

# 亚热带典型区域水稻土氧化铁高光谱反演 ——以珠江三角洲为例

郭颖<sup>1,2</sup> 郭治兴<sup>2</sup> 刘佳<sup>3</sup> 袁宇志<sup>2</sup> 孙慧<sup>4</sup> 柴敏<sup>2</sup> 毕如田<sup>1\*</sup>

(<sup>1</sup>山西农业大学资源环境学院, 山西太谷 030801; <sup>2</sup>广东生态环境技术研究所/广东省农业环境综合治理重点实验室, 广州 510650; <sup>3</sup>广州地理研究所, 广州 510070; <sup>4</sup>中国科学院地球环境研究所, 西安 710061)

**摘要** 氧化铁是土壤中铁元素的主要存在形式, 亚热带土壤中高含量的氧化铁形成了该区域重要的土壤附色成分针铁矿和赤铁矿等矿物, 使得土壤颜色明显区别于其他气候带. 以亚热带典型地区珠江三角洲为例, 分析不同光谱形式与土壤氧化铁含量的相关性, 提取特征光谱波段建立土壤氧化铁的反演模型. 结果表明: 土壤氧化铁含量与反射光谱之间呈负相关, 且敏感波段主要位于 404, 574, 784, 854 和 1204 nm 等可见近红外区域. 微分处理后的光谱与土壤氧化铁的相关性明显提高. 在相关性显著波段的基础上采用逐步多元线性回归以及主成分分析剔除共线性波段, 最后选择特征光谱波段作为反演模型的输入参数. 比较反演模型的结果, 得出该地区土壤氧化铁含量的最佳反演模型为 BP 人工神经网络 (RMSEC = 0.22, RMSEP = 0.81,  $R^2 = 0.93$ , RPD = 12.20), 该模型具有非常好的稳定性, 适用于快速估测土壤中氧化铁含量, 并且能够为测度土壤氧化铁的空间分布提供研究基础.

**关键词** 土壤氧化铁; 遥感; 高光谱; 反演; 亚热带区域

**Hyperspectral inversion of paddy soil iron oxide in typical subtropical area with Pearl River Delta, China as illustration.** GUO Ying<sup>1,2</sup>, GUO Zhi-xing<sup>2</sup>, LIU Jia<sup>3</sup>, YUAN Yu-zhi<sup>2</sup>, SUN Hui<sup>4</sup>, CHAI Min<sup>2</sup>, BI Ru-tian<sup>1\*</sup> (<sup>1</sup>College of Resource and Environment, Shanxi Agricultural University, Taigu 030801, Shanxi, China; <sup>2</sup>Guangdong Institute of Eco-Environment and Technology/Guangdong Key Laboratory of Integrated Agro-environmental Pollution Control and Management, Guangzhou 510650, China; <sup>3</sup>Guangzhou Institute of Geography, Guangzhou 510070, China; <sup>4</sup>Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710061, China).

**Abstract:** Iron oxide is the main form of iron element existing in the soil. In subtropical areas, the high-content iron oxide constitutes the soil's important coloring components, or its mineral substances, such as goethite and hematite, making the soil color apparently different from that in other climatic zones. The present paper, with the Pearl River Delta, a typical subtropical area, as illustration, and through analysis of the correlation between different spectral forms and the content of soil iron oxide, created inversion models of soil iron oxide by extracting characteristic spectral bands. The findings showed that there was a negative correlation between the content of soil iron oxide and the reflection spectrum, and the sensitive bands were mainly found in such visible near-infrared regions such as 404, 574, 784, 854 and 1204 nm. The correlation between the spectrum through differential processing and the soil iron oxide was significantly improved. On the basis of the correlation-prominent bands, the methods of both multiple linear regression and principal component analysis were adopted so as to remove collinear bands, and finally, characteristic bands were selected to serve as the input parameters of inversion models. A comparison of the results revealed that the best inversion model of soil iron oxide content in the Pearl River Delta was BP artificial neural

本文由广东省科技计划项目 (2015B070701017, 2017A040406021)、国家自然科学基金青年科学基金项目 (41601558)、广州市科技计划项目 (201709010010) 和广东省科学院创新平台建设专项资助 This work was supported by Guangdong Province Science & Technology Project (2015B070701017, 2017A040406021), National Natural Science Foundation of China (41601558), Guangzhou City Science & Technology Project (201709010010) and Special Program on Construction of Innovation Platform of Guangdong Academy of Sciences.

2017-04-10 Received, 2017-08-30 Accepted.

\* 通讯作者 Corresponding author. E-mail: birutian@163.com

network (*i.e.*, RMSEC = 0.22, RMSEP = 0.81,  $R^2 = 0.93$ , RPD = 12.20). It was applicable with excellent stability to the fast estimation of the iron oxide content in the soil and could hopefully serve as the research basis for the measure of the spatial distribution of the soil iron oxide.

**Key words:** soil iron oxide; remote; hyperspectral; inversion; subtropical area.

土壤中铁对促进作物生长代谢及提高作物产量和品质等具有重要意义<sup>[1]</sup>.研究表明,土壤环境中铁元素的稀缺或过量均会致使植物产生不良性状,供给植物足够的铁元素能够降低镉对氨基酸、蛋白质合成以及酶活性的影响,从而达到缓解植物重金属毒害的目的<sup>[2-4]</sup>.除此之外,铁元素因参与了土壤中多种物理化学作用,在土壤发生学中具有重要的地位.土壤中铁元素主要以氧化铁形式存在,因此,准确快速地估测土壤氧化铁含量具有重要意义.

