DOI:10.11766/trxb202205080237
张秀，谢恩泽，陈剑，彭雨璇，严国菁，赵永存. 参数优化方法对微生物模型预测土壤有机碳时空演变的影响[J]. 土壤学报，2024，61（1）：39–51.
ZHANG Xiu，XIE Enze，CHEN Jian，PENG Yuxuan，YAN Guojing，ZHAO Yongcun. Effects of Microbial Model Parameter Optimization on the Spatiotemporal Dynamics Modelling of Soil Organic Carbon[J]. Acta Pedologica Sinica，2024，61（1）：39–51.

参数优化方法对微生物模型预测土壤有机碳时空演变的影响*

张 秀[1, 2]，谢恩泽[1, 2]，陈 剑[1, 2]，彭雨璇[1, 2]，严国菁[1, 2]，赵永存[1, 2†]
（1. 土壤与农业可持续发展国家重点实验室（中国科学院南京土壤研究所），南京 210008；2. 中国科学院大学，北京 100049）

摘 要：准确把握土壤有机碳（SOC）的时空演变规律对于土壤资源的高效持续利用、发挥土壤生态系统服务功能，以及应对气候变化等均具有重要意义。以江苏省南部为研究区，以明确表达微生物分解作用的微生物模型 MIMICS 为对象，以模型参数敏感性分析为切入点，分析了不同参数优化方法对 MIMICS 模型预测苏南农田表层（0～20 cm）SOC 时空演变动态的影响。结果表明，批处理和点对点两种参数优化方法下，MIMICS 模型均能较好地模拟 1980—2015 年苏南农田表层 SOC 密度先增加后减少的总体趋势；采用考虑模型参数空间异质性的点对点参数优化方法时，MIMICS 模型预测精度最高，其预测误差（RMSE）较采用默认参数值时分别降低 22.2%（2000 年独立验证）和 14.7%（2015 年独立验证），但 2015 年 SOC 密度预测精度依然偏低（$R^2 = 0.13$，RMSE = 1.22 kg·m^{-2}）。上述结果表明进一步改进微生物模型的结构、提高模型输入数据的精度及分辨率，将是微生物模型建模区域尺度 SOC 时空动态所面临的重要挑战。

关键词：土壤有机碳；微生物模型；敏感性分析；参数优化
中图分类号：S159 **文献标志码：**A

Effects of Microbial Model Parameter Optimization on the Spatiotemporal Dynamics Modelling of Soil Organic Carbon

ZHANG Xiu[1, 2], XIE Enze[1, 2], CHEN Jian[1, 2], PENG Yuxuan[1, 2], YAN Guojing[1, 2], ZHAO Yongcun[1, 2†]
(1. *State Key Laboratory of Soil and Sustainable Agriculture*, *Institute of Soil Science*, *Chinese Academy of Sciences*, *Nanjing* 210008, *China*; 2. *University of Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100049, *China*)

Abstract: 【Objective】 Soil organic carbon (SOC) forms the basis of soil fertility, food production, and soil health, and plays a key role in climate change via mediating greenhouse gas emissions. Consequently, accurate characterization of SOC spatiotemporal dynamics is extremely important for the sustainable management of soil resources, ecosystem stability maintenance, and mitigation and adaptation to climate change. 【Method】 A total of 399, 413, and 407 cropland topsoil (0 ~ 20 cm) SOC data in 1980, 2000, and 2015 were collected from the southern Jiangsu Province of China, respectively, and the

* 国家自然科学基金项目（41971067）资助 Supported by the National Natural Science Foundation of China（No. 41971067）
† 通讯作者 Corresponding author，E-mail：yczhao@issas.ac.cn
作者简介：张 秀，女，安徽亳州人，博士研究生，主要从事土壤有机碳时空演变模拟的尺度效应研究。E-mail：zhangxiu@issas.ac.cn
收稿日期：2022–05–08；收到修改稿日期：2022–09–23；网络首发日期（www.cnki.net）：2023–01–04

microbial-explicit SOC model MIMICS (Microbial-Mineral Carbon Stabilization) was used to model the spatiotemporal dynamics of SOC. The Sobol global sensitivity analysis was applied to identify the sensitive parameters of the MIMICS model, and then, two-parameter optimization schemes, one batch (using all SOC observations in a batch mode to optimize the parameters) and site-by-site (using SOC observations at individual sites to optimize the parameters site by site), were used to optimize the sensitive parameters of the MIMICS model through Markov Chain Monte Carlo (MCMC) approach, respectively. The coefficient of determination(R^2), root mean squared error (RMSE), and mean absolute error (MAE) that were calculated from the independent validation of SOC in 2000 and 2015 were used to compare the performance of different parameter optimization schemes.【Result】Results show: (1) The net increment of SOC density between 1980 and 2000 was 0.89 kg·m^{-2}, while the net decrement was 0.44 kg·m^{-2} between 2000 and 2015, representing a net increment of 0.45 kg·m^{-2} over the period of 1980–2015; (2) The MIMICS model with parameters optimized by either One batch or site-by-site method can represent the overall trends in topsoil SOC dynamics during the period of 1980–2015, but the model with parameters optimized by the site-by-site method presents more local details on the variability of the SOC change rate; (3) Compared with the default parameter values and the One-batch optimized parameter values, the MIMICS model with site-by-site optimized parameter values had the best performance in modeling the spatiotemporal dynamics of SOC in the study area, with the RMSE decreasing by 22.2% (the independent validation in 2000) and 14.7% (the independent validation in 2015) in comparison with the MIMICS model with default parameter values. Yet, its prediction accuracy in 2015 was still relatively low (R^2 = 0.13, RMSE = 1.22 kg·m^{-2}). 【Conclusion】The optimization of sensitive parameters can improve the space-time SOC prediction accuracy of the MIMICS model, and the representation of local details on the spatiotemporal patterns of SOC dynamics. Although the MIMICS model with the spatially heterogeneous parameter values optimized by the site-by-site method had the best performance, its prediction accuracy in 2015 was still relatively low, which indicated that the MIMICS model still has limitations in representing the responses of SOC to anthropogenic activities such as changes in land use and agricultural management practices. Thus, further improvement of the MIMICS model structure and enhancing the spatiotemporal resolution of model input data are still significant challenges for regional scale modeling of SOC spatiotemporal dynamics through microbial-explicit SOC models.

Key words: Soil organic carbon; Microbial model; Sensitivity analysis; Optimized parameters

土壤有机碳（Soil organic carbon，SOC）作为土壤肥力形成的基础，不但影响土壤质量和粮食产量，而且在全球碳循环中扮演重要角色[1-3]。因此，准确把握 SOC 时空演变规律对于土壤资源高效可持续利用，以及应对气候变化和碳中和决策等均具有重要意义。

过程模型是 SOC 时空演变建模的常用方法。经典 SOC 过程模型（例如 RothC、Century）已广泛应用于区域及国家尺度 SOC 时空演变建模，同时，经典 SOC 过程模型结构也被嵌入陆面过程模型（例如 Community Land Model，CLM；Joint UK Land Environment Simulator，JULES），以实现全球尺度碳循环预测建模[4]。SOC 过程模型大多在田块等较小的尺度上建立[5-6]，其内部参数的默认值则是基于模型开发环境条件下的长期定位试验数据来确定[7]。然而，由于气候、土壤、管理措施等的空间异质性，过程模型内部参数的默认值并非总是最优的。某些环境条件下，直接采用过程模型参数的默认值来建模 SOC 动态可能导致模拟结果产生极大的不确定性[8-9]，因此，在基于过程模型的 SOC 建模中，对过程模型内部参数进行优化校正已经成为降低模型预测不确定性、提升预测精度的重要手段。例如，Gurung 等[10]基于欧洲及北美的 19 个长期定位试验获取的 491 个 SOC 观测数据，采用贝叶斯校正方法对 DayCent 模型（Century 模型的日步长版本）中影响 SOC 过程的 17 个敏感参数进行优化，结果表明，SOC 预测结果的不确定性由参数优化前的 211%降低至参数优化后的 33%。Hararuk 等[11]采用马尔科夫链蒙特卡洛（Markov Chain Monte Carlo，MCMC）方法对 CLM 模型内部影响 SOC 过程的 20 个参数进行优化研究发现，参数优化后 CLM 模型预测的全球 SOC 能够解释观测值变异性的 41%，较采用模型默认参数值预测精度提高了 52%。Xu 等[12]基于 CLM-CASA（Community Land Model with

