径向基神经网络的苏打盐碱地重金属定量反演

付艳华1,刘 晶2*,毛亚纯2,曹 旺2,黄家其2,赵占国3

1. 东北大学江河建筑学院, 辽宁 沈阳 110819

2. 东北大学资源与土木工程学院, 辽宁 沈阳 110819

3. 中国黄金集团,北京 100000

摘 要 土壤是自然生态系统的重要组成部分,是人类赖以生存和农业生产的重要物质基础。随着社会经济高速发展,高强度的工农业生产活动导致重金属等各种污染物通过大气沉降、污水灌溉等途径进入土壤,并在土壤中不断富集造成土壤盐渍化和土壤重金属污染,两者是导致全球荒漠化和土壤退化的主要诱因。 然而中国的耕地非常有限,粮食安全尤为重要。因此,如何快速、准确地大面积反演盐碱地的重金属含量是 保障粮食安全的重要研究课题。针对上述关键问题,以吉林省镇费县盐碱地为研究对象,建立了盐碱地重金 属元素锰(Mn)、钴(Co)和铁(Fe)含量与土壤可见光-近红外光谱数据的定量反演模型。首先对原始光谱数据 分别进行了 Savitzky-Golay 平滑、多元散射校正、连续统去除变换处理;然后基于预处理后的光谱数据构建 了比值(RI)、差值(DI)和归一化(NDI)三种光谱指数,通过光谱指数与重金属含量的相关性分析确定模型训 练样本,利用径向基神经网络算法进行建模并反演盐碱地重金属含量;最后通过相关系数等梯度循环建模 的精度分析方法确定了光谱指数与锰、钴和铁含量相关性显著的敏感波段组合,建立了基于径向基神经网 络算法的盐碱地重金属含量最优反演模型。研究结果表明,Mn选取相关系数 r>0.70,Co选取相关系数 r>0.80,Fe选取相关系数 r>0.80,并选取敏感指数组合分别为 108 组、690 组和 31 组,基于上述显著敏感 指数组合建立的 Mn,Co和 Fe 最优反演模型 R² 分别为 0.703 4,0.897 6 和 0.848 4,均方根误差 RMSE 分 别为 53.007 3,1.059 2 和 0.363 4,平均相对精度达到 88.64%,90.36% 和 91.78%。该研究对盐碱地重金 属含量的准确、快速分析提供了一种有效的方法,对实现土壤重金属污染治理具有重要的现实意义。

关键词 苏打盐碱地;可见光-近红外光谱;光谱指数;重金属含量;反演模型 中图分类号:TP79 文献标识码:A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)05-1595-06

引 言

近年来,随着我国城市化进程加快,城市周边耕地被大量占用,人均耕地日益减少,对盐碱地的改造已成为迫在眉睫的问题。松嫩平原是世界三大苏打盐碱地分布区之一,该区域盐碱地总面积约为 3.42×10⁶ hm²,70%以上为苏打盐碱土(主要成分为 NaHCO₃ 和 Na₂CO₃)^[1]。由于盐碱地改良及农作物选取方法与盐碱地中重金属含量密切相关,因此如何准确、快速确定大区域内盐碱地重金属含量已成为亟待解决的关键问题。遥感高光谱技术具有快速、动态获取地物连续光谱信号的优势,已被广泛应用于河漫滩平原^[2]、矿区^[3]、农田^[4]的土壤重金属定量反演等领域。

有效的光谱数据预处理方法和反演方法是实现盐碱地土 壤重金属高精度反演的重要保障。在光谱数据预处理方面, 涂宇龙等^[5]在保留土壤样品弱光谱信号的基础上,发现经标 准正态变换的光谱全要素主成分分析后基于逐步回归建模方 法能有效提升土壤 Cu 含量估算精度;徐丽华等^[6]利用 Savitzky-Golay 平滑(SG)、多元散射校正(MSC)、标准正态 化(SNV)和克里克滤波(KF)等8种方法对 33个水稻土壤样 本进行了光谱预处理,然后基于分区极值法选取的特征波段 进行建模,结果表明建模精度明显提高。在建模方法方面, 程先锋等^[7]开展了兰坪矿区土壤样本的 Zn, Pb, As 和 Cd 共 4种重金属含量与光谱响应测试实验,利用逐步回归方法预 测土壤重金属含量的反演模型具有较高的精度, R² 均高于 0.816。Ma 等^[8]通过对土壤重金属含量与预处理波段的相关

