

基于 BP 神经网络的城市公园土壤重金属磁学诊断分析

——以上海市莘庄公园为例

汤宇, 柳云龙

(上海师范大学环境与地理科学学院地理系, 上海 200234)

摘要: 在上海市莘庄公园采集公园绿地表层土壤, 结合磁学方法和化学方法, 通过地统计学分析土壤重金属、土壤磁学特征的空间变异特征, 对基于非线性 BP 神经网络和偏最小二乘法建立的土壤重金属磁学诊断模型的稳定性和精确性进行了比较分析。结果表明, 土壤中 Cu、Mn、Pb 和 Zn 含量平均值分别为 27.31、651.91、26.05 和 96.20 mg/kg, 皆超过上海土壤重金属背景值, 公园绿地土壤重金属存在富集现象。土壤低频磁化率、饱和等温剩磁和非磁滞剩磁磁化率平均值分别为 $27.39 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{kg}$ 、 $3\,480.67 \times 10^{-6} \text{ Am}^2/\text{kg}$ 和 $182.01 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{kg}$, 也不同程度超出上海土壤背景值, 公园绿地土壤存在磁性增强现象。土壤低频磁化率、饱和等温剩磁与 Cu、Pb 和 Zn 呈极显著正相关 ($p < 0.01$), 与 Mn 呈显著正相关 ($p < 0.05$), 通过非线性 BP 神经网络土壤重金属磁学诊断建模的稳定性和精确性均优于偏最小二乘法。

关键词: 土壤重金属; 城市公园; 磁学诊断; BP 神经网络

中图分类号: X144

文献标志码: A

DOI: [10.16803/j.cnki.issn.1004-6216.2021030034](https://doi.org/10.16803/j.cnki.issn.1004-6216.2021030034)

Magnetic diagnosis of heavy metals in urban park soil based on BP neural network

——A case study of Xinzhuang Park in Shanghai

TANG Yu, LIU Yunlong

(Department of Geography, School of Environment and Geographical Sciences, Shanghai Normal University, Shanghai 200234, China)

Abstract: The surface soil samples were collected from Xinzhuang Park in Shanghai. Combining the magnetic method with the chemical method, the spatial variation characteristics of soil heavy metals and soil magnetic characteristics were analyzed by geostatistics. The stability and accuracy of the magnetic diagnosis model for soil heavy metals based on nonlinear BP neural network and partial least square method were investigated. The results showed that the average contents of Cu, Mn, Pb and Zn in soil were 27.31, 651.91, 26.05 and 96.20 mg/kg, respectively, which were higher than the background value of heavy metal content in the soil of Shanghai with a certain accumulation. The mean value of χ_{lf} , SIRM and χ_{ARM} were $27.39 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{kg}$, $3\,480.67 \times 10^{-6} \text{ Am}^2/\text{kg}$, and $182.01 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{kg}$, which exceeded the background values of Shanghai soil in certain degrees. Soil χ_{lf} and SIRM were significantly positively correlated with Cu, Pb and Zn ($p < 0.01$), and positively correlated with Mn ($p < 0.05$). From the comprehensive effect of the model prediction, the fitting effect of BP neural network model was better than that of partial least square method.

Keywords: soil heavy metals; urban park; magnetic diagnosis; BP neural network

CLC number: X144

城市土壤是城市生态系统的基础, 受人类活动深刻的影响, 城市土壤重金属已有不同程度的积累, 并通过呼吸、手口和皮肤接触等不同方式影响人体的健康^[1]。城市绿地作为人类活动的重要场

收稿日期: 2021-03-12

基金项目: 上海市教育委员会科研创新项目 (09YZ175); 上海市教委重点学科建设项目 (J50402); 闵行区自然科学研究项目 (2014MHZ002)

作者简介: 汤宇 (1993-), 女, 硕士研究生。研究方向: 城市生态环境。E-mail: yuantty@126.com

通信作者: 柳云龙 (1971-), 男, 博士、副教授。研究方向: 城市生态与环境。E-mail: liu_zju@126.com

引用格式: 汤宇, 柳云龙. 基于 BP 神经网络的城市公园土壤重金属磁学诊断分析——以上海市莘庄公园为例 [J]. 环境保护科学, 2022, 48(5): 69-73.