Carnegie-Ames-Stanford Approach biogeochemistry sub-model，CLM-CASA）模型预测全球 SOC 的精度分析则表明，默认参数值下 CLM-CASA 模型预测结果仅能解释 SOC 观测值变异性的 33%，而采用 SBO（Surrogate-based Optimization，SBO）方法优化模型中影响 SOC 过程的 20 个内部参数后，模型解释的 SOC 变异性则提升至 41%。

微生物是土壤碳循环的重要驱动者。一方面，微生物通过分解 SOC 获得自身生长所需要的养分和能量[13]；另一方面，微生物死亡后，其残留物是 SOC 的重要组成部分[14]。经典 SOC 过程模型考虑了微生物在 SOC 周转过程中的作用，例如，RothC 和 Century 模型分别采用微生物生物量库（Microbial Biomass，BIO）和活性 SOC 库（包括活的微生物和微生物产物）表征微生物及其残体对 SOC 库的贡献。但在经典 SOC 过程模型（例如 RothC、Century）中，微生物作为 SOC 分解者的作用仅被隐含在不同 SOC 亚库的分解速率常数中，未明确表达。而近些年新出现并应用于 SOC 建模的微生物模型，例如 MIMICS（Microbial-Mineral Carbon Stabilization model，MIMICS）、MEND（Microbial ENzyme-mediated Decomposition，MEND）等，则直接将土壤碳周转和微生物生物量及生理机能耦合，从而明确反映了微生物在 SOC 分解和稳定中的作用[15]。然而，微生物模型内部参数的默认值主要基于其开发环境条件下的短期田间试验以及实验室培养试验确定[9]，且大多为常值参数。但常值参数可能难以表征区域、国家、全球等大尺度上土壤碳循环动态显著的空间异质性[16-17]，从而对 SOC 时空演变预测精度产生深刻影响。针对这一问题，本研究以优化过程模型内部敏感参数有助于提高 SOC 预测精度为科学假设前提，选择有三期丰富实测数据的江苏省南部（苏南）为研究区，以明确表达微生物分解作用的微生物模型 MIMICS 为对象，以不同参数优化方法优化校正模型内部敏感参数为切入点，通过 MCMC 方法优化对 MIMICS 输出影响较大的模型内部参数，探究参数优化方法对 MIMICS 模型预测苏南农田表层（0～20 cm）SOC 时空演变的影响，为提高微生物模型建模区域尺度 SOC 动态的可靠性提供理论和方法依据。

1　材料与方法

1.1　研究区概况

研究区为江苏省南部地区（30°44′—32°16′N，118°29′—121°19′E），简称苏南地区（图 1）。该区地处长三角核心区，北依苏中，东临上海，南靠浙江，西接安徽，是我国经济社会发达、现代化程度较高

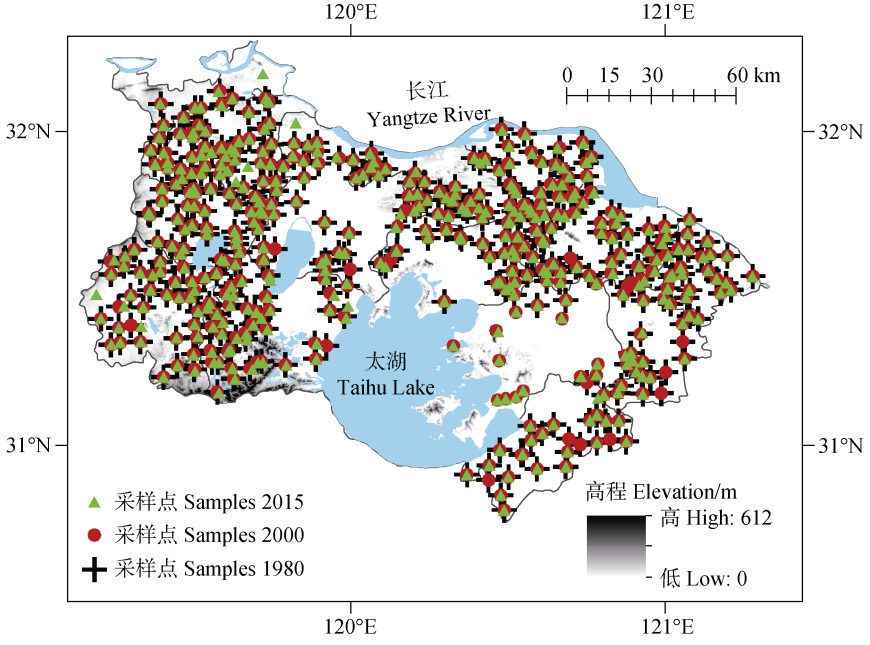


图 1　研究区地形及土壤采样点分布

Fig. 1　The topography and soil sampling sites in the study area

的地区之一。该区属北亚热带季风气候，年平均气温 16 ℃，年均降水量 1 000 mm，气候温暖，雨量充足。地势西高东低，太湖平原区地势平坦，水系发达。土壤类型以水稻土为主，占研究区土壤总面积的 83.9%；其次是黄棕壤和潮土，面积占比分别为 8.1%和 5.9%；其他土壤类型（如石灰（岩）土、沼泽土、红壤、紫色土等）则分布面积较小，不足 3.0%。

1.2 MIMICS 模型

MIMICS 模型由美国国家大气研究中心 Wieder 等[18]开发，在 SOC 时空演变对气候变化响应等研究中得到了广泛应用[19-20]。该模型通过土壤碳周转和微生物生物量及生理机能的耦合，明确反映了 SOC 形成过程中，凋落物质量、微生物生理机能以及微生物副产物的物理化学保护机制三者之间的关系。MIMICS 模型基于多分室建模思想，将 SOC 库划分为 3 个亚库，包括受物理保护的 SOC 亚库（SOC_p）、可利用的 SOC 亚库（SOC_a）和受化学保护的 SOC 亚库（SOC_c）。该模型根据凋落物的质量，即木质素含量与氮含量比值（lignin/N）的线性函数（fmet，式（1）），将植被输入的碳分配到代谢性碳库（LIT_m）和结构性碳库（LIT_s）。根据生态学中的生物进化对策，MIMICS 模型将土壤微生物分为两种功能类型：基于富养生长策略的微生物（r-策略，MIC_r）和基于贫养生长策略的微生物（k-策略，MIC_k），其中，MIC_r 具有较高的增长率和周转率，倾向于消耗更多的 LIT_m，而 MIC_k 则具有相对较低的增长率和周转率，在消耗 LIT_s 和 SOC_c 时更具竞争力[19-21]。

$$fmet = 0.85 - 0.013 \times (\text{lignin}/N) \quad (1)$$

$$\frac{dCs}{dt} = Is - \text{MIC} \times \frac{V\text{max} \times Cs}{K\text{m} + Cs} \quad (2)$$

MIMICS 模型以小时为模拟时间步长，采用具有温度敏感性的 Michaelis-Menten 动力学方程计算土壤微生物对 LIT 和 SOC 的分解速率（式（2））。式（2）中 Cs（$mg \cdot cm^{-3}$，以 C 计）表示底物浓度（LIT 或 SOC），MIC 表示微生物生物量碳库（MICr 或 MICk），Vmax 和 Km 分别表示分解反应的最大速率（$mg \cdot (mg\ MIC)^{-1} \cdot h^{-1}$）和半饱和浓度（$mg \cdot cm^{-3}$，以 C 计）。关于 MIMICS 模型的详细介绍，可参考文献[15–17]。

