理（参见第 5 章工作流程），直至结果趋于一致。

当仅采用 PMF 单一方法溯源时，通过 Bootstrap 误差评估（因子匹配率不低于 80%）、Q 值检验（Q 计算值/Q 理论值在 85%~115%范围内）和源谱特征现场核查等方式加强结果验证。

8.4.2 专家评定

在定量溯源结果的基础上，组织相关领域专家（环境地球化学、土壤学、环境监测、水文地质、行业工艺等）对溯源过程和结论进行综合评定。专家评定重点审查以下方面：

a) 信息调查结论的可靠性：污染成因类型研判依据是否充分，潜在污染源清单是否完整，有无遗漏重要污染源；

b) 数据质量的可信度：采样布点方案是否合理，样品数量和代表性是否满足统计学要求，分析测试质量保证与质量控制数据是否合格；

c) 模型结果的合理性：PMF 因子识别为具体污染源类的地球化学依据是否充分，同位素端元特征值是否具有代表性和区分度；

d) 结论与实际的一致性：溯源结论是否与信息调查掌握的污染源分布、排污历史和污染物迁移路径等事实相符，是否存在与客观证据明显矛盾之处；

e) 不确定度评估：各污染源贡献率的不确定度是否在可接受范围内，溯源结论的置信度是否满足管理决策需求。

专家组根据审查结果，给出“同意溯源结论”、“建议补充完善后确认”或“建议重新溯源”的评定意见。对于“建议补充完善”的情形，明确补充内容和工作要求。

8.4.3 综合判定结论

综合判定结论应综合溯源结果比对和专家评定意见形成：

a) 两种方法结果一致且专家评定同意时，确认为最终溯源结论；

b) 两种方法结果一致但专家评定提出质疑时，针对质疑问题补充论证或补充监测，经专家复评同意后确认；

c) 两种方法结果不一致时，按 8.4.1 处理直至结果一致，再经专家评定确认；

d) 仅采用 PMF 单一方法时，须经专家评定同意后方可确认为最终溯源结论。

最终溯源结论明确列出：主要污染源类型及各污染源贡献比例（含不确定度范围）、溯源结论的置信度等级、主要不确定性来源及尚需进一步查证的问题。

9 报告编制

耕地土壤重金属污染溯源工作完成后，编制《耕地土壤重金属污染溯源分析报告》。报告内容涵盖信息调查、布点采样与测试分析、溯源分析全过程，具体要求参见附录 C。

附 录 A

(资料性附录)

信息调查推荐资料清单

信息调查阶段推荐收集的资料类型及具体内容见表 A.1。

表 A.1

| 序号 | 资料类别 | 具体内容 | 主要来源 |
|----|--------|---|-----------------|
| 1 | 自然地理 | 地形地貌图、气象数据（风向风速、降雨量）、水文水系分布图、土壤类型图 | 自然资源部门、气象部门 |
| 2 | 土地利用 | 土地利用现状图、耕地分布图、历史土地利用变化资料、种植结构和灌溉方式 | 农业农村部门、自然资源部门 |
| 3 | 社会经济 | 行政区划图、人口分布、主要产业类型和布局 | 统计部门 |
| 4 | 工矿企业 | 企业清单（含在产和关停）、行业类型、生产规模、排污许可证信息、废气废水排放数据、运行时段 | 生态环境部门、企业环境信息公开 |
| 5 | 固废和尾矿 | 尾矿库分布图、废渣堆存点清单、固废类别和数量、“三防”措施情况 | 生态环境部门、应急管理部门 |
| 6 | 环境监测 | 区域土壤环境质量监测数据（长时序）、农产品重金属含量监测数据、大气沉降监测数据、地表水和地下水水质监测数据 | 生态环境部门、农业农村部门 |
| 7 | 农业投入品 | 化肥种类和施用量、有机肥来源和施用量、农药使用记录、农用污泥施用记录、灌溉水源和水质 | 农业农村部门、农户调查 |
| 8 | 历史污染事件 | 环境污染事故记录、群众投诉举报信息、环保督察反馈问题 | 生态环境部门 |
| 9 | 遥感影像 | 历史遥感影像数据（不同年份对比）、无人机航拍影像 | 自然资源部门、生态环境部门 |

附 录 B

(资料性附录)

PMF 模型计算数据记录表

PMF 模型计算过程中记录的主要参数和结果见表 B.1。

表 B.1

| 记录项目 | 记录内容 |
|------------------------|------|
| 采样地点 | |
| 采样日期和时间 | |
| 土壤类型 | |
| 样品数量 | |
| 重金属元素种类和数量 | |
| 数据剔除情况 | |
| 不确定度计算方法 | |
| 重金属元素计算权重 | |
| 基础计算：因子个数 | |
| 基础计算：计算次数 | |
| 基础计算：Seed 值 | |
| 基础计算：Q 理论值/Q 计算值/Q 修正值 | |
| 基础计算：是否收敛 | |
| 基础计算：误差评估方法及结果 | |
| 旋转计算：Fpeak 参数 | |
| 旋转计算：旋转后误差评估结果 | |
| 源类识别：因子 1 | |
| 源类识别：因子 2 | |
| 源类识别：因子 3 | |
| 源类识别：因子 N... | |
| 各污染源贡献率 (%) | |
| Bootstrap 匹配率 | |
| 备注 | |

