

粮食主产区耕地土壤重金属高光谱综合反演模型

张秋霞¹ 张合兵¹ 张会娟¹ 王新生² 刘文锴³

(1. 河南理工大学测绘与国土信息工程学院, 焦作 454000; 2. 河南科技学院生命科技学院, 新乡 453003;

3. 华北水利水电大学资源与环境学院, 郑州 450046)

摘要: 粮食主产区的耕地土壤重金属污染已成为影响粮食安全和人居环境安全的突出问题。高光谱遥感技术为快速高效获取土壤重金属含量提供了新的途径, 也为土壤总金属污染的监测和防治提供了技术保障。以河南省粮食主产区新郑市为研究对象, 共采集 191 个耕地土壤样品, 利用 Rank-KS 法划分为 144 个建模集样本和 47 个验证集样本; 在室内利用 ASD FieldSpec 3 型地物光谱仪获取土壤高光谱数据, 对耕地土壤样品在 400~2400 nm 的光谱反射率与 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 5 种重金属元素进行相关性分析, 筛选出 5 种重金属均通过 $P=0.01$ 显著性检验的共用高光谱特征波段作为反演模型的自变量; 采用基于 OLS 的固定影响变系数面板数据模型, 对新郑市 144 个建模集样本的 5 种土壤重金属面板数据构建高光谱综合反演模型。结果表明: 面板数据模型整体显著, 拟合优度较高 ($\bar{R}^2=0.9937$, F 统计量为 1365.94)。模型精度检验 Cu 的相对分析误差为 2.046, Pb 的相对分析误差为 3.432, 都具有较好的预测精度; Cr、Cd、Zn 的相对分析误差在 1.4~1.8 之间, 具有一般的定量预测能力。面板数据模型通过一次建模综合反演多种土壤重金属, 计算简便、速度快, 可以用于新郑市耕地土壤重金属的高光谱快速监测。

关键词: 耕地; 土壤重金属; 粮食主产区; 高光谱; 综合反演模型; 面板数据模型

中图分类号: S151.9 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2017)03-0148-08

Hybrid Inversion Model of Heavy Metals with Hyperspectral Reflectance in Cultivated Soils of Main Grain Producing Areas

ZHANG Qiuxia¹ ZHANG Hebing¹ ZHANG Huijuan¹ WANG Xinsheng² LIU Wenkai³

(1. School of Surveying and Landing Information Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China

2. College of Life Science and Technology, Henan Institute of Science and Technology, Xinxiang 453003, China

3. School of Resources and Environment, North China University of Water Resources and Electric Power, Zhengzhou 450046, China)

Abstract: The heavy metals pollution in cultivated soils of main grain producing areas has become a prominent problem affecting the safety of food and living environment. The hyperspectral remote sensing technology as the frontier technology in the field of remote sensing technology, provides a new approach to access to soil heavy metal data quickly and accurately, and also provides the technical support for monitoring and predicting. Taking Xinzheng City of main grain producing areas in Henan Province as the research object, the 191 cultivated soil samples collected were divided into 144 calibration set and 47 validation set by Rank-KS method. The hyperspectral reflectance of soil samples was measured by using ASD FieldSpec 3 spectrometer in laboratory experiments. The correlation analyses between row spectral reflectance in 400~2400 nm and the content of heavy metals Cr, Cd, Zn, Cu, Pb were done, and the correlation coefficient by F significance test ($P=0.01$) was selected which could be used to extract sensitive hyperspectral feature wavebands reflectance common to the above heavy metals as the independent variables of model. The hyperspectral inversion model was built by panel data model of fixed effect variable coefficient based on the ordinary least squares estimation method (OLS), which was about the panel data of heavy metals Cr, Cd, Zn, Cu, Pb of 144 samples in Xinzheng. The results show that the panel data model is overall significant, with high goodness of fit ($\bar{R}^2=0.9937$, $F=1365.94$). The result of precision test indicated that models for Cu and Pb performed well in modeling and predicting with a good ability of quantificational prediction, with relative percent deviation (RPD) values of 2.046 and

收稿日期: 2016-12-11 修回日期: 2016-12-30

基金项目: 国土资源部公益性行业科研专项(201411022-2)

作者简介: 张秋霞(1985—),女,博士生,主要从事矿区土地复垦与生态重建研究,E-mail: zqx_0818@163.com

3.432 separately; Cr, Cd, Zn could perform generally in modeling and predicting with a good ability of quantificational prediction, with RPD values range of 1.4 ~ 1.8. The panel data model can be used to calculate various heavy metals at the same time and rapidly monitor soil heavy metals with hyperspectral reflectance in Xinzheng, with simple and fast calculation.