近年来遥感技术广泛应用于土壤成分的反演<sup>[5-7]</sup>,研究发现卫星光谱数据与黏粒、三氧化二铁以及二氧化钛等多数土壤属性相关性较好<sup>[8]</sup>.近年来,不同学者先后利用多光谱影像以及高光谱数据建立不同预测模型估测土壤氧化铁含量.高光谱具有光谱分辨率高、波段连续性强并且可以获得比多光谱更精细的光谱信息的优点,其建立的回归模型预测精度比多光谱影像高<sup>[9-10]</sup>,利用高光谱数据可以实现土壤氧化铁的定量反演<sup>[11-12]</sup>.通过对铁含量与特征光谱反射率之间相关性的研究,建立多元逐步线性以及人工神经网络反演等模型,可以实现预测值与实测值之间的显著相关<sup>[13-17]</sup>.研究表明,游离态氧化铁对土壤整个可见光-近红外区间光谱影响很大,其中  $Fe^{2+}$ 、 $Fe^{3+}$  的吸收特征表现在可见光范围,  $Fe^{2+}$  吸收波长大致在 430、510 以及 1000 ~ 1100 nm;  $Fe^{3+}$  的吸收位置在 400、450、700 以及 870 nm<sup>[18-19]</sup>.土壤光谱是各种土壤性质的综合反映,而影响土壤光谱的因子众多,除氧化铁外,主要包括土壤有机质、土壤颜色、土壤质地、土壤水分以及矿物成分等,光谱的形成异常复杂,导致反演数据存在局限性<sup>[20-21]</sup>.

光谱变换能够降低外界噪声的干扰,突出光谱特征<sup>[22-23]</sup>.其中微分处理、倒数的对数及连续统去除能够扩大光谱差异,突出光谱曲线的吸收和反射特征;多元散射校正以及标准正态变换能够消除样品本身的影响,并且解决测量光程变化的影响.建模方法的选取主要考虑线性以及非线性关系,而这两方面的研究主要为多元线性回归、偏最小二乘、人工神经网络及支持向量机<sup>[15, 24-25]</sup>

不同的地形地貌、土壤类型以及地质环境等因

素使得不同区域土壤氧化铁反演模型不具有普适性.亚热带地区三价氧化铁以及土壤游离铁的含量和比例主导了亚热带土壤不同于其他气候带的颜色和光谱特征<sup>[26]</sup>.珠江三角洲地处亚热带典型区域,是广东省重要的粮食、蔬菜、水果和畜禽生产基地<sup>[27]</sup>,但近年来土壤重金属元素镉污染等问题日益突出,对食物链形成了潜在的威胁<sup>[28]</sup>.本文利用高光谱数据,以珠江三角洲地区为例,研究亚热带区域水稻土氧化铁含量的定量反演模型,分析不同光谱形式与土壤氧化铁含量之间的相关性,探讨亚热带典型区域水稻土氧化铁含量反演的最佳模型,旨在为快速获取类似区域土壤氧化铁含量提供技术手段,也为亚热带典型区域水稻土的相关研究提供参考.

## 1 研究区域与研究方法

### 1.1 研究区概况

珠江三角洲位于 21°30'—23°40' N,属南亚热带区<sup>[29]</sup>.其农用地土壤类型主要为水稻土,约占 81.6%,成土母质主要为河流冲积物.全年平均气温 18~21 °C,降雨充沛,年平均降水量在 1400~1900 mm,全年无霜期 310 d 左右,平均温度在 10 °C 以上的太阳辐射占全年辐射总量的 90% 以上,是全国光、热和水资源最丰富的地区之一.温度、降水以及光照等条件的适宜性,使得该地区非常适合植物生长以及农作物生产.研究区地理位置见图 1.

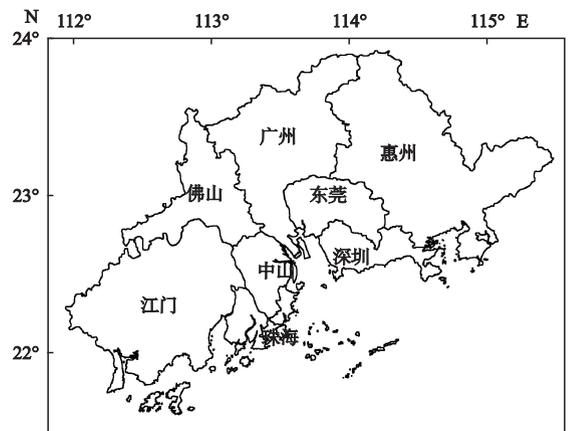


图 1 研究区位置

Fig.1 Location of the study area.

表 1 氧化铁含量描述性统计

Table 1 Descriptive statistics of iron oxide content

| 样本集<br>Sample set  | 数目<br>Number | 最大值<br>Maximum<br>( $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) | 最小值<br>Minimum<br>( $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) | 均值<br>Mean<br>( $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) | 标准差<br>SD<br>( $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) | 变异系数<br>CV<br>(%) |
|--------------------|--------------|--|--|--|---|-------------------|
| 全部样本 All samples   | 100          | 44.91  | 4.19   | 20.43  | 9.85  | 48.2              |
| 建模集 Train set      | 70           | 44.91  | 4.19   | 20.08  | 9.88  | 49.2              |
| 验证集 Validation set | 30           | 41.33  | 4.49   | 21.38  | 9.85  | 46.1              |

## 1.2 样品采集与制备

以珠江三角洲农用地为研究对象, 采样网格为 10 km, 采集样品时选择样地中间位置按五点法进行采集, 采样深度为 0~20 cm, 共采集 103 个样点. 样品经自然风干、木棒压磨后粗略去除砂砾及植物残体, 然后过 80 目尼龙筛混合均匀. 采用四分法取样, 将每个样品分为两份, 一份采用草酸-草酸铵以及 DCB 提取不同状态中铁离子含量<sup>[30]</sup>, 另一份用于测量光谱.

采用 ASD FieldSpec 3 地物光谱仪测量土壤样品的反射光谱. 为最大程度地接近土壤自然环境同时消除土壤表面植被的影响, 选择晴朗无云、无风的天气, 在自然光条件下采用 5 度视场角探头, 距离土样 15 cm 垂直角度进行光谱采集, 测量时间范围为 10:00—14:00. 每个样品采集 10 条光谱, 取光谱数据算术平均值作为该土样的实际反射光谱. 光谱波长范围为 350~2500 nm, 采样间隔为 1.4 nm (350~1000 nm) 和 2 nm (1000~2500 nm), 重采样间隔为 1 nm, 输出波段数为 2151.

