文章编号:1674-2869(2026)03-0261-09

融合差分进化与粒子群优化的磷化工污染土壤扩散预测方法

张传利[1],吴 鹏[*1],李思悦[2],高 峰[3],李 亮[*4]
1.湖北数字文旅集团有限公司,湖北 武汉 430061;
2.武汉工程大学环境生态与生物工程学院,湖北 武汉 430205;
3.武汉工程大学校长办公室,湖北 武汉 430205;
4.武汉工程大学化学与环境工程学院,湖北 武汉 430205

摘 要:尽管在土壤污染扩散的高精度预测方面已取得一定进展,但如何在复杂环境中有效融合多维度因子并兼顾参数优化的全局搜索与局部精细能力,仍然是提升预测模型性能的关键。针对磷化工污染土壤扩散预测中多环境影响因子建模不足、单一优化算法易陷入局部最优等问题,提出一种融合差分进化(DE)与粒子群优化(PSO)预测方法DE-PSO。该方法通过定期样本采集与传感器实时监测获取多维度数据,采用线性回归与最小二乘法对传感数据进行校准。构建融合土壤温度、湿度、pH值等环境因子的污染扩散机理模型,并设计DE与PSO的交替迭代机制对模型关键参数进行协同优化。实验结果表明:在对镉、氟化物等磷化工典型污染物的扩散预测中,以镉为例,该方法的预测均方根误差(RMSE)低至0.033 9,决定系数达0.971,收敛迭代次数仅为70次,预测精度与计算效率均显著优于单一DE、单一PSO及传统遗传算法。该方法为复杂环境下土壤污染扩散的高精度、实时预测提供了新的技术路径。

关键词:土壤污染;磷化工;扩散预测;差分进化;粒子群优化
中图分类号:X53;X11;TP18 **文献标志码**:A **DOI**:10.19843/j.cnki.CN42-1779/TQ.202603017

Fusion of differential evolution and particle swarm optimization for predicting soil pollutants diffusion in phosphorus chemical industry

ZHANG Chuanli[1], *WU Peng*[*1], *LI Siyue*[2], *GAO Feng*[3], *LI Liang*[*4]
1. Hubei Digital Culture & Tourism Group Co., Ltd, Wuhan 430061, China;
2. School of Environmental Ecology and Biological Engineering, Wuhan Institute of Technology, Wuhan 430205, China;
3. President's Office, Wuhan Institute of Technology, Wuhan 430205, China;
4. School of Chemistry and Environmental Engineering, Wuhan Institute of Technology, Wuhan 430205, China

Abstract: Although certain progress has been made in high-precision prediction of soil pollutants diffusion, how to effectively integrate multi-dimensional factors in complex environments while balancing global search and local refinement capabilities of parameter optimization remains the key to improving the performance of prediction models. To address the problems of insufficient modeling of multiple environmental impact factors and the tendency of single optimization algorithms to fall into local optima in the prediction of soil pollutants diffusion in the phosphorus chemical industry, a prediction method integrating differential evolution and particle swarm optimization (DE-PSO) was proposed. Multi-dimensional data were obtained through regular

收稿日期:2026-03-30
基金项目:湖北省农业微生物产业发展重大专项揭榜挂帅项目(NYWSWZX2025-2027-09)
作者简介:张传利,硕士,工程师。Email:zclsingle@qq.com
***通信作者**:吴 鹏,硕士,架构师。Email:wp19851101@163.com
李 亮,博士,高级实验师。Email:LL121789574@163.com
引文格式:张传利,吴鹏,李思悦,等.融合差分进化与粒子群优化的磷化工污染土壤扩散预测方法[J].武汉工程大学学报,2026,48(3):261-269.

sample collection and real-time sensor monitoring, and the sensor data were calibrated using linear regression and the least squares method. A pollutant diffusion mechanism model integrating environmental factors such as soil temperature, humidity, and pH value was constructed, and an alternating iteration mechanism of DE and PSO was designed to collaboratively optimize the key parameters of the model. Results showed that in the diffusion prediction of typical phosphorus chemical industry pollutants such as cadmium and fluoride, the root mean square error (RMSE) of this method was as low as 0.033 9, the coefficient of determination reached 0.971, and the number of convergence iterations was only 70. Both the prediction accuracy and computational efficiency were significantly superior to those of single DE, single PSO, and traditional genetic algorithms. This method provides a new technical path for the high-precision, real-time prediction of soil pollutants diffusion in complex environments.

Keywords: soil pollution; phosphorus chemical industry; diffusion prediction; differential evolution; particle swarm optimization

磷化工生产过程中,磷石膏堆存、废水排放等环节易导致土壤中重金属(镉、铅、镍)及氟化物等典型污染物累积[1-2]。土壤污染物的迁移转化是一个受物理、化学多环境因子耦合调控的复杂动态过程[3]。构建高精度预测模型以揭示其扩散规律,是开展环境风险评估与制定治理决策的关键。

现有土壤污染扩散预测方法主要分为3类:(1)基于宏观污染指数的统计分析方法[4];(2)采用单一智能优化算法(如遗传算法、模拟退火算法)对扩散模型参数进行寻优的方法[5-7];(3)基于传感器实时监测数据进行动态分析与预测的方法[8]。上述方法在应用场景中均取得了良好效果,但面对复杂环境下的高精度预测需求,其在以下方面仍存在一定的局限:第一类方法对微观环境因子的耦合作用考虑不足[9];第二类方法中单一算法在高维建模环境中全局搜索与局部精细化的平衡能力有限[9];第三类方法中传感器数据易受环境因素干扰而产生系统偏差[10-11]。

