doi:10.6041/j.issn.1000-1298.2017.05.018

# 基于分数阶微分的荒漠土壤铬含量高光谱检测

王敬哲<sup>1,2</sup> 塔西甫拉提·特依拜<sup>1,2</sup> 张 东<sup>1,2</sup>

(1. 新疆大学资源与环境科学学院, 乌鲁木齐 830046; 2. 新疆大学绿洲生态教育部重点实验室, 乌鲁木齐 830046)

摘要:为解决高光谱检测土壤中痕量级重金属含量存在的困难,提高土壤重金属铬含量检测的准确度,利用新疆准 东煤田周边 168 个荒漠土壤样本的重金属铬含量及其对应的高光谱数据,运用分数阶微分算法进行光谱数据预处 理,最后利用全部波段进行偏最小二乘建模并进行可视化分析,旨在探讨分数阶微分预处理在高光谱数据估算荒 漠土壤重金属铬含量的可能性。结果表明:原始光谱与吸光率变换的分数阶微分模型均在 1.8 阶微分处达到了最 好的精度效果。吸光率变换 1.8 阶微分模型为最优模型,模型的校正均方根误差为 7.68 mg/kg,  $R_e^2$  = 0.83,预测均 方根误差为 8.39 mg/kg,  $R_p^2$  = 0.78,相对分析误差为 2.14。最后利用铬含量实测值与光谱预测值通过反距离加权 法插值获得研究区土壤重金属铬含量的空间分布,说明利用该方法对土壤重金属铬含量定量检测并进行大尺度的 空间分布反演在一定程度上是可行的,为荒漠土壤重金属污染状况的高光谱检测提供了一定的科学依据和技术支 持。

关键词:荒漠土壤;重金属;铬;分数阶微分;高光谱 中图分类号:X53;X87 文献标识码:A 文章编号:1000-1298(2017)05-0152-07

# Spectral Detection of Chromium Content in Desert Soil Based on Fractional Differential

WANG Jingzhe<sup>1,2</sup> TASHPOLAT • Tiyip<sup>1,2</sup> ZHANG Dong<sup>1,2</sup>

(1. College of Resource and Environment Sciences, Xinjiang University, Urumqi 830046, China
 2. Key Laboratory of Oasis Ecology, Ministry of Education, Xinjiang University, Urumqi 830046, China)

Abstract: To solve the problem in prediction of soil heavy metal content at trace levels by hyperspectral data and improve the accuracy of prediction in soil chromium (Cr) content, fractional order differential algorithm was brought in to preprocess hyperspectral data. With 168 samples of soil taken from the open coalmine area in Eastern Junggar Basin, China, the soil heavy metal Cr contents and the reflectance of these samples were measured by indoors experiments. The hyperspectral data were preprocessed by using fractional order differential algorithm, all of the wavelengths among 401 ~ 2 400 nm were used to calibrate the hyperspectral estimation models of soil Cr content by partial least squares regression (PLSR) and the predicted values were used in visualization analysis. Finally, the possibility of prediction of chromium content in soil with hyperspectral data preprocessed by fractional differential in coalmine area was discussed. The results showed that fractional order differential model of the raw reflectance and the absorption rate transform both achieved the best performance at the 1.8-order derivative. Among all of the models through fractional order differential preprocessing, the model based on 1.8-order derivative of absorbance transform (RMSEC was 7.68 mg/kg,  $R_c^2 = 0.83$ , RMSEP was 8.39 mg/kg,  $R_p^2 = 0.78$ , RPD was 2.14) was much better than others, and had better performance in predicting Cr content in desert soil. Then the spatial distribution of the actual Cr content and its estimation values in soil of the study area were obtained by inverse distance weighted (IDW) algorithm. Moreover, the spatial distributions showed the same trend. The results showed that quantitative inversion of soil Cr content and the spatial distribution of large scale were feasible by this method. This research would provide scientific basis and technical support for the application in monitoring heavy metal contamination by hyperspectral data. Key words: desert soil; heavy metal; chromium; fractional differential; hyperspectral

基金项目:"十二五"国家科技支撑计划项目(2014BAC15B01)和国家自然科学基金重点项目(41130531)