根据土壤氧化铁含量的箱型图剔除测量值异常点, 利用 view specpro 软件剔除光谱曲线差异较大的样点, 剔除异常值后的光谱数据用于进一步的研究分析. 依据分层抽样<sup>[31]</sup> 获取 70% 的样点作为建模集, 依据 Rank-KS 抽样<sup>[32]</sup> 获取 30% 的样本作为验证集, 两组数据的 K-S 检验结果 ( $D=0.230, P=0.724$ )  $P>0.05$ , 可以认为两组样本来自同一分布<sup>[33]</sup>. 土壤氧化铁含量各个样本集的箱型散点图见图 2, 统计特征描述见表 1.

## 1.3 光谱处理及模型评价标准

**1.3.1 平滑处理** 光谱采集过程不可避免地受到测试环境、仪器本身、样品背景以及杂散光等众多因素的影响, 导致光谱曲线不平滑, 因此在进行数据分析之前, 首先去除噪声较大的边缘波段 350~400 nm 以及 2401~2500 nm. 之后采用 Savitzky-Golay (S-G) 滤波二阶多项式方法<sup>[34]</sup> 对光谱进行平滑处理, 从图 3 可以看出, 处理结果较好地保证了光谱曲线的总

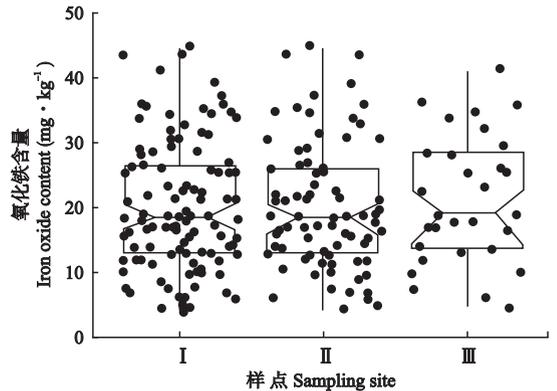


图 2 氧化铁含量箱型散点图

Fig.2 Boxplot and scatter plot of iron oxide content.

I: 全部样本 All samples; II: 建模集 Train set; III: 验证集 Validation set.

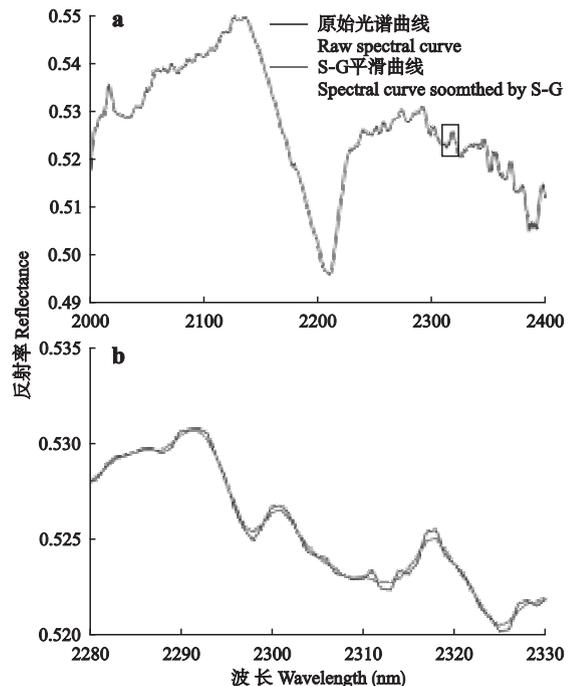


图 3 S-G 平滑处理后 (a) 及局部放大 (b) 光谱曲线

Fig.3 Spectral curves of S-G smoothing (a) and local amplified (b).

体特征.

**1.3.2 光谱变换** 光谱变换能够改善信噪比, 在对光谱波段进行 10 nm 重采样基础上, 对光谱进行了

多种变换,分别为一阶微分(FD)、二阶微分(SD)、倒数(RT)、倒数的对数[LG(RT)]、倒数的一阶微分(RT-FD)、倒数的二阶微分(RT-SD)、倒数对数的一阶微分[LG(RT)-FD]、倒数对数的二阶微分[LG(RT)-SD]、连续统去除(CR)、基线校正(BC)、标准正态变换(SNV)及多元散射校正(MSC)等。

**1.3.3 提取建模波段** 首先根据相关性分析选取显著性波段,结合逐步多元线性算法剔除共线性波段,最后通过主成分分析检验入选波段之间的共线性。判断依据为方差膨胀因子(variance inflation factor, VIF)以及容差值(tolerance)的大小,当 $VIF > 10$ 、容差值 $\leq 0.1$ 时,认为特征波段之间存在较严重的冗余,并且会对模型反演精度造成干扰。

**1.3.4 建模及模型评价** 目前利用高光谱进行反演的方法多以逐步线性以及偏最小二乘为主,支持向量机及人工神经网络等手段也得到诸多学者认可,基于机器学习的建模方法尚处于探索阶段<sup>[35-36]</sup>。线性回归模型中逐步多元线性回归(stepwise multiple linear regression, SMLR)通过将全部反射光谱方差贡献值按大小进行排列,根据其重要性逐步将与土壤氧化铁相关性较好的反射光谱选入回归方程进行分析。偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)则结合了普通多元回归、主成分分析和典型相关分析的思想,对自变量间多重共线性问题作了很好的解决<sup>[37]</sup>。非线性回归中BP人工神经网络(back propagation artificial neural network, BPNN)模型结构中的隐层节点数一般选取输入节点数一半或者两倍值上下浮动,本文通过对两个范围内的数值建立模型的平方和误差以及相对误差值进行比较,最终选取4为隐层节点数。支持向量机(support vector machine, SVM)以统计学习理论SLT为基础,按照给定误差分离一组训练数据的最优化超平面,能够克服神经网络中局部极小值难点<sup>[38]</sup>。