Key words: cultivated land; soil heavy metals; main grain producing areas; hyperspectral; hybrid inversion model; panel data model

引言

目前土壤重金属污染越来越受到社会关注,由于土壤性质差异较大,重金属污染物在土壤中存在迁移慢、不易随水淋滤、难以降解、难可逆等问题,可能造成耕地土壤质量退化、生态与环境恶化的现象,甚至威胁粮食安全及人体健康。因此,快速高效获取土壤重金属数据,监测土壤健康状况,对粮食主产区耕地土壤污染的防治以及粮食安全的保障有重要意义。

高光谱遥感波段多且连续、分辨率高,克服了传统方法的不足,为准确、高效、无损、无污染、大范围快速监测提供了可能。以往土壤高光谱遥感技术研究多注重于土壤有机质^[1-2]、氮^[3-4]、磷^[5-6]、钾^[7-8]、含水率^[9-10]等,对土壤重金属含量反演的研究较少,且多集中于三角洲、郊区、河流沉积区、污染区和矿区等^[11],很少有对粮食主产区耕地土壤重金属的研究。徐明星等^[12]构建了历史时期土壤重金属 Cd、Cr、Cu、Ni 和 Pb 含量的多元线性逐步回归高光谱反演模型。宋练等^[13]定量反演了重庆市万盛采矿区土壤 As、Cd、Zn 含量。马伟波等^[14]引入超限学习机方法对复垦矿区的 Zn、Cr、Cd、Cu、As、Pb 进行了反演建模。TAN 等^[15]采用传统的多元线性回归、偏最小二乘回归和最小二乘支持向量机对土壤样本回收矿区建立了土壤重金属的定量反演模型。夏芳等^[16]对浙江省 36 个县市的 643 个农田耕层土样的重金属 Ni、Cu、As、Hg、Zn、Cr、Cd、Pb 含量构建了偏最小二乘回归模型。袁中强等^[17]分别建立了四川省若尔盖国际重要湿地土壤锌、镉、铅、铬、铜含量的偏最小二乘回归模型。郑光辉等^[18]利用 PLSR 方法建立反射光谱与土壤 As 含量之间的模型。WANG 等^[19]对比分析了偏最小二乘回归与遗传算法对宜兴农业土壤重金属的建模精度。多数研究方法是针对单个土壤重金属的反演定量研究,需要逐个构建土壤重金属与光谱反射率的反演模型,计算过程复杂且耗费时间。而面板数据模型可以将多样点的多种土壤重金属与高光谱波段特征值三维数据同时建立模型,通过一次建模反演多种土壤重金属,计算过程更为简便,且能根据模型分析土壤各个重金属之间的相互关系,以及高光谱波段特征值

对每个土壤重金属的影响。

本文以河南省新郑市为研究对象,在室内利用 ASD FieldSpec 3 型地物光谱仪获取土壤高光谱数据,与土壤重金属 Cd、Cr、Cu、Pb、Zn 含量相结合,根据相关性分析选择 5 种重金属均通过显著性检验的共用高光谱特征波段,利用面板数据模型建立耕地土壤重金属的高光谱综合反演模型,估计高光谱特征波段对每个土壤重金属的影响,预测每个土壤重金属的含量,旨在为粮食主产区土壤重金属的高光谱快速反演提供理论与技术支撑。

1 材料与方 法

1.1 研究区概况

新郑市位于河南省中部,隶属于郑州市,地处北纬 34°16' ~ 34°39'、东经 113°30' ~ 113°54',北靠郑州市,东邻中牟县、尉氏县,南连长葛市、禹州市,西与新密市接壤,地势西高东低,西部为浅山丘陵区,东部为平原,西北部为丘岗地。新郑市属粮食主产区,全年粮食总产量 27.31 万 t,土壤类型多样,主要以褐土、潮土与风砂土土类为主。属暖温带大陆性季风气候,气温适中,四季分明。新郑市土地总面积 886.721 7 km²,耕地占全市土地面积的 60.51%,达到 536.545 4 km²,年均气温 14.2℃,年均降水量 676.1 mm。研究区概况如图 1 所示。

1.2 样本采集与制备

本次采样采用 2 km × 2 km 规则网格法布设采样点,形成的空间数据库中每个点包括其编号、经纬度坐标、所属乡镇、邻近村庄等基本信息(图 1)。依据样点图和点位属性表,用 GPS 精确定位后去野外采样,采样深度为 0 ~ 30 cm 土壤表层,并记录实际采样点坐标及详细的样地特征信息,共采集 191 个土壤样品,剔除土样中植物根茎残体及砖瓦片等,通过自然风干、研磨,过 1 mm 孔筛后,采用四分法取样,一式两份,一份用于实验室理化性质测定,另一份用于土壤光谱的测定。

1.3 光谱测定

采用 ASD 光谱仪在室内条件下对经过处理的土壤样品测定土壤光谱反射率。光谱测试仪器是美国 ASD 公司生产的 ASD FieldSpec 3 型光谱仪(光谱范围为 350 ~ 2 500 nm)。光谱测定在暗室中进