所,及时有效地掌握绿地土壤环境污染信息有利于提高城市环境管理水平,保障居民身体健康^[2]。但传统土壤重金属检测方法比较复杂,检测成本高,难以满足大区域、大样本量的环境监测需求^[3]。

环境磁学是介于地学、磁学和环境科学之间新兴边缘学科,能指示环境的变化,已广泛应用于土壤重金属污染监测^[4]。土壤磁学参数与重金属含量之间存在相关性,利用土壤环境磁学参数来监测城市土壤污染状况已成为近年来城市生态环境研究的重要方法^[5-8]。BECKWITH et al^[9] 研究发现,城市土壤重金属 Fe、Pb、Zn 和 Cu 含量与土壤磁化率之间存在线性关系。DANKOUB et al^[10] 发现,土壤磁学参数与重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 含量呈极显著正相关。吴丹等^[11] 利用磁学参数建立了指示土壤重金属污染的半定量数学模型,对土壤重金属污染状况进行了初步评估。陈亮等^[12] 通过线性回归解释了土壤磁学参数与重金属含量的关系,并揭示了表层土壤重金属元素含量与磁化率的空间分布规律。这些研究表明,通过磁学方法可以建立磁学参数指示土壤重金属含量模型,为土壤重金属含量评估提供支持。但由于影响土壤环境质量的重金属种类及形态多样,加上磁学参数与土壤重金属含量关系之间存在复杂的非线性关系,表现出极大的随机性、不确定性,单一的线性关系难以准确描述城市土壤重金属与磁性特征之间复杂关系,使目前基于磁学参数的建模研究不能有效指示土壤重金属含量。

BP 神经网络作为 20 世纪 80 年代以后迅速发展起来的一种新型技术,相比于传统的线性分析模型,BP 神经网络具有自组织性、自适应性、非线性和容错性等特征^[13-14],能更好地分析土壤磁学特征与土壤重金属含量之间的关联模式,自动归纳规则获得数据的内在规律。基于 BP 神经网络建立土壤磁学参数预测重金属含量模型,能定量描述区域土壤重金属情况,也是对土壤重金属分布研究的拓展。本文以上海市闵行区莘庄公园为研究区域,分析土壤环境磁学与重金属含量的空间分布特征,通过 BP 神经网络建立土壤磁学特征与土壤重金属含量的非线性映射关系,探索建立土壤重金属污染的环境磁学诊断模型,为大范围高效、快速指示环境污染提供支持,服务于城市土壤污染状况调查、评价和监控,以提高城区环境管理水平。

1 材料与方法

1.1 样品采集与测试

莘庄公园是具备游憩休闲功能的综合性绿地,总面积为 5.9 km²。结合遥感影像图、土地利用和植被覆盖情况,以公园数字底图为基础,以网格布点方式采样点,使取样点分布均匀,实际取样时,考虑下垫面的复杂性对采样点进行适度调整,随机取样,采集表层土壤样品,采样深度为 0~20 cm,共采集样品 38 个,见图 1。

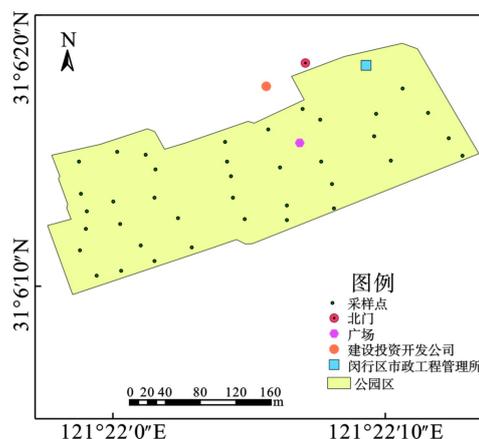


图 1 研究区概况及采样点位置分布

采集的土壤样品剔除较大的固体颗粒物,装入密封袋带回实验室,检出植物根系以及可见侵入体,自然风干后用木质工具碾碎研磨,过孔径为 1 mm 尼龙筛后,用玛瑙研钵研磨至颗粒状(过 100 μm 筛)。采用 X 射线荧光分析检测法(美国 Innov-X 公司的 AS-4000 土壤重金属测量仪)测定土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 含量。选用英国 Bartington MS2 磁化率仪测定磁化率,非磁滞剩磁(ARM)、饱和等温剩磁(SIRM,外加磁场强度为 1T)和等温剩磁(IRM)采用 MMPM10 脉冲磁化仪和 Molspin 旋转磁力仪测定,并计算了非磁滞剩磁磁化率(χ_{ARM})。