e-mail: fuyanhua@mail. neu. edu. cn

收稿日期: 2021-03-23,修订日期: 2021-06-09

基金项目:国家自然科学基金项目(52074064)资助

作者简介: 付艳华, 1967年生, 东北大学江河建筑学院副教授

^{*} 通讯作者 e-mail: 1800988@stu. neu. edu. cn

性分析,建立了土壤重金属含量预测模型,结果表明,极限 学习机和随机森林的建模精度优于支持向量机。目前,国内 外学者利用遥感技术对农田、河漫滩平原土壤的重金属含量 研究较多,但针对盐碱地重金属含量的反演研究较少,尤其 针对该应用中的光谱数据预处理和建模训练样本选择等方面 研究不足。

以吉林省白城市镇赉县苏打盐碱地为研究区域,首先利 用 Savitzky-Golay (SG)平滑法、多元散射校正(MSC)和连续 统去除法(CR) 3 种方法对原始光谱数据进行了预处理,然 后利用差值、比值及归一化对预处理后的数据提取了光谱指 数,并将光谱指数与重金属含量做相关性分析以选取高相关 性的光谱指数,再以选择的光谱指数作为建模输入的自变 量,盐碱地重金属含量作为因变量,运用径向基神经网络算 法建立重金属元素锰(Mn)、钴(Co)和铁(Fe)含量的反演模 型,最后通过相关系数等梯度循环建模精度分析确定了光谱 指数的最优选取原则和重金属含量的最优反演模型。研究结 果表明:利用上述方法对 Mn,Co和 Fe 含量进行预测,相对 精度分别达到 88.64%,90.36%和 91.78%,为盐碱地土壤 重金属元素含量的反演提供有效技术手段和理论支撑。

1 实验部分

1.1 研究区域概况

镇赉县位于中国吉林省白城市的西北部,总面积约 4737 km²。镇赉县百万亩水田具有盐碱地面积大、可溶性盐 含量高等特点,且锰、钴、铁等重金属含量较高。由于重金 属含量决定盐碱地土壤改良方法及种植植被种类,因此以镇 赉县为研究区域,采样区面积约为15 km²,每个采样点之间 有400 m,如图1所示。以均匀抽样的方式共采集65 个土样 作为实验样本,开展盐碱地重金属含量反演研究。







1.2 实验数据获取

首先通过实验室土壤干燥箱对采集的样本进行烘干处理,然后去除石块和植物根系后研磨,放在土壤干燥箱中烘干,过100目筛,共制成粉末状样本65件,每个样品分成两份,每份约150g,分别用于化学分析和光谱实验。采用美国

SVC HR-1024 便携式地物光谱仪对 65 件粉末状样品进行光 谱测试。该仪器的基本参数如表 1 所示。

表 1 SVC HR-1024 便携式地物光谱仪基本参数 Table 1 Basic parameters of SVC HR-1024 portable ground-object spectrometer

功能	参数范围
波段范围	$350 \sim 2500 \text{ nm}$
通道数	1 024
光谱精度	\pm 0.5 nm
光谱分辨率	≪8.5 nm
最小积分时间	1 s
视场角	4°

光谱测试实验于 10:00—14:00 进行,该时段可有效降 低气溶胶及太阳辐射传播路径对光谱测试的影响。将被测样 品放置于直径为 6 cm 的圆形黑色小盒中,保证样品表面平 整,可有效避免测量背景对光谱实验的影响。光谱仪镜头垂 直于样品观测面,取 3 次测试的反射率均值作为样品最终反 射率。

光谱测试结束后,对样品进行化学测试确定各个实验样本的锰、钴和铁的含量,实验土壤样本中重金属含量描述统 计分析如表2所示。

表2 重金属含量描述统计分析(mg・kg⁻¹)