反演模型的优劣从两个方面评价:1)模型的稳健性,决定系数 $R^2$ 以及相对分析误差RPD,其中 $R^2$ 越接近于1、RPD $> 1.4$ ,表明模型的稳健性越好;2)模型的预测精度,均方根误差(RMSE)越小,模型预测精度越好<sup>[39]</sup>。

#### 1.4 数据处理

采用Excel 2003和SPSS 23.0对土壤氧化铁含量进行统计分析,采用ViewSpecPro 16.0对原始光谱进行算术平均取值,采用R 3.3.3划分样本集及建模预测分析,采用Unscrambler X10.0软件对光谱曲线进行平滑、变换处理及建模预测分析,采用SPSS

23.0软件对特征光谱进行共线性检验分析。

## 2 结果与分析

### 2.1 土壤光谱特征

研磨后的土样反射光有所增强,但吸收特性的位置不会改变。本研究的土样均为水稻土,经研磨、风干处理,基本消除了土壤类型、土壤质地以及土壤湿度对土壤光谱的影响。测量仪器在1900和2400 nm附近存在较强的噪声干扰,属于系统误差。虽然有研究认为有机质与土壤氧化铁的敏感波段一样主要位于可见光和近红外区域,但其存在并不能掩盖氧化铁对于反射光谱的影响<sup>[40]</sup>。

由图4可知,土壤光谱反射率随着波长的增加而增加,在350~600 nm,形似陡坎,斜率最大,反射率也增长最快。在600~750 nm,坡形平缓,斜率变小,增长相对较缓。在750~1100 nm,曲线逐渐趋于缓和。整体在可见光区域,反射率增加较快,在近红外区域,曲线逐渐平缓,反射率值增长较缓。这与典型土壤光谱形状基本一致<sup>[41-42]</sup>。有研究表明,由于黏土矿物中-OH的影响,波段1400、1900以及2400 nm附近存在强烈的水汽吸收,波段2100~2380 nm出现的峰谷吸收结构主要是由残余在土壤中的少量水分以及空气中水汽吸收引起的<sup>[36,43]</sup>。因此本文选择400~1300 nm为主要分析波段。

### 2.2 土壤铁含量与光谱相关性

土壤铁元素与各波段呈负相关,但其相关性整体较低(图5)。从不同波段分析,400~600 nm相关性快速减弱,相关系数最大值为-0.60。600~750 nm相关性稳定,但强度较弱,相关系数最大仅为-0.15;750~1100 nm相关性逐渐增强,但与400~600 nm范围相比增长速度较缓,相关系数最大值也仅为-0.30。因此对光谱进行预处理以增强变换后光谱与土壤氧化铁含量之间的相关性,进而提取建模波段。原始光谱经不同处理后与土壤氧化铁含量间的相关

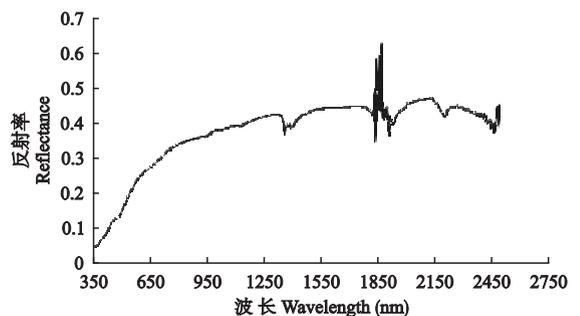


图4 土壤反射光谱曲线

Fig.4 Spectral reflectance curve of soil.

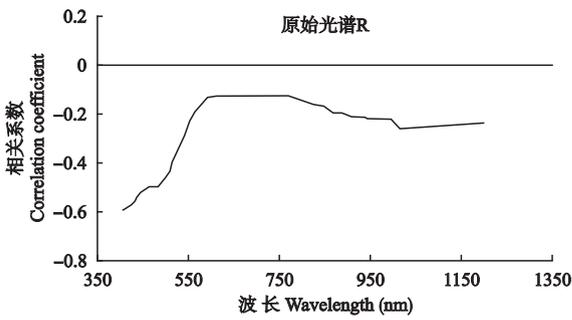


图 5 原始反射光谱与土壤氧化铁含量的相关性曲线  
 Fig.5 Correlation curve between original spectral reflectance (R) and soil iron oxide content.

性见图 6.可以看出,基线校正以及多元散射校正整体效果最不理想,连续统去除以及标准正态分布效果一般,倒数以及倒数的对数曲线基本是原始光谱曲线以 x 轴为对称轴的相似图,基本没有变化.原始光谱经微分处理后的相关系数显著提高,多处波段的相关系数大于等于 0.5,倒数以及倒数的对数微分处理又比原始光谱的微分处理显著,一阶微分又比二阶微分效果要好.最后用于建模的波段 404、574、784、854 以及 1204 nm 中 4 条波段来自微分处理,其中显著性最强的 854 nm 来自于倒数对数的一阶微分处理.

