

土壤铬的航空高光谱间接反演模型及可迁移性研究

赵宁博, 秦凯*, 赵英俊, 杨越超

核工业北京地质研究院遥感信息与图像分析技术国家级重点实验室, 北京 100029

摘要 铬(Cr)是我国东北黑土区土壤重金属污染评价中的主要目标元素之一,随着航空高光谱技术的引入,Cr含量的高光谱反演具备了大范围应用的数据基础,其中影响调查质量的关键是高光谱模型的精度及应用范围。常用的建模方法是利用各类统计学手段进行光谱特征提取并建模,局限性表现为建模结果受样本选择的影响较大,模型泛化能力不强。研究以土壤Cr的赋存规律为切入点,设计了一种新的基于Cr影响因素及光谱特征的间接反演模型,改善了模型在不同地区的适用性。选择黑龙江省建三江和海伦两个研究区,高光谱数据来自CASI/SASI航空高光谱成像系统,波段范围380~2450 nm,建三江和海伦研究区地面采样数量分别为225个和121个,分析获得土壤Cr元素及SOM, N, P, K₂O, SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, CaO, MgO, Na₂O和pH等理化参数,建模方法采用偏最小二乘法。Cr的赋存规律分析结果表明,Cr在两个研究区均表现为与Al₂O₃, Fe₂O₃, MgO, K₂O和pH呈极显著的正相关关系,与SiO₂, Na₂O和SOM呈极显著的负相关关系,该特征为间接反演模型的建立提供了基础。两个地区Cr的光谱特征分析结果共同表明,光谱反射率经变量标准化(SNV)变换后与Cr含量的相关性最明显,特征波段为1520, 2195, 2210和2225 nm。将光谱SNV变换后的特征波段作为纯光谱模型自变量,将SNV特征波段和上述与Cr密切相关的土壤组分作为间接反演模型的自变量,建模结果显示,相比于纯光谱模型,建三江研究区的间接反演模型将建模R²由0.643提升到了0.751,验证R²由0.571提升到了0.687,海伦研究区的间接反演模型将建模R²由0.537提升到了0.676,验证R²由0.471提升到了0.643,间接模型相应的均方根误差(RMSE)也得到了降低,可见间接反演模型明显提升了Cr的反演精度。两个研究区之间的模型迁移性实验结果表明,纯光谱模型的可迁移性较差,模型迁移后实测与预测值的回归R²接近于0,而间接模型在两个研究区间的迁移能力得到了显著提升,海伦的间接反演模型应用到建三江时,实测与预测值的回归R²达到0.5975,而建三江的间接模型应用到海伦时,回归R²为0.5773。研究结果可为土壤Cr在不同地区的大范围反演制图提供一种新的途径。

关键词 铬;航空高光谱;东北黑土地;偏最小二乘法;反演

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)05-1617-08

引言

Cr是土壤中主要的重金属元素之一,土壤Cr污染直接影响着粮食安全和人体健康,具有明显的致癌致畸作用。工业生产活动产生的含Cr“三废”加剧着土壤Cr污染的蔓延,因此,土壤Cr含量调查是土壤质量评价工作中的重要内容。

土壤Cr含量传统的调查方式主要是依靠地球化学调查,局限性是工作周期长、调查成本较高,高光谱技术具有时效性强、操作便利等优势,近年来在土壤Cr含量反演中受到

了关注。Cr元素作为微量元素,自身的光谱特征较为微弱,因此研究人员通过不同的数理统计方法进行Cr元素的光谱特征提取与反演建模,例如吴明珠等^[1]通过倒数、微分等光谱变换提取了Cr的敏感波段;张明月等^[2]利用反向光谱吸收积分改善了Cr含量反演模型的精度和稳定性;王敬哲等^[3]利用分数阶微分进行光谱预处理后提升了反演精度;路杰晖等^[4]利用灰色关联度修正模型对Cr的定量反演取得了较好效果。

上述研究中针对土壤Cr的高光谱反演采用了不同的数学变换与建模方法,但共同点是基于单个研究区数据利用光

收稿日期:2020-05-26,修订日期:2020-09-02

基金项目:国家自然科学基金项目(41602333),中国地质调查局兴凯湖平原及松辽平原西部土地质量地球化学调查(DD20190520)资助

作者简介:赵宁博,1985年生,核工业北京地质研究院遥感信息与图像分析技术国家级重点实验室高级工程师

e-mail: zhaoningbo1985@126.com * 通讯作者 e-mail: h_rs_qk@163.com

谱信息直接进行建模,尚未在多个地区进行对比研究。由于不同地区的土壤质地、矿物、养分、土地利用类型等因素均存在差异,会直接或间接地影响土壤光谱,导致同一模型在不同研究区的应用效果出现较大差异,从而影响模型的应用范围。

提升土壤 Cr 反演模型精度及泛化能力的途径之一是研究 Cr 在不同地区土壤中的赋存特征,将共性的影响因素与特征光谱共同作为模型变量参与计算,以间接形式开展建模,并在不同研究区间开展模型迁移性评价。目前关于 Cr 的间接高光谱建模及不同地区的迁移性研究的报道较少。

Cr 在土壤中存在多种价态,以 Cr(III)和 Cr(VI)两种价态为主,Cr(VI)毒性较高,活动性强,Cr(III)毒性较小,赋存形式较为稳定,两种价态的吸附和解吸受土壤 pH、有机质(SOM)、矿物等多种因素的控制,直接关系到 Cr 的含量分布及对环境的威胁程度。相对于 Cr 来说,有机质、铁锰氧化物、粘土矿物等土壤组分具有较强的光谱特征,能够为 Cr 的光谱信息提取提供新的途径。这为 Cr 的间接反演提供了理论依据。