 Table 2
 Descriptive statistics for heavy metal concentrations in

soil samples $(mg \cdot kg^{-1})$

项目	最大值	最小值	均值	标准差
Mn	673.03	312.94	512.99	85.03
Co	12.85	4.35	8.61	2.18
Fe	2.87	1.22	2.10	0.47

1.3 光谱特征分析

由于边缘波段测试效果不佳,因此在分析中去除了 350 ~399 和 2 401~2 500 nm 两段数据,最终获得 890 个波段。 65 件土壤样品的可见光-近红外波段光谱反射率曲线如图 2 所示,由图可知,光谱反射率介于 5%~60%之间,在 400~ 2 400 nm 之间呈现一定的波动性;在 1 400,1 900 和 2 200 nm 波段附近水分吸收特征较为明显。在 400~1 000 nm 之 间,光谱反射率随着波长的增加呈现迅速增大趋势,最高值 达到 47%;在 1000~1 400 nm 之间,光谱反射率仍保持随着 波长的增加而增大,但增加曲线的斜率逐渐变小;在 1 400 和 1 900 nm 这两个水分吸收带之间,光谱曲线仍然呈现上 升的趋势,趋势较为平缓,累计增幅约为 5%;在 2 100 nm 附近,反射率总体呈下降趋势。

对于土壤光谱而言,其吸收特征与某些特定的土壤属性 有关。在 400~600 nm 区域形状较陡,斜率较大,这与土壤 中所含的铁有关。在可见光(400~700 nm)和短近红外(700 ~1 000 nm)波段范围,土壤光谱的吸收特征主要由于金属 离子(如 Fe^{2+} , Fe^{3+} 和 Mn^{3+} 等)的电子跃迁形成的,且 Mn 的主要吸收波段为 588.5~591.4, 595.7~601.4, 604.3 和 615.7 nm^[9]。





2 结果与讨论

2.1 光谱数据预处理

由于光谱数据在获取过程中易受到环境变化、仪器稳定性的影响,因此获得的光谱数据中包括地物光谱数据和一定的噪声,而通过光谱数据预处理可以有效降低噪声的影响,并增强土壤原始光谱的细节特征,更好地识别地物和土壤重金属信息,增强反演模型的鲁棒性^[5]。因此,对原始光谱数据进行 Savitzky-Golay 平滑、多元散射校正、连续统去除 3 种预处理变换。

(1)Savitzky-Golay 平滑法(SG)

Savitzky-Golay 算法是最早在 1964 年引入的基本平滑方 法之一,它利用多项式来对移动窗口内的数据进行最小二乘 拟合,其实质是一种加权平均法。该算法不受样本数据限 制,适用于各种信号的平滑去噪,能够保留频谱的峰谷特 征。与传统算法相比,该算法具有更稳定、误差更小的平滑 去噪效果^[10]。计算公式如式(1)所示

$$X_{i}^{*} = \frac{\sum_{j=-r}^{r} X_{i+j} W_{j}}{\sum_{j=-r}^{r} W_{j}}$$
(1)

式(1)中: X^{*} 是平滑后光谱数据向量中的元素; W_i 是平滑 中移动窗口的权重因子,取值为多项式的拟合系数,窗口长 度为 2r+1。

(2)多元散射校正(MSC)

多元散射校正算法^[11]常用于消除因样本颗粒分布不均 匀造成的散射影响,在农业土壤研究领域的应用较为广泛。 该方法可有效提高原始光谱的信噪比,消除光谱数据的线性 散射干扰。具体处理过程如下:

计算待校正光谱的平均光谱

$$\overline{A_{i,j}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} A_{i,j}}{n}$$
(2)

一元线性回归

$$A_i = m_i \overline{A} + b_i \tag{3}$$

得出多元散射校正

$$A_{i(\text{MSC})} = \frac{(A_i - b_i)}{m_i} \tag{4}$$

式中: A 为定标光谱数据矩阵; $\overline{A_{i,j}}$ 表示样品经 Savitzky-Golay 平滑处理后光谱数据在各个波长的平均光谱矢量; m_i 和 b_i 分别表示所测近红外光谱与平均光谱一元线性回归后的相 对偏移系数与平移量^[12]。

(3)连续统去除法(CR)