通信作者: 塔西甫拉提·特依拜(1958—),男,教授,博士生导师,主要从事地图学与地理信息系统研究, E-mail: tash@ xju. edu. cn

收稿日期:2016-10-01 修回日期:2016-10-24

作者简介: 王敬哲(1992一), 男, 博士生, 主要从事陆地遥感与全球变化研究, E-mail: wjzf-682@163. com

# 引言

铬(Cr)是环境污染中的有毒重金属元素之一, 在土壤中主要以 Cr(Ⅲ)、Cr(Ⅵ)两种价态存在,其 中 Cr(Ⅵ)移动性大、毒性强且进入土壤后再难迁出 并对环境造成持续性污染进而对人类健康造成严重 威胁<sup>[1-3]</sup>。伴随着农业集约化和工业化的迅速发 展,土壤铬污染的状况愈发严峻<sup>[4]</sup>,如何快速高效 率、无损害且准确地获取土壤中重金属铬含量数据 并据此进行及时的评估与治理,成为近年来生态学 研究的热点。

遥感技术特别是高光谱技术凭借其极高的光谱 分辨率和高效率、无损害、安全、环保等特性而广泛 应用于国内外土壤重金属含量的估算,为土壤重金 属的定量研究提供了新途径<sup>[5-7]</sup>。SIEBIELEC 等<sup>[8]</sup> 使用热红外光谱仪测定了波兰 Tarnowskie Gory 矿 区土壤的光谱数据,建立了热红外发射率与重金属 含量的偏最小二乘(Partial least squares regression, PLSR) 估测模型, 其中 Fe、Cr 和 Cu 估算模型的决定 系数分别为 0.98、0.90 和 0.95。WANG 等<sup>[9]</sup>利用 室内获取的土壤光谱数据对江苏省官兴市的农田重 金属含量进行了定量反演并指出遗传算法与偏最小 二乘回归相结合对土壤中痕量级的重金属具有更好 的反演精度。SONG 等<sup>[10]</sup> 以重庆市万盛矿区为研 究区,在对土壤光谱进行一阶微分等预处理的基础 上,对土壤中铬含量与反射率的各种数学变换形式 进行了相关分析,并利用逐步多元法进行敏感波段 建模,模型决定系数为0.60。夏芳等[11]基于643个 土壤样本的实测重金属含量、有机质含量与高光谱 数据分析了浙江省农田中 Ni、Cu、Cr 等 8 种重金属 含量与有机质含量的相关性,对比了不同重金属元 素的光谱敏感波段并进行建模,Cr模型的预测决定 系数和相对分析误差分别为 0.70 和 1.80。

对土壤中痕量级的重金属直接利用高光谱数据 进行预测存在一定难度,且可靠性低<sup>[12]</sup>。这些针对 土壤重金属所建立的高光谱反演模型,主要基于整 数阶微分、对数变换等简单预处理构建。对于高光 谱这类高维数据源,整数阶微分变换会忽略其中的 分数阶微分信息,可能造成信息丢失,建模精度也会 受到制约<sup>[13-14]</sup>。借助高光谱手段对土壤中的重金 属含量进行反演具有很大难度,因此必须深度挖掘 土壤的光谱信息,以提高土壤重金属铬高光谱定量 预测模型的精度与稳定性。分数阶微分在阶数上对 整数阶微分进行了拓展,并在数字滤波、信号与图像 处理等领域已成熟运用<sup>[15-16]</sup>。张东等<sup>[17]</sup>将分数阶 微分应用在五彩湾矿区土壤砷含量的高光谱定量估 算中,表明利用分数阶微分对矿区土壤光谱数据进 行潜在信息提取是可行的。基于此,本文选取新疆 准东煤田及周边地区为研究区域,探讨分数阶微分 预处理在高光谱数据估算荒漠复垦土壤重金属铬含 量的可能性,以期为煤矿周边复垦地区土壤重金属 污染状况进行快速、准确的高光谱遥感监测提供一 定参考依据。

# 1 研究区概况

研究区位于天山北麓,地处卡拉麦里西南山的 山前戈壁荒漠带,地理位置 88°45′~90°20′E、 44°30′~45°00′N,属典型的极端干旱大陆气候<sup>[18]</sup>。 该地区地表植被稀疏,土地利用类型以沙地、裸土地 和荒漠为主。主要土壤类型为棕模土、灰棕模土、荒 漠风沙土和荒漠碱土,表层土壤的有机质质量分数 不足 2%。准东煤田是我国最大的整装煤炭基地, 由于准东煤田五彩湾矿区等五大露天矿区的开采及 煤化工业园区废水废渣的排放,导致区内土壤中铬、 砷等重金属超标严重<sup>[19]</sup>。