附 录 C

（资料性附录）

溯源分析报告编制要求

C.1 工作背景

阐述溯源工作任务的来源、目标、区域范围及受污染耕地的基本信息，包括地理位置、面积、主要种植作物、超标重金属种类和超标程度等。描述调查区域周围的自然环境特征、环境质量状况和潜在污染源基本情况。

C.2 工作概况

C.2.1 工作目标：明确本次溯源工作的主要目标。

C.2.2 工作依据：列出溯源工作所依据的法律法规、标准规范和技术文件。

C.2.3 工作程序：给出本次溯源工作的技术路线图，明确各阶段的工作流程和衔接关系。

C.3 信息调查结果

详细说明信息调查的方法、过程和主要结论，包括：收集的资料类型和数量、现场查勘的路线和点位、访谈对象和关键信息、污染成因类型的判定依据和结论、潜在污染源核实情况及清单。

C.4 布点采样与测试分析

C.4.1 布点方案：说明采样范围确定依据、点位布设原则和方案、点位数量和各类型分布。

C.4.2 样品采集与测试：描述样品采集、保存、运输和实验室测试的全过程，列出样品信息表。

C.4.3 质量控制：阐述全流程质量保证与质量控制措施及结果（空白样、平行样、标准物质结果）。

C.4.4 测试结果：以表格形式给出所有样品的重金属浓度测定结果和同位素组成测定结果。

C.5 PMF 溯源分析过程及结论

详细描述 PMF 模型数据准备、参数设置、数据检验和优化过程、模型运行结果。以图表形式展示因子源谱（F 矩阵）和因子贡献（G 矩阵）结果，说明各因子识别为具体污染源类的依据。给出各污染源的贡献率，并评估模型误差。

C.6 金属同位素溯源分析过程及结论

详细描述同位素特征信息提取结果、数据制图方法、污染源同位素特征对比分析过程。以二维散点图等形式展示受损区样品与不同端元的同位素组成对比。给出基于同位素数据的同源性判定结论和各污染源贡献度计算结果。

C.7 两种方法比对与综合判定

对比 PMF 方法和金属同位素方法的溯源结果，说明两种方法识别的污染源类型、数量和贡献率的一致性 or 差异性。按照本文件 8.4 节的综合判定规则，经专家评定后给出最终溯源结论。如两种方法结果不一致，说明处理过程和最终判定依据。

C.8 结论与建议

总结溯源结论，明确主要污染来源及贡献比例，提出耕地土壤重金属污染源头管控和治理修复的

对策建议。

C.9 附件

提供溯源相关的图表、数据和文件，包括但不限于：区域地形图、遥感影像图、水文地质图、采样点位分布图、现场照片、调查记录表和访谈记录、样品检测报告、模型输入输出数据文件、参考文献及其他支撑资料。

参 考 文 献

- [1] HJ 700-2014 水质 65种元素的测定 电感耦合等离子体质谱法
 - [2] HJ 1315-2023 土壤和沉积物 19种金属元素总量的测定 电感耦合等离子体质谱法
 - [3] HJ 493-2009 水质 样品的保存和管理技术规定
 - [4] HJ 494-2009 水质 采样技术指导
 - [5] HJ 657-2013 空气和废气 颗粒物中铅等金属元素的测定 电感耦合等离子体质谱仪
 - [6] HJ 777-2015 空气和废气 颗粒物中金属元素的测定 电感耦合等离子体发射光谱仪
 - [7] TSDEPI 044 土壤重金属来源解析正定矩阵因子分解法方法指南
 - [8] NY/T 3957-2021 农用地土壤重金属污染风险管控与修复 名词术语
 - [9] NY/T 4600-2025 耕地土壤污染治理规范
 - [10] NY/T 395-2025 农田土壤环境质量监测技术规范
 - [11] NY/T 4155-2022 农用地土壤环境损害鉴定评估技术规范
 - [12] TGDSES 15-2024 土壤和沉积物 铊稳定同位素比值的测定 多接收电感耦合等离子体质谱法
 - [13] TGDSES 14-2024 土壤和沉积物 铅稳定同位素比值的测定 多接收电感耦合等离子体质谱法
 - [14] GB/T 17141-1997 土壤质量 铅、镉的测定 石墨炉原子吸收分光光度法
 - [15] HJ 680-2013 土壤和沉积物 汞、砷、硒、铋、锑的测定 微波消解/原子荧光法
 - [16] HJ 923-2017 土壤和沉积物 总汞的测定 催化热解-冷原子吸收分光光度法
 - [17] HJ 491-2019 土壤和沉积物 铜、锌、铅、镍、铬的测定 火焰原子吸收分光光度法
 - [18] HJ 780-2015 土壤和沉积物 无机元素的测定 波长色散 X 射线荧光光谱法
 - [19] GB/T 17138-1997 土壤质量 铜、锌的测定 火焰原子吸收分光光度法
 - [20] HJ 803-2016 土壤和沉积物 12 种金属元素的测定 王水提取-电感耦合等离子体质谱法
 - [21] GB/T 17139-1997 土壤质量 镍的测定 火焰原子吸收分光光度法
 - [22] HJ 1353-2024 环境空气 颗粒物来源解析 正定矩阵因子分解模型计算技术指南
 - [23] DB41/T 1948-2020 农用地土壤污染状况调查技术规范
-