针对上述问题,本研究在已有研究的基础上,尝试通过融合多环境因子建模、引入差分进化-粒子群协同优化算法、构建传感数据校准机制等途径,进一步探索提升土壤污染扩散预测精度与效率的技术路径。主要贡献包括:(1)建立双源数据采集与线性回归校准机制,降低传感器环境误差;(2)构建融合多环境因子的污染扩散机理模型;(3)设计差分进化算法(differential evolution,DE)-粒子群优化算法(particle swarm optimization, PSO)(DE-PSO)交替迭代优化策略,实现全局搜索与局部精细调整的优势互补。

1 DE-PSO融合优化策略

1.1 标准算法简述

PSO算法由Kennedy和Eberhart于1995年提出,模拟鸟群觅食行为[12-13]。将每个潜在解视为粒子,通过调整速度和位置进行迭代搜索,粒子根据自身历史最优(个体极值)和群体最优(全局极值)不断靠近,逐步收敛至全局最优解,本质是一种基于群体协作与信息共享的优化策略[14]。因其应用简单而高效,PSO被广泛应用于工程、机器学习等领域[14]。但标准PSO易陷入局部最优,催生了多种改进算法[15]。

DE算法由Storn和Price于1995年提出,是一种基于群体的随机搜索优化算法[16]。其核心是通过群体内个体的差分变异产生新个体,再通过适应度评估保留更优者,迭代直至收敛[17]。DE算法具有结构简单、鲁棒性强、收敛快等优点,广泛应用于约束优化、神经网络等领域[18]。相比遗传算法,DE算法的差分变异算子能更好地保持种群多样性,避免早熟收敛[19]。

1.2 DE-PSO交替迭代融合机制

DE-PSO混合算法并非简单叠加两种算法,而是基于两者的优势互补进行融合设计[20-21]。DE算法具有较强的全局搜索能力,能够有效维持种群多样性,避免陷入局部最优;PSO算法则利用个体极值引导策略,局部搜索效率高、收敛速度快。将两者结合,可实现全局探索与局部挖掘的动态平衡[22-24]。

本研究借鉴上述研究思路,设计DE全局优化协同PSO局部优化的交替迭代策略:在变异阶段采用DE的差分操作,避免种群过早陷入局部最优;在更新阶段借鉴PSO的速度-位置更新逻辑,让粒子在受群体信息引导的同时保留自身搜索记忆,实现优势互补。其交替迭代流程如下:

(1)DE全局搜索:执行标准DE算法迭代G_{DE}代,得到全局最优解;(2)PSO局部优化,将X_{DE}作为PSO初始种群中心,加入小范围随机扰动生成

初始粒子群，执行PSO算法迭代G_{PSO}代，得到局部最优解X_{PSO}；(3)交替迁移：将X_{PSO}作为下一轮DE的初始种群中心，重复上述过程；(4)收敛判断：满足收敛条件或达到最大交替次数时停止迭代。

该策略通过DE的全局搜索避免PSO陷入局部最优，通过PSO局部优化弥补DE后期收敛缓慢的不足。

2　数据采集与污染扩散建模

2.1　数据的采集与校准

本研究采用排污单位在生产运行阶段对其周边环境质量影响开展的自行监测数据，辅以传感器同步采集的土壤湿度、温度、pH值数据；每月在相同点位采集实验室样本作为校准基准。数据校准采用线性回归与最小二乘法。建立实验样本数据x_i与传感器数据k_i的线性关系：

$$k_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i \tag{1}$$

式(1)中，α为回归截距，β为回归系数，ε_i为第i个点位的随机误差项。采用最小二乘法求解回归参数α、β，使误差平方和$S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2$最小。校准后的传感器数据$kr_i$为：

$$kr_i = \alpha + \beta k_i \tag{2}$$

2.2　融合环境因子的污染扩散模型

为了便于理解后续模型构建过程，首先对本节涉及的物理变量进行统一说明：$C(x,t)$表示t时刻x处的污染物质量浓度，单位为mg/kg；D为扩散系数，单位为m^2/s，表征污染物在土壤介质中的扩散迁移能力；v为对流流速，单位为m/s，表征污染物随土壤水分运动的迁移速度；t为时间，单位为s；x, y, z为空间坐标，单位为m；M_0为污染物瞬时注入的总质量，单位为mg；$\delta(x)$为Dirac delta函数，描述瞬时点源释放条件。

基于菲克第二定律，污染物在三维空间中的扩散满足：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla\cdot(D\nabla C) - \nabla\cdot(vC) \tag{3}$$

假设均匀介质、扩散系数为常数，式(3)可简化为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C - v\cdot\nabla C \tag{4}$$

在磷化工污染场地中，地下水流向或地表径流方向为主导迁移方向，且监测点沿该方向呈线性布设，因此可采用一维对流-扩散模型进行近似。以x方向为例，建立一维对流-扩散方程：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v\frac{\partial C}{\partial x} \tag{5}$$

初始条件：$C(x,0) = M_0\delta(x)$，表示在$x = 0$处瞬时注入总质量为M_0的污染物，其中，$\delta(x)$为Dirac delta函数。边界条件：$\lim_{|x|\to\infty} C(x,t) = 0$，即无穷远处浓度为0。