# 2 材料与方法

### 2.1 土壤样品采集与分析

土壤样品采样时间为2014年6月中旬,针对研究区典型景观特征,在矿区、复垦区、荒漠等区设置56个样点(图1),每个样点按10 cm为1层,对0~30 cm的土壤进行人工分层,采用五点混合采样法共采集168个样本,取样混合均匀后用样品袋封装。土壤样品带回实验室后经自然风干、研磨、过筛处理后分为3份,分别用于土壤铬含量、有机质含量以及高光谱测定。土壤铬Cr及有机质含量分别采用日立Z-2000型原子吸收分光光度计和重铬酸钾容量-稀释热法测定。

# 2.2 光谱测定及预处理

土壤的光谱反射率测定使用美国 ASD 公司生 88°30′0″E 89°0′0″E 89°30′0″E 90°0′0″E 90°30′0″E



图 1 研究区位置和采样点分布 Fig. 1 Location of study area and sampling points

产的 FieldSpec 3 型光谱仪(波段 350~2500 nm)在 可控光照条件的暗室内进行。光谱的采样间隔: 350~1000 nm 为1.4 nm,1000~2500 nm 为2 nm, 重采样间隔为1 nm。将制备好的 168 个土壤样品 分别装入黑色盛样皿(直径12 cm、深1.8 cm)中,装 满后将表面刮平。光谱测定的光源为50 ₩ 卤素 灯,测量时距土壤样品表面 50 cm,光源的天顶角为 15°,探头至待测样品的表面距离为10 cm。每次光 谱测定之前均进行白板标定,每个样品重复测量10

次,取10条光谱曲线的算术平均值作为土壤样品实 际反射率光谱。

# 2.3 数据处理与研究方法

为减少光谱噪声的影响,剔除信噪比较低的边 缘波段(350~400 nm 及 2 401~2 500 nm),利用 401~2400 nm 波段的反射光谱数据进行研究。所 有光谱数据进行 Savitzky - Golay 滤波平滑去噪,去 噪后的光谱曲线如图2所示。

分数阶微分对整数阶微分的概念进行了扩展,





用于研究任意阶微分数学性质及其应用的领域。常 用的分数阶微分运算主要基于 Grünwald - Letnikov 分数阶微分一元函数差分表达式来实现,公式[20] 为

$$\frac{d^{v}f(x)}{dx^{v}} \approx f(x) + (-v)f(x-1) + \frac{(-v)(-v+1)}{2}f(x-2) + \dots + \frac{\Gamma(-v+1)}{n!\Gamma(-v+n+1)}f(x-n)$$
(1)

式中 x-----对应点的值 v --阶数

反射率

0.2

0.1

 $\Gamma(\cdot)$ ——Gamma 函数

n——微分上下限之差,若阶数为零,则表示 未经微分处理即变换本身

根据式(1),对所有土壤样品平滑去噪后的原 始光谱反射率 R 以及对应的吸光率(lg(1/R)),进 行0~2阶微分预处理(间隔0.2),作为后续光谱分 析与土壤重金属 Cr 含量预测模型建立的基础。本 研究采用光谱数据建模领域中经典的 PLSR 方法进 行建模。将研究区共168个样本按铬含量从高到低 进行排序,等间隔选取112个作为建模集,56个作 为验证集,分别用于建立模型及检验模型的效果。 比较各模型的校正均方根误差、建模决定系数  $R_{e}^{2}$ 、 预测均方根误差、预测决定系数 R<sub>a</sub>、相对分析误差 等5个参数对 PLSR 模型精度进行验证。 $R_{a}^{2}$ ,  $R_{a}^{2}$ 用 以判定模型的稳定程度,越接近于1说明模型越稳 定;校正均方根误差及预测均方根误差用于表征模 型的准确性,其值越小表明模型的精度越高。另外, 当相对分析误差小于1.4 时,模型几乎不可用;相对 分析误差为1.4~2时,模型只能对样品进行一般估 测且效果一般,相对分析误差在2以上时,模型具有 较好的定量预测能力<sup>[21]</sup>。

#### 结果与分析 3

#### 3.1 土壤重金属铬含量统计分析

由表1可知,研究区所有土壤样本的重金属铬 含量(质量比)平均值为 53.67 mg/kg,为新疆土壤 铬元素背景值 49.30 mg/kg 的 1.10 倍,其中最大值 为110.07 mg/kg,最小值为14.31 mg/kg,变异系数 为34.13%,为中等变异程度。土壤样本的有机质 含量最大值为 95.90 g/kg,且所有样本中有机质的 质量分数低于 2%, 变异系数为 160%, 属强变异程 度。