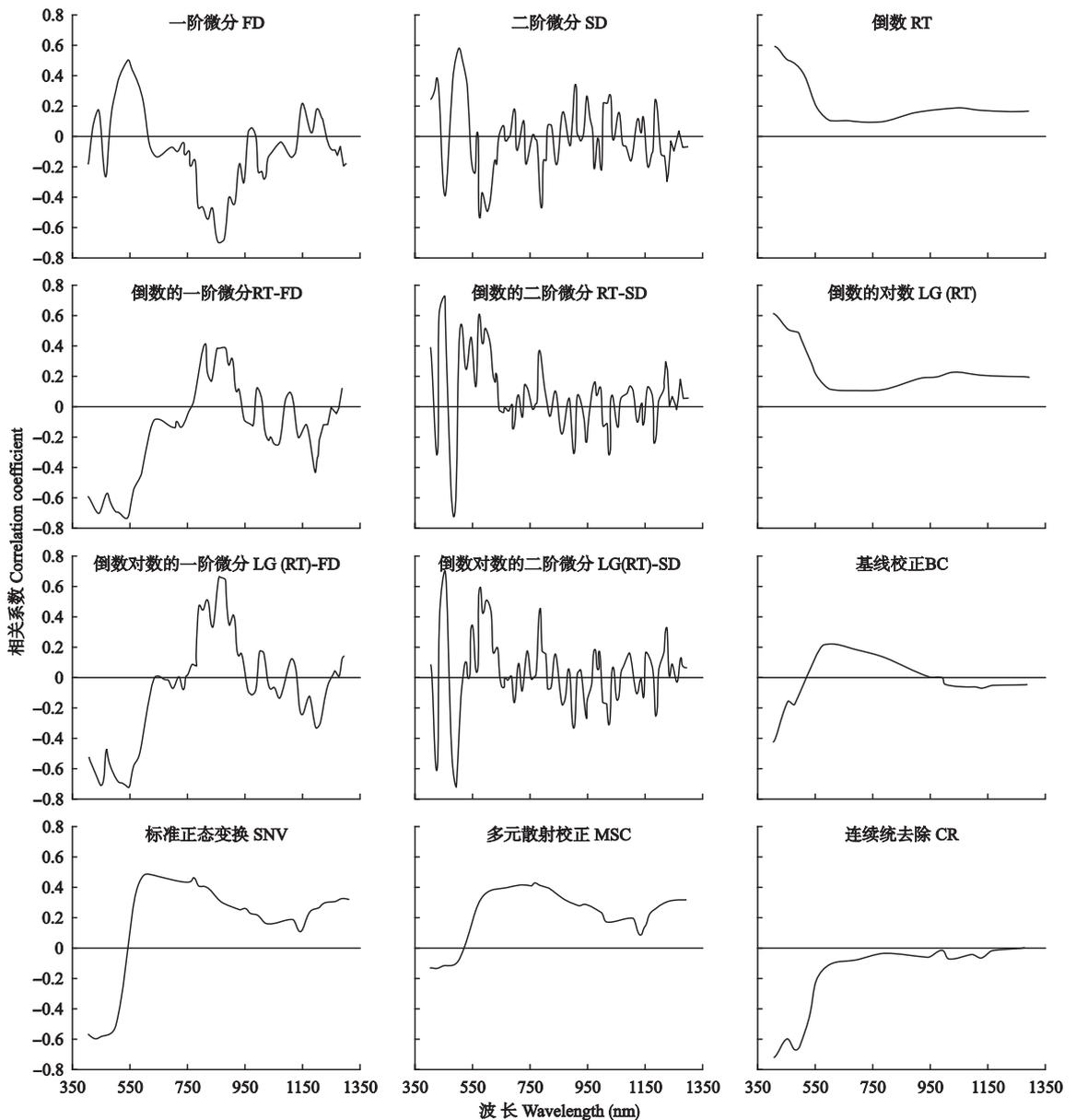


图 6 不同转换光谱与土壤氧化铁含量的相关性曲线  
 Fig.6 Correlation curves between different transfer reflectances and soil iron oxide content.

表 2 特征波段的共线性检验

Table 2 Collinearity test of characteristic bands

| 波段<br>Wavelength<br>(nm) | 皮尔逊相关系数<br>Pearson<br>correlation<br>coefficient | 容差<br>Tolerance | 方差膨胀因子<br>Variance<br>inflation<br>factor |
|--------------------------|--|-----------------|---|
| 404                      | -0.589 **  | 0.428           | 2.335                                     |
| 574                      | 0.585 **   | 0.594           | 1.684                                     |
| 784                      | -0.475 **  | 0.796           | 1.257                                     |
| 854                      | 0.624 **   | 0.676           | 1.479                                     |
| 1204                     | -0.369 **  | 0.517           | 1.935                                     |

\*  $P < 0.05$ ; \*\*  $P < 0.01$ .

## 2.3 特征波段及反演模型结果

**2.3.1 特征波段** 为对比模型精度以及稳健性,本文以相同的波段作为 4 种模型的输入参数.入选特征波段与土壤氧化铁含量之间的相关系数以及方差膨胀因子见表 2.

**2.3.2 反演模型结果** 4 种模型结果显示(表 3), SMLR 与 PLSR 模型稳健性整体基本一致,  $RPD > 2$  表明模型具有较好的稳健性,从 RMSEC 来看,PLSR 精度略高于 SMLR.虽然 SVM 决定系数  $R^2$  高于 SMLR 以及 PLSR,但是模型的均方根误差较高,模型预测精度较差.同其他模型 RPD 值相比,SVM 的 RPD(1.64)最低,因此该模型不适用于研究区域土壤氧化铁含量的反演.BPNN 模型精度以及稳健性远高于其他 3 种,其决定系数  $R^2$  达 0.93, RPD 值远

表 3 不同模型的反演精度比较

Table 3 Comparison of the inversion accuracy by different models

| 回归模型<br>Regression model                              | 实测均方根误差<br>RMSEC | 预测均方根误差<br>RMSEP | 决定系数<br>$R^2$ | 相对分析误差<br>RPD |
|---|------------------|------------------|---------------|---------------|
| 逐步多元线性回归<br>Stepwise multiple linear regression       | 4.72             | 4.43             | 0.72          | 2.23          |
| 偏最小二乘回归<br>Partial least squares regression           | 4.36             | 4.43             | 0.72          | 2.23          |
| 支持向量机<br>Support vector machine                       | 6.36             | 8.00             | 0.77          | 1.64          |
| BP 神经网络<br>Back propagation artificial neural network | 0.22             | 0.81             | 0.93          | 12.2          |

大于 2.0.综合比较,BP 神经网络模型优于其他模型.模型预测结果(图 7)表明,支持向量机的预测精度最差,逐步线性回归以及偏最小二乘预测效果较为理想,BP 神经网络预测效果最好,模型决定系数  $R^2$  为 0.93,预测均方根误差 RMSEP 为 0.81.