采用傅里叶变换法求解上述偏微分方程。对空间变量x进行傅里叶变换$\hat{C}(k,t)=\int_{-\infty}^{\infty} C(x,t)e^{-ikx}dx$，将偏微分方程转化为常微分方程：

$$\frac{\partial \hat{C}}{\partial t} = -Dk^2\hat{C} - ikv\hat{C} \tag{6}$$

结合初始条件的傅里叶变换$\hat{C}(k,0) = M_0$，求解得：

$$\hat{C}(k,t)=M_0 e^{-(Dk^2 + ikv)t} \tag{7}$$

对上述结果进行逆傅里叶变换，得到解析解：

$$C(x,t) = \frac{M_0}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{4Dt}\right) \tag{8}$$

令$M_0 = 1$(即考虑单位质量污染物瞬时注入)，得到本研究采用的基础扩散方程：

$$C_{(x,t)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_t}}\exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{4D_t}\right) \tag{9}$$

式中：$C_{(x,t)}$为t时刻x空间位置的镉浓度(mg/kg)，D为扩散系数(m^2/s)，v为土壤中的对流流速(m/s)，t为时间(s)，x为空间位置(m)。

2.3　融合环境因子的参数函数

考虑土壤温度(T)、pH值(P)、湿度(W)、颗粒度(L)、空气流速(K)对扩散过程的影响，建立扩散系数D与流速v的量化函数。

(1)扩散系数函数：

$$D = D_0\cdot f(T,P,W,L,K) \tag{10}$$

(2)流速函数：

$$v = v_0\cdot g(T,P,W,L,K) \tag{11}$$

式中：D_0、v_0为标准环境下的初始扩散系数与初始流速；$f(\cdot)$、$g(\cdot)$为环境因子的非线性映射函数，通过实验数据拟合决定。

在上述环境因子中，湿度(W)和pH值(P)对污染物扩散的影响最为显著，具体表现为3点：

一是湿度的影响。湿度W与降雨量密切相关，是影响污染物迁移的关键因子。湿度升高会增加土壤孔隙水的含量，一方面提高污染物在土壤溶液中的溶解度和扩散速率(即f函数值增大，D增大)；另一方面增强对流迁移能力(即g函数值增大，v增大)。然而，湿度过高也可能因稀释效应导致表观浓度降低，这解释了4.2.1节中镉浓度与湿

度呈负相关(r=−0.53)的实验现象。

二是pH值的影响。pH值P通过改变重金属离子的形态和土壤胶体表面电荷,调控污染物在固−液两相间的吸附−解吸平衡。在酸性条件下(pH值降低),镉、铅等重金属的溶解度增强,更多离子释放到土壤溶液中,导致g函数值增大,v升高,污染物迁移加快;在碱性条件下,重金属形成氢氧化物沉淀或被土壤胶体吸附,迁移能力减弱。

三是其他因子的影响。土壤温度T影响分子热运动速率和化学反应速率,温度升高通常增强扩散系数D;颗粒度L影响土壤孔隙结构和渗透性,细颗粒土壤对污染物的吸附能力较强,扩散和迁移能力相对减弱;空气流速K影响土壤表层水分的蒸发和气体交换,间接调控污染物的挥发和迁移过程。

3 DE-PSO融合优化算法设计

本研究设计DE全局优化结合PSO局部优化的交替迭代策略,先通过DE算法搜索模型参数的全局较优解,将其作为PSO算法的初始位置,再通过PSO完成参数的局部精细调整,反复交替直至满足收敛条件,实现模型参数的最优求解。优化的目标参数为D_0、v_0,即污染扩散模型的核心参数。

3.1 DE的全局优化

DE算法采用DE/rand/1/bin策略,通过变异、交叉、选择操作更新种群,搜索全局较优参数组合,步骤如下:

(1)种群初始化:设置种群规模为N,随机生成N组初始解$X=[D_0^1, v_0^1]$,$[D_0^2, v_0^2]$,$[D_0^n, v_0^n]$,解的范围根据土壤污染实际场景设定。

(2)适应度函数定义:以模型预测浓度与实际观测浓度的绝对误差和为适应度函数,值越小表示解的性能越优,表达式为:

$$\text{fitness}=\sum_{i=1}^{m}|C_{\text{obs}}(x_i,t_i)-C_{\text{model}}(x_i,t_i)| \quad (12)$$

式中,$C_{\text{obs}}(x_i,t_i)$为t_i时刻x_i位置的污染物实际观测浓度,$C_{\text{model}}(x_i,t_i)$为模型预测浓度,$m$为数据样本量。

(3)变异操作:对第i个个体x_i,选取3个不同个体X_{r1}、X_{r2}、X_{r3},生成变异向量$\boldsymbol{V}_i$:

$$\boldsymbol{V}_i=X_{r1}+F\cdot(X_{r2}-X_{r3}) \quad (13)$$

式中F为变异因子,取0.5。

(4)交叉操作:将变异向量$\boldsymbol{V}_i$与原个体X_i进行交叉,生成试验向量$\boldsymbol{U}_i$,交叉概率取0.7。

(5)选择操作:对比试验向量$\boldsymbol{U}_i$与原个体X_i的适应度值,保留适应度更优的个体,组成新一代种群。

(6)收敛判断:重复上述步骤,直至适应度达到预设的初步阈值,得到全局较优解X_{de}。

3.2 PSO的局部优化

将DE算法得到的全局较优解X_{DE}作为PSO算法的初始粒子位置,通过粒子的速度与位置迭代,完成参数的局部精细优化,步骤如下:

(1)粒子初始化:设置粒子群规模与DE种群规模一致,将X_{DE}作为粒子初始位置$P_i=[D_i, V_i]$,随机初始化粒子速度V_i,速度范围根据参数特性设定;