1.2 BP 神经网络

BP 神经网络是一种按误差逆传播算法训练的多层前馈网络,采用有监督式的学习模式,学习和存贮大量输入-输出模式映射关系^[15]。学习过程分为正向传播阶段和反向调整误差阶段,通过梯度下降法不断调整网络权值和阈值,使网络的误差平方和最小^[16]。BP 神经网络模型拓扑结构包括输入层(X)、隐含层(P)和输出层(Y),其数据处理能力由网络神经元、网络拓扑结构和神经元之间的连接权重大小、阈值决定的^[17]。其数学模型,见式(1~2):

$$P = f(\omega_1 X + \theta_1) \quad (1)$$

$$Y = f(\omega_2 P + \theta_2) \quad (2)$$

式中, X 、 P 和 Y 分别为输入层、隐含层和输出层的节点向量, ω_1 、 θ_1 和 ω_2 、 θ_2 分别表示输入层与隐含层和隐含层与输出层之间的连接权重和阈值。BP 网络输入层和输出层的神经元数根据实际使用情况来调整, 隐含层神经元数常用经验式(3)来确定:

$$h = \sqrt{m+n+a} \quad (3)$$

式中, h 为隐含层神经元数, m 为输入层神经元数, n 为输出层神经元数, a 为调节常数, 取值范围在 1~10 之间。

表1 莘庄公园表土样品的重金属含量

重金属	最大值/mg·kg ⁻¹	最小值/mg·kg ⁻¹	平均值/mg·kg ⁻¹	背景值/mg·kg ⁻¹	标准差	变异系数
Cu	46.67	19.00	27.31	27.20	5.86	0.21
Mn	939.75	522.00	651.97	548.00	89.15	0.14
Pb	42.00	19.75	26.05	25.00	5.00	0.19
Zn	161.67	77.00	96.20	81.30	16.39	0.17

表1可知, 土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 含量变化范围分别为 19~46.67、522~939.75、19.75~42 和 77~161.67 mg/kg, 平均值分别为 27.31、651.91、26.05 和 96.20 mg/kg。根据中国环境监测总站研究^[18] 和上海土壤站具体情况, 得到上海区域土壤背景值^[19-20]。将研究区土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 含量与上海市土壤背景值进行对比可知, 土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 含量分别是上海市表层土壤重金属背景值的 1.01、1.19、1.04 和 1.18 倍, 表明表层土壤存在一定程度的重金属累积现象。变异系数反映了总体样本中各采样点平均变异程度, 变异系数<15% 为弱变异, 15%~35% 为中等变异, >35% 为强变异^[20]。土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 的变异系数分别为 0.21、0.14、0.19 和 0.17, 除 Mn 为弱变异外, 土壤重金属 Cu、Pb 和 Zn 均为中等变异, 空间变异性较大, 可能与公园绿地四周交通、商业和工业等人类活动有关。

2.2 土壤磁学特征分析

土壤 χ_{lf} 、SIRM 和 χ_{ARM} 均指示样品中磁性矿物的含量, 常用作亚铁磁性矿物含量的粗略量度; χ_{ARM} 主要反映细粒级假单畴 (PSD) 和稳定单畴 (SSD) 亚铁磁性矿物含量^[4]; SIRM 不受顺磁性和抗磁性物质影响, 主要由亚铁磁性矿物和不完全反

1.3 地统计学

地统计学以区域化变量理论为基础, 通过半方差函数, 分析既有随机性又有结构性的地理现象的空间分布规律。克里金 (Kriging) 法作为地统计学主要方法, 其基于区域化变量的空间结构, 对未采样点的区域变化量的取值进行线性无偏最优估计。本研究采用的普通克里金插值采用 ESRI 的 ArcGIS10.6 地统计模块完成。