## 3 讨论

### 3.1 珠江三角洲水稻土氧化铁的光谱特性及其与含量的相关性

珠江三角洲水稻土中氧化铁含量与反射光谱之间呈负相关,且敏感波段主要位于可见近红外

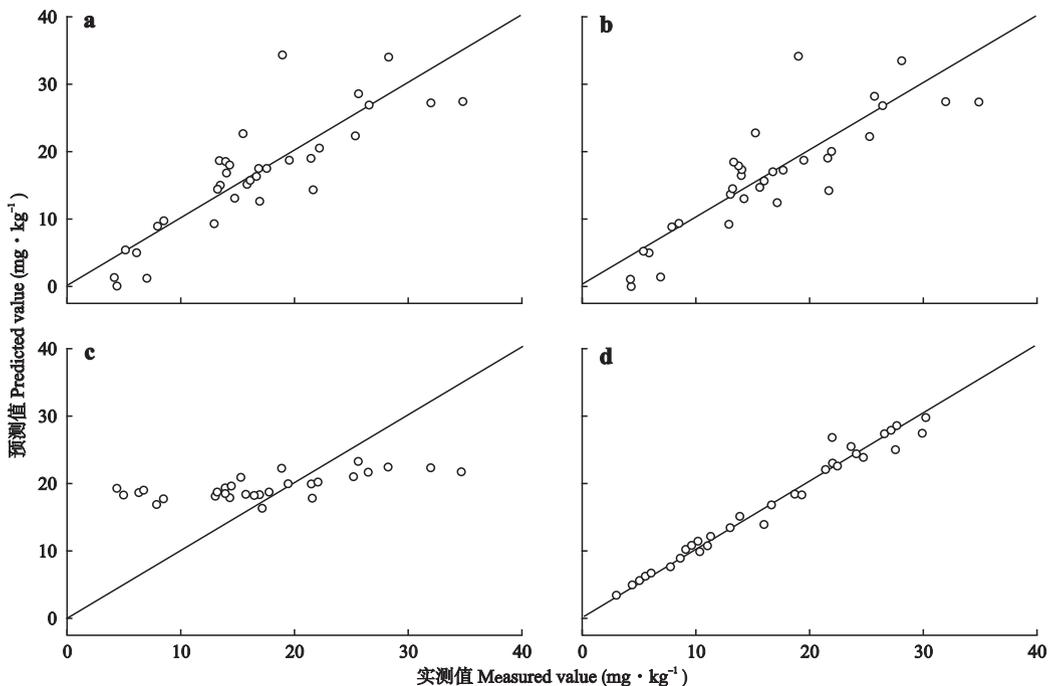


图 7 不同模型验证值散点图

Fig.7 Scatter plots of validation values by different models.

a) 逐步线性回归模型 Stepwise multiple linear regression model; b) 偏最小二乘回归模型 Partial least squares regression model; c) 支持向量机模型 Support vector machine model; d) BP 神经网络模型 Back propagation artificial neural network model.

(400~1000 nm) 区域, 该结论同之前的研究结果一致<sup>[22,44]</sup>. 同时该结论符合土壤特征光谱的产生机理<sup>[12,45]</sup>.

404、574、784、854 和 1204 nm 是本区域土壤氧化铁的特征波段. 不同的研究者采用的提取特征波段的手段不同, 导致提取的特征波段存在差异<sup>[13,46]</sup>. 特征波段提取方法包括利用不同光谱变换形式与土壤氧化铁含量之间的单相关性分析、去包络线分析、去包络线结合单相关分析等多种形式, 不同的提取方法对模型反演精度会造成影响. 本文则是在相关性分析结果基础上通过逐步多元线性以及主成分分析的手段剔除共线性波段的方法获取特征波段.

原始光谱与土壤氧化铁含量之间的相关性整体偏低, 经过微分处理后的相关性显著提高, 尤其是在可见近红外区域, 本结论同已有结论一致<sup>[19]</sup>. 但也有研究认为, 反射光谱与土壤氧化铁含量之间的相关性并不会通过光谱变换得到增强, 只有经过数学计算的微分光谱才可大大提高土壤反射光谱与土壤氧化铁含量的相关性<sup>[47]</sup>. 造成这一结果的可能原因包括: 1) 土壤中 Fe 含量值偏低. 一般情况下, 氧化铁含量的高低明显影响土壤反射率, 氧化铁含量越高, 反射率就越低. 作为亚热带典型区域的珠江三角洲, 其土壤中 Fe 较其他区域的含量高很多; 2) 研究区土壤类型的多样. 不同的土壤类型反射光谱存在差异, 相同的氧化铁含量, 不同的土壤类型其反射光谱不同, 之前的研究多以整个区域为对象, 土壤类型复杂, 会影响土壤反射光谱与土壤氧化铁含量的相关性. 本文仅选择水稻土为单一研究对象, 排除了不同土壤类型对精度的影响.

### 3.2 土壤氧化铁含量反演模型

比较偏最小二乘回归与逐步多元线性回归模型, 二者的反演效果基本相同, 都可用于研究区域土壤氧化铁含量的反演. 但对这两个模型的效果不同研究者的结论有所不同<sup>[14,17,44]</sup>. 出现这种结果的原因可能包括: 1) 采样方式以及样本数量会直接影响模型的精度. 样本数量影响模型精度已得到诸多学者认可, 采样方式对模型精度的影响也逐渐引起研究者的注意, 但尚未有大量文献加以佐证; 2) 不同光谱去噪方法反演模型的精度也有差异. 由于土壤成分复杂, 当土壤中 Fe 含量不高时, 其他成分的干扰会使信噪比降低, 合适的光谱去噪处理手段同样至关重要; 基于不同光谱去噪处理方法, 如小波分析、滤波处理以及平均加权等, 或普遍选择的 S-G 平滑处理, 导致的结果不同; 3) 其他土壤组分的干扰. 土

壤中水分、有机质以及全氮等成分对光谱波段影响较大<sup>[48]</sup>, 这些成分在不同研究区域差异很大, 模型结果自然也有较大不同. 本文虽然已经尽可能排除了这些影响, 但成土母质及众多含量较少成分的影响仍难以排除. 通过高光谱数据直接反演土壤中含量较少的成分, 还需要继续深入研究.