1.3 数据来源与处理

（1）土壤样点数据。本研究收集了研究区 1980 年，2000 年和 2015 年三期农田表层（0～20 cm）土壤样点数据（图 1）。其中，1980 年土壤样点数量为 399 个，SOC 含量、pH、机械组成等土壤属性数据来自研究区第二次全国土壤普查期间各县级土壤普查办公室编制的县级土种志；2000 年土壤样点数量为 413 个，来自 973 项目“土壤质量演变规律与可持续利用”，主要根据第二次土壤普查的样点位置进行布设；2015 年土壤样点数量为 407 个，来自本研究的野外调查采样，主要根据 2000 年的土壤样点位置进行布设。2000 年、2015 年 SOC、pH 及机械组成的测定方法与 1980 年相同，即，SOC 含量采用重铬酸钾氧化-外加热法测定，pH 采用电位法（土：水=1：2.5）测定，土壤机械组成采用吸管法测定[22]。土壤样点的 SOC 密度（$kg \cdot m^{-2}$）采用以下公式计算：

$$\text{SOC密度} = \text{OC} \times \text{BD} \times \text{Depth} \times (1-\delta) \times 100 \quad (3)$$

式中，OC 表示 SOC 含量（$g \cdot kg^{-1}$），δ 表示大于 2 mm 砾石含量（体积百分比含量）；Depth 表示土层厚度（cm），本研究中为 20 cm；BD 表示土壤容重（$g \cdot cm^{-3}$），采用 Song 等[23]建立的农田土壤容重土壤转换函数（pedotransfer function，PTF）进行估算。

（2）MIMICS 模型输入数据。本研究以 500 m × 500 m 栅格为 MIMICS 模型的基本模拟单元。MIMICS 模型输入数据主要包括土壤温度（Soil temperature，ST）、黏粒含量和土壤碳输入。其中，土壤温度数据来源于欧洲中期天气预报中心（European Centre For Medium-Range Weather Forecasts，ECMWF，https://apps.ecmwf.int/datasets/）[24]，空间分辨率为 0.125°；黏粒含量来自本研究土壤样点黏粒含量数据；土壤碳输入基于遥感反演 NPP（Net Primary Production）进行估算，来源于 MUSES（Multi-resolution Satellite remote Sensing）植被生产力数据[25]，空间分辨率为 5 km。

（3）SOC 密度基线及敏感参数空间预测辅助变量。1980 年 SOC 密度基线空间分布及 MIMICS 模型敏感参数空间分布预测的辅助变量主要包括：气候：年平均气温（Mean annual temperature，MAT）和年平均降水量（Mean annual precipitation，MAP），来源于 CHELSA（Climatologies at high resolution for

the earth's land surface areas，CHELSA，https://chelsa-climate.org/）[26]，空间分辨率为 1 km；土壤温度和土壤湿度（Soil moisture，SM）数据来源于 ECMWF，空间分辨率为 0.125°。

地形：高程（Elevation）、坡度（Slope）、坡向（Aspect）、地形位置指数（Topographic Position Index，TPI）、地形崎岖指数（Terrain Ruggedness Index，TRI）和地表粗糙度（Roughness）等地形因子，基于江苏省 1∶10 000 地形图生成的 30 m 分辨率 DEM 计算。

土壤类型及属性：土壤类型来源于江苏省 1∶20 万土壤图；土壤黏粒含量和 pH 来自本研究土壤样点数据。

植被和土地利用：归一化植被指数（Normalized Difference Vegetation Index，NDVI）和土地利用数据来源于中国科学院资源环境科学与数据中心（https://www.resdc.cn/），空间分辨率为 1 km，其中，NDVI 为 1998—2005 年的均值。

气候、地形及 NDVI 等连续型数据采用双线性内插重采样至 500 m× 500 m 栅格，土壤黏粒含量和 pH 分别采用块克里格方法插值到 500 m × 500 m 栅格。土壤类型及土地利用类型则根据面积优势原则分别聚合到 500 m × 500 m 栅格，其中，土壤类型和土地利用类型分别转换为 0-1 二值化变量进行哑变量编码，作为预测辅助变量。

1.4　敏感性分析方法

MIMICS 模型中，直接影响 SOC 分解过程的模型参数共 30 个。考虑到并非所有的参数值变动都会对研究区 SOC 模拟结果产生显著影响，本研究中采用 Sobol 全局敏感性分析方法对模型内部影响 SOC 过程的敏感参数进行识别。其中，MIMICS 模型参数的先验不确定性区间采用 Shi 等[27]的方法进行设置，即，将 U[a/3，3a]设置为参数的先验分布（其中，U 表示均匀分布；a 表示参数的默认值）。Sobol 敏感性分析中，基于模型参数先验分布 10 000 次随机抽样计算的总敏感性指数（Total sensitivity indices，TSI）作为 MIMICS 模型敏感参数识别的依据。

1.5　参数优化方法

基于研究区 1980 年样点的 SOC 密度观测数据，本研究采用 MCMC 方法对 MIMICS 模型敏感参数的后验分布进行推断。根据贝叶斯理论，给定 SOC 密度观测数据集 D 的条件下，MIMICS 模型敏感参数集 θ 后验概率密度 p（$\theta|D$）的贝叶斯推断过程可表示为：

$$p(\theta|D)=\frac{p(D|\theta)p(\theta)}{p(D)}=\frac{p(D|\theta)p(\theta)}{\int p(\theta)p(D|\theta)\mathrm{d}\theta}\propto p(D|\theta)p(\theta) \quad (4)$$

式中，$p(\theta)$ 为模型参数的先验概率密度，$p(D|\theta)$ 为给定参数 θ 条件下模型预测结果数据的似然性。式（4）表示模型参数的后验概率密度依比例收敛于模型参数的先验概率密度与数据似然性概率密度的乘积。

本研究采用自适应 M-H（Metropolis-Hastings）算法实现 MCMC。其中，模型预测的失配函数（misfit function）$J(\theta)$，以及建议参数值 θ_{new} 被接受的概率 $p(\theta_{\mathrm{new}})$ 分别采用以下公式计算：

$$J(\theta)=\sum_{i=1}^{n}\frac{(D_i-M_i)^2}{2\delta_i^2} \quad (5)$$

$$p(\theta_{\mathrm{new}})=\min\left\{1,\exp\left[-\left(J(\theta_{\mathrm{new}})-J(\theta_{\mathrm{old}})\right)\right]\right\} \quad (6)$$

式中，D_i 为采样点位置 i 的 SOC 密度观测值，M_i 为采样点位置 i 的 SOC 模型预测值，δ_i 为样点位置 i 的 SOC 密度观测值的标准差；$J(\theta_{\mathrm{new}})$ 表示以建议参数值 θ_{new} 为 MIMICS 模型输入参数值时，SOC 密度预测值与观测值的失配程度，$J(\theta_{\mathrm{old}})$ 则表示以前一次接受的参数值 θ_{old} 为模型输入参数值时，SOC 密度预测值与观测值的失配程度。M-H 算法迭代中，当 $p(\theta_{\mathrm{new}})\geqslant$rand 时（其中 rand 为一个 0 到 1 之间的均匀分布随机数），则接受建议的新参数值 θ_{new}，否则拒绝接受。

本研究通过 2 个步骤实现模型参数后验分布的抽样[28]。

第 1 步：基于 MCMC 估算模型参数集的初始协方差矩阵 C_0。此步骤中，假设模型参数 θ 的先验分布 $p(\theta)$ 服从最小值为 $\theta_{\min}$、最大值为 $\theta_{\max}$ 的均匀分布 $U(\theta_{\min},\theta_{\max})$，采用以下公式产生建议的参数值 θ_{new}：

$$\theta_{\mathrm{new}}=\theta_{\mathrm{old}}+r\frac{\theta_{\max}-\theta_{\min}}{S} \quad (7)$$