在现有研究的基础上利用航空高光谱开展土壤 Cr 的间接反演建模及模型迁移性评价;选择黑龙江省建三江和海伦两个黑土区作为研究区,在获取航空高光谱数据与地面数据的基础上,基于两个研究区的共性特征开展 Cr 的赋存规律分析与光谱特征提取,建立间接反演模型,并在两个研究区之间进行模型的迁移性评价,探讨该方式对提高 Cr 反演模型的精度及泛化能力的有效性,为提升航空高光谱技术对土壤 Cr 含量的实际调查能力提供新的手段。

1 实验部分

1.1 研究区概况

研究区分别位于我国黑龙江省建三江地区和海伦地区(图 1),两个地区均属于东北黑土区,但在地形地貌、土壤类型、农作物类型等方面均存在差异。建三江地区处于乌苏里江、松花江、黑龙江冲积而成的三江平原腹地,地势平坦,平均海拔 50 m 左右,相对高差 10 m 左右,农作物类型主要

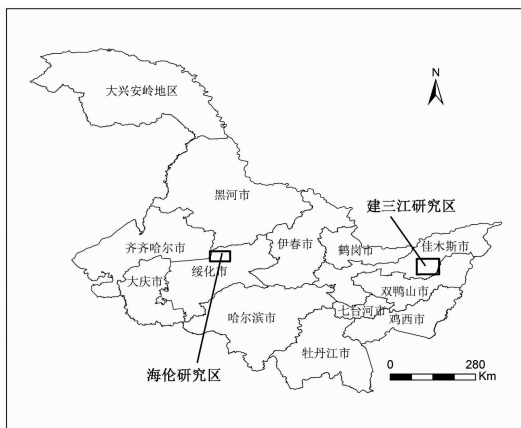


图 1 研究区位置分布图

Fig. 1 Location map of the study area

为水稻。土壤类型有暗棕壤、白浆土、黑土、草甸土、沼泽土、泥炭土、水稻土。研究区面积约 2 600 km²。海伦地处松嫩平原东北端,小兴安岭西麓,位于东北黑土区的中心区域,地形为丘陵、漫岗,属中温带大陆性气候,农作物种植类型主要为水稻、玉米和大豆。主要土壤类型为黑土、暗棕壤和草甸土等。研究区面积约 15 00 km²。

1.2 航空数据获取及处理

航空高光谱数据获取采用 CASI/SASI 成像光谱仪(加拿大 ITRES 公司),选择 Y-12 飞机为搭载平台。CASI 传感器波段范围为 380~1 050 nm,空间分辨率 1.5 m,波段数 72 个,光谱带宽 10 nm;SASI 传感器波段范围为 950~2 450 nm,空间分辨率为 3.75 m,波段数 100 个,光谱带宽 15 nm。飞行相对高度 3 000 m。建三江航空数据获取时间为 2017 年 4 月,海伦数据获取时间为 2018 年 5 月,地表均处于裸土期。

数据预处理主要包括辐射校正、几何校正、大气纠正和光谱重建。航空成像光谱测量系统配备了用于辐射校正和几何校正的软件,其中辐射校正软件为 RCX(Radiometric Calibration Xpress) 9.3.5.1,几何校正软件为 Geocor 3.0。处理步骤包括:①辐射校正;②传感器姿态数据处理;③GPS 定位数据处理;④姿态数据与定位数据时间同步与集成;⑤精细的几何校正。在此基础上采用大气辐射传输模型对航空高光谱遥感数据进行光谱重建,软件采用 ENVI5.3 版本。首先在 ENVI 的 FLAASH 模块中利用大气辐射传输模型进行校正,大气水汽含量主要根据 820,940 和 1 135 nm 附近的水汽吸收谱带的吸收面积与大气水汽含量的统计关系来反演,在校正过程中及时对水汽含量反演结果进行评估,反演生成的水汽图像应呈云雾状,地物的轮廓基本分辨不清。然后利用地面黑、白两种定标布的光谱测量数据,在 ENVI 的 empirical line 模块中进行地-空回归校正,计算地面光谱与大气校正光谱(基于辐射传输模型)之间的乘性与加性系数,进一步消除因辐射定标、波段间相对定标、波段配准、大气参数选取等误差因素造成的光谱误差,最终获得地物光谱反射率。反射率数据去除了水汽吸收波段(1 370~1 415 和 1 835~1 925 nm)及噪声较大波段(380~499 nm)。

为了进一步增强光谱信息,采用多种方法进行光谱反射率的数学变换,包括光谱一阶导数、倒数对数(log(1/R))、连续统去除(continuum remove, CR)、多元散射校正(multivariate scattering correction, MSC)和变量标准化(standard normalized variable, SNV)。

1.3 地面采样与分析

在航空数据获取时同步进行地面土壤采样,综合土壤类型、地形地貌及农作物类型等进行均匀布点。采样点布置于农田中,长期处于翻耕状态,为了保证样品的代表性,采样深度为地表 0~20 cm 层位的耕作层土壤,由 4 个子样等量均匀混合成 1 件样品后采用四分法留取样品。建三江地区采样数量为 225 个,海伦地区采样数量为 121 个。指标分析方法如下:Cr 的全量,样品经盐酸、硝酸、氢氟酸、高氯酸分解后用盐酸提取,采用 OPTIMA 2100DV 等离子体发射光谱仪测量;有机质(SOM)采用硫酸、重铬酸钾消解法滴定;全