(2)速度与位置迭代:粒子通过跟踪个体最优位置P_i^{best}与全局最优位置P_g^{best}更新速度与位置,迭代公式为:

$$v_i^{n+1}=w\cdot v_i^n+c_1\cdot r_1\cdot(P_i^{\text{best}}-P_i^n)+c_2\cdot r_2\cdot(P_g^{\text{best}}-P_i^t) \quad (14)$$

$$P_i^{t+1}=P_i^t+v_i^{t+1} \quad (15)$$

式中:w为惯性权重,取0.8;c_1、c_2为学习因子,均取0.2;r_1、r_2为[0,1]范围内的随机数,n为迭代次数;

(3)最优位置更新:若粒子当前位置的适应度值优于个体最优位置P_i^{best},则更新P_i^{best};若所有粒子的P_i^{best}优于全局最优位置P_g^{best},则更新P_g^{best};

(4)收敛判断:重复迭代,直至适应度值达到预设最终阈值,得到局部最优解。

3.3 DE-PSO交替迭代优化的具体实现

DE-PSO交替迭代优化的核心思想是将DE的全局探索能力与PSO的局部开发能力有机集合,通过多次交替实现参数空间的充分搜索与精细调整。具体实现流程如下:

(1)初始化。设置最大交替次数$t_{\max}=10$,当前交替次数$t=0$,收敛精度$\varepsilon=0.01$。

(2)DE全局搜索。执行标准DE算法,迭代$G_{\text{DE}}=50$,得到全局较优解$X_{\text{DE}}^{(t)}$。DE的变异算子保证了种群多样性,能够探索参数空间中的不同区域,避免过早陷入局部最优。

(3)PSO局部精细优化。将$X_{\text{DE}}^{(t)}$作为PSO的初始种群中心,以$X_{\text{DE}}^{(t)}$为基础加入小范围随机扰动生成初始粒子群(扰动幅度为参数范围的5%),执行标准PSO算法迭代$G_{\text{PSO}}=30$代,得到局部最优解$X_{\text{PSO}}^{(t)}$。以DE解为起点进行局部搜索,能够充分利用PSO的快速收敛特性,同时避免随机初始化带来的不确定性。

(4)交替与迁移。将$X_{\text{PSO}}^{(t)}$作为下一轮DE算法的初始种群中心,同样加入小范围随机扰动生成新的DE初始种群,重复执行步骤2(DE全局搜索)

和步骤3（PSO局部优化）。这种迁移策略将PSO优化后的优质解信息传递回DE种群，实现两种算法的信息共享与协同进化。

（5）收敛判断。若$|fitness(X_{PSO}^{(t)})-fitness(X_{PSO}^{(t-1)})<\varepsilon$或$t \geqslant t_{max}$，则停止迭代，输出最终最优解$X^* = X_{PSO}^{(t)}$；否则$t = t + 1$，转步骤2。

上述交替策略与现有研究中的混合方法具有一致性[22-23]，通过DE的全局搜索避免PSO的早熟收敛，通过PSO的局部优化弥补后期收敛缓慢的不足，实现优势互补。

3.4　模型性能评价

为验证所提DE-PSO融合方法的优越性，选取单一DE算法、单一PSO算法、传统遗传算法（genetic algorithms，GA）作为对比方法，在相同实验数据与参数设置下，从四个维度评价模型性能：（1）均方根误差（root mean square error，RMSE），反映预测值与实际值的整体误差，值越小精度越高；（2）平均绝对误差（mean absolute error，MAE），反映预测值与实际值的平均偏差，值越小精度越高；（3）决定系数（R^2），反映模型的拟合程度，值越接近1拟合效果越好；（4）收敛迭代次数：反映算法的计算效率，值越小收敛速度越快。

各指标计算公式如下：

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(C_{obs,i} - C_{model,i})^2} \tag{16}$$

$$\mathrm{MAE} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}|C_{obs,i} - C_{model,i}| \tag{17}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{m}(C_{obs,i} - C_{model,i})^2}{\sum_{i=1}^{m}(C_{obs,i} - \overline{C_{obs}})^2} \tag{18}$$

式中，$\overline{C_{obs}}$为实际观察浓度的平均值。

4　结果与讨论

4.1　数据与设置

实验数据采用2023年3月至2023年11月的土壤污染监测数据，涵盖9个监测点的镉、铅、氟化物浓度及温度、湿度、pH值等环境因子。数据按8∶2划分为训练集和测试集。

对比模型包括：单一PSO、单一DE、GA优化模型及传统BP神经网络模型。所有模型的输入层为4个环境因子，输出层为污染物浓度，隐含层结构统一设置为3层（神经元数量均为12个）。

4.2　数据分析

4.2.1　预测精度对比　实验数据的统计结果显示，2类污染物在9个监测点的浓度分布存在显著差异（见表1）：

氟化物质量浓度统计：监测点9均值最高（0.061 1 mg/kg），监测点1均值最低（0.006 5 mg/kg）；镉浓度统计：监测点8的均值最高（0.074 9 mg/kg），监测点1的均值最低（0.021 2 mg/kg）。Pearson相关性分析显示：氟化物浓度与降雨量呈显著负相关（$r = -0.68$，$p < 0.01$），镉浓度与湿度呈显著负相关（$r = -0.53$，$p < 0.05$）。这一现象可以从扩散模型中得到解释：如式（10）和式（11）所示，降雨量的增加会提高土壤湿度，进而影响扩散系数D与对流流速v的函数$f(T, P, W, L, K)$和$g(T, P, W, L, K)$，湿度的升高通常增强污染物在土壤溶液中的扩散与迁移能力，但在某些条件下也可能因稀释作用或吸附增强而降低表观浓度，从而呈现负相关。