式中，θ_{old} 表示前一次迭代中接受的参数值；r 为[–0.5，0.5]范围内的均匀分布随机数；S 为步长控制系数，本研究中取值为 5，即，新参数值的建议过程中，参数值变化步长为相应参数极差的 1/10。迭代运行 m 次，基于第 m/2 到第 m 次迭代中被接受的建议参数值来估算模型参数集 θ 的初始协方差矩阵 C_0。

第 2 步：基于 MCMC 推断模型参数后验分布。此步骤中，假设模型参数服从多元正态分布。这里新产生的建议参数值依赖于 k-1 次接受的参数值 θ^{k-1}作为多元正态分布的均值和协方差 C_t=C_t（ θ_0，…， θ_{t-1} ）产生[11, 17]：

$$C_t = \begin{cases} C_0 \\ sdCov(\theta_0, \cdots, \theta_{t-1}) \end{cases} \quad (8)$$

式中的协方差矩阵 C_0是基于第 1 步中所接受的参数集估算产生，sd 为常数，其值等于 2.38sqrt（d），d 为待优化参数总个数，本研究取值为 9。本研究采用 Gelman-Rubin（G-R）统计量来检验马尔科夫链是否收敛[17, 27]。如果马尔科夫链收敛，链间方差与单条链方差接近，则 G-R 统计量的值接近于 1。

本研究中 1980 年 SOC 密度观测数据用于 MIMICS 模型的参数优化，共设计了批处理（One Batch）和点对点（Site-by-Site）两种参数优化方案。批处理参数优化方案中，将 1980 年所有 SOC 密度观测值看作一个整体来共同约束参数值（即，不考虑模型参数的空间差异性），优化过程中采用 3 条马尔科夫链并行，第 1 步每条链迭代 10 000 次，第 2 步每条链迭代 100 000 次。第 2 步生成的马尔科夫链丢弃前 50%样本后再计算每个参数的 G-R 统计量，以及每个参数的后验分布。以 3 条链后验分布中值的平均值作为模型参数的最优值，驱动 MIMICS 模型的模拟。该方案是针对整个研究区优化出一套最优参数集。

点对点参数优化方案中，对于 1980 年的每个采样点位置，分别采用其 SOC 密度观测值对样点位置的参数值进行约束（即，不同空间位置的模型参数值不同）。该方案中，对于 1980 年的每个采样点位置，分别采用 3 条马尔科夫链并行进行参数优化，其中，第 1 步每条链迭代 10 000 次，第 2 步每条链迭代 50 000 次。将第 2 步生成的马尔科夫链丢弃前 50%样本后再计算每个采样点位置上每个参数的 G-R 统计量，以及每个参数的后验分布。以每个样点位置 MIMICS 模型参数的最优值（3 条链后验分布中值的平均值）为目标变量，以 MAP、MAT、ST、SM、NDVI、NPP、土壤黏粒、pH、地形因子、土壤类型和土地利用等 22 个协同变量为预测变量，采用随机森林（Random Forest，RF）预测模型敏感参数最优值的空间分布，用于驱动 MIMICS 模型的模拟。

1.6 模型精度评价

本研究基于 2000 年和 2015 年两期 SOC 密度观测数据，对 MIMICS 模型模拟精度进行独立验证。采用决定系数（R^2）、均方根误差（Root Mean Square Error，RMSE）和平均绝对误差（Mean Absolute Error，MAE）3 个指标进行精度评价。

本研究中，MIMICS 模型和 MCMC 算法采用 Fortran 语言编程实现，通过 R 语言调用 MIMICS 模型和 MCMC 算法，实现 SOC 时空动态模拟和参数优化。模型参数敏感性分析采用 R 语言中的 sensitivity 包[10]实现，敏感参数最优值空间分布的 RF 预测采用 R 语言的 caret 包实现[29]。

2 结 果

2.1 SOC 密度的描述性统计特征

SOC 密度的描述性统计分析结果表明（表 1），1980 年、2000 年和 2015 年苏南农田表层 SOC 密度（以下分别用 SOC_{1980}、SOC_{2000} 和 SOC_{2015} 表示）中值分别为 3.36 kg·m^{-2}、4.25 kg·m^{-2} 和 3.81 kg·m^{-2}。SOC 密度变化表现为先增加后降低的趋势，其中，1980—2000 年 SOC 密度净增幅为 0.89 kg·m^{-2}，而 2000—2015 年净降幅为 0.44 kg·m^{-2}。1980—2015 年的 35 年间，研究区 SOC 密度净增幅为 0.45 kg·m^{-2}，表层土壤年均固碳速率为 129 kg·hm^{-2}，低于华东地区农田表层土壤 1980—2011 年间的年均固碳速率 268 kg·hm^{-2}[30]。SOC_{1980}、C_{2000} 和 SOC_{2015} 的偏度系数分别为 0.55、0.19 和–0.09，偏度系数均<|1|，表明极端值对 3 个年份 SOC 密度变异性的影响均不大。然而，SOC_{2015} 的变异系数（34%）和极差（7.15 kg·m^{-2}）均显著高于 SOC_{1980}（26%和 4.82 kg·m^{-2}）和 SOC_{2000}（23%和 6.70 kg·m^{-2}），表明相较前两个采样年份而言，SOC_{2015} 的变异性更强，因此，其可能受人为活动的影响更为强烈。

表 1　表层（0～20 cm）土壤有机碳密度的描述性统计

Table 1　Descriptive statistics of topsoil（0～20 cm）SOC density（kg·m^{-2}）in different sampling date

年份 Year	最小值 Min	最大值 Max	中值 Median	平均值 Mean	标准差 SD	偏度 Skewness	峰度 Kurtosis	变异系数 CV/%
1980	1.60	6.42	3.36	3.42	0.88	0.55	3.33	26
2000	1.22	7.92	4.25	4.30	0.97	0.19	3.63	23
2015	0.51	7.66	3.81	3.73	1.27	–0.09	2.85	34

2.2　全局敏感性分析及敏感参数的后验分布特征

敏感性分析的目的在于量化模型参数变动对模型输出结果变动的影响程度，从而从众多的模型参数中识别出对模拟结果影响较大的敏感参数。过程模型敏感参数的识别不但有利于区域模拟中模型参数化过程的简化，而且可为模型参数优化提供更为明晰的优化对象。从基于 Sobol 方法的 MIMICS 模型参数全局敏感性分析结果来看（图 2），最敏感的参数为 Vint，其 TSI 为 0.85，随后依次分别为 kint（TSI = 0.76）、Vslop（TSI = 0.37）、ak（TSI = 0.31）、aV（TSI = 0.16）和 CUE_m_r（TSI = 0.06）等。参数 fi_met 的敏感性最弱，TSI 仅为 0.01，表明在本研究区的气候、土壤和 C 输入条件下，fi_met 的变动对 MIMICS 模拟的 SOC 密度结果影响极小。此外，fi_met、KO_k 及 KO_r 的敏感性亦较弱。本研究采用 0.035 作为敏感性指数的阈值（一般≤0.05[31]），以区分敏感和不敏感参数。共识别到 TSI > 0.035 的敏感性参数 9 个，包括与米氏方程中最大分解速率 Vmax 计算相关的 Vslop、Vint 和 aV 共 3 个，与半饱和浓度 Km 计算相关的 Kslope_a、Kint、ak、Kmod_a_r_coeff 共 4 个，以及 CUE_m_k 和 CUE_m_r。

采用 MCMC 算法对识别的 9 个敏感参数进行优化，从模型参数的马尔科夫链收敛性诊断结果来看（表 2），批处理优化和点对点优化方法中，基于 3 条并行马尔科夫链计算的 G-R 统计量介于 1.00～1.06 之间，表明两种参数优化方法的马尔科夫链均收敛于平稳分布[32]。从模型参数优化的后验分布中值统计结果来看，Vslope、Vint、av、ak、Kint、Kslope_a 和 Kmod_a_r_coeff 均大于模型参数默认值，而与 CUE 估算密切相关的 CUE_m_k 和 CUE_m_r 则显著