2 结果与讨论

2.1 土壤重金属含量特征分析

土壤重金属含量测定结果, 见表1。

铁磁性矿物含量所控制^[21]。公园绿地土壤样品磁学参数的统计值, 见表2。

表2 莘庄公园表土样品的磁学参数特征

磁学参数	$\chi_{lf} \times 10^{-8}$ m ³ ·kg ⁻¹	SIRM/ $\times 10^{-6}$ Am ² ·kg ⁻¹	$\chi_{ARM} \times 10^{-8}$ m ³ ·kg ⁻¹
最大值	77.11	11 169.48	2 307.00
最小值	15.24	27.59	43.00
平均值	27.39	3 480.67	182.01
标准差	11.03	1 803.88	387.47
变异系数	0.40	0.52	2.13
背景值	29.10	2 371.00	103.30

表2可知, 土壤 χ_{lf} 的变化范围 15.24~77.11 $\times 10^{-8}$ m³/kg, 均值 27.39 $\times 10^{-8}$ m³/kg。土壤 SIRM 的变化范围 27.59~11 169.48 $\times 10^{-6}$ Am²/kg, 均值 3 480.67 $\times 10^{-6}$ Am²/kg。土壤 χ_{ARM} 变化范围 43.21~2 306.88 $\times 10^{-8}$ m³/kg, 平均值 182.01 $\times 10^{-8}$ m³/kg。将研究区土壤磁学参数与上海市土壤磁学背景值^[19] 进行对比可知, 除土壤 χ_{lf} 外, 土壤 SIRM、 χ_{ARM} 的平均值均高于上海土壤背景值, 土壤亚铁磁性矿物存在累积, 土壤磁性有增强现象。研究区域土壤的成土母质主要为河湖相沉积物, 地下水埋深浅, 土壤磁性的增强应与磁性矿物人为源的输入有关^[22]。从土壤磁性参数的变异情况来看, χ_{lf} 、SIRM 和 χ_{ARM}

变异系数分别为 0.4、0.52 和 2.13, 均为强变异, 3 种土壤磁学参数空间变异性强, 说明土壤磁性矿物含量的空间差异大, 可能与公园绿地环境中磁性矿物来源的多样性有关。

2.3 土壤重金属磁性诊断模型分析

对土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 与 3 种磁学参数 χ_{lf} 、SIRM 和 χ_{ARM} 进行相关分析, 见表 3。

表 3 土壤重金属与磁学参数相关系数

金属元素	χ_{lf}	χ_{ARM}	SIRM
Cu	0.603**	0.145	0.532**
Mn	-0.339*	-0.273	-0.321*
Pb	0.746**	-0.064	0.747**
Zn	0.835**	-0.041	0.832**

注: *, 显著水平 $p < 0.05$; **, 极显著水平 $p < 0.01$ (p 值表示 2 个变量间的相关程度)。

表 4 土壤重金属元素 BP、PLSR 建模和验证分析结果

元素	BP建模集			BP验证集			PLSR建模集			PLSR验证集		
	R^2	RMSE	MAPE/%	R^2	RMSE	MAPE/%	R^2	RMSE	MAPE/%	R^2	RMSE	MAPE/%
Cu	0.54	2.56	7.18	0.66	7.87	16.69	0.14	3.49	10.29	0.64	9.27	15.49
Mn	0.43	67.10	6.86	0.55	95.03	12.29	0.19	78.45	8.03	0.21	127.15	13.96
Pb	0.62	2.84	8.65	0.80	3.09	8.37	0.56	3.06	9.27	0.71	5.83	14.72
Zn	0.81	4.38	3.66	0.72	17.92	11.48	0.48	7.12	6.03	0.84	18.03	11.70

表 4 可知, 土壤重金属 Zn、Pb 和 Cu 的 BP 建模 R^2 分别为 0.81、0.62 和 0.54, R^2 均 > 0.5 , 而 PLSR 建模的 R^2 仅 Pb 高于 0.5, 为 0.56, 其余皆在 0.5 以下。除 Zn 外, 土壤 Cu、Mn 和 Pb 的 BP 验证模型的 R^2 均高于 PLSR 验证模型。BP 模型的稳定性明显优于 PLSR 模型。从模型精确性来看, 土壤 Cu、Mn、Pb 和 Zn 在 BP 模型建模集和验证集中的 RMSE 均小于 PLSR 模型, BP 模型精确性更高。土壤 Cu、Mn、Pb 和 Zn 的 BP 建模 MAPE 分别为 7.18%、6.86%、8.65% 和 3.66%, 除 Pb 外, 皆低于 PLSR 建模 MAPE。而 BP 验证集的 MAPE 均低于 PLSR 验证模型。总体而言, 通过 BP 神经网络建立土壤重金属诊断模型能获得更好的稳定性和更高的精确性。