氮, 样品采用石墨消解仪消解后用凯氏定氮仪测量; P, K_2O , SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , CaO , MgO , Na_2O 采用 X 射线荧光光谱法测量; pH 值采用 PHS-25 酸度计测定。数据统计分析在 SPSS 22 软件中完成。

1.4 建模方法

建模采用偏最小二乘法。建模数据准备: 以地面采样点位置为中心, 将对应位置航空影像中 3×3 像元范围的光谱反射率进行平均后作为该点的光谱数据。建三江研究区共整理 225 组样本数据, 其中 145 组作为建模样本, 80 组作为验证样本。海伦研究区共整理 121 组样本数据, 其中 80 组样本为建模样本, 剩余 41 组样本为验证样本。建模样本和验证样本均按照空间分布均匀挑选。模型评价指标包括决定系数 (R^2) 和均方根误差 (RMSE)。

土壤理化参数 SOM, N, P, K_2O , SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , CaO , MgO , Na_2O 和 pH 采用光谱数据直接进行建模。Cr 的反演模型自变量包括光谱和理化参数数据, 以探讨间接反演模型的效果。

2 结果与讨论

2.1 Cr 的赋存规律分析

2.1.1 土壤指标含量描述统计

分别统计了海伦和建三江地面样品中 Cr、养分、pH 和相关主量成分的含量 (表 1)。参照规范 (GB15618—2018) 要求, 两个地区所有样品的 Cr 含量均没有超过土壤污染风险筛选值, 表明目前两个地区土壤 Cr 污染的风险较小。

表 1 土壤指标含量统计
Table 1 Statistics of soil index content

指标	海伦				建三江			
	最小值	最大值	均值	变异系数	最小值	最大值	均值	变异系数
Cr/($mg \cdot kg^{-1}$)	43.9	88.1	62.76	0.112	37.5	80.8	59.852	0.126
SOM/%	2.138	7.93	5.131	0.193	0.52	9.26	4.099	0.327
N/%	0.107	0.357	0.235	0.155	0.056	0.497	0.221	0.312
P/($mg \cdot kg^{-1}$)	0.51	1.355	0.926	0.126	0.322	5.481	0.802	0.251
K_2O /%	2.26	2.69	2.502	0.030	2.13	2.88	2.509	0.051
pH	5.15	8.45	6.366	0.091	4.7	7.91	6.126	0.080
SiO_2 /%	58.26	70.2	64.349	0.022	57.63	72.93	66.001	0.042
Al_2O_3 /%	11.73	15.05	14.002	0.031	11.85	16.47	13.475	0.084
Fe_2O_3 /%	3.27	5.73	4.645	0.062	2.53	5.77	4.154	0.155
MgO /%	0.84	1.8	1.303	0.099	0.59	1.36	0.888	0.167
CaO /%	0.89	4.19	1.637	0.246	0.86	3.65	1.209	0.222
Na_2O /%	1.37	1.89	1.641	0.077	1.31	2.34	1.842	0.105

土壤养分方面, 参照规范 (DZT0295—2016), 两个地区土壤有机质、全氮、全磷、全钾整体上均处于较丰富级和丰富级, 显示出土壤养分条件较好。海伦地区的有机质、全氮和全磷的均值高于建三江, 其中有机质更为明显, 这与海伦地区黑土资源更为丰富有关。

土壤其他主量成分方面, 海伦地区土壤 Fe_2O_3 , MgO 和 CaO 含量整体高于建三江, Na_2O 略低于建三江, SiO_2 和 Fe_2O_3 含量两区基本持平。

根据变异程度分级标准^[5], 海伦地区土壤 Cr, SOM, N, P 和 CaO 属于中等变异, 其余指标为弱变异; 建三江地区 Cr, SOM, N, P, Fe_2O_3 , MgO , CaO 和 Na_2O 属于中等变异, 其余为弱变异。除了 Cr, pH 和 CaO 外, 其余指标在建三江地区的变异系数均明显高于海伦地区, 表明在建三江地区这些指标的空间分布更为不均匀。

2.1.2 Cr 与土壤理化指标的相关性

分别计算建三江和海伦研究区土壤 Cr 与理化指标的相关系数 (表 2), 可以发现两个地区相关系数具有较强的规律性, 表现为: Cr 与 Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO , K_2O 和 pH 均呈极显著的正相关, 与 SiO_2 , Na_2O 和 SOM 均呈极显著的负相关, 与 CaO 没有显著相关性。在个别参数上的相关性略有差

表 2 Cr 与土壤理化指标的相关系数

Table 2 Correlation coefficient between Cr and soil physical and chemical indexes

	Cr	
	建三江	海伦
SiO_2	-0.691**	-0.494**
Al_2O_3	0.865**	0.742**
Fe_2O_3	0.775**	0.570**
CaO	-0.024	-0.046
MgO	0.810**	0.674**
K_2O	0.233**	0.497**
Na_2O	-0.724**	-0.566**
P	-0.162*	-0.025
SOM	-0.200**	-0.396**
pH	0.196**	0.287**
N	0.011	-0.160**

注: ** 代表 0.01 水平的相关性, * 代表 0.05 水平的相关性
Note: correlations are significant at 0.01 level (***) and 0.05 level (*)