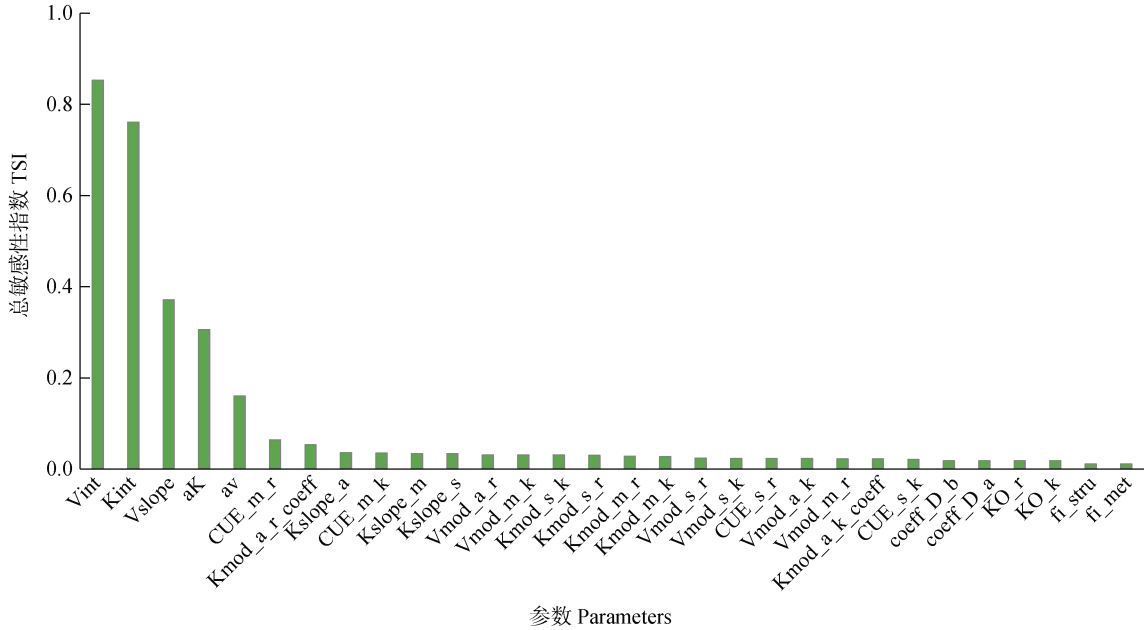


图 2　MIMICS 模型参数全局敏感性分析指标

Fig. 2　Ranked MIMICS parameters based on the total sensitivity indices

表 2 马尔科夫链的收敛性诊断及 MIMICS 模型参数的后验分布中值统计

Table 2 The Gelman-Rubin convergence diagnostic and the median of model parameter posterior distribution

参数 Parameters	G-R 统计量 Gelman-Rubin		后验中值 Median	
	批处理 One batch	点对点 Site-by-Site	批处理 One batch	点对点 Site-by-Site
Vslope	1.01	1.00～1.04	0.13	0.11
Vint	1.03	1.00～1.05	12.48	12.73
av	1.05	1.00～1.01	1.2×10^{-5}	1.4×10^{-5}
Kslope_a	1.06	1.00～1.04	0.02	0.03
Kint	1.01	1.00～1.02	5.95	4.01
ak	1.02	1.00～1.03	18.22	15.73
Kmod_a_r_coeff	1.00	1.00～1.02	0.53	0.42
CUE_m_k	1.02	1.00～1.02	0.03	0.27
CUE_m_r	1.00	1.00～1.02	0.48	0.42

低于模型的默认值（表 2）。批处理方法和点对点方法优化的 Vslope、Vint、ak、Kint 和 Kmod_a_r_coeff 的后验分布中值分别为 0.13 和 0.11、12.48 和 12.73、18.22 和 15.73、5.95 和 4.01、0.53 和 0.42（表 2），其中 Vint、aK 和 Kint 与 Shi 等[27]采用批处理方法在全球尺度上的优化结果相比（Vslope = 0.14、Vint = 8.09、ak = 16.97、Kint = 5.38、Kmod_a_r_coeff = 0.42）具有明显差异，表明 MIMICS 模型在区域尺度应用时，对模型参数进行优化校正是十分必要的。此外，批处理方法进行参数优化时，CUE_m_k 的后验分布中值为 0.03，而点对点方法优化的 CUE_m_k 后验分布中值为 0.27，为批处理方法优化结果的 9 倍，说明 CUE_m_k 的空间异质性对研究区表层 SOC 密度动态建模的影响极大。因此，如果整个研究区均采用批处理方法优化的单一参数值，则可能导致模拟结果误差增大。

以每个样点位置 MIMICS 模型参数的最优值为目标变量，以气候、地形、土壤类型和土地利用等 22 个协同变量为预测变量，采用 RF 预测模型敏感参数最优值的空间分布，用于驱动 MIMICS 模型的模拟。RF 模型十折交叉验证结果表明，不同敏感参数空间预测的 R^2 介于 0.77～0.89 之间，敏感参数空间分布预测的精度较高。

2.3 不同参数优化方法下 MIMICS 模型预测的 SOC 时空演变特征

不同参数优化方法下 MIMICS 模型建模苏南农田表层 SOC 密度动态变化结果表明（图 3），默认参数与优化参数预测的 SOC 密度动态差异较大，但批处理和点对点两种参数优化方法下，SOC 密度动态变化规律较为相似。具体而言，默认参数下，MIMICS 模型预测的苏南农田表层 SOC 密度从 1980 年的 3.39 $kg\cdot m^{-2}$ 增加到 2015 年的 4.33 $kg\cdot m^{-2}$，SOC 变化表现为逐年持续增加趋势。其中，2000 年 SOC 密度预测值为 4.10 $kg\cdot m^{-2}$，较 2000 年观测值（4.25 $kg\cdot m^{-2}$）低 3.6%，而 2015 年 SOC 密度的预测值为 4.33 $kg\cdot m^{-2}$，较 2015 年观测值（3.81 $kg\cdot m^{-2}$）高 13.7%。批处理优化敏感参数的条件下，SOC 密度先从 1980 年的 3.39 $kg\cdot m^{-2}$ 增加至 2002 年的 4.26 $kg\cdot m^{-2}$，再减少至 2015 年的 3.68 $kg\cdot m^{-2}$，总体呈先增加后降低的趋势。其中，2000 年和 2015 年 SOC 密度的预测值分别为 4.22 $kg\cdot m^{-2}$ 和 3.68 $kg\cdot m^{-2}$，较观测值（4.25 $kg\cdot m^{-2}$ 和 3.81 $kg\cdot m^{-2}$）分别低 0.7% 和 3.3%。点对点优化模型敏感参数的条件下，研究区 SOC 密度先从 1980 年的 3.39 $kg\cdot m^{-2}$ 增加至 1999 年的 4.18 $kg\cdot m^{-2}$，再减少至 2015 年的 3.87 $kg\cdot m^{-2}$，亦呈现先增加后降低的趋势。其中，2000 年 SOC 密度预测值为 4.17 $kg\cdot m^{-2}$，较观测值低 1.7%，而 2015 年 SOC 密度预测值为 3.87 $kg\cdot m^{-2}$，较观测值高 1.7%。

从农田表层 SOC 密度变化速率的空间分布来看（图 5），不同参数优化方法下其空间分布模式具有明显的差异。MIMICS 模型默认参数条件下，1980—2015 年间，研究区西部、中部及北部沿江地区 SOC 密度显著增加，且大部分地区 SOC 增加速率高于 0.02 $kg\cdot m^{-2}\cdot a^{-1}$；研究区东南部 SOC 密度降低，丢碳速率超过 0.01 $kg\cdot m^{-2}\cdot a^{-1}$（图 4a）。批处理方法优化 MIMICS 模型敏感参数条件下，1980—2015 年间苏南农田 SOC 密度总体呈增加趋势，其中，研究区西部 SOC 密度显著增加（图 4b），但增加速率明显低于默认参数的估计结果（图 4a），研究区中部 SOC 密度略有增加，但增速较低，而研究区东部增速更低，且有大面积的 SOC 密度降低区域（图 4b）。而点对点参数优化方法下，SOC 密度变化速率的空间分异模式更为明显，其中，西部 SOC 密度增加的区域范围明显高于批处理参数优化方法的预测结果，而东部 SOC 密度降低的区域范围则较批处理参