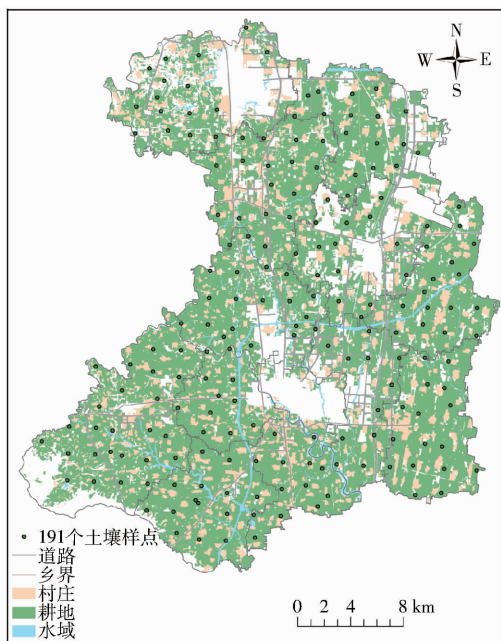


图1 研究区概况及采样点分布图

Fig.1 Study area and the distribution of soil samples

行,以功率为 50 W 的卤素灯作为唯一光源,将土壤盛装在直径 10 cm、深度 2 cm 的黑色器皿中。进行光谱测定之前,先将土壤表面经过刮平处理,即用尺子沿土样器皿边缘朝同一方向刮平备用^[20],光源入射角为 45°,光源距离土样表面中心 30 cm,探头视场角为 25°,探头距离土样 15 cm。测量过程中转动盛样皿 3 次,每次转动约 90°,共获取 4 个方向的土样光谱,重复测量 5 次,共 20 次,利用 ViewSpec Pro 软件剔除异常曲线后取光谱反射率平均值作为原始反射率光谱值。由于波长 350 nm 和 2 500 nm 附近受外界噪声影响较大,因此选取光谱范围 400 ~ 2 400 nm 用于分析。

1.4 模型建立及其精度检验

1.4.1 相关性分析

在土壤重金属高光谱数据的建模过程中,敏感波段往往通过土壤重金属含量与光谱反射率的相关分析进行确定,相关性越高,波段响应越敏感。因此首先对光谱反射率与土壤重金属含量进行 Pearson 相关分析,考虑不同重金属光谱反演的需要,对相关系数进行 $P = 0.01$ 水平上的显著性检验来确定高光谱特征波段,选取共用显著性波段作为最佳高光谱特征波段,并作为建立重金属综合反演模型的自变量。

1.4.2 样本集划分

在考虑土壤类型的基础上,采用 Rank - KS 法^[21],将研究区的 191 个样本分成建模集和验证集 2 组,建模集样本数 144 个,用于面板数据模型的构建,验证集样本数 47 个,用于检验模型的预

测精度。

1.4.3 面板数据模型

面板数据也称为平行数据,或时间序列界面数据或混合数据,是指在时间序列上取多个横截面,在这些横截面上同时选取样本观测值所构成的样本数据^[22]。从横截面上看,是若干个个体在某一时刻构成的横截面观测值,从纵剖面上看是一个时间序列。根据面板数据的特点,多个样本的土壤重金属高光谱特征波段,可以看作是在横截面上土壤重金属在某一个样本点的高光谱波段特征值,纵剖面上是一个样本点序列。面板数据分析方法作为新的统计方法,可以控制样本个体的异质性,克服数据受多重共线性的困扰。通过构建面板数据模型,可以同时建立土壤重金属的综合反演模型,无需对每个指标进行单独反演,减少了对于多指标反演的繁琐过程。

由于样本点数目 T 较大而横截面数量 N 较小,故确定为固定影响模型,选择普通最小二乘估计法构建面板数据模型。然后通过协方差分析检验确定面板数据模型类型:不变系数模型、变截距模型、变系数模型。为了降低异方差性的影响,分别对面板模型方程两边的变量求自然对数,得到面板数据模型为

$$\ln y_{it} = a_i + b_{1i} \ln x_{1it} + b_{2i} \ln x_{2it} + \cdots + b_{ki} \ln x_{kit} + \mu_{it} \\ (i = 1, 2, \cdots, N; t = 1, 2, \cdots, T)$$

式中 y_{it} ——被解释变量在横截面 i 和样本 t 上的值,即土壤重金属元素含量

a_i ——常数项或截距项,代表第 i 个横截面(第 i 个体的影响)

b_{ji} ——第 i 个横截面上的第 j 个解释变量的模型参数

x_{jit} ——第 j 个解释变量在横截面 i 和样本 t 上的值,即土壤重金属高光谱特征波段反射率

μ_{it} ——横截面 i 和样本 t 上的随机误差项

k ——解释变量的个数

1.4.4 模型精度验证方法

建模精度的检验利用得到的建模集决定系数 \bar{R}^2 和均方根误差;验证集检验根据决定系数 R_v^2 、均方根误差和相对分析误差。其中相对分析误差是验证集标准差与验证集均方根误差的比值,当相对分析误差在 2.5 以上时,表明模型具有极好的预测能力;当相对分析误差在 2.0 ~ 2.5 之间时,表明模型具有很好的定量预测能力;当相对分析误差在 1.8 ~ 2.0 之间时,表明模型具有定量预测能力;当相对分析误差在 1.4 ~ 1.8 之间时,表明模型具有一般的定量预测能力;当相对分析误差在 1.0 ~ 1.4 之

间时,表明模型具有区别高值和低值的能力;当相对分析误差小于 1.0 时,表明模型不具备预测能力^[23]。对于建模集来说, $\overline{R^2}$ 越大,均方根误差越小,建模精度越高,模型越稳定。而对于验证集来说, $\overline{R^2}$ 和相对分析误差越大,均方根误差越小,预测精度越高。