表1　主要污染物浓度统计特征

Table 1　Statistical characteristics of major pollutant concentrations　mg/kg

污染物	监测点	均值	标准差	最大值	最小值
氟化物	1	0.006 5	0.001 6	0.010 1	0.003 6
	2	0.018 4	0.008 9	0.043 5	0.007 1
	3	0.020 4	0.008 1	0.039 2	0.010 6
	4	0.021 4	0.011 3	0.054 1	0.009 0
	5	0.020 6	0.009 4	0.041 3	0.007 4
	6	0.031 6	0.014 8	0.072 8	0.012 2
	7	0.027 3	0.011 7	0.056 4	0.010 3
	8	0.054 8	0.025 9	0.119 1	0.021 3
	9	0.061 1	0.026 7	0.131 8	0.025 3
镉	1	0.021 2	0.005 1	0.029 4	0.000 8
	2	0.044 3	0.015 4	0.078 0	0.012 8
	3	0.037 9	0.012 7	0.059 1	0.000 1
	4	0.049 1	0.019 8	0.097 1	0.020 5
	5	0.044 7	0.019 1	0.109 8	0.021 5
	6	0.048 6	0.015 3	0.079 6	0.000 1
	7	0.045 3	0.014 3	0.074 6	0.002 6
	8	0.074 9	0.022 5	0.114 4	0.000 1
	9	0.055 5	0.017 5	0.080 0	0.003 9

4.2.2　算法性能对比　不同算法的预测性能指标对比见表2，结合实验图片（图1和图2为误差对比柱状图，图3和图4为收敛曲线图）分析如下：

预测精度：从图1、图2（预测误差对比图）可见，DE-PSO混合算法在3类污染物预测中均表现最优，氟化物预测的RMSE为0.008 2、MAE为0.008、R^2为0.983；镉预测的RMSE为0.033 9、MAE为0.022 7、R^2为0.971，均显著优于其他对比模型。相比单一PSO算法，DE-PSO的RMSE降低

表2 不同算法预测性能对比(以氟化物、镉为例)

Table 2 Comparison of prediction performance of different algorithms (taking fluoride and cadmium as examples)

算法	污染物	RMSE	MAE	R^2	收敛迭代次数
DE-PSO	氟化物	0.008 2	0.008 0	0.983	60
	镉	0.033 9	0.022 7	0.971	70
PSO	氟化物	0.009 8	0.009 6	0.951	50
	镉	0.039 8	0.032 6	0.934	60
DE	氟化物	0.011 4	0.011 2	0.967	75
	镉	0.046 1	0.037 4	0.948	85
GA	氟化物	0.013 0	0.012 8	0.942	100
	镉	0.052 0	0.042 3	0.921	100

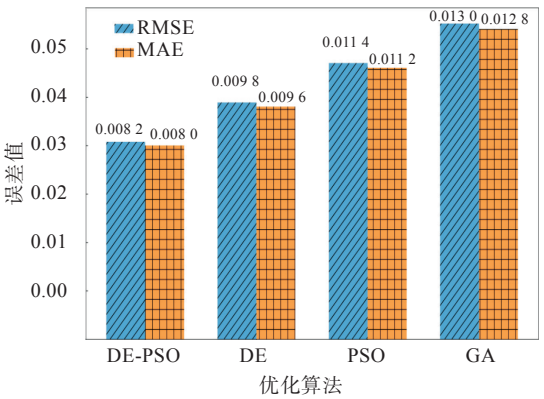

图1 氟化物预测误差对比图

Fig. 1 Comparison of prediction errors for fluoride

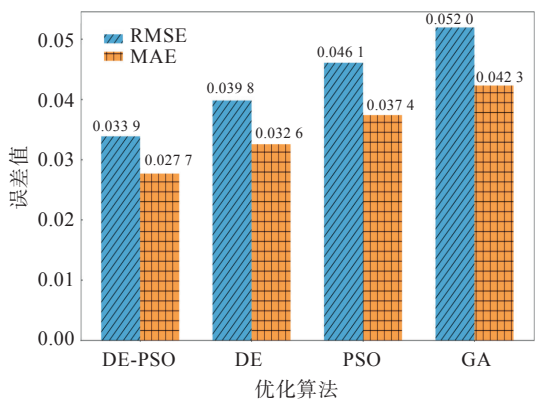

图2 镉预测误差对比图

Fig. 2 Comparison of prediction errors for cadmium

了16.3%(氟化物)、14.8%(镉),证明混合算法的优化效果显著。

收敛速度:由图3、图4(收敛曲线图)可见,以氟化物为例,DE-PSO算法在迭代60次后基本收敛,而单一DE算法需迭代75次以上,PSO算法虽迭代50次后快速收敛,但后期出现精度波动。DE-PSO的收敛速度兼顾了PSO的快速性与DE的稳定性,避免了“早熟收敛”与“收敛过慢”的问题。

鲁棒性:在不同监测点的交叉验证中,DE-PSO算法的预测误差变异系数(coefficient of variation,CV)为3.2%(氟化物)、4.1%(镉),低于