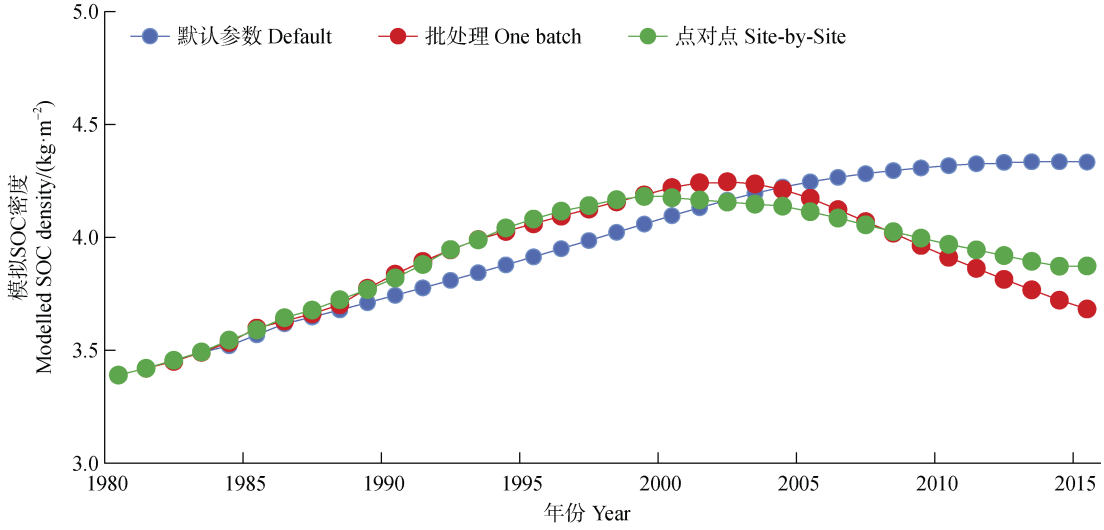


图 3　1980—2015 年间苏南农田表层 SOC 密度变化趋势

Fig. 3　The dynamics of soil organic carbon density between 1980 and 2015 derived from default parameters，one batch，and site-by-site

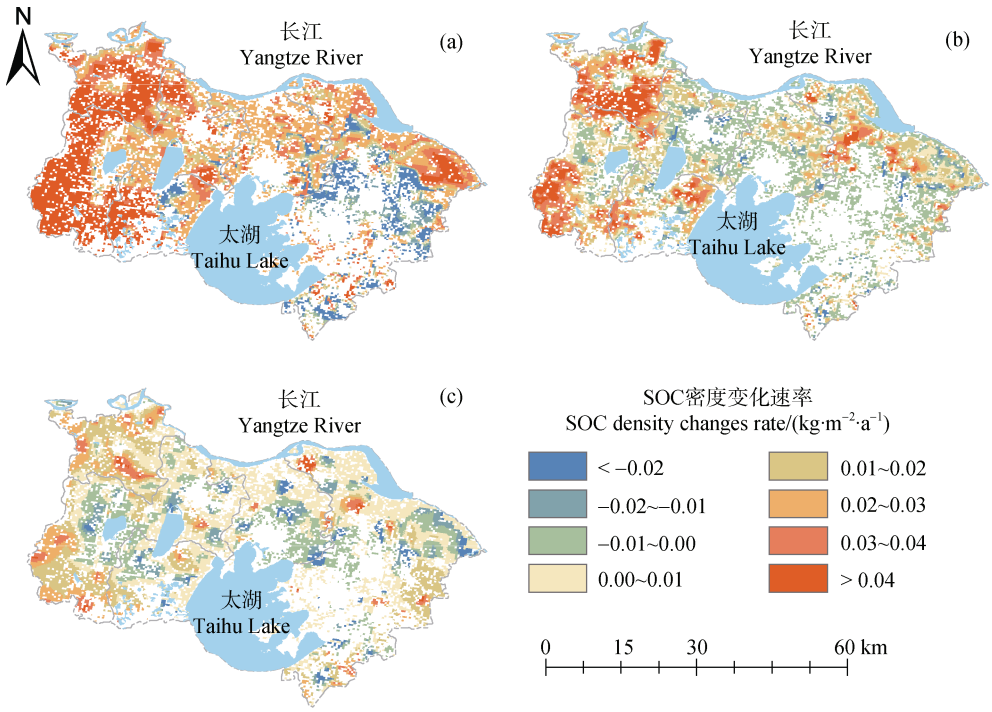


图 4　默认参数（a），批处理（b）及点对点（c）方法下 1980—2015 年农田表层 SOC 密度变化速率空间分布

Fig. 4　Spatial distributions of the rate of change in topsoil SOC density between 1980 and 2015 derived from the default parameters（a），one-batch optimized parameters（b），and site-by-site optimized parameters（c）

数优化方法的预测结果稍小（图 4b、图 4c）。

2.4　不同参数优化方法下模型的预测精度

从 MIMICS 模型预测精度的独立验证结果来看（表 3），采用模型默认参数值时的模拟误差最大，其中，2000 年和 2015 年表层 SOC 密度预测 RMSE 分别为 0.99 kg·m^{-2} 和 1.43 kg·m^{-2}，仅能解释 2000 年、2015 年表层 SOC 密度观测值变异性的 31%和 3%。当采用批处理方法优化 MIMICS 模型敏感参数后，2000 年和 2015 年表层 SOC 密度预测的 RMSE 分别降低至 0.81 kg·m^{-2} 和 1.25 kg·m^{-2}，较采用默认参数值的预测误差分别降低了 18.2%和 12.6%。同时，批处理优化敏感参数方法下，MIMICS 模型解

表 3 不同参数优化方法下 MIMICS 模型预测精度

Table 3 Prediction accuracy of MIMICS model with different parameter optimization methods

年份 Year	R^2			RMSE/（kg·m^{-2}）			MAE/（kg·m^{-2}）		
	默认参数 Default	批处理 One batch	点对点 Site-by-Site	默认参数 Default	批处理 One batch	点对点 Site-by-Site	默认参数 Default	批处理 One batch	点对点 Site-by-Site
2000	0.31	0.37	0.43	0.99	0.81	0.77	0.80	0.64	0.61
2015	0.03	0.07	0.13	1.43	1.25	1.22	1.12	1.02	0.98

释的 2000 年、2015 年表层 SOC 密度观测值变异性分别提高到 37%和 7%。当采用点对点优化 MIMICS 模型敏感参数，并利用 RF 模型估算的最优参数值空间分布数据驱动 MIMICS 模型时，2000 年和 2015 年表层 SOC 密度预测的 RMSE 分别进一步降低至 0.77 kg·m^{-2} 和 1.22 kg·m^{-2}，与采用默认参数值模拟相比，RMSE 分别降低了 22.2%（2000 年）和 14.7%（2015 年），MIMICS 模型解释的表层 SOC 密度观测值变异性则分别提高到 43%（2000 年）和 13%（2015 年），表明优化模型敏感参数并表征其空间异质性能有效提高 MIMICS 模型预测表层 SOC 密度时空演变的精度。

3 讨 论

3.1 微生物模型敏感参数优化的必要性

土壤及气候条件等显著异于过程模型开发环境时，直接采用模型参数默认值来建模 SOC 时空演变可能导致模拟结果产生极大的不确定性[11, 33]。因此，基于观测数据对模型参数进行本地化校正，是降低过程模型模拟 SOC 时空演变不确定性的重要手段。从本研究的结果来看，采用默认参数值驱动 MIMICS 模型，仅能够再现研究区农田前 20 年（1980—2000 年）的表层 SOC 密度增加趋势，但不能反映随后 15 年（2000—2015 年）的表层 SOC 密度降低趋势。而采用批处理和点对点两种方法优化敏感参数后，MIMICS 模型能够反映与观测数据较为一致的 SOC 密度变化趋势，即 1980—2015 年间研究区农田表层 SOC 密度先增加后减少（图 3，表 1）。

