DOI: 10.20103/j.stxb.202311202527

聂磊超,曲柯莹,崔丽娟,翟夏杰,赵欣胜,王泽成,王金枝,雷茵茹,李晶,李伟.不同粒径湿地土壤高光谱特征及碳氮磷含量反演模型研究.生态学报,2024,44(15):6618-6629.

Nie L C, Qu K Y, Cui L J, Zhai X J, Zhao X S, Wang Z C, Wang J Z, Lei Y R, Li J, Li W. Hyperspectral characteristics and inversion model of carbon, nitrogen, and phosphorus contents in wetland soil with different particle sizes. Acta Ecologica Sinica, 2024, 44(15):6618-6629.

不同粒径湿地土壤高光谱特征及碳氮磷含量反演模型 研究

聂磊超^{1,2},曲柯莹^{1,2},崔丽娟^{1,2},翟夏杰^{1,2},赵欣胜^{1,2},王泽成^{1,2},王金枝^{1,2},雷茵茹^{1,2},李 晶^{1,2},李 伟^{1,2,*}

- 1 中国林业科学研究院湿地研究所湿地生态功能与恢复北京市重点实验室,生态保护与修复研究所,北京 100091
- 2 北京汉石桥湿地生态系统国家定位观测研究站, 北京 100091

摘要:河流湿地是非常重要的湿地类型,其中河流湿地土壤能够有效维持河流湿地生态系统的稳定性。土壤碳氮磷是支撑湿地土壤质量和植被生长的关键营养元素,利用高光谱遥感数据对其进行估算对实现湿地土壤养分信息的快速和准确检测具有重要意义。土壤粒径作为土壤最重要的属性之一,对土壤样本的光谱反射率有着重要影响,并且是影响土壤结构、阳离子交换能力、植物养分可用性等的重要因素。以陕西黄河湿地省级自然保护区为研究区,于 2022 年 8—9 月采集 477 份湿地表层土壤样本,经过室内过筛处理后得到 1.0 mm、0.3 mm、0.2 mm、0.1 mm 四种不同粒径的土壤样本。基于原始光谱数据及一阶微分转换光谱数据对土壤碳、氮、磷含量建立不同粒径的偏最小二乘回归、随机森林、高斯过程回归 3 种预测模型,比较建模 R²以及 RMSR 选择最优模型,并筛选敏感波段构建模型进行评价。研究结果显示:(1)光谱反射率数值随土壤粒径的减小而增大,0.1 mm粒径的预测模型相比于其他粒径始终有着更好的精度;(2)基于一阶微分光谱建立的土壤有机碳、全氮、全磷含量估算模型均具有更高的精度;(3)基于敏感波段建立的偏最小二乘回归模型,建模 R²范围 0.62—0.98,验证 R²范围 0.36—0.94,相比其他模型具有更优秀更稳定的反演效果。研究结果表明通过控制土壤粒径建立土壤碳、氮、磷含量的估算模型是可行的,选择合适的粒径大小能够提高反演模型估算精度。而偏最小二乘回归作为具有较高精度的反演模型可以帮助提高模型的稳定性和预测能力,从而更准确地估算土壤中的碳、氮、磷含量。研究结果为基于高光谱遥感的不同粒径处理的湿地表层土壤碳、氮、磷定量反演提供坚实的理论支撑与技术支持。

关键词:高光谱:粒径:机器模型:湿地土壤:模型研究

Hyperspectral characteristics and inversion model of carbon, nitrogen, and phosphorus contents in wetland soil with different particle sizes

NIE Leichao^{1,2}, QU Keying^{1,2}, CUI Lijuan^{1,2}, ZHAI Xiajie^{1,2}, ZHAO Xinsheng^{1,2}, WANG Zecheng^{1,2}, WANG Jinzhi^{1,2}, LEI Yinru^{1,2}, LI Jing^{1,2}, LI Wei^{1,2,*}

- 1 Beijing Key Laboratory of Wetland Services and Restoration, Institute of Wetland Research, Institute of Ecological Conservation and Restoration, Chinese Academy of Forestry, Beijing 100091, China
- 2 Beijing Hanshiqiao National Wetland Ecosystem Research Station, Beijing 100091, China

Abstract: River wetlands are a critically important type of wetland, with soil playing a vital role in maintaining the stability of riverine wetland ecosystems. Soil carbon, nitrogen, and phosphorus are key nutrient elements supporting soil quality and

基金项目:黄河流域生态系统生态质量演变研究(CAFYBB2021ZB003);黄河流域湿地生态承载力研究(20212DKT005-3)

收稿日期:2023-11-20; 网络出版日期:2024-05-24

^{*}通讯作者 Corresponding author.E-mail: wetlands207@163.com

vegetation growth in wetlands. Utilizing hyperspectral remote sensing data to estimate them is of significant importance for rapid and accurate detection of soil nutrient information in wetlands. Soil particle size, as one of the most important soil properties, has a significant impact on the spectral reflectance of soil samples and is a crucial factor affecting soil structure, cation exchange capacity, and plant nutrient availability. Taking the Shaanxi Yellow River Wetland Provincial Nature Reserve as the study area, 477 surface soil samples were collected from August to September 2022, and after sieving in the laboratory, four different particle-sized soil samples of 1.0 mm, 0.3 mm, 0.2 mm, and 0.1 mm were obtained. Three prediction models, namely partial least squares regression (PLSR), random forest (RF), and Gaussian process regression (GPR), were established for soil carbon, nitrogen, and phosphorus content based on original spectral data and first-order differential transformed spectral data of different particle sizes. The models were compared in terms of modeling R^2 and RMSR to select the optimal model, and sensitive bands were selected to construct the model for evaluation. The research results showed that; (1) The numerical values of spectral reflectance increased with decreasing soil particle size, and the prediction model for 0.1 mm particle size consistently exhibited better accuracy than other particle sizes; (2) Models for estimating soil organic carbon, total nitrogen, and total phosphorus content based on first-order differential spectra had higher accuracy; (3) Partial least squares regression (PLSR) models based on sensitive bands had a modeling R^2 range of 0.62-0.98 and a validation R^2 range of 0.36-0.94, demonstrating superior and more stable inversion results compared to other models. The study results indicate that establishing models to estimate soil carbon, nitrogen, and phosphorus content by controlling soil particle size is feasible, and selecting appropriate particle sizes can improve the accuracy of inversion models. Partial least squares regression (PLSR), as a high-precision inversion model, can help enhance the stability and predictive capability of the model, thereby more accurately estimating carbon, nitrogen, and phosphorus content in the soil. The research results provide solid theoretical and technical support for the quantitative inversion of surface soil carbon, nitrogen, and phosphorus in wetlands with different particle size treatments based on hyperspectral remote sensing.