#### 3.2 土壤光谱曲线特征分析

由图 3 可知,研究区不同铬含量土壤样本光谱 反射曲线形态基本一致,且土壤样品的光谱反射与 其铬含量呈负相关关系,即铬含量越高,光谱反射率 越低。光谱曲线在可见光范围内呈快速上升态势, 在近红波段趋于平缓,并在1413、1922、2200 nm附 近有3个较为明显的水分吸收峰,这主要是3个波 段内的 H<sub>2</sub>O 及其—OH 基团以及粘土矿物中金属— OH 震荡的倍频与合频造成的<sup>[12]</sup>。在 800 ~ 2000 nm 波段内,不同铬含量土壤样本的光谱反射 率曲线差距较大,区分相对容易,这与 SONG 等<sup>[10]</sup>

土壤中有机质与重金属铬含量的统计结果 Tab. 1 Descriptive statistics of soil organic matter and Cr content

参数	最小值	最大值	平均值	标准误差	标准偏差	偏度	峰度	背景值
有机质含量/(g·kg <sup>-1</sup> )	0.26	95.90	6.35	0.78	10.15	5.19	37.54	
铬含量/(mg·kg <sup>-1</sup> )	14.31	110.07	53.67	1.41	18.32	0.11	0.12	49.30



表 1

和 KEMPER 等<sup>[22]</sup>的研究结果吻合。

#### 3.3 土壤铬含量的高光谱预测及检验

全波段建模可充分利用高光谱数据所具有的光 谱信息,且微分处理能有效地消除背景噪声对目标 光谱的干扰并突出光谱特征,本研究利用平滑去噪 后的401~2400 nm 波段的原始反射率及其吸光率 变换的 0~2 阶(间隔 0.2) 共 11 阶的微分数据构建 了土壤铬含量的 PLSR 模型,并利用全部样本的 1/3 (56个)作为验证样本对所建模型进行验证,建模及 预测结果如表 2、3 所示。

表 2 原始光谱偏最小二乘回归模型的建模与预测效果 Tab. 2 Assessment statistics for modeling and predictions of raw reflectance model by partial least squares regression

		建模集	预测集			
阶数	$R_c^2$	校正均方根误差	<b>P</b> <sup>2</sup>	预测均方根误差	相对分	
		$/(mg \cdot kg^{-1})$	$\mathbf{n}_p$	$/(mg \cdot kg^{-1})$	析误差	
0	0.03	18.39	0.02	17.78	1.01	
0.2	0.02	18.42	0.02	17.77	1.01	
0.4	0.03	18.38	0.02	17.79	1.01	
0.6	0.05	18.20	0.02	17.84	1.01	
0.8	0.12	17.53	0.01	17.92	1.00	
1.0	0.13	17.40	0.05	17.50	1.03	
1.2	0.18	16.89	0.06	17.45	1.03	
1.4	0.21	16.53	0.08	17.24	1.04	
1.6	0.38	14.71	0.45	13.35	1.35	
1.8	0.82	7.90	0.77	8.59	2.09	
2.0	0.76	9.12	0.72	9.60	1.87	

原始光谱的 0~0.8 阶微分模型效果没有显著 的变化,其 $R_{e}^{2}$ , $R_{a}^{2}$ 两项指标的均值分别为 0.05 和 0.02, 而相对分析误差仅为 1.01, 预测效果均处于 较差的水平。随着阶数的增多,模型的各项精度评

吸光率偏最小二乘回归模型的建模与预测效果 表 3

Tab. 3 Assessment statistics for modeling and predictions

of absorbance model by partial least squares regression

		建模集	预测集			
阶数	$R_c^2$	校正均方根误差	<b>D</b> <sup>2</sup>	预测均方根误差	相对分	
		$/(mg \cdot kg^{-1})$	$\mathbf{n}_{p}$	$/(mg \cdot kg^{-1})$	析误差	
0	0.02	18.46	0.03	17.76	1.01	
0.2	0.02	18.47	0.03	17.74	1.01	
0.4	0.03	18.37	0.02	17.78	1.01	
0.6	0.06	18.02	0.02	17.84	1.01	
0.8	0.11	17.59	0.03	17.68	1.02	
1.0	0.13	17.33	0.03	17.70	1.02	
1.2	0.16	17.06	0.05	17.56	1.02	
1.4	0.21	16.61	0.09	17.16	1.05	
1.6	0.75	9.40	0.63	10.92	1.65	
1.8	0.83	7.68	0.78	8.39	2.14	
2.0	0.79	8.53	0.69	9.96	1.81	