## 4 结 论

本文以亚热带典型区域珠江三角洲水稻土为研究对象, 利用高光谱数据构建了氧化铁含量的最佳反演模型, 对土壤氧化铁含量进行了反演. 结果表明, 亚热带典型区域珠江三角洲水稻土的土壤反射光谱与土壤氧化铁含量之间呈现负相关, 无论光谱是否进行其他的数学计算, 微分光谱都能够显著提升光谱与氧化铁含量之间的相关性. 从提取的特征波段 404、574、784、854 和 1204 nm (其中以 854 nm 的相关性最为显著) 来看, 土壤氧化铁的光谱影响范围为可见近红外波段, 即近红外波段较可见光区域影响显著. 反演模型结果表明, BP 人工神经网络模型的精度和稳健性都非常好, 可用于珠江三角洲水稻土氧化铁含量的快速估测.

**致谢** 感谢陈水森博士提供实验条件, 并特别感谢张欣欣的技术指导.

### 参考文献

- [1] Xiao J-X (肖家欣), Qi X-X (齐笑笑), Zhang S-L (张绍铃). Effects of zinc and iron deficiency on physiological indices, mineral contents, and leaf ultrastructure of *Poncirus trifoliat*. *Chinese Journal of Applied Ecology* (应用生态学报), 2010, **21**(8): 1974–1980 (in Chinese)
- [2] He J-L (贺军亮), Zhang S-Y (张淑媛), Zha Y (查勇), et al. Review of retrieving soil heavy metal content by hyperspectral remote sensing. *Remote Sensing Technology and Application* (遥感技术与应用), 2015, **30**(3): 407–412 (in Chinese)
- [3] Chang C-Y (常春英). Biogeochemical Model and Mechanism of Heavy Metals and Rare Earth Elements (REEs) in Vegetables in Pearl River Delta Regions. PhD Thesis. Guangzhou: Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, 2014 (in Chinese)
- [4] Liu H-J (刘侯俊), Li X-P (李雪平), Han X-R (韩晓日), et al. Effects of Fe-Cd interaction on the lipid peroxidation and antioxidative enzyme activities of rice. *Chinese Journal of Applied Ecology* (应用生态学报), 2013, **24**(8): 2179–2185 (in Chinese)
- [5] Soriano-disla JM, Janik LJ, Rossel RAV, et al. The performance of visible, near-, and mid-infrared reflectance

- tance spectroscopy for prediction of soil physical, chemical, and biological properties. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2014, **49**: 139–186
- [6] Kuang B, Mahmood HS, Quraishi MZ, *et al.* Sensing soil properties in the laboratory, in situ, and on-line: A review. *Advances in Agronomy*, 2012, **114**: 155–223
- [7] Song Y, Li F, Yang Z, *et al.* Diffuse reflectance spectroscopy for monitoring potentially toxic elements in the agricultural soils of Changjiang River Delta, China. *Applied Clay Science*, 2012, **64**: 75–83
- [8] Nanni MR, Demattê JAM. Spectral reflectance methodology in comparison to traditional soil analysis. *Soil Science Society of America Journal*, 2006, **70**: 393–407
- [9] Galvão LS, Pizarro MA, Epiphany JCN. Variations in reflectance of tropical soils: Spectral-chemical composition relationships from AVIRIS data. *Remote Sensing of Environment*, 2001, **75**: 245–255
- [10] Li J-B (李巨宝), Tian Q-J (田庆久), Wu Y-Z (吴昫昭). The study of spectral responses of agricultural soils for Fe, Zn and Se in the area of Fuyang Riversides. *Remote Sensing Information* (遥感信息), 2005, **2005** (3): 10–13 (in Chinese)
- [11] Madeira J, Bedidi A, Cervelle B, *et al.* Visible spectrometric indices of hematite (Hm) and goethite (Gt) content in lateritic soils: The application of a thematic mapper (TM) image for soil-mapping in Brasilia, Brazil. *International Journal of Remote Sensing*, 1997, **18**: 2835–2852
- [12] Xia X-Q (夏学齐), Ji J-F (季峻峰), Chen J (陈骏), *et al.* Analysis of soil physical and chemical properties by reflectance spectroscopy. *Earth Science Frontiers* (地学前缘), 2009, **16**(4): 354–362 (in Chinese)
- [13] He T (何挺). The Study of Applying Hyperspectral Remote Sensing Technology in Land Quality Monitoring. PhD Thesis. Wuhan: Wuhan University, 2003 (in Chinese)
- [14] Ben-Dor E, Banin A. Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 1995, **59**: 364–372
- [15] Ding G-X (丁国香). Studies on the Retrieval of Soil Organic Matter and Total Iron Content from Hyper-Spectrum Based on ANN. Master Thesis. Nanjing: Nanjing University of Information Science & Technology, 2008 (in Chinese)
- [16] Kemper T, Sommer S. Estimate of heavy metal contamination in soils after a mining accident using reflectance spectroscopy. *Environmental Science & Technology*, 2002, **36**: 2742–2747
- [17] Xiong J-F (熊俊峰), Zheng G-H (郑光辉), Lin C (林晨). Estimating soil iron content based on reflectance spectra. *Spectroscopy and Spectral Analysis* (光谱学与光谱分析), 2016, **36**(11): 3615–3619 (in Chinese)
- [18] Montgomery OL. An Investigation of the Relationship between Spectral Reflectance and the Chemical, Physical and Genetic Characteristics of Soils. PhD Thesis. Lafayette, IN: Purdue University, 1978
- [19] Zhou P (周萍). Quantitative Retrieval of Soil Constituents Using Hyperspectrum. PhD Thesis. Beijing: China University of Geosciences, 2006 (in Chinese)
- [20] Brown DJ, Shepherd KD, Walsh MG, *et al.* Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 2006, **132**: 273–290
- [21] Coleman TL, Agbu PA, Montgomery OL. Spectral differentiation of surface soils and soil properties: Is it possible from space platforms? *Soil Science*, 1993, **155**: 283–293
- [22] He T (何挺), Wang J (王静), Cheng Y (程烨), *et al.* Study on spectral features of soil Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *Geography and Geo-Information Science* (地理与地理科学), 2006, **22**(2): 30–34 (in Chinese)
- [23] Clark RN, Roush TL. Reflectance spectroscopy: Quantitative analysis techniques for remote sensing applications. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1984, **89**: 6329–6340
- [24] Lu P, Wang L, Niu Z, *et al.* Prediction of soil properties using laboratory VIS-NIR spectroscopy and hyperion imagery. *Journal of Geochemical Exploration*, 2013, **132**: 26–33
- [25] Ma W-B (马伟波), Tan K (谭琨), Li H-D (李海东), *et al.* Hyperspectral inversion of heavy metals in soil of a mining area using extreme learning machine. *Journal of Ecology and Rural Environment* (生态与农村环境学报), 2016, **32**(2): 213–218 (in Chinese)
- [26] Long X-Y (龙晓泳). Climatic Response of Pedogenic Iron Oxides in Subtropical and Tropical Regions. PhD Thesis. Nanjing: Nanjing University, 2011 (in Chinese)
- [27] Guangdong Statistical Bureau (广东省统计局). Guangdong Statistical Yearbook 2012. Beijing: China Statistics Press, 2013 (in Chinese)
- [28] Chang CY, Yu HY, Chen JJ, *et al.* Accumulation of heavy metals in leaf vegetables from agricultural soils and associated potential health risks in the Pearl River Delta, South China. *Environmental Monitoring and Assessment*, 2014, **186**: 1547–1560
- [29] Maphobbyist. Global Subtropical Climate According to Köppen Climate Classification [EB/OL]. (2010-03-06) [2017-03-31]. <https://en.wikipedia.org/wiki/Subtropics#/media/File:Subtropical.png>
- [30] Dou F (窦飞). Geochemical Mechanism of Cadmium, Copper and Arsenic Availability in Paddy Soil in the Pearl River Delta. Master Thesis. Nanning: Guangxi University, 2015 (in Chinese)
- [31] Sun H (孙慧), Bi R-T (毕如田), Guo Z-X (郭治兴), *et al.* Prediction of distribution of soil Cd concentrations in Guangdong Province, China. *Acta Scientiae Circumstantiae* (环境科学学报), 2016, **36**(11): 4173–4183 (in Chinese)
- [32] Liu W (刘伟), Zhao Z (赵众), Yuan H-F (袁洪福), *et al.* An optimal selection method of samples of calibration set and validation set for spectral multivariate