连续统去除法又称去包络线法,可有效去除光谱数据中 的不相关信息,是一种可有效增强光谱特征的预处理方 法^[13]。连续统去除法可以将光谱数据归一化,不仅能保留和 增强光谱的吸收特征,还能减轻混合物引起的非线性影响, 以便于进行光谱吸收特征分析和光谱特征波段选择。其公式 如式(5)所示

$$R_{c}(\lambda) = R_{cr}(\lambda) - R(\lambda)$$
⁽⁵⁾

式(5)中, R_c, R_c和 R 分别是去包络(特征吸收)、包络线和 光谱反射率值, λ 是波长。经过对光谱反射率曲线去包络后, 能够清晰地看到特征吸收峰。

2.2 光谱指数构建

为提高重金属含量反演精度,分别构建了比值(RI)、差 值(DI)和归一化差值(NDI)三种光谱指数^[9]。对预处理后的 光谱数据所建立的指数与重金属含量作相关性分析,各指数 计算公式如式(6)一式(8)

$$\mathrm{RI} = \frac{R_{\lambda_m}}{R_{\lambda}} \tag{6}$$

$$\mathrm{DI} = R_{\lambda_m} - R_{\lambda_n} \tag{7}$$

$$NDI = \frac{R_{\lambda_m} - R_{\lambda_n}}{R_{\lambda_m} + R_{\lambda_n}}$$
(8)

式(6)—式(8)中: λ_m 为*m* 点对应的波长; λ_n 为*n* 点对应的波 长; R_{λ_m} 为*m* 点波长对应的反射率值; R_{λ_n} 为*n* 点波长处对应 的反射率值。

利用 3 种光谱预处理方法处理后的光谱数据构建 RI, DI 和 NDI 三种光谱指数,并分析重金属含量与光谱指数的 Spearman 秩相关系数。对锰原始光谱数据的 DI、连续统去 除后的 DI、Savitzky-Golay 平滑后的 DI 和多元散射校正后的 DI 与锰重金属含量相关性分布如图 3 所示。

图 3 中的横坐标和纵坐标是样品的光谱波长,颜色表示 光谱指数与该点样品的 Mn 含量之间的相关系数的绝对值。 颜色由蓝色逐渐增加到红色,说明二者之间相关系数的绝对 值由 0 增加到 1,红色越深,说明光谱指数与重金属含量的 相关性越强。图 3 中(a),(b),(c)和(d)分别为原始光谱指 数 DI、CR 处理后的光谱指数 DI、SG 平滑处理后的光谱指 数 DI、MSC 处理后的光谱指数 DI 与 Mn 含量的相关性。比 较上述三种预处理方法,CR 处理后光谱指数 DI 与 Mn 的相 关系数基本低于 0.5,勉强达到弱相关,光谱预处理效果较 差;SG 平滑处理后的光谱指数 DI 与 Mn 的相关系数可达到 0.8,能达到强相关,预处理效果较为理想;MSC 处理后的 光谱指数 DI 与 Mn 的相关系数和原始光谱数据的光谱指数 DI 与 Mn 的相关系数基本一致。







2.3 模型建立与验证

各种数据处理方法增强了部分光谱特征,但也残留了部 分冗余信息,数据处理后的光谱指数选取过多或过少,均会 造成建模精度的降低,因此需要确定一个合理的数据集来保 证建模的反演精度,具体流程如图4所示。

将上述共计 65 件样本,按照重金属含量从低到高排列, 抽样选取 50 件样本作为训练集,15 件样品作为测试集。训 练集的光谱指数按照秩相关系数 $r > \tau$ 进行等梯度选取输入 数据集,利用径向基神经网络算法对重金属含量进行建模预 测,输出预测的重金属含量。 τ 的初始取值为 0.6,然后按 $\Delta \tau$ = 0.1 的梯度递增,选取特定输入数据集进行多次循环建模 预测,在分析中为验证所建模型的精度,以决定系数 R^2 、均 方根误差 RMSE 和平均相对精度作为模型评价指标。 R^2 越 接近 1,均方根误差 RMSE 值越小,平均相对精度越接近 1, 表明模型精度越高^[14]。基于反演精度分析最终确定重金属 锰、钴和铁含量的最优选取原则和最优反演模型。