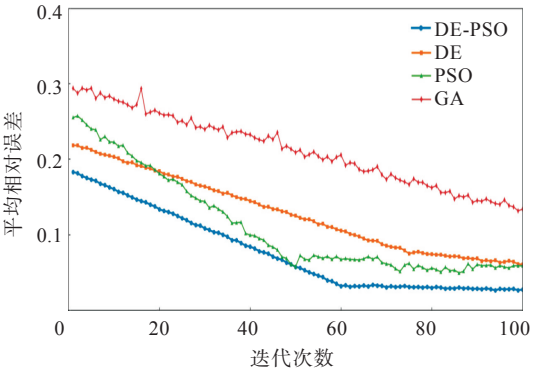

图3 氟化物收敛曲线图

Fig. 3 Convergence curve for fluoride

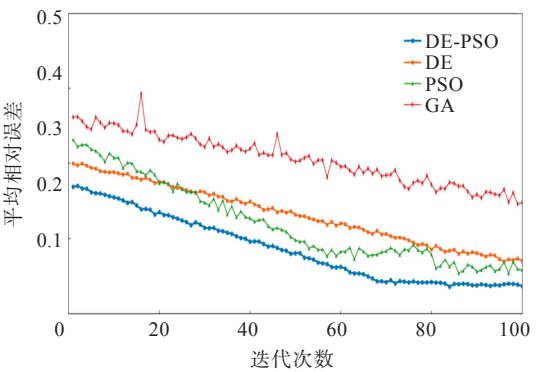

图4 镉收敛曲线图

Fig. 4 Convergence curve for cadmium

单一DE(5.8%、6.3%)与PSO(4.9%、5.7%)(见图5、图6),说明其在不同空间位置的污染预测中具有更强的稳定性,更适合复杂区域的土壤污染扩散模拟。

4.2.3 时空预测结果分析 时间维度上,2023年1月到3月氟化物浓度整体呈波动下降趋势,监测点9的预测值与实际值拟合度最高(R^2=0.983),在2月17日降雨量突增(1.146 mm)后,预测质量浓度为0.046 79 mg/kg,实际质量浓度为0.047 57 mg/kg,误差仅0.000 78 mg/kg,说明算法能有效响应环境因子突变对污染扩散的影响(表3)。

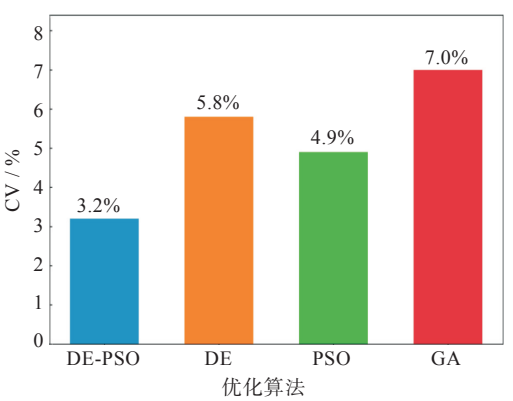

图5 误差变异系数对比图-氟

Fig. 5 Comparison of the coefficient of variation of the error for fluorine

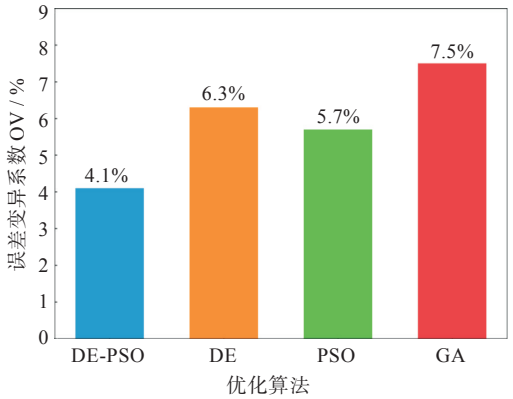

图6　误差变异系数对比图-镉

Fig. 6　Comparison of the coefficient of variation of the error for cadmium

表3　一周（2023年2月17日—2月24日）浓度预测

Table 3　One-week concentration forecast (February 17–24, 2023)

污染物	监测点	实际浓度	预测浓度	误差	拟合度
氟化物	1	0.015 98	0.015 10	0.000 87	0.945 4
	2	0.026 49	0.025 30	0.001 18	0.955 2
	3	0.025 39	0.024 54	0.000 84	0.966 7
	4	0.025 09	0.023 71	0.001 37	0.945 2
	5	0.022 05	0.021 10	0.000 94	0.957 2
	6	0.036 74	0.035 47	0.001 26	0.965 5
	7	0.029 33	0.028 52	0.000 80	0.972 6
	8	0.055 54	0.053 55	0.001 98	0.964 2
	9	0.047 57	0.046 79	0.000 77	0.983 7
镉	1	0.004 61	0.004 27	0.000 33	0.927 9
	2	0.009 95	0.009 54	0.000 40	0.959 1
	3	0.010 64	0.009 67	0.000 96	0.908 9
	4	0.009 37	0.009 15	0.000 21	0.977 1
	5	0.009 19	0.008 74	0.000 44	0.952 1
	6	0.018 7	0.018 12	0.000 57	0.969 1
	7	0.015 28	0.014 80	0.000 47	0.968 7
	8	0.032 32	0.031 62	0.000 69	0.978 6
	9	0.028 57	0.028 22	0.000 34	0.987 8

空间维度：预测结果显示污染物浓度从高值区（如监测点9、监测点5）向周边呈梯度递减，扩散范围与实际监测的空间分布一致。以镉污染为例，监测点5周边3个监测点（4、6、7）的预测浓度分别为0.091 50、0.018 12、0.014 80 mg/kg，实际质量浓度为0.009 37、0.018 7、0.015 28 mg/kg，空间分布趋势吻合度达96.96%，证明算法能精准模拟污染的空间扩散规律。