2.4 土壤重金属空间分析

将预测值和实测值通过克里金插值生成土壤重金属空间分布, 见图 2。

表 3 可知, 土壤 χ_{lf} 、SIRM 与土壤重金属 Cu、Pb、Zn 呈极显著正相关 ($p < 0.01$), 与 Mn 呈显著相关 ($p < 0.05$)。随机将 38 个土壤样本分为建模集和验证集, 32 个样本用作建模集, 6 个样本用作验证集。以土壤重金属含量为因变量, 以在 0.01 水平显著相关的 χ_{lf} 和 SIRM 为自变量, 分别采用 BP 神经网络模型和偏最小二乘回归模型 (PLSR) 建立土壤重金属磁学诊断模型, 并根据验证集数据对建模结果进行验证分析。模型的稳定性和精确性通过决定系数 R^2 、均方根误差 (RMSE) 和平均绝对百分比误差 (MAPE) 来分析。 R^2 越接近于 1, 回归方程拟合效果越好, 模型越稳定。RMSE 表征模型预测值与实测值的差异, RMSE 越小, 模型预测效果越好^[23]。MAPE 不易受个别离群点影响, 对模型预测结果的评价更具稳定性和精确性。 R^2 、RMSE 和 MAPE 的统计, 见表 4。

图 2 可知 (为了突出空间分布特征, 本文未统一坐标轴), 基于 BP 神经网络得到的各土壤重金属预测结果最值与实测值最值相近, 各土壤重金属空间分布特征重合度高。其中, 土壤重金属 Cu、Pb 和 Zn 的空间分布特征相似, 其高值区均出现在公园东北部, 由东向西递减 (图 3a、c、d)。东北部为公园出入口, 交通车辆、商业设施等人类活动均对土壤重金属 Cu、Pb 和 Zn 的空间分布产生影响。土壤重金属 Mn 以岛状分布为主 (图 3b), 高值区位于公园中部偏西, 并以此为中心向四周辐射递减。土壤 Cu、Pb 和 Zn 空间分布的相似性, 说明土壤 Cu、Pb 和 Zn 具有同源性, 受到交通运输、人类活动等因素的影响。土壤 Mn 呈岛状分布, 但其空间变异弱, 主要受成土母质等结构性因素的影响。将基于实测值与预测值生成的土壤重金属空间分布图进行比较, 基于非线性 BP 神经网络预测值与基于实测值生成的 4 种土壤重金属空间分布高值区与低值区基本一致, 重合度高。