2 结果与讨论

2.1 土壤样品统计分析

土壤重金属含量测定结果见表 1,新郑市采集的 191 个样本中,5 种土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 的含量(质量比)为 0.06 ~ 80.80 mg/kg,涉及范围广。标准差范围除了 Cd 为 0.06 mg/kg 外,其余 4 个土壤重金属的标准差为 4.55 ~ 11.73 mg/kg,变异系数为 0.196 ~ 0.398,变异程度为中等变异性^[24]。从平均值看除了 Cd 有超过背景值样点外,其余均低于背景值,说明该区域土壤环境质量总体是好的;但从最大值可以看出有部分样点的土壤重金属含量与背景值相近,甚至超出背景值,根据土壤重金属污染的单因子指数法,可知 Cr、Zn、Cu、Pb 的污染指数都接近于 1,存在潜在危害甚至轻度污染;Cd 的污染指数为 2.51,为 2 ~ 3 之间,属于中度污染,所以作为粮食主产区的新郑市应该加强土壤质量调查与动态监测,以便及时发现并控制耕地土壤的重金属污染。

2.2 土壤重金属含量与光谱反射率的相关性分析

通过对土壤重金属含量与光谱反射率进行相关性分析,得到每个土壤重金属与对应的光谱反射率相关系数曲线,并作相关系数在 $P = 0.01$ 水平上的显著性检验(双侧),如图 2 所示。

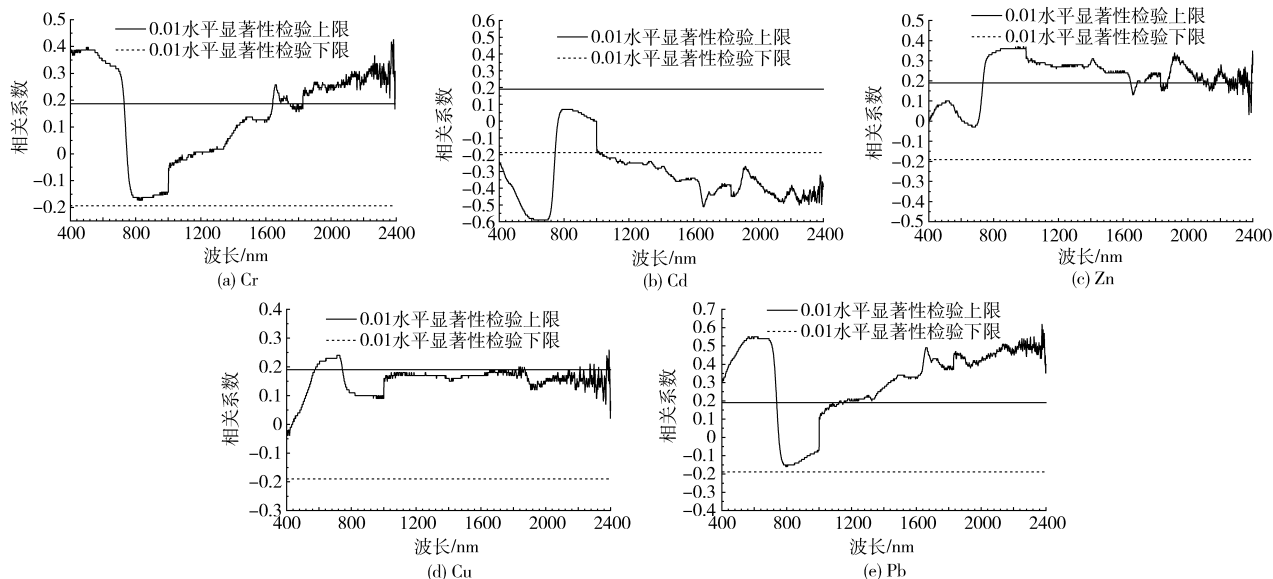


图 2 光谱反射率与土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 的相关系数

Fig. 2 Correlation coefficient between Cr, Cd, Zn, Cu, Pb and the raw spectral reflectance value

表 1 土壤重金属含量统计特征

Tab. 1 Statistical characteristics of the soil heavy metal content

参数	元素				
	Cr	Cd	Zn	Cu	Pb
最小值/(mg·kg ⁻¹)	30.40	0.06	27.40	5.00	9.30
最大值/(mg·kg ⁻¹)	80.80	0.30	58.20	25.80	32.70
平均值/(mg·kg ⁻¹)	59.90	0.16	44.47	15.38	20.68
标准差/(mg·kg ⁻¹)	11.73	0.06	8.77	4.55	7.16
变异系数	0.196	0.398	0.197	0.296	0.346
污染指数	0.95	2.51	0.71	0.77	0.95
背景值	63.300	0.064	62.500	20.000	21.800
样本数	191	191	191	191	191

注:背景值根据文献[25]的河南省主要元素的土壤环境背景值确定;单因子指数法公式: $P_i = C_i/S_i$, P_i 为土壤中 i 污染物的环境质量指数, C_i 为实测值, S_i 为相应背景值。