价指标逐渐好转,预测效果渐升;1.6 阶微分模型的 校正均方根误差和预测均方根误差分别达到了 14.71 mg/kg 和 13.35 mg/kg, 相对分析误差为 1.35,各项指标较之前均有了较大提升。1.8 阶微 分模型的各项指标均达到最优,该模型的校正均方 根误差为 7.90 mg/kg,  $R_c^2 = 0.82$ , 预测均方根误差 为 8.59 mg/kg,  $R_{p}^{2} = 0.77$ , 相对分析误差为 2.09。

吸光率的偏最小二乘模型在0~0.8 阶的变化 趋势与原始光谱的 0~0.8 阶微分模型的各项评价 指标变化趋势类似,0~0.8 阶共5个微分模型的校 正均方根误差和预测均方根误差均维持在高值水 平,说明误差很大。进入1阶微分后,各阶微分模型 的  $R_{c}^{2}$  、  $R_{p}^{2}$  迅速提升,在 1.8 阶处达到了 0.83 和 0.78,模型的稳定度得到了提高。此时模型的校正 均方根误差和预测均方根误差也达到了最低值,相 对分析误差为2.14,说明该模型具有较好的定量预 测能力。经过原始光谱与吸光率变换的分数阶微分 模型均在1.8 阶微分处达到了最好的精度效果并在 2 阶微分处迅速下降,且吸光率变换的各分数阶微 分模型均优于没有经过变换的原始反射率模型。

对上述 22 个模型筛选可以发现,相对分析误差 大于2的模型只有2个,分别是原始反射率1.8阶 微分和吸光率变换1.8 阶微分。对2个模型的建模 精度与预测精度进行综合对比,吸光率变换1.8阶 微分模型较原始反射率的 1.8 阶微分的 R<sup>2</sup><sub>c</sub>, R<sup>2</sup><sub>p</sub> 均提 高了 0.01,校正均方根误差和预测均方根误差分别

降低了 0.22 mg/kg 和 0.20 mg/kg,相对分析误差从 原有的 2.09 提高至 2.14,这表明吸光率变换 1.8 阶 微分能够较好地消除外界因素对光谱的干扰,一定程 度上增强了光谱对土壤中铬的敏感程度,模型的稳定 程度和准确性得到了提高,这说明吸光率变换 1.8 阶 微分建立的模型为最优模型,该模型的校正均方根误 差为 7.68 mg/kg,  $R_c^2 = 0.83$ ,预测均方根误差为 8.39 mg/kg,  $R_p^2 = 0.78$ ,相对分析误差为 2.14。对研 究区土壤铬含量具有较好的定量反演能力。建模样 本、检验样本的实测值与估测值散点如图 4 所示。



图 4 吸光率变换 1.8 阶微分模型建模样本、检验样本的实测值与估算值比较 Fig. 4 Comparisons of measured Cr contents and estimated values of modeling and testing samples through 1.8-order derivative absorbance transformation

## 3.4 土壤重金属铬的空间插值

将上面建立的研究区土壤铬含量的全波段反演 模型应用到全部采样点中,得到了对应土壤采样点 的铬含量预测值,通过反距离权重插值法绘制研究 区内土壤重金属铬的实测与预测含量分布图,如 图5所示。

结合研究区地形(图1)与实测值(图5a)可知, 平原区土壤铬含量总体上高于山区;土壤中铬含量 最高值出现在研究区北部的复垦土地,但此处并不 是矿区密集地区,因此矿区分布并不是重金属浓度 的主要决定因素,还可能受到风向、交通等因素的交 叉影响<sup>[23-24]</sup>。预测值空间分布图(图 5b)反映出的空 间分布情况与图 5a 类似,实测值与预测值的插值平均 绝对误差、均方根误差分别为 1.06 mg/kg、5.27 mg/kg 和实测值插值图的 1.35 mg/kg、4.98 mg/kg,二者虽 然存在一定差异,但最值出现的地区以及整体的空 间分布几乎一致且差异极微。说明利用分数阶微分 算法预处理后高光谱数据对土壤重金属铬含量的监 测具有一定的应用价值,为快速获取荒漠土壤重金 属污染状况提供了可能的途径。