异, 表现为: 建三江地区 Cr 与 P 呈显著的负相关, 海伦地区 Cr 与 P 没有显著相关性; 海伦地区 Cr 与 N 呈极显著的负相关, 建三江地区则没有显著的相关性。总体上两个地区 Cr

与土壤理化指标的相关性规律具有较高的一致性,虽然与 N 和 P 的相关系数显著性有差异,但相关系数绝对值均不高。

2.1.3 Cr 的赋存规律分析

通过 Cr 的相关性进一步分析其赋存规律。pH 是影响土壤 Cr 赋存状态的重要影响因素,其对 Cr(III)和 Cr(VI)的影响机制不同。土壤中的 Cr(III)主要以阳离子形式存在, Cr(III)进入土壤后容易形成铬和铁氢氧化物的混合物,吸附在土壤表面形成稳定的沉淀物。土壤对 Cr(III)的吸附主要是因为形成 Cr(OH)₃ 的沉淀作用,其次是阳离子交换吸附作用。陈英旭等^[6]实验结果表明, pH 值 4~6 属于 Cr(III)的吸附-沉淀区间,在此 pH 值区间内 Cr(III)开始沉淀,土壤对 Cr(III)的吸附能力随 pH 升高而增强, pH 大于 6 时 Cr(III)进入稳定沉淀区间。而土壤对 Cr(VI)的吸附量整体上随 pH 值增高而减少。建三江和海伦的土壤 pH 整体处于中性和偏酸性,根据上述 pH 对 Cr(III)和 Cr(VI)的影响作用, pH 与土壤 Cr 含量整体应呈正相关,这与相关系数计算结果是较为吻合的。

土壤金属氧化物是吸附 Cr 的重要载体。当 pH > 4 时,水合铁氧化物表面的负电荷开始增加,对 Cr(III)阳离子的吸附能力随着 pH 的升高而增强,此外在 pH 4~6 区间, Cr(III)还易与 Fe³⁺和 Al³⁺发生吸附共沉淀。土壤游离氧化铁是吸附 Cr(VI)的主要成分,此外铁、铝氧化物对 Cr(VI)的吸附能力明显高于粘土矿物^[7]。Vega^[8]的研究显示土壤水铝矿、针铁矿和云母对 Cr 有较强的吸附性。建三江地区 Cr 与 Al₂O₃, Fe₂O₃ 和 MgO 的相关系数分别达到了 0.865, 0.775 和 0.810, 海伦地区对应的相关系数分别为 0.742, 0.570 和 0.674, 显示了在两个研究区上述金属氧化物对 Cr 均具有较高的吸附性,其中建三江地区相关性更高。

此外有机质对土壤 Cr 的形态和含量也有重要影响。有机质对 Cr(VI)有较强的还原作用,有机质中的腐殖质能够增加土壤的表面积和表面活性,从而增加土壤的吸附能力^[9],促进碳酸盐结合态 Cr 向有机结合态 Cr 的转化^[10]。土壤有机酸与 Cr 离子会产生络合作用,从而对 Cr 在土壤中的吸附解吸产生影响^[7],陈英旭实验^[6]显示柠檬酸和富啡酸降低土壤对 Cr(III)的吸附和沉淀作用,而胡敏酸的相关作用不明显。建三江地区 Cr 与有机质的相关系数为 -0.2, 海伦地区为 -0.396, 虽然相关系数绝对值并不高,但两个地区 Cr 与有机质的显著性均达到了极显著水平,表明在有机质的综合作用下,两个地区 Cr 与有机质整体上均表现为负相关。

综上,基于 Cr 在土壤中的赋存规律以及相关分析,认为两个研究区 Cr 的赋存规律有较高的一致性, Cr 均与 Al₂O₃, Fe₂O₃, MgO, K₂O 和 pH 呈极显著的正相关关系,与 SiO₂, Na₂O 和 SOM 呈极显著的负相关关系,为 Cr 的建模提供了相关依据。

2.2 Cr 的光谱特征分析

2.2.1 Cr 与不同光谱预处理的相关性

计算 Cr 与光谱反射率(R)、反射率变量标准化(SNV)、反射率多元散射校正(MSC)、连续统去除(CR)、反射率一阶导数(R')、反射率倒数对数(log(1/R))共六种光谱预处理的相关系数。

从图 2 可看到,建三江地区反射率 R 的相关系数曲线较为平缓,随着波段增大曲线缓慢下降并保持平稳,整体呈负相关关系,在 2 210 nm 处有微弱的峰值(相关系数 -0.275); SNV 和 MSC 曲线较为吻合,在 1 800 nm 之前呈正相关关系,之后转为负相关关系, MSC 曲线较为明显的峰值为 0.424(660 nm), 0.486(1 520 nm), -0.495(2 210 nm), SNV 曲线较明显的峰值为 0.401(670 nm), 0.326(1 535 nm), -0.492(2 210 nm); CR 曲线在 1 370 nm 之前呈持续下降的趋势,在 2 000 nm 之后整体呈负相关关系,较明显的峰值有 0.405(540 nm), -0.590(2 195 nm), -0.479(2 345 nm); R' 曲线在 1 200 nm 之前呈缓慢下降的趋势, 1 415 nm 之后波动较大,较明显的峰值有 -0.494(2 105 nm), 0.374(2 390 nm); log(1/R) 曲线整体形态与原始反射率曲线呈镜像分布,相关性也基本等同。