从图 2 中可以看出,除了 Cu 以外, Cr、Cd、Zn、Pb 与光谱反射率的相关系数曲线中的大量波段通过了 $P = 0.01$ 显著性检验,其中除了 Cd 与多数波段呈现显著负相关外,其他 3 个重金属与多数波段均表现为显著正相关, Cr、Pb 的相关系数曲线形状接近,相关系数在 1 000 ~ 2 400 nm 的光谱范围内逐渐变大; Cd、Zn 的相关系数曲线形状接近,相关系数在 600 ~ 800 nm 的光谱范围内快速上升, 1 000 nm 之后开始略有下降;而 Cu 的相关系数分布方向与 Cd、Zn 相反(与文献[2]结果相同)。

从图 3 显著性波段的数量上来看, Cd、Pb 明显多于其他 3 种重金属, Cu 的显著性波段数最少,仅为 284 个波段。 Cr 与原始光谱反射率的最大相关性出现在 2 390 nm ($r = 0.425$), Zn 与原始光谱反射率的最大相关性出现在 951 nm ($r = 0.367$), Cu 与原

始光谱反射率的最大相关性出现在 2 391 nm ($r = 0.255$)。除了 746 ~ 1 007 nm, Cd 与其他原始光谱反射率均呈显著负相关,最大相关性出现在 681 nm

($r = -0.595$);除了 739 ~ 1 082 nm, Pb 与其他原始光谱反射率均呈显著正相关,最大相关性出现在 2 376 nm ($r = 0.6164$)。

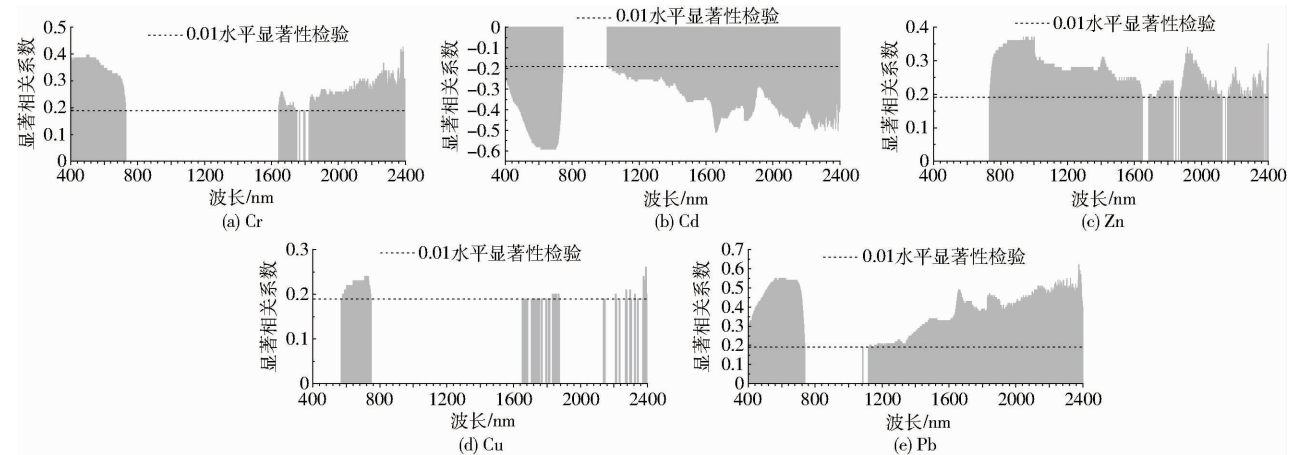


图3 土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 的光谱显著波段

Fig.3 Wavelengths of Cr, Cd, Zn, Cu, Pb by significance test ($P = 0.01$)

因此,结合各相关系数曲线相似性以及 0.01 水平上显著性检验,选取显著性波段 1 709 nm、1 713 ~ 1 716 nm、1 718 ~ 1 719 nm、1 724 ~ 1 725 nm、1 729 ~ 1 735 nm、1 741 nm、1 744 nm、1 745 nm、1 753 nm、1 795 nm、1 864 nm、2 210 ~ 2 213 nm、2 234 nm、2 343 nm、2 381 nm、2 394 nm 作为新郑市耕地土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 光谱反演的共用最佳波段。

2.3 面板数据模型构建

运用选取的 30 个共用显著性高光谱特征波段作为土壤重金属反演模型的自变量,对粮食主产区新郑市 144 个土壤样本 5 种重金属含量的面板数据,构建基于 OLS 的面板数据模型。对模型进行协方差分析检验,确定构建固定影响变系数模型面板数据模型,常数项和系数向量都是依土壤重金属的不同而变化,体现了土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 之间的差异性(表 2)。

由表 2 的结果表明,回归系数显著不为零,调整后的样本决定系数 \bar{R}^2 达到 0.993 7,残差平方和为 1.750 3,德宾-瓦特逊检验统计量为 1.898 2, P 值为零,说明模型的拟合优度较高。 F 统计量较大,为 1 365.94,说明回归系数显著,回归模型整体显著。

2.4 模型精度检验

运用构建的面板数据模型对土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 进行精度检验,结果见表 3。