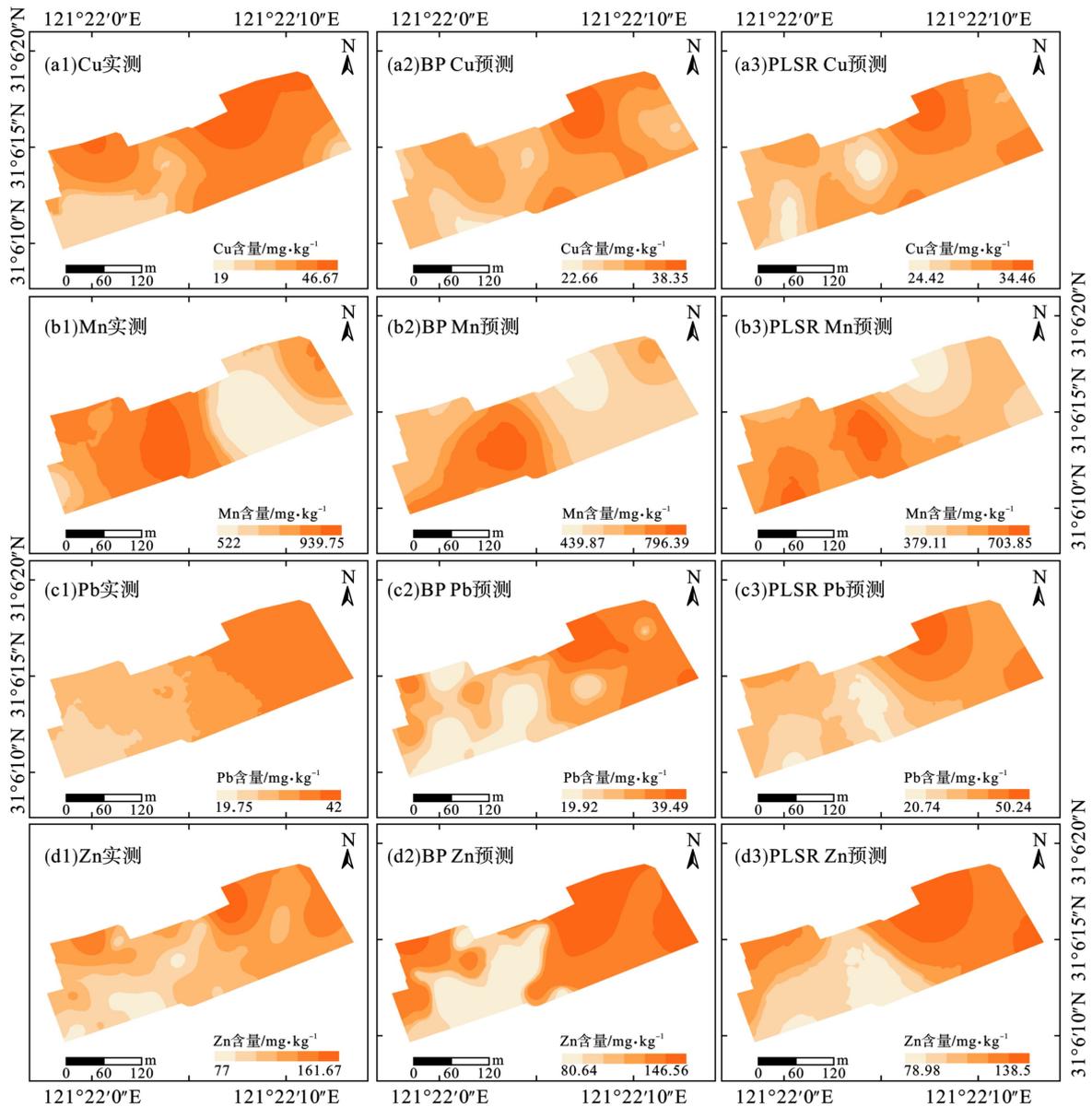


图 2 基于实测值与预测值的土壤重金属含量空间分布

3 结论

(1) 公园绿地土壤 Cu、Mn、Pb 和 Zn 平均值分别为 27.31、651.9、26.05 和 96.20 mg/kg，土壤重金属含量均高于土壤背景值，存在一定的重金属累积现象。除 Mn 外，土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 均为中等变异。

(2) 土壤 χ_{lf} 、SIRM 和 χ_{ARM} 平均值分别为 $27.39 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}$ 、 $3\,480.67 \times 10^{-6} \text{ Am}^2/\text{kg}$ 和 $182.01 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{kg}$ ，SIRM、 χ_{ARM} 均高于土壤背景值，公园绿地土壤存在磁性增强现象。 χ_{lf} 、SIRM 和 χ_{ARM} 变异系数均为强变异，空间异质性强，这与公园绿地环境中磁性矿物来源的多样性有关。

(3) 土壤重金属 Cu、Mn、Pb 和 Zn 与 χ_{lf} 、SIRM 存在显著相关性，土壤重金属含量磁学诊断 BP 建模的稳定性和精确性均优于 PLSR 模型，基于非线性 BP 模型预测值与基于实测值生成的 4 种土壤重金属空间分布高值与低值区基本一致，重合度高。

参考文献

[1] YANG J L, ZHANG G L. Formation, characteristics and eco-environmental implications of urban soils – a review[J]. Soil Science & Plant Nutrition, 2015, 61(sup1): 30 – 46.
 [2] 杨杉, 汪军, 李洪刚, 等. 重庆市绿地土壤重金属污染特征及健康风险评价[J]. 土壤通报, 2018, 49,(4): 966 – 972.

(下转第 99 页)