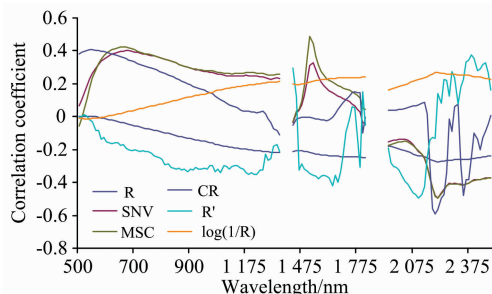


图 2 建三江地区土壤 Cr 与不同光谱预处理的相关系数曲线
Fig. 2 Correlation coefficient curves of Cr and different spectral pretreatments in Jiansanjiang area

从图 3 可见,海伦地区反射率 R 的相关系数曲线整体随波段增大而缓慢下降,形态较为平缓,相关系数最大为 0.165(500 nm); SNV 和 MSC 曲线整体上同样较为吻合, SNV 曲线较明显的峰值为 0.071(920 nm), -0.089(1 520 nm), -0.086(2 195 nm), MSC 曲线较明显的峰值为 0.066(940 nm), -0.080(2195 nm); CR 曲线在 1 100 nm 之前波动较小,之后波动幅度变大,较明显的峰值有 -0.213(1 310 nm), 0.220(1 700 nm), -0.206(2 165 nm), -0.205(2 270 nm), -0.200(2 345 nm); R' 曲线在 1 000 nm 之前呈缓慢下降趋势,波动幅度较小,之后波动较为剧烈,较明显的峰值有 -0.270(1 280 nm), -0.183(2 045 nm), 0.225(2 360 nm); log(1/R) 曲线整体形态与原始反射率曲线呈镜像分布,

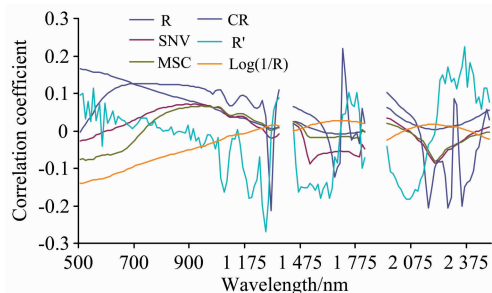


图 3 海伦地区土壤 Cr 与不同光谱预处理的相关系数曲线
Fig. 3 Correlation coefficient curves of Cr and different spectral pretreatments in Hailun area

相关性略低于反射率曲线。

2.2.2 不同变换形式对 Cr 与光谱相关性的影响

对比上述六种光谱预处理的相关性计算结果可以看到，反射率的相关性曲线整体较为平缓，没有明显的峰值出现，这是由于土壤是复杂的混合体，光谱的混合程度较高。

MSC 和 SNV 对应的曲线相关特征得到增强，出现了不同程度的峰值。MSC 是在标准光谱的参考下对每条光谱的基线平移和偏移进行修正，消除散射影响，增强与成分含量相关的光谱吸收信息；SNV 是各波段间反射率数据的标准化，在一定程度上也可消除光谱中线性平移的影响，与多元散射校正有类似之处。因此通过 MSC 和 SNV 变换能在一定程度上增强土壤光谱吸收特征。

CR 曲线整体在上在 1 000 nm 之前相对平缓，之后波动幅度较大，这是由于在 1 000 nm 之前土壤光谱主要受有机质和铁锰氧化物的影响，影响结果是光谱整体反射率的影响，诊断特征相对较弱；1 000 nm 之后光谱主要受黏土矿物、水等影响，诊断特征相对明显。因此经 CR 变换后在 1 000 nm 之后，尤其是 2 000 nm 之后黏土矿物吸收区间出现了明显的峰值。

R' 曲线整体形态特征和 CR 曲线有相似之处，大致在 1 000 nm 之前较平缓，之后波动加剧，因为两种变换方式都是为了增强局部特征。但是 R' 曲线的局部波动幅度明显更高，与其计算方式有关，R' 变换在增强局部吸收特征的同时也增强了噪声信息。

此次 log(1/R) 变换没有明显增强 Cr 与光谱的相关性。

2.2.3 不同地区 Cr 的光谱特征对比

在整体相关性水平上，每种光谱形式下建三江地区 Cr 与光谱的相关性均高于海伦地区。建三江地区正相关值最高为 0.486(MSC 变换)，负相关值最小为 -0.590(CR 变换)，海伦地区相应的值分别为 0.220(CR 变换)、-0.270(R' 变换)。建三江地区 Cr 与光谱相关性更高的原因之一认为是该区 Cr 与土壤矿物、有机质等组分的相关性更强，间接影响到了光谱的相关性。

虽然两区土壤 Cr 与光谱的相关程度存在差异，但是特

征波段的位置存在相似性。对比图 2 和图 3 可以看到：两区反射率曲线均没有明显的相关峰值；SNV 和 MSC 曲线在 2 200 nm 附近均存在明显的负相关峰值；CR 曲线在 2 345 nm 处均存在明显的负相关峰值；R' 曲线在 2 360 nm 附近存在明显的正相关峰值。两区特征波段位置的相似性在一定程度上表明了土壤 Cr 赋存的控制因素存在一致性。

2.2.4 Cr 的特征波段筛选

为了增强 Cr 反演模型的精度及可迁移性，需要综合两个研究区的光谱特征筛选特征波段。根据上述相关性分析结果筛选每种光谱预处理对应的特征波段，结果见表 3。

表 3 Cr 的特征波段筛选

Table 3 Screening result of characteristic band of Cr

光谱预处理	波段/nm
R	全波段
SNV	1 520, 2 195, 2 210, 2 225
MSC	2 195, 2 210, 2 225
CR	2 345
R'	2 360, 1 275, 2 390, 2 405
log(1/R)	全波段