- analysis. *Spectroscopy and Spectral Analysis* (光谱学与光谱分析), 2014, **34**(4): 947-951 (in Chinese)
- [33] Wilcoxon R. *Encyclopedia of Biostatistics*. London: John Wiley and Sons, 2005
- [34] He J-L (贺军亮), Jiang J-J (蒋建军), Zhou S-L (周生路), *et al.* The hyperspectral characteristics and retrieval of soil organic matter content. *Scientia Agricultura Sinica* (中国农业科学), 2007, **40**(3): 638-643 (in Chinese)
- [35] Johnson RA, Wichern DW. *Applied Multivariate Statistical Analysis*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 2014
- [36] Geladi P, Kowalski BR. Partial least-squares regression: A tutorial. *Analytica Chimica Acta*, 1986, **185**: 1-17
- [37] Rodriguez-Galiano V, Sanchez-Castillo M, Chica-Olmo M, *et al.* Machine learning predictive models for mineral prospectivity: An evaluation of neural networks, random forest, regression trees and support vector machines. *Ore Geology Reviews*, 2015, **71**: 804-818
- [38] Collobert R, Bengio S. SVMToolbox: Support vector machines for large-scale regression problems. *Journal of Machine Learning Research*, 2001, **1**: 143-160
- [39] Tan K, Zhang Q. Estimation of heavy metal concentrations in reclaimed mining soils using reflectance spectroscopy. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, **34**: 3317-3322
- [40] Baumgardner MF, Silva LRF, Biehl LL, *et al.* Reflectance properties of soils. *Advances in Agronomy*, 1986, **38**: 1-44
- [41] Ryerson RA, Rencz AN. *Remote Sensing for the Earth Sciences*. New York: John Wiley & Sons, 1999
- [42] Shepherd KD, Walsh MG. Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 2002, **66**: 988-998
- [43] Huang Y-F (黄应丰), Liu T-H (刘腾辉). Spectral characteristics of main types of soils in Southern China and soil classification. *Acta Pedologica Sinica* (土壤学报), 1995, **32**(1): 58-68 (in Chinese)
- [44] Xu J-H (徐金鸿). The Research on Element Characteristics and Quantitative Remote Sensing of Cenozoic Red Earth in Western Guangdong Province. PhD Thesis. Guangzhou: Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, 2006 (in Chinese)
- [45] Zheng G-H (郑光辉). Study on the Quantitative Estimating of Soil Properties with Hyper-Spectrum in Some Parts of Jiangsu Province. Master Thesis. Nanjing: Nanjing University, 2011 (in Chinese)
- [46] Xie B-Y (谢碧裕). Studies on Soil Iron Oxide Hyper-Spectrum Characteristics and Estimating Model in Hilly Paddy Soil in Southern China. Master Thesis. Jiangxi: Jiangxi Agricultural University, 2015 (in Chinese)
- [47] Yang P (杨萍). Study on Estimating Contents of Soil Components Based on Hyperspectral Reflectance Data in Laboratory. Master Thesis. Nanjing: Nanjing Agricultural University, 2007 (in Chinese)
- [48] Shi Z (史舟). Principle and Method of Hyperspectral Remote Sensing for Soil. Beijing: Science Press, 2014 (in Chinese)

---

作者简介 郭颖, 女, 1992年生, 硕士研究生. 主要从事3S技术与应用研究. E-mail: guoying9224@163.com

责任编辑 肖红

---