Key Words: hyperspectral; particle size; machine model; wetland soil; model study

河流湿地是具有独特生态结构特征和多种生态功能的重要湿地类型之一,是生态系统物质、能量和信息转移与转化的活跃地带^[1-3]。河流湿地土壤在河流湿地生态系统稳定性维持、各种元素过滤固定、富集方面发挥着重要作用^[4-6]。陕西黄河湿地是黄河中游地区面积最大的湿地之一,也是陕西省最大的河流湿地,其土壤碳组分和氮磷元素成为我国陆地生态系统碳库的重要组成部分和支撑湿地土壤质量和植被生长的关键营养物质,正是当今气候变化和陆地生态系统物质循环研究的焦点问题^[7-10]。土壤作为一个自然连续体,土壤有机碳、全氮、全磷的分布特征具有明显的空间异质性^[11]。传统的实验室化学测量方法操作成本高,测量时容易产生化学废料造成环境污染,无法大面积推广和应用^[12-13]。可见-近红外高光谱技术可以获取土壤中的多种组分信息,分析速度快、操作简单、检测成本低,为土壤元素含量检测提供新的途径^[14]。

当前对于土壤养分高光谱反演研究中,研究者们通过适当的光谱数据预处理和模型构建方法有效提高了预测精度。在光谱预处理上,采用的方法包括对原始光谱反射率进行一阶导数、相关性分析、对数变换等[15-16];在模型构建方法上,采用的模型主要是线性模型,例如一元线性回归、偏最小二乘回归等,另外还有一些数据挖掘技术也被众多学者运用于该方面研究,例如随机森林、高斯过程回归模型等[17-19]。

除了光谱预处理和模型构建方法的不断改进,研究者们还在关注土壤的另一个重要属性,即土壤粒径。土壤粒径作为土壤最重要的属性之一,已被公认为是影响土壤结构、阳离子交换能力、土壤水力特性和植物养分可用性的重要因素。Willimas 等人的研究结果表明,土壤样本光谱预测的模型精准度会受到土壤样本粒径大小的影响^[20]。Dalal 等人对于表层土壤细研磨样品(<0.25 mm)的有机碳和全氮预测标准误差分别为0.16%和0.014%,然而对于粗研磨土壤(<2 mm)有机碳和全氮预测标准误差要大得多^[21]。Wu 等制备出 6种不同土壤粒径的样本,并对其土壤有机质含量分别进行了建模预测,结果显示,土壤粒径大小会影响基于高

光谱数据对土壤有机质含量的预测效果,并认为土壤粒径的不断减小会导致土壤光谱反射率数据随之增大^[22]。司海清等人研究发现不同颗粒大小对高光谱估算土壤有机质含量有着很大影响,土样过 60 目和 100 目筛的光谱反射率明显增加^[23]。武红旗等人基于未处理粒径的原始土壤样本与处理粒径后的 2 mm 粒径土壤样本分别进行建模预测,结果表示,基于 2 mm 粒径土壤样本光谱数据的建模精度较原始土壤样本有大幅度提升^[24]。

目前研究人员认为土壤粒径对土壤光谱特征的研究有着重要影响,单一粒径土壤的光谱特征是土壤理化特性的综合反映。土壤颗粒粒径(比表面积)对土壤光谱反射率有显著影响,以往的土壤养分高光谱反演研究主要集中在同一种粒径的土壤上,采用不同的光谱变换和建模方法,并未考虑土壤粒径差异对光谱检测土壤养分含量的影响^[25]。关于土壤样本如何进行粒径筛选及最优粒径还没有统一的认可,基于此,本研究以陕西黄河湿地土壤为研究对象,通过室内过筛处理获得4种不同粒径土壤样本,并利用高光谱技术建立不同粒径土壤有机碳、全氮、全磷含量预测模型,对前人研究进行挖掘,以实现对湿地土壤养分信息的快速精准检测,帮助湿地管理降低成本。

1 材料与方法

1.1 研究区域概况

陕西黄河湿地省级自然保护区位于陕西省关中平原东部(110°10′—110°36′E,34°36′—35°40′N)。整个自然保护区的总面积为 45986 hm²,功能分区按照核心区、缓冲区、实验区三个标准分类部分,分别占据保护区总面积的 39.60%、38.65%、21.75%。以黄河、渭河、洛河三条主要河流交汇处的河床为重要组成部分,由三条河流水面、岸带滩涂、泛洪平原、河床及少量阶地组成。研究区属暖温带大陆性半湿润季风气候,四季分明,雨热同季。年平均气温 13.5℃,年降水量 529—574 mm,春暖干燥、降水少,夏季炎热多雨,秋季凉爽湿润、降温快,冬季寒冷多风、雨雪稀少。研究区内土壤类型有盐土、新积土和沼泽土^[26]。湿地植物区系以世界广布种为主,种子植物 70 科,236 属,287 种,其中我国特有种植物 20 种,国家保护植物 1 种。湿地群落内主要优势植物物种为芦苇(Phragmites australis)、香蒲(Typha orientalis)、香附子(Cyperus rotundus)。

1.2 数据获取

1.2.1 土壤样本采集

采样时间为 2022 年 8—9 月。每个样点采集 0—30 cm 深度的土壤,充分混合后装袋。采样点间隔在 50 m以上,共选择样点 477 个,最终采集样本情况为:光滩湿地土壤样本 117 份,芦苇湿地土壤样本 118 份,香 附子湿地土壤样本 120 份,香蒲湿地土壤样本 122 份。采样区域保证始终处于黄河湿地自然保护区内,将为结果分析提供充足的数据支撑。

1.2.2 土壤碳、氮、磷养分含量化学测定

土壤有机碳 (soil organic carbon, SOC) 含量采用重铬酸钾-硫酸亚铁滴定法测定,土壤全氮 (total nitrogen, TN) 含量采用半微量凯氏定氮法测定,土壤全磷 (total phosphorus, TP) 含量采用硫酸-高氯酸消化-钼锑抗比色法测量。

1.2.3 不同粒径的土壤样本高光谱数据测量

在野外采集到的新鲜土样置于室内阴凉干燥通风处自行风干,手工剔除土壤样本中的沙砾、虫体、植物根系等杂物后将土壤样本充分混合,倒入陶瓷研钵中充分研磨,依次经过 1.0 mm、0.3 mm、0.2 mm、0.1 mm 孔径的筛子,孔径在 0.3—1.0 mm 范围之间的土壤样本命名为 1.0 mm 样本,孔径在 0.2—0.3 mm 范围之间的土壤样本命名为 0.3 mm 样本,孔径在 0.1—0.2 mm 范围之间的土壤样本命名为 0.2 mm 样本,孔径小于 0.1 mm 的土壤样本命名为 0.1 mm 样本,制备完成后进行不同粒径土壤光谱测量。