2.3 反演模型建立及迁移性分析

2.3.1 不同光谱预处理建模结果分析

利用不同光谱预处理进行建模及验证，从结果(表 4)可以看到，建三江和海伦研究区中 SNV 对应的建模 R² 和验证 R² 均为最高。整体上对于两个研究区，SNV 和 MSC 对应的建模 R² 均明显高于其他四种光谱预处理，RMSE 也明显低于其他四种光谱预处理，验证结果的趋势整体上与建模结果较为吻合。综合上文中不同光谱变换形式对 Cr 与光谱间相关性的影响结果，认为本研究中 SNV 和 MSC 变换能够较好地提升 Cr 与光谱的相关性，使建模结果得到了稳定的提升。CR 和 R' 变换在某些波段范围内能大幅提升微弱的光谱特征，但同时也引入了噪声干扰，建模结果中只有建三江地区的 CR 对应的模型 R² 略高于原始反射率，其余均有一定的降低。log(1/R) 对应的模型精度基本与原始反射率持平。

表 4 不同光谱形式的建模精度

Table 4 Modeling accuracy of different spectral pretreatments

光谱形式	建三江				海伦			
	建模		验证		建模		验证	
	RMSE	R ²	RMSE	R ²	RMSE	R ²	RMSE	R ²
R	5.36	0.536	5.56	0.483	5.83	0.446	6.03	0.386
SNV	4.76	0.643	5.11	0.571	5.34	0.537	5.54	0.471
MSC	4.83	0.631	5.23	0.556	5.41	0.521	5.61	0.456
CR	5.31	0.544	5.58	0.487	5.88	0.433	6.05	0.377
R'	5.46	0.515	5.65	0.445	5.86	0.441	6.08	0.381
log(1/R)	5.41	0.533	5.59	0.479	5.81	0.449	6.06	0.383

2.3.2 间接反演模型

间接反演模型的自变量集成了光谱数据和土壤组分数据，为了后续模型迁移性研究的需要，将两个研究区的模型

自变量设置为完全一致。根据上述 Cr 的光谱特征分析与光谱建模结果，光谱数据采用 SNV 变换后的特征波段数据(表 3)；根据 Cr 在土壤中的赋存规律分析，参与建模的土壤组分

数据设定为 Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO , K_2O , pH, SiO_2 , Na_2O 和 SOM。建三江研究区建立的模型为: $\text{Cr} = -0.123b_{1520} - 0.098b_{2195} - 0.096b_{2210} - 0.094b_{2225} - 0.705\text{SiO}_2 + 3.932\text{Al}_2\text{O}_3 + 0.715\text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.358\text{MgO} + 0.253\text{K}_2\text{O} - 0.312\text{Na}_2\text{O} - 0.601\text{SOM} - 1.498\text{pH} + 61.813$, 建模结果显示 R^2 为 0.751, RMSE 为 3.741; 模型验证结果显示 R^2 为 0.687, RMSE 为 3.873。海伦研究区建立的模型为: $\text{Cr} = -0.053b_{1520} + 0.031b_{2195} + 0.033b_{2210} + 0.035b_{2225} - 0.808\text{SiO}_2 + 8.235\text{Al}_2\text{O}_3 + 3.972\text{Fe}_2\text{O}_3 + 1.945\text{MgO} + 1.357\text{K}_2\text{O} - 1.634\text{Na}_2\text{O} - 0.399\text{SOM} + 0.024\text{pH} - 21.11$, 建模结果显示 R^2 为 0.676, RMSE 为 4.133; 模型验证结果显示 R^2 为 0.643, RMSE 为 4.316。

通过对比两个研究区 Cr 的间接反演模型与纯光谱模型的模型精度, 可以发现间接反演模型明显提升了 Cr 的模型精度。以纯光谱模型中精度最高的 SNV 结果(表 4)为比较对象, 建三江研究区的间接反演模型将建模 R^2 由 0.643 提升到了 0.751, 验证 R^2 由 0.571 提升到了 0.687; 海伦研究区的间接反演模型将建模 R^2 由 0.537 提升到了 0.676, 验证 R^2 由 0.471 提升到了 0.643。间接反演模型包括了更多 Cr 的赋存规律信息, 因此模型精度有明显提升。在航空高光谱反演制图时, 首先利用光谱信息进行土壤相关组分的含量反演, 然后将相关组分的反演数据纳入间接反演模型进行 Cr 的含量反演。此次建三江研究区 Cr 间接反演模型中相关组分的建模 R^2 均在 0.783 以上, 最高为 0.887(Fe_2O_3); 海伦研究区相关组分的建模 R^2 均在 0.736 以上, 最高为 0.836(MgO), 均达到了较好的反演效果, 能够为 Cr 的间接反演模型提供数据支持。

2.3.3 模型迁移性分析

分别将两个研究区各自建立的 SNV 光谱模型和间接模型进行互相迁移, 以探讨直接与间接反演模型在迁移性上的差异及迁移的可行性。从图 4(a) 可看到, 海伦研究区的直接光谱模型应用到建三江研究区后, 实测值和预测值之间几乎没有相关性, R^2 仅为 0.019 4, 并且预测值出现了若干负值, 可以认为模型不具有迁移的价值。而图 4(b) 的结果与图 4(a) 类似, 同样不具有可迁移性。出现此类现象的原因是不同地区间土壤光谱信息的影响因素有较多差异, 而包括 Cr 在内的重金属元素在可见光-近红外区又没有明显的诊断光谱特征, 从而影响了不同地区间模型的通用性。