实际应用价值：通过DE-PSO算法预测，可提前3~7 d预判污染物扩散范围，如针对监测点9的氟化物高浓度区域，预测3 d后污染将扩散至监测点8周边，为土壤污染防控（如隔离措施、净化处理）提供科学依据。

4.3　结　论

（1）算法层面：DE-PSO通过融合DE的全局搜索优势与PSO的局部优化能力，解决了单一智能算法在土壤污染扩散预测中“早熟收敛”或“精度不足”的问题，在收敛速度、预测精度与鲁棒性上均优于传统算法与单一智能算法，是适配土壤污染扩散复杂非线性特征的高效优化方法。

（2）数据层面：实验数据验证表明，氟化物、镉等污染物浓度与降雨量、湿度等环境因子存在显著相关性，DE-PSO算法能有效捕捉这种相关性，实现污染物浓度的时空精准预测，预测误差控制在0.002 mg/kg以内，R^2均高于0.90。

5　讨论

5.1　主要发现

本研究提出的基于DE-PSO融合算法的土壤污染扩散预测方法，通过双源数据采集与线性回归校准消除了传感数据的环境误差，构建了融合多环境因子的扩散机理模型，并利用DE全局搜索与PSO局部优化的交替迭代实现了模型参数的最优求解，最终实现了土壤污染扩散的高精度、快速预测。以镉的预测为例，其预测RMSE低至0.033 9，R^2达0.971，收敛迭代次数仅70次，性能显著优于单一优化算法与传统遗传算法。

5.2　结果分析

（1）数据校准是高精度预测的基础：环境数据受环境温度、湿度等因素干扰存在系统误差，本研究采用线性回归+最小二乘法校准方法，以定期监测的样本数据为基准，有效修正了传感数据的偏差，校准后数据的误差指标降幅超85%，为后续模型训练提供了高质量的数据基础。

（2）融合环境因子完善了扩散机理：现有模型多忽略环境因子对扩散过程的影响，本研究建立的扩散系数、流速与土壤pH值等因子的量化函数，更贴合土壤污染扩散的实际物理化学过程，从机理上提升了模型的预测能力。在本模型中，湿度W与降雨量密切相关，是影响污染物迁移的关键因子；pH值通过影响重金属的吸附-解吸平衡，间接调控污染物在固-液两相间的分配。

（3）DE-PSO融合算法兼顾精度与效率：DE算法的全局搜索能力有效避免了PSO算法易陷入局部最优的问题，而将DE的全局较优解作为PSO的初始位置，大幅减少了PSO的迭代次数，同时PSO

的局部精细优化弥补了DE算法后期误差下降缓慢的不足，交替迭代策略实现了全局搜索与局部优化的优势互补，因此融合算法在预测精度与计算效率上均实现了提升。

5.3 模型关键参数的物理意义及优化讨论

本模型的核心待优化参数为基准扩散系数D_0与基准对流流速v_0，以及环境因子映射函数$f(T,P,W,L,K)$和$g(T,P,W,L,K)$中的权重系数。这些参数共同决定了污染物在土壤中的迁移速率与方向。

(1)基准参数(D_0,v_0)的物理意义。D_0表征在标准环境(如温度20 ℃、湿度25%、pH=7、颗粒度中值、空气流速0.1 m/s)下污染物在土壤孔隙水中的分子扩散能力；v_0反映标准条件下地下水或毛细作用驱动的对流输运强度。优化算法通过最小预测浓度与实际浓度之间的误差(式3)，自动搜索最优的D_0,v_0组合，使模型能够匹配不同监测点的浓度分布(如表1所示的空间差异)。

(2)环境因子权重的影响逻辑。函数f和g通过加权组合将多环境因子耦合进扩散过程。例如，若湿度W的权重较高，则模型会赋予土壤含水量对外扩散系数更大的调控作用—湿度升高时，f可能增大或减小(取决于正负相关关系)，从而改变D。表3中降雨后氟化物浓度下降的实际观测结果，可解释为：历史监测数据(如表1的浓度分布与同步记录的环境因子)的驱动下，自动学习各因子的权重分配，使得预测误差最小。这一过程避免了人为赋权的主观性。

(3)参数敏感性的讨论方向。虽然本研究未进行系统的参数敏感性分析，但从图5、图6的误差变异系数可知，DE-PSO优化后的模型在不同监测点间表现更稳定(CV值更低)，间接说明优化后的参数组对空间异质性的适应能力更强。后续研究可进一步采用偏秩相关系数或Sobol指数法，定量评估D_0、v_0及各环境因子权重对输出浓度的全局敏感性，从而识别主导控制参数。

5.4 研究局限性

本研究虽取得了较好的实验结果，但仍存在以下不足之处：

(1)实验数据为模拟工业污染区数据，未开展现场实测验证，实际场地的水文地质条件(如土壤孔隙度、地下水流动)可能对模型预测效果产生影响。

(2)扩散模型仅考虑了物理化学因子，未纳入生物降解、植物吸收、微生物转化等生物因素。

(3)算法的超参数(变异因子F，惯性权重w)均为经验设置，未设计自适应调整策略。

6 结论与展望

本研究针对现有土壤污染扩散预测方法的精度低、收敛慢、忽视多环境因子等问题，提出了一种基于DE-PSO融合算法的预测方法，通过双源数据采集与线性回归校准、融合多环境因子的机理建模、DE-PSO交替迭代参数优化，实现了土壤污染扩散的高精度、快速预测。实验结果表明，该方法能有效降低传感数据的环境误差，以镉为例，其预测RMSE为0.033 9，R^2达0.971，收敛迭代次数仅70次，显著优于单一DE、单一PSO及传统GA算法。该方法为复杂环境下土壤污染扩散的高精度、实时预测提供了新的技术路径。

(1)开展现场实测验证，结合水文地质参数优化模型。

(2)引入生物降解、地下水流动等因素，构建物理-化学-生物耦合的多因子扩散模型。

(3)设计自适应超参数调整策略，使算法参数能根据迭代过程动态调整。

(4)开发可视化预测系统：基于本研究方法开发集数据采集、校准、预测、预警于一体的土壤污染扩散预测可视化系统。

参考文献

[1] ARHOUNI F E, HAKKAR M, OUAKKAS S, et al. Evaluation of the physicochemical, heavy metal and radiological contamination from phosphogypsum discharges of the phosphoric acid production unit on the coast of El Jadida Province in Morocco [J]. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 2023, 332(10): 4019-4028.