使用 ASD FS4 (Analytical Spectral Devices, Inc, Boulder, CO, 美国), 搭配仪器配套的土壤光谱反射率测试 探头。将土壤反射率探头垂直置于样品表上方 5 cm 处, 探头接收土壤光谱的区域直径不超过培养皿的范围。

测量时,仪器需要提前预热 30 分钟后再进行白板定标。每份土壤样品取 10 条光谱曲线,将 10 条光谱曲线的 算术平均值作为该土壤样品的实际反射光谱数据,减少测量时土壤样品光谱的误差。

1.2.4 土壤数据预处理

用 Viewspec Pro 软件提取光谱数据。首先通过抛物线校正函数修改光谱曲线,以避免光谱采集中连接点的跳跃,然后通过连续 10 个点的平滑处理对光谱反射率曲线进行平滑,以消除光谱数据采集过程中由背景噪声引起的反射率误差^[27]。

为了强调土壤光谱反射率数据和土壤元素含量之间的相关性关系,使用了两种光谱数学变换,即原始光谱反射率(RAW)数据和一阶微分反射率(FD)数据^[28],转换公式为:

$$FDR(\lambda_i) = \frac{R(\lambda_{i+1}) - R(\lambda_{i-1})}{\Delta \lambda}$$

式中, λ_i 是每个波段的波长, $FDR(\lambda_i)$ 是波长 λ_i 的一阶微分光谱值, $\Delta\lambda$ 是从波段 i 到波段 i +1 的波长值。此外,由于许多高光谱数据带中的数据冗余,为了提高模型的准确性,原始光谱反射率 (RAW) 和一阶微分反射率 (FD) 被用作自变量,与土壤碳、氮和磷含量进行皮尔逊相关性分析,此过程基于 R 语言实现 [29]。

1.2.5 反演模型的构建与精度验证

根据土壤样本的碳、氮、磷含量对数据集进行梯度排序,将土壤光谱反射率总数据集中排序间隔数为三的样本划入同一个样本小层次,最终得到四个样本小层次,按照 3:1 的比例划分成两组,3/4 样本作为建模集建模,剩余 1/4 样本作为验证集对建模进行验证。依托 Weka3.8 软件构建土壤生态化学计量特征的偏最小二乘 (Partial Least Squares Regression, PLSR)、随机森林(Random Forest, RF)、高斯过程回归(Gaussian Process Regression,GPR)三种预测模型。模型反演精度评价通过对比决定系数 (R^2)、均方根误差(Root-mean-square error,RMSE)来完成评估, R^2 越大,RMSE 越小,表明预测模型的预测精度越高[30]。其中:

$$R^{2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y - y_{i})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (\bar{y} - y_{i})^{2}}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y - y_i)^2}{n}}$$

式中,y 为土壤元素含量的实测值, y_i 为土壤元素含量的模型预测值, \bar{y} 为土壤元素含量实测平均值,n 为样本数。

2 结果

2.1 不同粒径下土壤原始光谱曲线特征

四种不同粒径所获得的土壤光谱反射率曲线(图1),在350—2500nm的光谱反射率范围内,土壤光谱反射率系数随着土壤粒径的减小而增加,粒径为0.1 mm的土壤光谱反射率最高,粒径为1 mm的土壤光谱反射率最低。从土壤光谱反射率曲线的整体角度来看,四种不同粒径的反射率曲线变化趋势基本相似,近乎平行,且在1400 nm、1900 nm和2200 nm波段处的吸收峰凹陷程度也基本相同。

2.2 基于不同粒径的土壤元素含量模型构建与评价

首先分别基于不同粒径土壤的原始光谱以及一阶微分光谱建立土壤有机碳、全氮、全磷含量的反演模型,比较筛选出不同粒径类型下不同土壤元素的最优模型。然后再基于原始光谱和一阶微分光谱的敏感波段数据同样建立不同粒径的土壤有机碳、全氮、全磷含量的反演模型,通过反演精度来判定土壤粒径对基于高光谱数据预测土壤有机碳、全氮、全磷含量的影响作用,找到最适用的粒径大小以及模型。

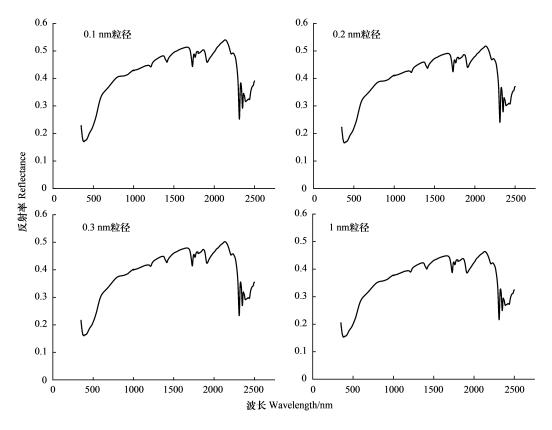


图 1 不同粒径下的土壤光谱反射率曲线

Fig.1 Spectral reflectance curve of soil under different particle sizes

2.2.1 基于不同粒径全波段的土壤元素含量模型构建与评价

模型建模效果和验证结果如表 1 所示。比较两种光谱数据的精度可以发现,当在模型建模时,基于一阶微分光谱建立的三种模型精度均高于或等于原始光谱。但在模型验证中,情况发生了改变,对于 RF 来说,一阶微分精度依然始终高于原始光谱。而 GPR 在预测 TP 时依然保持这个规律,但在反演 SOC、TN 时,除了对 0.1 mm 粒径梯度的 TN 预测时,一阶微分精度稍好一些之外,其他粒径梯度下的原始光谱精度均高于一阶微分,并且 RMSE 也均更低。对于 PLSR 来说,原始光谱建模具有更高的验证精度和更低的 RMSE。因此对于 RF 模型来说,基于一阶微分光谱具有更好的反演效果;对于 PLSR 模型来说,基于原始光谱具有更好的反演效果;而对于 GPR 模型来说,使用哪种数据类型还有待进一步研究。