# 4 讨论

定量遥感反演的困难,在于应用参量往往不是 控制遥感信息的主导因子,只能为遥感信息提供弱 信号<sup>[25]</sup>。土壤光谱是其有机质含量、铁氧化物、黏 土矿物和土壤的机械组成等各种成分的综合反映, 就研究区而言,土壤有机质的质量分数普遍低于 2%,从光谱中提取有效信息存在一定困难;且土壤 中重金属含量一般较低,在土壤光谱中很难形成相 应的特征波段。而土壤中的重金属又是一种十分微弱的讯号,因此借助高光谱手段对土壤中的重金属 含量进行反演具有很大难度。

以往土壤重金属含量的高光谱反演模型主要基 于原始光谱反射率等数学变换及对应的一、二阶微 分等光谱预处理方法,结合逐步多元、主成分、PLSR 等回归方法所构建,在精度验证后,确立最优模型: 夏芳等<sup>[11]</sup>以浙江省为研究区,利用 PLSR 对光谱反 射率一阶微分后的数据进行全波段建模并估算了土 壤中 8 种常见重金属含量,其中铬含量估算模型的 相对分析误差为1.80;吴明珠等<sup>[26]</sup>对光谱反射率、吸光 率进行一、二阶微分及去包络线处理后,结合多种线 性、非线性回归方法,建立的多种亚热带土壤铬含量的 预测模型中,最优模型为基于 520 nm 波长的指数型函 数,该模型的检验相关系数为 0.484;解宪丽等<sup>[27]</sup>构建 了基于 627 nm 和 672 nm 二阶微分处理后的组合变量, 并建立了基于该变量的贵溪市铜冶炼厂附近土壤中铬 元素非线性回归模型,该模型决定系数为 0.70。

本研究利用分数阶微分公式计算原始反射率及 其吸光率变换的 0~2 阶(间隔 0.2) 共 11 阶的微分 数据,兼顾了单个波段的光谱信息以及微分窗口内 的一、二阶微分的光谱信息,发挥分数阶微分的非局 部性与遗传性等特点,深度挖掘光谱潜在信息。同 时,利用 PLSR 的优势,从具有"维数灾难"以及波段 间多重共线性的高光谱全波段数据中<sup>[28]</sup>,充分挖掘 与土壤中重金属 Cr 相关的波段信息,建立比以往仅 基于整数阶微分更多的模型,提供更多的选择空间。 以吸光率变换为例,常用的一、二阶微分预处理后建 模的相对分析误差分别为 1.02 和 1.81, 而经过分 数阶微分预处理的1.8 阶微分建模相对分析误差达 2.14,此外经过微分预处理后最优的校正均方根误 差、预测均方根误差较一阶微分分别降低了 9.65 mg/kg 和 9.31 mg/kg, R<sup>2</sup><sub>e</sub>、R<sup>2</sup><sub>p</sub>则 较 原 有 的 0.13、0.05 提高至 0.83、0.78, 说明分数阶预处理过 后的模型精度和稳健性较整数阶微分有了大幅提 升,并达到了土壤重金属铬含量高光谱预测的精度 要求。分数阶微分算法为高光谱数据定量预测土壤 中痕量级重金属含量提供了新的角度,且提高了土 壤重金属铬含量预测的准确度与稳健性,说明该方 法在高光谱数据估算矿区周边土壤重金属含量上是 可行的。研究区域覆盖范围极大,受交通可达性等 因素的影响,样点分布不够均匀,预测制图的精度还 有待于进一步深入分析并加以验证。

# 5 结束语

本研究利用168个土壤样本的重金属铬含量及 其对应的高光谱数据,运用分数阶微分算法进行预 处理并利用平滑去噪后的 401~2 400 nm 波段对研 究区的土壤重金属铬含量进行了 PLSR 建模,原始 光谱及其吸光率变换的分数阶微分模型均在1.8阶 微分处达到了最好的精度效果,目吸光率变换的各 分数阶微分模型均优于没有经过变换的原始反射率 模型。吸光率变换 1.8 阶微分模型为最优模型,该 模型的校正均方根误差为 7.68 mg/kg,  $R_c^2 = 0.83$ , 预测均方根误差为 8.39 mg/kg,  $R_s^2 = 0.78$ ,相对分 析误差为2.14,对研究区土壤铬含量具有较好的定 量反演能力。通过实测值与预测值的空间插值图对 比分析,说明利用分数阶微分处理后的高光谱数据 估算土壤重金属铬含量并进行大尺度空间分布反演 是可行的,为矿区复垦土壤的重金属铬污染情况监 测提供了一定的科学依据和技术支持。