图 5 显示, 将海伦研究区 Cr 的间接反演模型应用到建三江研究区后, 实测与预测值的回归 R^2 达到 0.597 5, 而建三江的间接反演模型应用到海伦后, 回归 R^2 为 0.577 3。可以看到间接模型迁移后预测值和实测值的线性关系较为明显, 相比纯光谱模型, 间接模型在两个研究区间的可迁移性得到了明显提升。这是由于两个地区中 Cr 与模型中土壤相关组分的相关性是一致的, 同时相关组分表现的光谱特征具有一致性, 提升了模型迁移后的稳健性。

3 结论

(1) 基于 Cr 在土壤中的赋存规律及光谱特征来建立航空

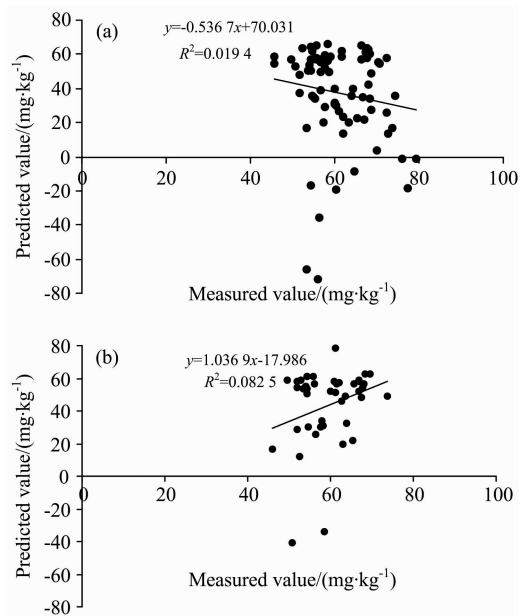


图 4 SNV 光谱模型迁移结果

Fig. 4 Migration results of SNV spectral model

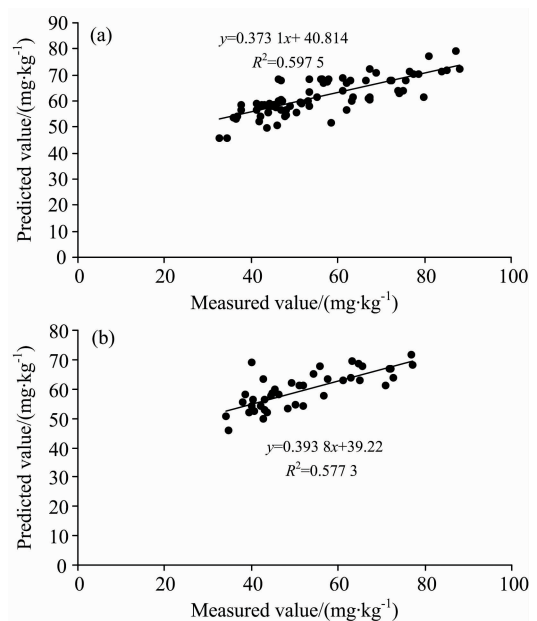


图 5 间接反演模型迁移结果

Fig. 5 Migration results of indirect inversion model

高光谱间接反演模型, 通过与土壤其他组分的相关性研究发现, 建三江与海伦两个研究区内土壤 Cr 均与 Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO , K_2O 和 pH 呈极显著的正相关关系, 与 SiO_2 , Na_2O 和 SOM 呈极显著的负相关关系。通过 Cr 与不同光谱变换形式的相关性分析筛选了相应的特征波段, 纯光谱建模结果显示光谱 SNV 形式对应的模型精度最高。Cr 的赋存规律及光谱特征分析为建立间接反演模型提供了相关依据。

(2) 两个研究区 Cr 的间接反演模型与纯光谱模型精度对比结果显示, 建三江研究区的间接反演模型将建模 R^2 由

0.643 提升到了 0.751, 验证 R^2 由 0.571 提升到了 0.687, 海伦研究区的间接反演模型将建模 R^2 由 0.537 提升到了 0.676, 验证 R^2 由 0.471 提升到了 0.643。间接反演模型明显提升了 Cr 的反演精度, 为土壤 Cr 的航空高光谱反演制图提供了一种新的途径。

(3)Cr 的纯光谱反演模型在两个研究区间的可迁移能力较差, 而间接反演模型的迁移能力则明显提升, 认为间接反演模型考虑了更多 Cr 的赋存规律信息, 提升了模型的泛化能力。