比较土壤 SOC、TN、TP 预测精度上的差别,可以发现 SOC、TN 具有着更高的预测精度以及验证精度,建模 R^2 范围为 0.64—0.99,验证 R^2 范围为 0.28—0.93,而 TP 建模 R^2 范围为 0.62—0.99,验证 R^2 范围为 0.26—0.65。 比较三种反演模型发现,PLSR 建模 R^2 范围为 0.76—0.98,验证 R^2 范围为 0.38—0.80;GPR 建模 R^2 为 0.62—0.97,验证 R^2 范围为 0.28—0.92;RF 建模 R^2 范围为 0.96—0.99,验证 R^2 范围为 0.26—0.91。 因此相互比较来看,RF 模型对于不同粒径的土壤 SOC、TN、TP 具有更加优秀的反演效果,而 PLSR 模型具有更稳定的反演表现。

比较本研究设置的四种不同的土壤粒径梯度的反演结果,可以发现 0.1 mm 粒径梯度的反演模型具有最高的模型精度和稳定性,其他三种粒径梯度的反演精度相互之间并没有固定规律。综合来看,基于 0.1 mm 粒径土壤的原始光谱建立的 PLSR 模型具有更高的反演精度和更高的稳定性。

进一步绘制 SOC、TN、TP 在 0.1 mm 粒径梯度时的两种光谱全波段三种模型的估算散点图(图 2),可以看出,PLSR 模型的建模集点位基本密集分布于 1:1 对角线上,极少样点会偏离 1:1 对角线,且其验证集与建模集偏差较小,验证集散点也基本处于 1:1 直线附近,精度均能达到较好的估算要求。

表 1 基于不同粒径全波段光谱的土壤有机碳、全氮、全磷的建模与评价

Table 1 Modeling and evaluation of soil organic carbon, total nitrogen, and total phosphorus based on full band spectra of different particle sizes

	Je2- 27 (原始 Original				一阶微分 First derivative				
元素	粒径/mm Ptarticle size	模型 Model	建模 Modeling set		验证 Validation set		建模 Modeling set		验证 Validation set		
Elements											
			R^2	RMSE	R^2	RMSE	R^2	RMSE	R^2	RMSE	
有机碳 SOC/(g/kg)	0.1	PLSR	0.95	0.64	0.82	1.15	0.97	0.49	0.82	1.15	
Soil organic carbon		GPR	0.88	0.98	0.84	1.09	0.99	0.19	0.83	1.13	
		RF	0.98	0.54	0.73	1.38	0.99	0.41	0.82	1.18	
	0.2	PLSR	0.78	1.29	0.44	2.00	0.86	1.04	0.59	1.67	
		GPR	0.64	1.58	0.68	1.47	0.95	0.67	0.50	1.87	
		RF	0.97	0.69	0.37	1.85	0.97	0.64	0.70	1.45	
	0.3	PLSR	0.76	1.33	0.41	1.92	0.86	1.02	0.38	2.13	
		GPR	0.63	1.60	0.58	1.63	0.96	0.63	0.28	2.18	
		RF	0.97	0.72	0.31	1.92	0.97	0.66	0.52	1.70	
	1	PLSR	0.89	0.94	0.70	1.46	0.93	0.76	0.63	1.62	
		GPR	0.78	1.29	0.68	1.45	0.99	0.34	0.60	1.64	
		RF	0.97	0.65	0.48	1.74	0.98	0.55	0.64	1.54	
总氮 TN/(g/kg)	0.1	PLSR	0.97	0.05	0.93	0.09	0.98	0.04	0.91	0.10	
Total phosphorus		GPR	0.93	0.09	0.91	0.09	0.99	0.02	0.92	0.09	
		RF	0.99	0.05	0.81	0.14	0.99	0.04	0.91	0.10	
	0.2	PLSR	0.84	0.13	0.61	0.20	0.90	0.10	0.53	0.23	
		GPR	0.75	0.16	0.66	0.17	0.96	0.07	0.46	0.23	
		RF	0.98	0.07	0.53	0.20	0.98	0.06	0.62	0.18	
	0.3	PLSR	0.80	0.14	0.57	0.20	0.88	0.11	0.50	0.23	
		GPR	0.70	0.17	0.62	0.18	0.96	0.07	0.48	0.23	
		RF	0.97	0.08	0.38	0.22	0.98	0.07	0.55	0.19	
	1	PLSR	0.91	0.10	0.82	0.13	0.94	0.08	0.74	0.16	
		GPR	0.81	0.14	0.81	0.14	0.99	0.03	0.78	0.15	
		RF	0.97	0.07	0.50	0.20	0.98	0.06	0.73	0.16	
总磷 TP/(g/kg)	0.1	PLSR	0.86	0.06	0.65	0.09	0.93	0.05	0.60	0.10	
Total phosphor-us		GPR	0.68	0.09	0.50	0.10	0.99	0.02	0.54	0.11	
		RF	0.97	0.04	0.40	0.10	0.98	0.03	0.57	0.09	
	0.2	PLSR	0.83	0.07	0.59	0.10	0.91	0.05	0.54	0.10	
		GPR	0.62	0.10	0.42	0.10	0.97	0.03	0.52	0.11	
		RF	0.96	0.04	0.39	0.11	0.97	0.04	0.54	0.10	
	0.3	PLSR	0.82	0.07	0.51	0.10	0.91	0.05	0.42	0.12	
		GPR	0.66	0.09	0.45	0.10	0.98	0.03	0.47	0.11	
		RF	0.97	0.04	0.26	0.11	0.97	0.04	0.36	0.11	
	1	PLSR	0.85	0.06	0.50	0.11	0.92	0.05	0.48	0.12	
		GPR	0.68	0.09	0.48	0.10	0.99	0.02	0.53	0.11	
		RF	0.97	0.04	0.33	0.11	0.97	0.04	0.42	0.10	

PLSR: 偏最小二乘回归 Partial Least Squares Regression; GPR: 高斯过程回归 Gaussian Process Regression; RF: 随机森林 Random Forest; RMSE: 均方根误差 Root-mean-square error

2.2.2 基于不同粒径敏感波段的土壤元素含量模型构建与评价

筛选出显著相关的敏感波段来完成模型构建,其模型建模效果和验证结果如表 2 所示。比较两种光谱数据的精度可以发现,当在模型建模时,敏感波段与全波段模型表现特点一致,即一阶微分光谱建立的三种模型的预测精度均高于或等于原始光谱。但在模型验证过程中,对于 RF 来说,表现与全波段一致。而 GPR 与