### 参考文献

- 1 GREENWAY G M, SONG Q J. Heavy metal speciation in the composting process[J]. Journal of Environmental Monitoring, 2002, 4(2): 300-305.
- 2 TURGUT C, PEPE M K, CUTRIGHT T J. The effect of EDTA on Helianthus annuus uptake, selectivity, and translocation of heavy metals when grown in Ohio, New Mexico and Colombia soils[J]. Chemosphere, 2005, 58(8): 1087-1095.
- 3 DUBBIN W E. Influence of organic ligands on Cr desorption from hydroxy-Cr intercalated montmorillonite [J]. Chemosphere, 2004, 54(8): 1071-1077.
- 4 王旌,罗启仕,张长波,等. 铬污染土壤的稳定化处理及其长期稳定性研究[J]. 环境科学,2013,34(10):4036-4041. WANG Jing, LUO Qishi, ZHANG Changbo, et al. Stabilization and long-term effect of chromium contaminated soil [J]. Environmental Science, 2013, 34(10):4036-4041. (in Chinese)
- 5 LI X, LIU L, WANG Y, et al. Heavy metal contamination of urban soil in an old industrial city (Shenyang) in Northeast China [J]. Geoderma, 2013, 192: 50 - 58.
- 6 LIU M, LIU X, ZHANG B, et al. Regional heavy metal pollution in crops by integrating physiological function variability with spatio-temporal stability using multi-temporal thermal remote sensing [J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2016, 51: 91 102.
- 7 邬登巍,吴昀昭,马宏瑞.基于中红外漫反射光谱的土壤重金属元素含量预测研究[J].光谱学与光谱分析,2010, 30(6):1498-1502.

WU Dengwei, WU Junzhao, MA Hongrui. Study on the prediction of soil heavy metal elements content based on mid-infrared diffuse reflectance spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(6): 1498-1502. (in Chinese)

- 8 SIEBIELEC G, MCCARTY G W, STUCZYNSKI T I, et al. Near- and mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy for measuring soil metal content[J]. Journal of Environmental Quality, 2004, 33(6): 2056 - 2069.
- 9 WANG J, CUI L, GAO W, et al. Prediction of low heavy metal concentrations in agricultural soils using visible and near-infrared reflectance spectroscopy [J]. Geoderma, 2014, 216: 1-9.

- 10 SONG L, JIAN J, TAN D J, et al. Estimate of heavy metals in soil and streams using combined geochemistry and field spectroscopy in Wan-sheng mining area, Chongqing, China [J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2015, 34: 1-9.
- 11 夏芳,彭杰,王乾龙,等.基于省域尺度的农田土壤重金属高光谱预测[J].红外与毫米波学报,2015,34(5):593-598. XIA Fang, PENG Jie, WANG Qianlong, et al. Prediction of heavy metal content in soil of cultivated land: hyperspectral technology at provincial scale[J]. Journal of Infrared and Millimeter Waves, 2015, 34(5):593-598. (in Chinese)
- 12 卓荦. 基于高光谱遥感的土壤重金属空间分布研究[D]. 武汉: 武汉大学, 2010. ZHUO Luo. The research of estimating heavy metal spatial distribution of soil using hyperspectral data[D]. Wuhan: Wuhan University, 2010. (in Chinese)
- 13 徐继刚,冯新泸,管亮,等.分数阶微分在红外光谱数据预处理中的应用[J]. 化工自动化及仪表, 2012, 39(3): 347 351.
  XU Jigang, FENG Xinlu, GUAN Liang, et al. Fractional differential application in reprocessing infrared spectral data [J].
  Control and Instruments in Chemical Industry, 2012, 39(3): 347 351. (in Chinese)
- 14 张东,塔西甫拉提·特依拜,张飞,等.分数阶微分算法对盐渍土高光谱数据的影响研究[J].光学学报,2016,36(3):
  274-281.

ZHANG Dong, TASHPOLAT. Tiyip, ZHANG Fei, et al. Effect of fractional differential algorithm on hyperspectral data of saline soil[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(3): 274 - 281. (in Chinese)

- 15 TSENG C C, LEE S L. Design of linear phase FIR filters using fractional derivative constraints [J]. Signal Processing, 2012, 92(5): 1317-1327.
- 16 TARASOV V E. On chain rule for fractional derivatives [J]. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2016, 30(1): 1-4.
- 17 张东,塔西甫拉提·特依拜,张飞,等.分数阶微分在高光谱数据估算矿区土壤砷含量中的应用[J].中国矿业,2015, 24(11):71-76.