由表 3 可知,建模集的每个土壤重金属都具有较高的 \bar{R}^2 ,最高为 Zn(0.81),对应的均方根误差为 3.51;最低为 Cd(0.69),对应的均方根误差为 0.03。均方根误差都较低,说明面板数据模型构建

的反演模型可以同时实现反演 5 种土壤重金属,且具备较好的建模精度。从验证集的预测结果可知,除了 Pb 的 \bar{R}^2 比建模集有所提高,达到 0.9 外,其余的均有所降低;均方根误差除了 Pb 比建模集降低,其余均有所提高;相对分析误差均大于 1.4,说明面板数据模型具备预测土壤重金属含量的能力。其中 Cr、Cd、Zn 的相对分析误差在 1.4 ~ 1.8 之间,说明模型具备预测土壤重金属 Cr、Cd、Zn 含量的能力;Cu 的相对分析误差在 2 ~ 2.5 之间,说明模型具有很好的定量预测 Cu 的能力;Pb 的相对分析误差大于 2.5,说明模型具有极好的预测 Pb 的能力。

为了更清晰展示面板数据固定影响变系数模型的建模精度,分别绘制实测值与面板数据模型反演的土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 的含量图(图 4)以及散点图(图 5)。

从图 4 和图 5 比较发现,面板数据模型反演的土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 含量有少数几个样本与实测值有差异外,多数样本实测值与预测值都集中在 $y = x$ 即 1:1 线附近,实测值与预测值之间的相关系数 r 均通过了 $P = 0.01$ 水平上的显著性检验,说明面板数据模型具备较好的预测能力,可以用于同时反演多种土壤重金属。

3 结论

(1) 新郑市的耕地土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu 和 Pb 的含量为 0.06 ~ 80.80 mg/kg,中等变异性,除了 Zn,其他 4 种重金属都有部分样点的含量值超出背景值,其中 Cd 的污染指数为 2.51,属于中度污染, Cr、Zn、Cu、Pb 的污染指数都接近于 1,存在潜在危

表2 土壤重金属显著性波段的面板数据模型

Tab.2 Panel data models for five heavy metal elements on significance bands

系数	Cr	Cd	Zn	Cu	Pb
常数项			0.97		
固定影响系数	1.186	-3.630	1.110	0.510	0.830
$b_{1709\text{ nm}}$	-24.01	-107.20	5.48	114.40	-28.27
$b_{1713\text{ nm}}$	-161.40	966.03	44.92	193.29	-224.30
$b_{1714\text{ nm}}$	849.81	-2437.92	-354.34	-722.89	472.01
$b_{1715\text{ nm}}$	-744.81	1678.31	359.25	468.77	-357.30
$b_{1716\text{ nm}}$	138.86	156.83	524.83	-335.79	408.78
$b_{1718\text{ nm}}$	-530.64	702.74	-1995.21	1403.89	-2030.91
$b_{1719\text{ nm}}$	506.56	-731.80	1731.77	-1373.28	1690.11
$b_{1724\text{ nm}}$	-702.54	-886.77	-993.67	277.67	-771.29
$b_{1725\text{ nm}}$	635.93	406.54	938.50	-241.33	939.73
$b_{1729\text{ nm}}$	-103.41	-928.25	-117.57	-312.19	1017.68
$b_{1730\text{ nm}}$	-403.06	4237.24	-866.23	1435.17	-3737.75
$b_{1731\text{ nm}}$	481.52	-3961.11	827.91	-1154.98	3997.13
$b_{1732\text{ nm}}$	417.57	548.15	277.47	221.64	-3288.35
$b_{1733\text{ nm}}$	-440.89	-334.62	-483.60	-227.84	2638.80
$b_{1734\text{ nm}}$	147.52	135.95	-481.97	921.21	742.68
$b_{1735\text{ nm}}$	27.27	432.62	437.40	-502.45	-1418.76
$b_{1741\text{ nm}}$	-21.24	-11.53	187.45	-92.27	25.13
$b_{1744\text{ nm}}$	-134.69	-453.24	-290.96	62.13	-116.35
$b_{1745\text{ nm}}$	135.55	654.23	375.80	-110.27	103.42
$b_{1753\text{ nm}}$	-71.31	80.01	-105.96	78.24	-76.43
$b_{1795\text{ nm}}$	2.20	-136.08	-3.35	-87.79	-1.66
$b_{1864\text{ nm}}$	-6.97	-28.98	-29.23	-17.02	16.17
$b_{2210\text{ nm}}$	-0.36	-76.35	-12.74	-105.33	-108.10
$b_{2211\text{ nm}}$	-15.13	267.90	19.28	203.93	159.10
$b_{2212\text{ nm}}$	10.79	-187.98	-29.67	-67.03	-68.84
$b_{2213\text{ nm}}$	10.62	-4.48	29.00	1.39	20.58
$b_{2234\text{ nm}}$	-6.65	10.03	-1.80	-32.24	2.50
$b_{2343\text{ nm}}$	-1.93	13.06	13.47	-4.81	3.23
$b_{2381\text{ nm}}$	7.95	-0.48	-3.38	1.36	-0.87
$b_{2394\text{ nm}}$	-2.31	-9.06	-2.08	3.51	-6.18