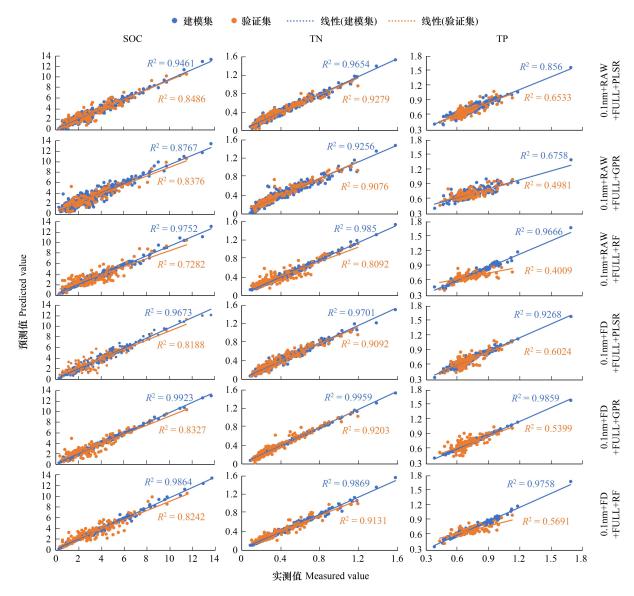


图 2 基于 0.1 mm 粒径土壤的全波段光谱反射率的模型验证结果

Fig.2 Validation results of model based on full band spectral reflectance of soil with a particle size of 0.1 mm
FULL:全波段光谱; RAW: 原始光谱反射率; FD: 一阶微分反射率; PLSR: 偏最小二乘回归; GPR: 高斯过程回归; RF: 随机森林

PLSR 在大体上原始光谱精度要高于一阶微分,但也有一阶微分表现更好的时候,因此无法判断哪种数据类型的敏感波段更有利于提高这两种模型的验证精度。

比较基于敏感波段建立的土壤 SOC、TN、TP 在预测精度上的差别,SOC 建模 R^2 范围为 0.17—0.99,验证 R^2 范围为 0.05—0.85; TN 建模 R^2 范围为 0.48—0.99,验证 R^2 范围为 0.29—0.94; TP 建模 R^2 范围为 0.62—0.98,验证 R^2 范围为 0.26—0.65,相对来说,基于敏感波段建立的不同粒径梯度的预测模型对 TP 的预测效果依旧 是最差的。比较模型之间的区别,发现 PLSR 建模 R^2 范围为 0.62—0.98,验证 R^2 范围为 0.36—0.94;GPR 建模 R^2 范围为 0.17—0.99,验证 R^2 范围为 0.20—0.90;RF 建模 R^2 范围为 0.95—0.99,验证 R^2 范围为 0.05—0.90。 因此相互比较来看,PLSR 模型对于不同粒径的土壤 SOC、TN、TP 具有更加优秀且相对稳定的反演效果。

比较四种不同土壤粒径梯度的敏感波段模型反演结果,可以发现 0.1 mm 粒径梯度的敏感波段反演模型具有最高的模型精度和稳定性,另外三种粒径梯度的反演精度与粒径大小无相关规律。综合来看,基于 0.1 mm 粒径土壤的原始光谱敏感波段建立的 PLSR 模型具有更高的反演精度和更高的稳定性。

表 2 基于不同粒径敏感波段光谱的土壤有机碳、全氮、全磷的建模与评价

Table 2 Modeling and evaluation of soil organic carbon, total nitrogen, and total phosphorus based on sensitive band spectra of different particle sizes

	粒径/mm Ptarticle size		原始 Original				一阶微分 First derivative			
元素 Elements		模型 Model	建模 Modeling set		验证 Validation set		建模 Modeling set		验证 Validation set	
	有机碳 SOC/(g/kg)	0.1	PLSR	0.95	0.64	0.85	1.06	0.98	0.37	0.82
Organic carbon		GPR	0.88	0.99	0.84	1.09	0.99	0.36	0.85	1.04
		RF	0.98	0.53	0.71	1.41	0.99	0.40	0.83	1.13
	0.2	PLSR	0.62	1.61	0.36	2.02	0.90	0.87	0.52	1.87
		GPR	0.17	2.03	0.20	2.02	0.91	0.88	0.54	1.77
		RF	0.95	0.82	0.05	2.13	0.97	0.64	0.71	1.41
	0.3	PLSR	0.72	1.43	0.44	1.85	0.90	0.91	0.36	2.16
		GPR	0.51	1.77	0.53	1.69	0.93	0.80	0.38	1.95
		RF	0.96	0.77	0.38	1.89	0.97	0.66	0.56	1.65
	1	PLSR	0.89	0.94	0.70	1.46	0.95	0.63	0.58	1.74
		GPR	0.78	1.29	0.68	1.45	0.98	0.44	0.62	1.64
		RF	0.97	0.65	0.48	1.74	0.98	0.57	0.61	1.58
总氮 TN/(g/kg)	0.1	PLSR	0.97	0.05	0.94	0.08	0.99	0.03	0.90	0.11
Total nitrogen		GPR	0.93	0.09	0.90	0.10	0.99	0.03	0.90	0.11
		RF	0.99	0.05	0.78	0.15	0.99	0.04	0.90	0.10
	0.2	PLSR	0.82	0.13	0.40	0.24	0.92	0.09	0.53	0.22
		GPR	0.48	0.21	0.47	0.20	0.93	0.09	0.58	0.20
		RF	0.97	0.08	0.30	0.23	0.98	0.06	0.63	0.18
	0.3	PLSR	0.76	0.15	0.55	0.20	0.91	0.10	0.49	0.24
		GPR	0.64	0.18	0.54	0.20	0.93	0.09	0.53	0.21
		RF	0.97	0.08	0.29	0.23	0.97	0.07	0.54	0.20
	1	PLSR	0.91	0.10	0.82	0.13	0.96	0.07	0.74	0.16
		GPR	0.81	0.14	0.81	0.14	0.98	0.04	0.75	0.16
		RF	0.97	0.07	0.50	0.20	0.98	0.06	0.73	0.16
总磷 TP/(g/kg)	0.1	PLSR	0.86	0.06	0.65	0.09	0.93	0.04	0.63	0.10
Total phosphorus		GPR	0.68	0.09	0.50	0.10	0.98	0.03	0.59	0.10
		RF	0.97	0.04	0.40	0.10	0.98	0.03	0.61	0.09
	0.2	PLSR	0.83	0.07	0.59	0.10	0.92	0.05	0.50	0.11
		GPR	0.62	0.10	0.42	0.10	0.96	0.04	0.47	0.11
		RF	0.96	0.04	0.39	0.11	0.97	0.04	0.50	0.10
	0.3	PLSR	0.82	0.07	0.51	0.10	0.94	0.04	0.43	0.12
		GPR	0.66	0.09	0.45	0.10	0.95	0.04	0.47	0.11
		RF	0.97	0.04	0.26	0.11	0.97	0.04	0.38	0.11
	1	PLSR	0.85	0.07	0.50	0.11	0.94	0.04	0.55	0.11
	-	GPR	0.68	0.09	0.48	0.10	0.97	0.03	0.53	0.11
		RF	0.97	0.04	0.33	0.10	0.97	0.04	0.41	0.11