根据建模后的决定系数 R^2 、均方根误差 RMSE 和平均 相对精度这三个评价指标,确定了最优选取原则,如表 3 所 示。Mn选取相关系数 r>0.70, Co选取相关系数 r>0.80, Fe选取相关系数 r>0.80,并分别选取了 108 组、690 组和 31 组。根据最优选取原则,对比三种光谱指数(DI, RI 和 NDI),其中 RI 和 NDI 被选取的组数多,表明这两种光谱指 数算法可有效增强光谱特征,提升建模精度。

根据最优选取原则选取后光谱指数组合作为输入数据, 利用径向基神经网络建立了最优重金属含量反演模型,其预 测值与实际重金属含量对比如图 5,图 6 和图 7 所示,其中 Mn, Co 和 Fe 的预测值与实测值的回归曲线 R² 分别为 0.703 4,0.897 6 和 0.848 4,均方根误差 RMSE 分别为 53.007 3,1.059 2 和 0.363 4,平均相对精度达到 88.64%, 90.36%和 91.78%。

表 3 重金属元素光谱指数最优选取原则 Table 3 Principle of the optimal selection of spectral

indices of heavy metal elements						
重金属元素	光谱指数	预处理方法	组数	总组数		
Mn	DI	SG	23			
	RI	MSC	47	108		
	NDI	MSC	38			
Со	DI	MSC	95			
	RI	MSC	434	690		
	NDI	MSC	161			
Fe	RI	MSC	29	21		
	NDI	CR	2	51		



3 结 论

以中国吉林省白城市镇赉县盐碱地 65 件样本的土壤可 见光-近红外光谱数据和 Co、Fe 和 Mn 元素的含量为数据 源,采用了 Savitzky-Golay 平滑、多元散射校正、连续统去除 共3种数据预处理方法对原始光谱数据进行了处理,并构建 了差值指数、比值指数和归一化指数,同时提出了适用于 Mn, Co 和 Fe 含量反演的光谱指数最优选取原则。然后,利 用径向基神经网络算法建立了盐碱地重金属 Mn, Co 和 Fe 含量最优反演模型,结论如下:

(1)对比三种预处理方法,利用 MSC 算法对盐碱地土壤

References







光谱数据进行预处理、对光谱数据中干扰信息的去除效果最为明显。对比三种光谱指数算法,RI和 NDI 两种光谱指数 算法可有效增强光谱特征,提升建模精度。

(2)根据提出的光谱指数最优选取原则,基于径向基神 经网络建立的盐碱地重金属 Mn, Co和 Fe 反演模型预测精 度较高,其预测值与实测值的平均相对精度分别为 88.64%, 90.36%和 91.78%。

研究对盐碱地重金属含量精确快速反演提供了一种有效 方法。对含重金属的盐渍化土壤治理具有重要的现实意义。

- [1] XU Xiao-hong, LIU Su, ZHAO Ying-jie, et al(许晓鸿,刘 肃,赵英杰,等). Bulletin of Soil and Water Conservation(水土保持通报), 2018, 38(1): 89.
- [2] ZHAO Dong-jie, WANG Xue-qiu(赵东杰,王学求). China Environmental Science(中国环境科学), 2020, 40(4): 1609.
- [3] CHEN Yu-bo, XUE Yun, ZOU Bin, et al(陈宇波,薛 云,邹 滨,等). Journal of Central South University(中南大学学报), 2020, 51(10): 2876.
- [4] ZHANG Qiu-xia, ZHANG He-bing, LIU Wen-kai, et al(张秋霞,张合兵,刘文锴,等). Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(农业工程学报), 2017, 33(12): 230.