此外，采用批处理方法优化 MIMICS 模型敏感参数后，2000 年和 2015 年表层 SOC 密度预测 RMSE 分别较采用默认参数值方法降低 18.2%和 12.6%，而 MIMICS 模型解释的表层 SOC 密度变异性分别提高到 37%和 7%，表明采用批处理优化模型敏感参数有利于提高模型的时空预测能力，并显著降低由于模型参数偏差所导致的预测结果不确定性，这与 Hararuk 等[11]的研究结果一致。微生物模型内部参数大多为常值参数，但常值参数可能难以表征区域、国家、全球等大尺度上土壤碳循环动态的显著空间异质性[16-17]，从而对 SOC 时空演变预测精度产生深刻影响。比如，Ge 等[34]研究发现，DALEC（Data Assimilation Linked Ecosystem Carbon，DALEC）模型中表征碳库周转过程的参数因气候带不同而具有明显差异。本研究结果表明，当采用点对点方法优化 MIMICS 模型敏感参数，并利用 RF 模型估算最优参数值的空间分布，进而利用其驱动 MIMICS 模型时，可使研究区 2000 年和 2015 年表层 SOC 密度预测 RMSE 分别降低 22.2%和 14.7%，其预测精度较采用批处理方法优化参数的预测精度更高（表 3）。由此可见，除了对模型敏感参数进行优化外，充分考虑模型参数优化值的空间异质性也是进一步降低 MIMICS 模型预测 SOC 时空演变预测误差的重要途径。

3.2 微生物模型模拟 SOC 时空动态的局限性

尽管采用不同的参数优化方法能够在一定程度上降低研究区农田表层 SOC 密度时空动态的预测误差，然而，微生物模型建模区域尺度农田 SOC 密度时空演变依然具有一定的局限性。

首先，尽管点对点优化参数方法下 MIMICS 模型的预测精度最高，但 2015 年 SOC 密度的预测 RMSE 仍然较 2000 年 SOC 密度的预测 RMSE 高 58%。表明，参数优化的 MIMICS 模型对强烈人为活动引起的高度变异 SOC 模拟精度依然偏低。这可能与 MIMICS 模型不能完全反映人为活动对 SOC 的影响过程有关。比如，Xie 等[35]研究表明，人为活动导致 1980—2000 年苏南农田土壤平均酸化速率

为每年 0.028 个 pH 单位，而 2000—2015 年则高达每年 0.035 个 pH 单位。土壤酸化过程影响土壤微生物活性，进而影响 SOC 分解速率，但 MIMICS 模型未考虑土壤 pH 变化的影响。同时，Xie 等[36]研究发现，秸秆还田、化肥施用以及土地利用变化是影响苏南农田表层 SOC 变化的主要人为因子。秸秆还田与合理施用化肥有利于增加农田土壤碳输入，促进农田土壤固碳[15, 30]，而土地利用变化则通过改变土壤理化属性从而影响作物生长发育及土壤微生物活性等，进而影响土壤碳输入及 SOC 分解[37-38]。1980—2000 年间苏南耕地面积减少了 5.6%，城镇建设和农村居民点占地面积则增加了 4.5%，而 2000—2015 年间苏南耕地面积减少了 9.1%，城镇建设和农村居民点占地面积则增加了 8.7%，然而，目前的微生物模型仅能以碳输入变化来反映土地利用变化的间接影响，还难以反映土地利用变化对 SOC 累积和分解过程的直接影响，这可能是导致 2015 年 SOC 预测精度偏低的主要原因之一。

其次，苏南不同区域 1980 年的初始 SOC 含量、施肥量及秸秆还田量、土地利用变化均存在一定的区域差异性[36]，因此，不同区域的 SOC 变化趋势亦存在明显的差异性。1980 年研究区东部（江阴、锡山、惠山、滨湖、梁溪、新吴、张家港、常熟、太仓、昆山、虎丘、吴中、相城、姑苏和吴江）和西部（丹徒、丹阳、金坛、溧阳、武进、天宁、钟楼、新北和宜兴）的农田表层平均 SOC 密度分别为 3.60 kg·m^{-2} 和 3.01 kg·m^{-2}，尽管东部地区 SOC 密度较西部稍高，但仍处于相对较低水平。因此，土壤碳输入的增加有助于促进 SOC 的累积，例如，2000 年时，研究区东部农田表层平均 SOC 密度增加到 4.55 kg·m^{-2}，而研究区西部则增加到 3.96 kg·m^{-2}。2000 年后研究区秸秆还田政策大面积推广[30]，与此同时，土地利用也发生了更为剧烈的变化，主要表现为农田面积加速减少、城镇建设用地面积持续增加，尤其以研究区东部更为明显[39]。然而，2000 年之后土地利用剧烈变化导致的土壤碳输入量停滞不前，已不足以维持研究区较高的 SOC 水平，从而导致 SOC 降低。例如，2000—2015 年，研究区东部 SOC 密度平均降幅为 0.72 kg·m^{-2}，而西部地区 SOC 密度降幅稍小，为 0.18 kg· m^{-2}。尽管点对点参数优化方法通过 MIMICS 模型敏感参数的空间异质性表达，从而提供了关于研究区农田表层 SOC 动态区域差异性的更多局部细节信息，但 MIMICS 模型还难以全面表达土壤碳输入、农业管理措施及土地利用变化交互作用对 SOC 动态的影响过程，因此，进一步改进微生物模型的结构，将是未来提高微生物模型预测 SOC 时空动态精度所面临的重要挑战。

此外，MIMICS 微生物模型采用具有温度敏感性的米氏动力学方程描述土壤碳的分解，这对于探讨 SOC 对于温度变化的响应非常有益，但目前在区域尺度上可免费获取的长时间序列土壤温度数据的空间分辨率仍然相对较低。比如，本研究中土壤温度数据空间分辨率为 0.125°，在反映研究区土壤温度的局部空间变异性方面还具有一定的局限性，这也可能会对本研究中的 SOC 时空演变模拟结果产生一定的影响。

4　结　论

默认参数、批处理以及点对点优化过程模型参数对 MIMICS 微生物模型建模苏南地区农田表层 SOC 时空动态的对比分析表明：（1）采用默认参数值的 MIMICS 模型不能完全反映观测到的 SOC 变化总体趋势，但敏感参数优化后的 MIMICS 模型能够再现苏南农田表层 SOC 密度先增加后减少的总体变化趋势；（2）与采用默认参数值相比，采用批处理方法优化 MIMICS 模型敏感参数后，2000 年和 2015 年 SOC 密度预测 RMSE 分别降低 18.2%和 12.6%，进一步考虑模型敏感参数的空间异质性，采用点对点方法优化 MIMICS 模型敏感参数后，2000 年和 2015 年 SOC 密度预测 RMSE 则较默认参数法分别降低 22.2%和 14.7%，其预测精度最高；（3）尽管点对点参数优化方法下 MIMICS 模型的预测精度最高，但其 2015 年 SOC 密度的预测精度依然偏低，因此，进一步改进微生物模型的结构、提高模型输入数据的精度及分辨率，将是未来提高微生物模型预测 SOC 时空动态精度所面临的重要挑战。

参考文献（References）

[1] Lal R. Societal value of soil carbon [J]. Journal of Soil and Water Conservation，2014，69（6）：186A—192A.

[2] Lal R. Soil carbon sequestration impacts on global climate change and food security[J]. Science，2004，304（5677）：1623—1627.