绘制 SOC、TN、TP 在 0.1 mm 粒径梯度时两种光谱敏感波段三种模型的估算散点图(图 3),可以看出,RF 建模集点都集中于 1:1 直线,但其验证集与建模集偏差较大,精度未能达到较好的估算要求,模型可能出现过拟合现象。而 PLSR 验证集与建模集散点均靠近 1:1 直线,拥有较高的模型精度。

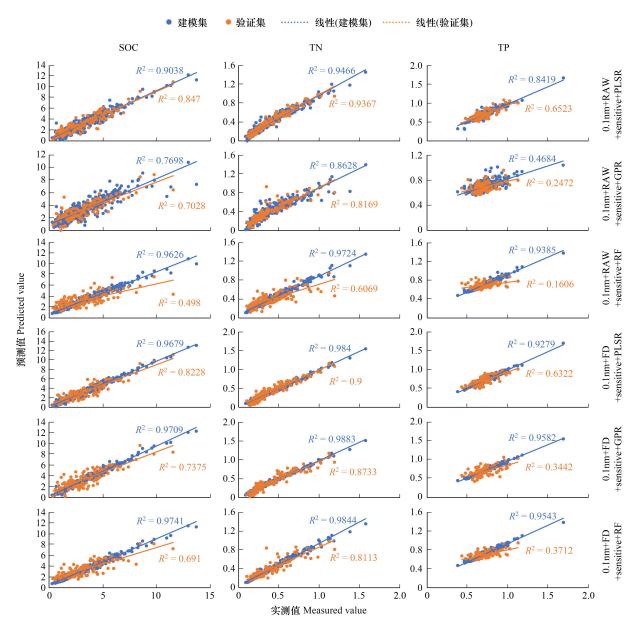


图 3 基于 0.1 mm 粒径土壤的敏感波段光谱反射率的模型验证结果

Fig.3 Validation results of model based on sensitive spectral reflectance of soil with a particle size of 0.1 mm sensitive:敏感波段光谱

3 讨论

3.1 土壤粒径对土壤养分反演精度的影响

土壤的光谱反射率特性会受到其质地和理化性质的多重影响。土壤粒径不同会对光谱反射率产生影响, 具体来说,较小粒径的土壤颗粒比表面积较大,其反射率也相对较高^[31]。国内外关于土壤光谱测定的研究 中,多数研究者认为在利用光谱特征反演土壤的不同参数之前需要进行过筛处理,使样品的粒径更加统 一^[32—33],然而目前对于不同粒径样品的光谱拟合精度的研究尚不充分。本研究在对土壤样品的原始光谱进 行一阶微分数据转换后,利用偏最小二乘、随机森林、高斯过程回归3种方法分别构建了土壤有机碳、全氮、全 磷含量的高光谱拟合模型,我们发现,采用过筛处理中最小粒径为0.1 mm的模型拟合精度最高,这一现象可 能是因为更小的土壤颗粒之间结合更紧密,土壤表面更加平滑,从而增强了反射率^[34-35]。另一方面较大的土壤颗粒可能会容纳更多空气和水分,这可能会对光谱特征的表达产生干扰^[36]。因此,本研究推断,土壤样品粒径越小,利用土壤光谱特征对土壤碳、氮、磷含量进行预测的能力越强。

3.2 湿地土壤不同高光谱反演差异

通常基于敏感带的预测模型精度会高于基于原始光谱和一阶微分的预测模型精度^[37—39]。而本研究中基于敏感波段所建立的模型精度相较于全波段并未提高,这可能是因为在进行相关系数计算时被土壤光谱中的干扰因素影响或在进行敏感波段提取时去除了一些与土壤有机碳、全氮、全磷含量相关的光谱特性,导致模型预测时因为缺少相关信息而出现验证精度低的现象。本研究中土壤全磷含量的预测模型相较于土壤有机碳、全氮含量的预测模型,其模型精度相对最低,这可能是由信噪比的频谱降低引起的。此外,基于一阶微分光谱的建模比原始光谱有更好的精度,但在进行验证时,基于原始光谱建立的预测模型具有更高的验证精度,这表明基于一阶微分光谱所建立的预测模型更容易出现过拟合现象^[40]。光谱变量的转换在有效地消除环境、土壤等因素对光谱信息的影响的同时,也抹除了一些必要的信息。

3.3 机器模型对湿地土壤碳氮磷反演精度影响

总结已有关于土壤碳、氮、磷元素光谱建模预测研究结果如表 3,目前研究人员中采用 RF 与 PLSR 的人居多,这两种模型表现较为稳定且优良。RF 模型是一种用于分类和回归的集成机器学习算法,通过组合各种决策树的结果并将原始数据集打包以选择样本来构建^[41-42]。GPR 模型是一种流行的机器学习技术,用于对所提供的数据进行分析、分类和回归分析^[43]。PLSR 模型综合了相关、主成分分析和多元线性回归等各种分析,从高维数据中识别影响因变量的主要控制因素,同时降低了光谱分析的维数,使构建的模型更加稳健^[44]。根据本研究结果比较,PLSR 模型在处理不同土壤粒径梯度中发挥最为优秀,体现了其在高维数据中识别有效数据的强大降维能力和在处理多元线性回归中的多重共线性时的较好效果。

Table 5 Summary of research results on predicting son carbon, introgen, and phosphorus elements							
元素 Element	模型精度 Accuracy	数据类型 Data type	模型 Model	研究者 Author			
N	$R^2 = 0.81$	敏感波段	PLSR	Li 等,2019 ^[41]			
N	$R^2 = 0.76$	原始	RF	Lin 等,2022 ^[42]			
N	$R^2 = 0.35$	原始	PLSR	Pechanec 等,2021 ^[44]			
C	$R^2 = 0.95$	一阶微分	RF	Wang 等,2022 ^[45]			
C	$R^2 = 0.44$	原始	PLSR	Mondal 等,2019 ^[46]			
C	$R^2 = 0.81$	敏感波段	PLSR	Ribeiro 等,2021 ^[47]			
P	$R^2 = 0.34$	原始	PLSR	Malmir 等,2019 ^[48]			
P	$R^2 = 0.54$	原始	PLSR	Lu 等,2013 ^[49]			
P	$R^2 = 0.57$	原始	PLSR	王莉雯等,2016 ^[50]			