- [5] TU Yu-long, ZOU Bin, JIANG Xiao-lu, et al(涂字龙, 邹 滨,姜晓璐,等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2018, 38(2): 575.
- [6] XU Li-hua, XIE De-ti(徐丽华,谢德体). Jiangsu Journal of Agricultural Sciences(江苏农业学报), 2019, 35(6): 1340.
- [7] CHENG Xian-feng, SONG Ting-ting, CHEN Yu, et al(程先锋, 宋婷婷, 陈 玉, 等). Acta Petrologica et Mineralogica(岩石矿物学杂志), 2017, 36(1): 60.
- [8] Tan Kun, Ma Weibo, Chen Lihua, et al. Journal of Hazardous Materials, 2021, 401: 123288.
- [9] Mao Yachun, Liu Jing, Cao Wang, et al. Infrared Physics and Technology, 2021, 112: 103602.
- [10] LEI Lin-ping(雷林平). Computer and Information Technology(电脑与信息技术), 2014, 22(5): 30.
- [11] WANG Tao, BAI Tie-cheng, ZHU Cai-die, et al(王 涛, 白铁成, 朱彩蝶, 等). Journal of Northwest Forestry University(西北林学院 学报), 2020, 35(5): 173.
- [12] WEN Ping, LI Hai-jun, LEI He-yu, et al(闻 萍,李海军,雷禾雨,等). Journal of Inner Mongolia Agricultural University(内蒙古农业 大学学报), 2021, 42(2): 79.
- [13] SONG Chun-yu, GAN Shu, YUAN Xi-ping, et al(宋春雨,甘 淑,袁希平,等). Acta Agriculturae Zhejiangensis(浙江农业学报), 2020, 32(11): 1978.
- [14] WU Zhong-qiang, MAO Zhi-hua, WANG Zheng, et al(吴忠强, 毛志华, 王 正, 等). Hydrographic Surveying and Charting(海洋测绘), 2019, 39(3): 11.

Experimental Study on Quantitative Inversion Model of Heavy Metals in Soda Saline-Alkali Soil Based on RBF Neural Network

FU Yan-hua¹ , LIU Jing^{2*} , MAO Ya-chun² , CAO Wang² , HUANG Jia-qi² , ZHAO Zhan-guo³

1. School of Resources and Civil Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China

2. School of Architecture, Northeastern University, Shenyang 110819, China

3. China Gold Group, Beijing 100000, China

Abstract Soil is an important part of the natural ecosystem and an important material basis for human survival and agricultural production. With the rapid socio-economic development, the high-intensity industrial and agricultural production activities lead to various pollutants such as heavy metals entering the soil through atmospheric deposition and sewage irrigation and continuously enriching in the soil, causing soil salinization and soil heavy metal pollution, both of which are the main causes of global desertification and soil degradation. However, China has very limited arable land, and food security is especially important. Therefore, quickly and accurately invert the heavy metal content of saline land in a large area is an important research topic to ensure food security. This paper establishes a quantitative inversion model of the heavy metal content of manganese (Mn), cobalt (Co) and iron (Fe) in saline land with soil visible-near infrared spectral data in Zhenlai County, Jilin Province. Firstly, Savitzky-Golay smoothing, multiple scattering correction and continuous statistical de-transformation were performed on the raw spectral data respectively; then three spectral indices, namely, ratio (RI), the difference (DI) and normalized (NDI), were constructed based on the pre-processed spectral data, and the model training samples were determined by correlation analysis between the spectral indices and heavy metal contents. The radial basis neural network algorithm was used to model and invert the saline heavy metal contents. Finally, the sensitive band combinations with significant correlation between the spectral indices and the contents of Mn, Co and Fe were determined by the accuracy analysis method of the gradient cycle modeling such as correlation coefficient and the optimal inversion model based on the radial basis neural network algorithm was established for the heavy metal content of saline land. The results show that the correlation coefficients r > 0.70 for Mn, r > 0.80 for Co, and r > 0.80 for Fe. The selected combinations of sensitivity indices are 108, 690, and 31 groups, respectively, and the optimal inversion models R^2 for Mn, Co, and Fe based on the above significant combinations of sensitivity indices are 0.703 4, 0.897 6. The RMSEs were 53.007 3, 1.059 2 and 0.363 4, and the average relative accuracies were 88.64%, 90.36% and 91.78%, respectively. This study provides an effective method for accurate and rapid analysis of heavy metal content in saline soils, which is of great practical importance for achieving soil heavy metal pollution control.

Keywords Soda saline-alkaline land; Visible-near infrared spectra; Spectral index; Heavy metal content; The inversion model

* Corresponding author

(Received Mar. 23, 2021; accepted Jun. 9, 2021)