表3 5种重金属元素的面板数据模型的建模与预测

Tab.3 Calibration and validation results for five heavy metal elements using panel data model

元素	建模集		验证集		
	\bar{R}^2	均方根误差	\bar{R}_v^2	均方根误差	相对分析误差
Cr	0.76	5.30	0.64	6.80	1.692
Cd	0.69	0.03	0.53	0.04	1.408
Zn	0.81	3.51	0.50	6.73	1.403
Cu	0.72	2.22	0.66	2.32	2.046
Pb	0.71	3.46	0.90	2.12	3.432

害甚至轻度污染。

(2)通过对土壤重金属与光谱反射率进行相关性分析,选取 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 共用显著性的高光

谱特征波段 1709 nm、1713~1716 nm、1718~1719 nm、1724~1725 nm、1729~1735 nm、1741 nm、1744 nm、1745 nm、1753 nm、1795 nm、1864 nm、2210~2213 nm、2234 nm、2343 nm、2381 nm、2394 nm,以此作为粮食主产区新郑市耕地土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 的面板数据反演模型的自变量。

(3)构建基于 OLS 的固定影响变系数面板数据模型,模型整体显著,拟合优度较高($\bar{R}^2 = 0.9937$, 德宾-瓦特逊检验统计量为 1.8982, $F = 1365.94$),且5种土壤重金属 Cr、Cd、Zn、Cu、Pb 的决定系数 \bar{R}_v^2 均较高,分别为 0.76、0.69、0.81、0.72、0.71,均方根误差分别为 5.3、0.03、3.51、2.22、3.46。精度检