[3] Lal R. Soil health and carbon management[J]. Food and

Energy Security，2016，5（4）：212—222.
[4] Vereecken H，Schnepf A，Hopmans J W，et al. Modeling soil processes：Review，key challenges，and new perspectives[J]. Vadose Zone Journal，2016，15（5）：1—57.
[5] Jenkinson D S. The turnover of organic carbon and nitrogen in soil[J]. Philosophical Transactions of the Royal，1990，B329：361—368.
[6] Li C S，Zhuang Y H，Frolking S，et al. Modeling soil organic carbon change in croplands of China[J]. Ecological Applications，2003，13（2）：327—336.
[7] Luo Y Q，Wu L H，Andrews J A，et al. Elevated CO_2 differentiates ecosystem carbon processes：Deconvolution analysis of duke forest face data[J]. Ecological Monographs，2001，71（3）：357—376.
[8] Bonan G B，Doney S C. Climate，ecosystems，and planetary futures：The challenge to predict life in Earth system models[J]. Science，2018，359（6375）：eaam8328.
[9] Luo Y Q，Ahlström A，Allison S D，et al. Toward more realistic projections of soil carbon dynamics by Earth system models[J]. Global Biogeochemical Cycles，2016，30（1）：40—56.
[10] Gurung R B，Ogle S M，Breidt F J，et al. Bayesian calibration of the DayCent ecosystem model to simulate soil organic carbon dynamics and reduce model uncertainty[J]. Geoderma，2020，376：114529.
[11] Hararuk O，Xia J Y，Luo Y Q. Evaluation and improvement of a global land model against soil carbon data using a Bayesian Markov chain Monte Carlo method[J]. Journal of Geophysical Research：Biogeosciences，2014，119（3）：403—417.
[12] Xu H Y，Zhang T，Luo Y Q，et al. Parameter calibration in global land carbon models using surrogate-based optimization[J]. Geoscientific Model Development Discussions，2017：1—28.
[13] Domeignoz-Horta L A，Pold G，Liu X J A，et al. Microbial diversity drives carbon use efficiency in a model soil[J]. Nature Communications，2020，11：3684.
[14] Wang B R，An S S，Liang C，et al. Microbial necromass as the source of soil organic carbon in global ecosystems[J]. Soil Biology and Biochemistry，2021，162：108422.
[15] Zhang X，Zhao Y C，Xie E Z，et al. Spatio-temporal change of soil organic carbon，progress and prospects[J]. Journal of Agro-Environment Science，2020，39（4）：673—679. [张秀，赵永存，谢恩泽，等. 土壤有机碳时空变化研究进展与展望[J]. 农业环境科学学报，2020，39（4）：673—679.]
[16] Luo Y Q，White L W，Canadell J G，et al. Sustainability of terrestrial carbon sequestration：A case study in Duke Forest with inversion approach[J]. Global Biogeochemical Cycles，2003，17（1）：1021.
[17] Tao F，Zhou Z H，Huang Y Y，et al. Deep learning optimizes data-driven representation of soil organic carbon in earth system model over the conterminous United States[J]. Frontiers in Big Data，2020，3：17.
[18] Wieder W R，Grandy A S，Kallenbach C M，et al. Representing life in the earth system with soil microbial functional traits in the mimics model[J]. Geoscientific Model Development，2015，8（6）：1789—1808.
[19] Wieder W R，Grandy A S，Kallenbach C M，et al. Integrating microbial physiology and physio-chemical principles in soils with the microbial-mineral carbon stabilization（mimics）model[J]. Biogeosciences，2014，11（14）：3899—3917.
[20] Wieder W R，Hartman M D，Sulman B N，et al. Carbon cycle confidence and uncertainty：Exploring variation among soil biogeochemical models[J]. Global Change Biology，2018，24（4）：1563—1579.
[21] Zhang H C，Goll D S，Wang Y P，et al. Microbial dynamics and soil physicochemical properties explain large-scale variations in soil organic carbon[J]. Global Change Biology，2020，26（4）：2668—2685.
[22] Xie E Z，Zhao Y C，Lu F Y，et al. Comparison analysis of methods for prediction of spatial distribution of soil organic matter contents in farmlands south Jiangsu，China[J]. Acta Pedologica Sinica，2018，55（5）：1051—1061. [谢恩泽，赵永存，陆访仪，等. 不同方法预测苏南农田土壤有机质空间分布对比研究[J]. 土壤学报，2018，55（5）：1051—1061.]
[23] Song G H，Li L Q，Pan G X，et al. Topsoil organic carbon storage of China and its loss by cultivation[J]. Biogeochemistry，2005，74（1）：47—62.
[24] Su Z，Rosnay P de，Wen J，et al. Evaluation of ECMWF's soil moisture analyses using observations on the Tibetan Plateau[J]. Journal of Geophysical Research：Atmospheres，2013，118（11）：5304—5318.
[25] Wang J M，Sun R，Zhang H L，et al. New global MuSyQ GPP/NPP remote sensing products from 1981 to 2018[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing，2021，14：5596—5612.
[26] Karger D N，Conrad O，Böhner J，et al. Climatologies at high resolution for the earth's land surface areas[J]. Scientific Data，2017，4：170122.
[27] Shi Z，Crowell S，Luo Y Q，et al. Model structures amplify uncertainty in predicted soil carbon responses to climate change[J]. Nature Communications，2018，9：2171.
[28] Xu T，White L，Hui D F，et al. Probabilistic inversion of a terrestrial ecosystem model：Analysis of uncertainty in parameter estimation and model prediction[J]. Global Biogeochemical Cycles，2006，20（2）：GB2007.
[29] Taghizadeh-Mehrjardi R，Schmidt K，Amirian-Chakan A，et al. Improving the spatial prediction of soil organic

carbon content in two contrasting climatic regions by stacking machine learning models and rescanning covariate space[J]. Remote Sensing，2020，12：1—26.

[30] Zhao Y C，Wang M Y，Hu S J，et al. Economics- and policy-driven organic carbon input enhancement dominates soil organic carbon accumulation in Chinese croplands[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America，2018，115（16）：4045—4050.

[31] Liu X Y，Zhao Y C，Shi X Z，et al. Sensitivity and uncertainty analysis of CENTURY-modeled SOC dynamics in upland soils under different climate-soil-management conditions：A case study in China[J]. Journal of Soils and Sediments，2017，17（1）：85—96.

[32] Brooks S P，Gelman A. General methods for monitoring convergence of iterative simulations[J]. Journal of Computational and Graphical Statistics，1998，7（4）：434—455.

[33] Bloom A A，Exbrayat J F，van der Velde I R，et al. The decadal state of the terrestrial carbon cycle：Global retrievals of terrestrial carbon allocation，pools，and residence times[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America，2016，113（5）：1285—1290.

[34] Ge R，He H L，Ren X L，et al. Underestimated ecosystem carbon turnover time and sequestration under the steady state assumption：A perspective from long-term data assimilation[J]. Global Change Biology，2019，25（3）：938—953.

[35] Xie E Z，Zhao Y C，Li H D，et al. Spatio-temporal changes of cropland soil pH in a rapidly industrializing region in the Yangtze River Delta of China，1980—2015[J]. Agriculture，Ecosystems & Environment，2019，272：95—104.

[36] Xie E Z，Zhang X，Lu F Y，et al. Spatiotemporal changes in cropland soil organic carbon in a rapidly urbanizing area of southeastern China from 1980 to 2015[J]. Land Degradation & Development，2022，33（9）：1323—1336.

[37] Fan M M，Lal R，Zhang H，et al. Variability and determinants of soil organic matter under different land uses and soil types in Eastern China[J]. Soil and Tillage Research，2020，198：104544.

[38] Luo Y L，Li Q Q，Shen J，et al. Effects of agricultural land use change on organic carbon and its labile fractions in the soil profile in an urban agricultural area[J]. Land Degradation & Development，2019，30（15）：1875—1885.

[39] Yirsaw E，Wu W，Temesgen H，et al. Socioeconomic drivers of spatio-temporal land use/land cover changes in a rapidly urbanizing area of China，the Su-Xi-Chang region[J]. Applied Ecology and Environmental Research，2017，15（4）：809—827.

（**责任编辑**：檀满枝）