表 3 关于土壤碳、氮和磷元素预测部分研究效果总结

Table 3 Summary of research results on predicting soil carbon, nitrogen, and phosphorus elements

4 结论

本研究以陕西黄河湿地省级自然保护区的湿地表层土壤为研究对象,制备1 mm、0.3 mm、0.2 mm、0.1 mm 四种不同粒径的土壤样本,通过原始光谱数据及一阶微分转换光谱数据对土壤碳、氮、磷含量建立不同粒径的偏最小二乘、随机森林、高斯过程回归3种预测模型,得到结论如下:

- (1)土壤光谱反射率数值随着土壤粒径的减小逐渐增大,0.1 mm 粒径的预测模型相比于其他粒径始终有着更好的精度。
- (2)比较原始和一阶微分光谱的模型验证精度,发现基于一阶微分光谱建立的土壤有机碳、全氮、全磷含量估算模型均具有更高的精度。

(3)基于敏感波段建立的偏最小二乘模型,建模 R^2 范围 0.62—0.98,验证 R^2 范围 0.36—0.94,具有更高的 反演精度和更高的稳定性。

本研究基于不同粒径的土壤光谱数据并利用不同模型估算了土壤中 SOC、TN、TP 含量,确立准确估测其含量及变化的最优粒径、光谱处理方法及模型,以期为湿地养分含量的快速、准确检测提供技术与理论支撑。

参考文献 (References):

- [1] Stella J C, Rodríguez-González P M, Dufour S, Bendix J. Riparian vegetation research in Mediterranean-climate regions; common patterns, ecological processes, and considerations for management. Hydrobiologia, 2013, 719(1); 291-315.
- [2] Hale R, Reich P, Daniel T, Lake P, Cavagnaro T. Scales that matter: guiding effective monitoring of soil properties in restored riparian zones. Geoderma, 2014, 228: 173-181.
- [3] Cui B L, Chang X L, Shi W Y. Abrupt changes of runoff and sediment load in the lower reaches of the Yellow River, China. Water Resources, 2014, 41(3): 252-260.
- [4] 郭二辉, 孙然好, 陈利顶. 河岸植被缓冲带主要生态服务功能研究的现状与展望. 生态学杂志, 2011, 30(8): 1830-1837.
- [5] Capon S J, Chambers L E, Mac Nally R, Naiman R J, Davies P, Marshall N, Pittock J, Reid M, Capon T, Douglas M, Catford J, Baldwin D S, Stewardson M, Roberts J, Parsons M, Williams S E. Riparian ecosystems in the 21st century: hotspots for climate change adaptation? Ecosystems, 2013, 16(3): 359-381.
- [6] Guo E H, Chen L D, Sun R H, Wang Z M. Effects of riparian vegetation patterns on the distribution and potential loss of soil nutrients: a case study of the Wenyu River in Beijing. Frontiers of Environmental Science & Engineering, 2015, 9(2): 279-287.
- [7] Trigalet S, Gabarrón-Galeote M A, Van Oost K, van Wesemael B. Changes in soil organic carbon pools along a chronosequence of land abandonment in southern Spain. Geoderma, 2016, 268; 14-21.
- [8] Geraei D S, Hojati S, Landi A, Cano A F. Total and labile forms of soil organic carbon as affected by land use change in southwestern Iran. Geoderma Regional, 2016, 7(1): 29-37.
- [9] Gregorich E G, Rochette P, McGuire S, Liang B C, Lessard R. Soluble organic carbon and carbon dioxide fluxes in maize fields receiving spring applied manure. Journal of Environmental Quality, 1998, 27(1): 209-214.
- [10] Eswaran H, Van Den Berg E, Reich P. Organic carbon in soils of the world. Soil Science Society of America Journal, 1993, 57(1): 192-194.
- [11] 张法升, 曲威, 尹光华, 刘作新. 基于多光谱遥感影像的表层土壤有机质空间格局反演. 应用生态学报, 2010, 21(4): 883-888.
- [12] Bao Y L, Meng X T, Ustin S, Wang X, Zhang X L, Liu H J, Tang H. Vis-SWIR spectral prediction model for soil organic matter with different grouping strategies. Catena, 2020, 195; 104703.
- [13] Xu X T, Chen S B, Xu Z Y, Yu Y, Zhang S, Dai R. Exploring appropriate preprocessing techniques for hyperspectral soil organic matter content estimation in black soil area. Remote Sensing, 2020, 12(22): 3765.
- [14] 聂磊超,彭辉,赵欣胜,翟夏杰,李伟.浙江百山祖国家公园土壤养分含量高光谱预测模型应用探讨.陆地生态系统与保护学报,2022,2(3):9-17.
- [15] 王薪宇. 基于高光谱数据的土壤速氮含量反演模型比较. 测绘与空间地理信息, 2023, 46(3): 201-204.
- [16] 王大伟, 倪建功, 高霁月, 王轩慧, 韩仲志. 大沽河流域土壤养分、重金属与 pH 高光谱探测. 青岛农业大学学报(自然科学版), 2019, 36 (2): 126-130,146.
- [17] 韦森超,梁立恒,董炜华,李晓强,邓守奇.基于高光谱遥感的土壤有机质反演模型研究进展.农业工程技术,2023,43(21):27-29.
- [18] Xu S, Wang MY, Shi XZ. Hyperspectral imaging for high-resolution mapping of soil carbon fractions in intact paddy soil profiles with multivariate techniques and variable selection. Geoderma, 2020, 370(7): 114358.
- [19] Pudełko A, Chodak M. Estimation of total nitrogen and organic carbon contents in mine soils with NIR reflectance spectroscopy and various chemometric methods. Geoderma, 2020, 368; 114306.
- [20] Williams W R, Mather R D. Analytical technique for recovering filler to study particle size fractionation during the paper forming process. Pap Technol Ind, 1975, 16(3): 150-153.
- [21] Dalal R C, Henry R J. Simultaneous determination of moisture, organic carbon, and total nitrogen by near infrared reflectance spectrophotometry. Soil Science Society of America Journal, 1986, 50(1): 120-123.
- [22] Wu C W, Zheng Y, Yang H, Yang Y, Wu Z Y. Effects of different particle sizes on the spectral prediction of soil organic matter. Catena, 2021, 196: 104933.
- [23] 司海青,姚艳敏,王德营,刘影.不同颗粒大小对高光谱估算土壤有机质含量的影响.中国农学通报,2015,31(18):173-178.
- [24] 武红旗, 范燕敏, 何晶, 靳瑰丽, 谢昀, 柴大攀, 何龙. 不同粒径土壤的反射光谱对荒漠土壤有机质含量的响应. 草地学报, 2014, 22 (2); 266-270.
- [25] 王海江, 刘凡, YUNGER John A, 崔静, 马玲. 不同粒径处理的土壤全氮含量高光谱特征拟合模型. 农业机械学报, 2019, 50(2): 195-204.
- [26] 徐干君,吴胜义,李伟,赵欣胜,聂磊超,唐希颖,翟夏杰.陕西黄河湿地自然保护区碳储量估算.植物生态学报,2023,47(7);