[2] BOUARGANE B, LAABOUBI K, BIYOUNE M G, et al. Effective and innovative procedures to use phosphogypsum waste in different application domains: review of the environmental, economic challenges and life cycle assessment [J]. Journal of Material Cycles and Waste Management, 2023, 25(3): 1288-1308.

[3] HUANG M Y, WU T L, CUI P X, et al. Production of hydroxyl radicals (•OH) and its effect on cadmium solubility during soil redox fluctuations [J]. ACS ES&T Water, 2025, 5(4): 1663-1672.

[4] KOWALSKA J B, MAZUREK R, GĄSIOREK M, et al. Pollution indices as useful tools for the comprehensive evaluation of the degree of soil

contamination：a review［J］. Environmental Geochemistry and Health，2018，40(6)：2395-2420.
［5］ 王薇，曾光明，秦肖生. 遗传模拟退火算法在水质模型参数估值中的应用研究[J]. 环境工程，2003，21(4)：60-62.
［6］ 王伟，何东之. 基于非线性和遗传变异的灰狼优化算法[J]. 合肥工业大学学报(自然科学版)，2021，44(2)：199-205.
［7］ 孙士平，吴建军. 直接搜索模拟退火算法的自适应改进[J]. 计算机工程与应用，2015，51(23)：31-37.
［8］ LOCONSOLE D，ELIA M，CONVERSA G，et al. Soil moisture sensing technologies：principles，applications，and challenges in agriculture［J］. Agronomy，2025，15(12)：2788.
［9］ 周凤玺，罗玥，马强. 温度梯度作用下非饱和土中铅离子迁移机理研究[J]. 岩土工程学报，2023，45(9)：1822-1830.
［10］ 韩束丹，田雨波，李睿，等. 融合随机因子的协方差自适应进化策略[J]. 江苏科技大学学报(自然科学版)，2022，36(3)：59-63.
［11］ BANERJEE P，BEHERA P，BANSODE S，et al. Performance analysis of soil sensors：accuracy，variability，and repeatability［C］//2025 IEEE Applied Sensing Conference（APSCON）. Hyderabad，India：IEEE，2025：311-314.
［12］ GRENZDÖRFFER G J，WIENKEN J S，STEIGER A. Spatial and temporal field-scale accuracy assessment of a multi-sensor spade for *in situ* soil diagnostics：performance and limitations of the stenon FarmLab for precision agriculture［J］. Sensors，2025，25(24)：7430.
［13］ SALGOTRA R，CHAUDHARY R，VERMA P，et al. The rise of particle swarm optimization：a systematic bibliometric & thematic review（1995–2025）［J］. Archives of Computational Methods in Engineering，2026：10532.
［14］ SHARMA R，MATHARU J S，PARMAR K S. A survey on particle swarm optimization：evolution，adaptations and practical implementations［J］. Applied Soft Computing，2026，186：114016.
［15］ ABUALIGAH L. Particle swarm optimization：advances，applications，and experimental insights［J］. Computers，Materials & Continua，2025，82(2)：1539-1592.
［16］ XU H R，DENG Q W，ZHANG Z Y，et al. A hybrid differential evolution particle swarm optimization algorithm based on dynamic strategies［J］. Scientific Reports，2025，15：4518.
［17］ OPARA K R，ARABAS J. Differential evolution：a survey of theoretical analyses［J］. Swarm and Evolutionary Computation，2019，44：546-558.
［18］ YANG Y，CHEN Y H，WANG Y C，et al. Modelling a combined method based on ANFIS and neural network improved by DE algorithm：a case study for short-term electricity demand forecasting［J］. Applied Soft Computing，2016，49：663-675.
［19］ ALJAIDI M，JANGIR P，ARPITA，et al. A two phase differential evolution algorithm with perturbation and covariance matrix for PEMFC parameter estimation challenges［J］. Scientific Reports，2025，15：8676.
［20］ 朱武. 基于种群自适应策略的差分演化算法及其应用研究[D]. 上海：东华大学，2013.
［21］ 辛斌，陈杰. 粒子群优化与差分进化混合算法的综述与分类[J]. 系统科学与数学，2011，31(9)：1130-1150.
［22］ YU X B，CAO J，SHAN H Y，et al. An adaptive hybrid algorithm based on particle swarm optimization and differential evolution for global optimization［J］. The Scientific World Journal，2014，2014(1)：215472.
［23］ SHANG J，LI G Y. A hybrid composite differential evolution and multiobjective particle swarm optimization evolutionary algorithm and its application［J］. IEEE Access，2024，12：74417-74431.
［24］ 马乐杰，邹德旋，李灿，等. 融合差分进化和Sine混沌的改进粒子群算法[J]. 计算机工程与应用，2024，60(19)：80-96.

本文编辑：张　瑞