References

- [1] WU Ming-zhu, LI Xiao-mei, SHA Jin-ming(吴明珠, 李小梅, 沙晋明). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2014, 34(6): 1660.
- [2] ZHANG Ming-yue, ZHANG Qi-li, WANG Lu, et al(张明月, 张奇栎, 王璐, 等). Remote Sensing Technology and Application(遥感技术与应用), 2019, 34(2): 313.
- [3] WANG Jing-zhe, TASHPOLAT · Tiyip, ZHANG Dong(王敬哲, 塔西甫拉提·特依拜, 张东). Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery(农业机械学报), 2017, 48(5): 152.
- [4] LU Jie-hui, LI Xi-can, WANG Feng-hua(路杰晖, 李西灿, 王凤华). Journal of Geomatics Science and Technology(测绘科学技术学报), 2018, 35(5): 508.
- [5] YANG Jin-song, YAO Rong-jiang(杨劲松, 姚荣江). Scientia Geographica Sinica(地理科学), 2007, 27(3): 348.
- [6] CHEN Ying-xu, LUO Yong-ming(陈英旭, 骆永明). Acta Pedologica Sinica(土壤学报), 1994, 31(1): 77.
- [7] GUI Xin-an, YANG Hai-zhen, WANG Shao-ping, et al(桂新安, 杨海真, 王少平, 等). Chinese Journal of Soil Science(土壤通报), 2007, 38(5): 177.
- [8] Vega F A, Covelo E F, Andrade M L. Journal of Colloid & Interface Science, 2006, 298(2): 582.
- [9] ZHENG Shun-an, ZHENG Xiang-qun, LI Xiao-chen, et al(郑顺安, 郑向群, 李晓辰, 等). Environmental Science(环境科学), 2013, 34(2): 698.
- [10] WANG Xue-feng, SHANG Fei, MA Xin, et al(王学锋, 尚菲, 马鑫, 等). Journal of Henan Normal University · Natural Science Edition(河南师范大学学报·自然科学版), 2013, 41(5): 101.

Study on Indirect Inversion Model and Migration Ability of Chromium in Soil by Aerial Hyperspectral Method

ZHAO Ning-bo, QIN Kai*, ZHAO Ying-jun, YANG Yue-chao

National Key Lab of Remote Sensing Information and Image Analysis Technology, Beijing Research Institute of Uranium Geology, Beijing 100029, China

Abstract Chromium (Cr) is one of the main target elements in the evaluation of soil heavy metal pollution in the black soil area of Northeast China. With the introduction of aerial hyperspectral technology, the hyperspectral inversion of Cr content has the data basis for a wide range of applications, among which the accuracy and application range of the hyperspectral model are the key factors affecting the quality of the investigation. The commonly used modeling method is to extract spectral features and build models by various statistical means. The limitations are that the model parameters are difficult to be explained, the modeling results are greatly influenced by sample selection, and the generalization ability is poor. In this study, based on the occurrence law of Cr in soil, a new indirect inversion model based on the influencing factors and spectral characteristics of Cr was designed to improve the applicability of the model in different regions. Two research areas of Jiansanjiang and Hailun in Heilongjiang Province were selected. The hyperspectral data came from the CASI/SASI aerial hyperspectral imaging system. The band range was 380~2 450 nm. The number of ground samples in Jiansanjiang and Hailun were 225 and 121 respectively. The physical and chemical parameters of Cr, SOM, N, P, K_2O , SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , CaO, MgO, Na_2O and pH were obtained by chemical analysis. The partial least square method was used in modeling. The analysis results of the occurrence rule of Cr show that Cr in both research areas shows a very significant positive correlation with Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO, K_2O and pH, and a very significant negative correlation with SiO_2 , Na_2O and SOM. This feature provides a foundation for the establishment of indirect inversion models. The analysis results of the spectral characteristics of Cr in the two regions together show that the spectral reflectance has the most obvious correlation with the Cr content after standard normalized variable (SNV) transformation, and the characteristic bands are 1 520, 2 195, 2 210 and 2 225 nm. The characteristic band after SNV

transformation was taken as the independent variable of the pure spectral model. The SNV characteristic band and the above-mentioned soil components closely related to Cr were taken as the independent variable of the indirect inversion model. The modeling results show that, compared with the pure spectral model, the indirect inversion model significantly improved the inversion accuracy of Cr. In the Jiansanjiang area, the modeling R^2 has been improved from 0.643 to 0.751, and the verification R^2 has been improved from 0.571 to 0.687. In the Hailun area, the modeling R^2 has been improved from 0.537 to 0.676, and the verification R^2 has been improved from 0.471 to 0.643. The root mean square error (RMSE) of the indirect model is also reduced. The experimental results of model migration between the two study areas show that the migration ability of the pure spectral model is poor, and the regression R^2 of measured and predicted values after model migration is close to 0, while the migration ability of the indirect model in the two study areas is significantly improved. When indirect inversion model of Hailun was applied to Jiansanjiang, the regression R^2 of measured and predicted values reaches 0.597 5, while the indirect inversion model of Jiansanjiang was applied to Hailun, the regression R^2 is 0.577 3. The results can provide a new method for large-scale inversion mapping of Cr in the soil in different areas.

Keywords Chromium; Aerial hyperspectral; Northeast black soil; Partial least square method; Inversion

(Received May 26, 2020; accepted Sep. 2, 2020)

* Corresponding author

本 刊 声 明

近期以来,一些不法分子假冒《光谱学与光谱分析》期刊社名义,以虚假网站等形式欺骗广大作者、读者。这些虚假网站公然假冒《光谱学与光谱分析》期刊名义进行大肆的征稿并骗取作者的审稿费和版面费。经部分作者及读者举报,现有有关部门已就此介入调查。我刊将通过法律途径向假冒者追究相应的责任,维护本刊权利。

本刊官方网站已正式开通,网址为

<http://www.gpxygpx.com/>

在此郑重声明,本网站为《光谱学与光谱分析》期刊唯一开通运行的官方网站。本刊从未授权任何单位或个人以任何形式(包括网上网下)代理本刊征稿、审稿等业务。

希望广大读者和作者切实维护好自身的合法权益,防止受骗上当。

《光谱学与光谱分析》期刊社

2019年3月15日