- 469-478.
- [27] 崔世超,周可法,丁汝福.高光谱的矿区植物异常信息提取.光谱学与光谱分析,2019,39(1):241-249.
- [28] Cui L J, Zuo X Y, Dou Z G, Huang Y L, Zhao X S, Zhai X J, Lei Y R, Li J, Pan X, Li W. Plant identification of Beijing Hanshiqiao wetland based on hyperspectral data. Spectroscopy Letters, 2021; 1-14.
- [29] 左雪燕,崔丽娟,李伟,窦志国,蔡杨,刘志君,雷茵茹.基于高光谱数据的互花米草叶片功能性状反演.生态学报,2021,41(15):6159-6169.
- [30] 张晓光,黄标,季峻峰,胡文友,孙维侠,赵永存.基于可见近红外高光谱的东北盐渍土盐分定量模型研究.光谱学与光谱分析,2012,32(8):2075-2079.
- [31] Sadeghi M, Babaeian E, Tuller M, Jones S B. Particle size effects on soil reflectance explained by an analytical radiative transfer model. Remote Sensing of Environment, 2018, 210: 375-386.
- [32] 张娟娟, 牛圳, 马新明, 王健, 徐超越, 时雷, Baiāo F, 司海平. 基于离散小波的土壤全氮高光谱特征提取与反演. 光谱学与光谱分析, 2023, 43(10): 3223-3229.
- [33] 罗德芳,柳维扬,彭杰,冯春晖,纪文君,白子金.土壤水分去除算法的田间原位光谱反演棉田有机质.光谱学与光谱分析,2022,42 (1):222-228.
- [34] Le Guillou, Wetterlind, Viscarra Rossel R A, Hicks, Grundy, Tuomi. How does grinding affect the mid-infrared spectra of soil and their multivariate calibrations to texture and organic carbon? Soil Research, 2015, 53(8): 913-921.
- [35] Croft H, Anderson K, Kuhn N J. Characterizing soil surface roughness using a combined structural and spectral approach. European Journal of Soil Science, 2009, 60(3): 431-442.
- [36] Deiss L, Culman S W, Demyan M S. Grinding and spectra replication often improves mid DRIFTS predictions of soil properties. Soil Science Society of America Journal, 2020, 84(3); 914-929.
- [37] Zhu J J, Jin X, Li S W, Han Y L, Zheng W R. Prediction of soil available boron content in visible-near-infrared hyperspectral based on different preprocessing transformations and characteristic wavelengths modeling. Computational Intelligence and Neuroscience, 2022, 2022; 9748257.
- [38] Tang R N, Li X W, Li C, Jiang K X, Hu W F, Wu J J. Estimation of total nitrogen content in rubber plantation soil based on hyperspectral and fractional order derivative. Electronics, 2022, 11(13): 1956.
- [39] Zhang Z H, Guo F, Xu Z, Yang X Y, Wu K Z. On retrieving the chromium and zinc concentrations in the arable soil by the hyperspectral reflectance based on the deep forest. Ecological Indicators, 2022, 144: 109440.
- [40] Li W, Dou Z G, Cui L J, Wang R M, Zhao Z J, Cui S F, Lei Y R, Li J, Zhao X S, Zhai X J. Suitability of hyperspectral data for monitoring nitrogen and phosphorus content in constructed wetlands. Remote Sensing Letters, 2020, 11(5): 495-504.
- [41] Li H Y, Jia S Y, Le Z C. Quantitative analysis of soil total nitrogen using hyperspectral imaging technology with extreme learning machine. Sensors, 2019, 19(20): 4355.
- [42] Lin L X, Liu X X. Mixture-based weight learning improves the random forest method for hyperspectral estimation of soil total nitrogen. Computers and Electronics in Agriculture, 2022, 192: 106634.
- [43] Harkort L, Duan Z. Estimation of dissolved organic carbon from inland waters at a large scale using satellite data and machine learning methods. Water Research, 2023, 229; 119478.
- [44] Pechanec V, Mrúz A, Rozkošný L, Vyvlečka P. Usage of airborne hyperspectral imaging data for identifying spatial variability of soil nitrogen content. ISPRS International Journal of Geo-Information, 2021, 10(6): 355.
- [45] Wang S, Guan K Y, Zhang C H, Lee D, Margenot A J, Ge Y F, Peng J, Zhou W, Zhou Q, Huang Y Z. Using soil library hyperspectral reflectance and machine learning to predict soil organic carbon; assessing potential of airborne and spaceborne optical soil sensing. Remote Sensing of Environment, 2022, 271; 112914.
- [46] Mondal B P, Sekhon B, Sahoo R, Paul P. Vis-nir reflectance spectroscopy for assessment of soil organic carbon in a rice-wheat field of Ludhiana district of punjab. International Archives of the Photogrammetry, 2019, 43(6): 417-422.
- [47] Ribeiro S G, dos Santos Teixeira A, de Oliveira M R R, Costa M C G, da Silva Araujo I C, Moreira L C J, Lopes F B. Soil organic carbon content prediction using soil-reflected spectra: a comparison of two regression methods. Remote Sensing, 2021, 13(23): 4752.
- [48] Malmir M, Tahmasbian I, Xu Z H, Farrar M B, Bai S H. Prediction of soil macro- and micro-elements in sieved and ground air-dried soils using laboratory-based hyperspectral imaging technique. Geoderma, 2019, 340: 70-80.
- [49] Lu P, Wang L, Niu Z, Li L H, Zhang W H. Prediction of soil properties using laboratory VIS-NIR spectroscopy and Hyperion imagery. Journal of Geochemical Exploration, 2013, 132: 26-33.
- [50] 王莉雯, 卫亚星. 湿地土壤全氮和全磷含量高光谱模型研究. 生态学报, 2016, 36(16): 5116-5125.