ZHANG Dong, TASHPOLAT. Tiyip, ZHANG Fei, et al. Application of fractional order derivative in estimation of As content of soil in coalmine area using hyperspectral data[J]. China Mining Magazine, 2015, 24(11): 71-76. (in Chinese)

- 18 崔文采. 新疆土壤[M]. 北京:科学出版社, 1996.
- 19 姚峰,包安明,古丽·加帕尔,等.新疆准东煤田土壤重金属来源与污染评价[J].中国环境科学,2013,33(10):1821-1828. YAO Feng, BAO Anming, GULI·Jiapaer, et al. Soil heavy metal sources and pollution assessment in the coalfield of East Junggar Basin in Xinjiang[J]. China Environmental Science, 2013, 33(10): 1821-1828. (in Chinese)
- 20 张东, 塔西甫拉提·特依拜, 张飞, 等. 分数阶微分在盐渍土高光谱数据预处理中的应用[J]. 农业工程学报, 2014, 30(24):151-160.

ZHANG Dong, TASHPOLAT. Tiyip, ZHANG Fei, et al. Application of fractional differential in preprocessing hyperspectral data of saline soil[J]. Transactions of the CSAE, 2014, 30(24): 151-160. (in Chinese)

- 21 SHI Z, WANG Q L, PENG J, et al. Development of a national VNIR soil-spectral library for soil classification and prediction of organic matter concentrations [J]. Science China Earth Sciences, 2014, 57(7): 1671-1680.
- 22 KEMPER T, SOMMER S. Estimate of heavy metal contamination in soils after a mining accident using reflectance spectroscopy [J]. Environmental Science & Technology, 2002, 36(12): 2742 - 2747.
- 23 史舟,梁宗正,杨媛媛,等.农业遥感研究现状与展望[J/OL].农业机械学报,2015,46(2):247-260.http://www.jcsam.org/jcsam/ch/reader/view\_abstract.aspx? flag = 1&file\_no = 20150237&journal\_id = jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2015.02.037.

SHI Zhou, LIANG Zongzheng, YANG Yuanyuan, et al. Status and prospect of agricultural remote sensing [J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2015, 46(2):247 - 260. (in Chinese)

24 阿不都艾尼·阿不里,塔西甫拉提·特依拜,买买提·沙吾提,等.准东露天煤矿土壤重金属的污染及空间分布特征分析 [J].中国矿业,2016,25(3):58-64.

ABDUGHENI·Abliz, TASHPOLAT·Tiyip, MAMAT·Sawut, et al. Analysis of the spatial distribution of soil heavy metal pollution in Zhundong open pit coal mine[J]. China Mining Magazine, 2016, 25(3): 58-64. (in Chinese)

- 25 刘巍,杨建军,汪君,等. 准东煤田露天矿区土壤重金属污染现状评价及来源分析[J]. 环境科学, 2016, 37(5): 1938-1945. LIU Wei, YANG Jianjun, WANG Jun, et, al. Contamination assessment and sources analysis of soil heavy metals in opencast mine of East Junggar Basin in Xinjiang[J]. Environmental Science, 2016, 37(5): 1938-1945. (in Chinese)
- 26 吴明珠,李小梅,沙晋明. 亚热带土壤铬元素的高光谱响应和反演模型[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 36(6): 1660 1666.
  WU Mingzhu, LI Xiaomei, SHA Jinming. Spectral inversion models for prediction of total chromium content in subtropical soil
  [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2014, 36(6): 1660 1666. (in Chinese)
- 27 解宪丽,孙波,郝红涛. 土壤可见光-近红外反射光谱与重金属含量之间的相关性[J]. 土壤学报, 2007, 44(6): 982 993.
  XIE Xianli, SUN Bo, HAO Hongtao. Relationship between visible-near infrared reflectance spectroscopy and heavy metal of soil concentration[J]. Acta Pedologica Sinica, 2007, 44(6): 982 993. (in Chinese)
- 28 PLAZA A, MARTINEZ P, PLAZA J, et al. Dimensionality reduction and classification of hyperspectral image data using sequences of extended morphological transformations[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2005, 43(3): 466 - 479.