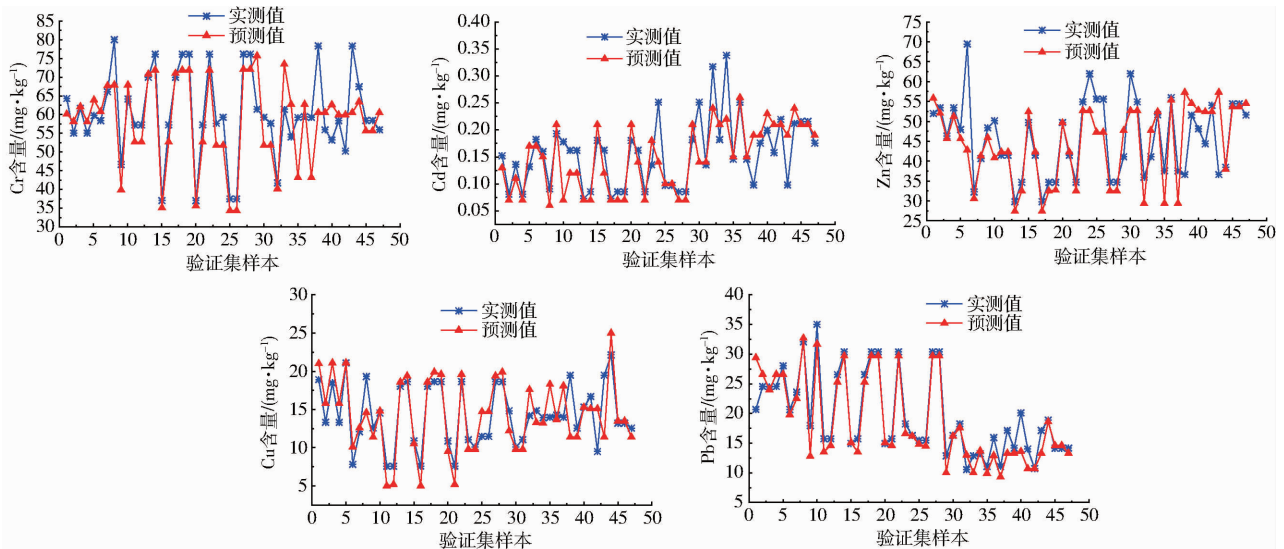


图4 验证集土壤重金属含量的反演结果

Fig. 4 Inversion of Cr, Cd, Zn, Cu, Pb on validation set

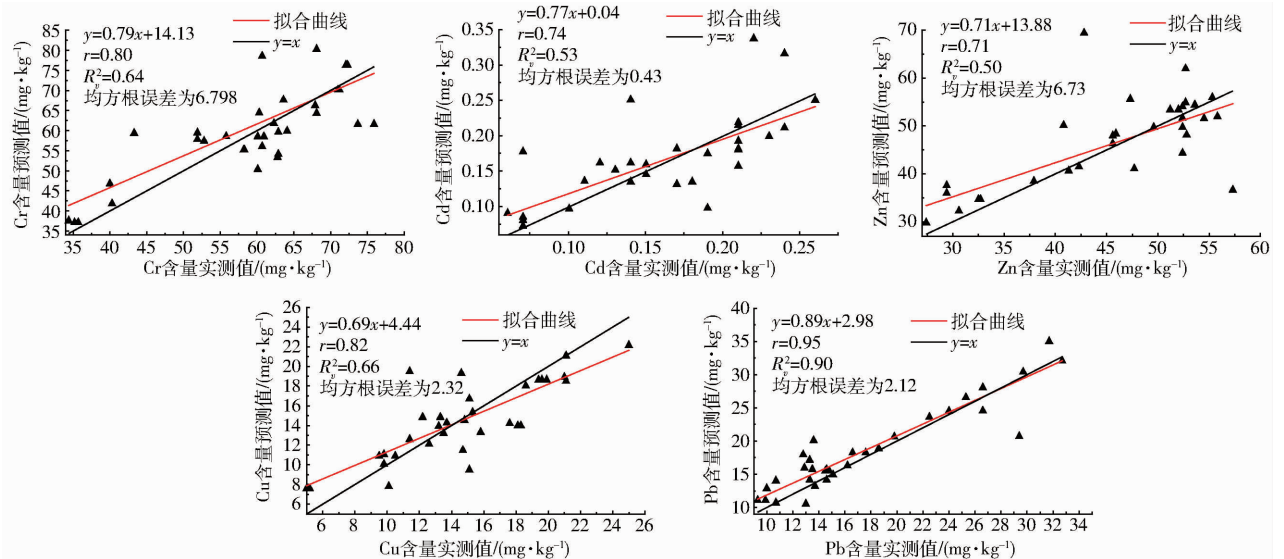


图5 面板数据模型预测值与实测值的散点图

Fig. 5 Scatter plot of measured values vs estimated values by panel data model

验结果显示, Cr、Cd、Zn 的相对分析误差在 1.4 ~ 1.8 之间, 具有定量预测 Cr、Cd、Zn 的能力; Cu 的相对分析误差在 2 ~ 2.5, 具有很好的定量预测 Cu 的能力; Pb 的相对分析误差大于 2.5, 具有极好的预测

Pb 的能力, 且多数样本实测值与预测值集中在 1:1 线附近, 由此可知面板数据模型可以同时有效反演 5 种土壤重金属含量, 且具有一定的预测精度。

参考文献

- XIAO Zhenzhen, LI Yi, FENG Hao. Hyperspectral properties models and forecasting of physico-chemical for salinized soils in Northwest China[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(5): 1615 - 1622.
- 于雷, 洪永胜, 耿雷, 等. 基于偏最小二乘回归的土壤有机质含量高光谱估算[J]. 农业工程学报, 2015, 31(14): 103 - 109.
- YU Lei, HONG Yongsheng, GENG Lei, et al. Hyperspectral estimation of soil organic matter content based on partial least squares regression[J]. Transactions of the CSAE, 2015, 31(14): 103 - 109. (in Chinese)
- 赵燕东, 皮婷婷. 北京地区粘壤土全氮含量的光谱预测模型[J/OL]. 农业机械学报, 2016, 47(3): 144 - 149. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20160321&flag=1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2016.03.021.
- ZHAO Yandong, PI Tingting. Spectral prediction model of soil total nitrogen content of clay loam soil in Beijing[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2016, 47(3): 144 - 149. (in Chinese)
- 吴明珠, 李小梅, 沙晋明. 亚热带红壤全氮的高光谱响应和反演特征研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(11): 3111 - 3115.
- WU Mingzhu, LI Xiaomei, SHA Jinming. Spectral inversion models for prediction of red soil total nitrogen content in subtropical region(Fuzhou)[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(11): 3111 - 3115. (in Chinese)

- 5 袁石林,马天云,宋韬,等. 土壤中总氮与总磷含量的近红外光谱实时检测方法[J]. 农业机械学报,2009,40(增刊):150-153.
YUAN Shilin, MA Tianyun, SONG Tao, et al. Real-time analysis of soil total N and P with near infrared reflectance spectroscopy [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2009,40(Supp.):150-153. (in Chinese)
- 6 杨爱霞,丁建丽,李艳红,等. 基于可见-近红外光谱变量选择的荒漠土壤全磷含量估测研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016,36(3):691-696.
YANG Aixia, DING Jianli, LI Yanhong, et al. Study on estimation of deserts soil total phosphorus content by Vis-NIR spectra with variable selection[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016,36(3):691-696. (in Chinese)
- 7 贾生尧,杨祥龙,李光,等. 近红外光谱技术结合递归偏最小二乘算法对土壤速效磷与速效钾含量测定研究[J]. 光谱学与光谱分析,2015,35(9):2516-2520.
JIA Shengyao, YANG Xianglong, LI Guang, et al. Quantitatively determination of available phosphorus and available potassium in soil by near infrared spectroscopy combining with recursive partial least squares[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(9):2516-2520. (in Chinese)
- 8 陈红艳,赵庚星,李希灿,等. 小波分析用于土壤速效钾含量高光谱估测研究[J]. 中国农业科学,2012,45(7):1425-1431.
- 9 李民赞,郑立华,安晓飞,等. 土壤成分与特性参数光谱快速检测方法 & 传感技术[J/OL]. 农业机械学报,2013,44(3):73-87. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20130315&flag=1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2013.03.015.
- LI Minzan, ZHENG Lihua, AN Xiaofei, et al. Fast measurement and advanced sensors of soil parameters with NIR spectroscopy [J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(3):73-87. (in Chinese)
- 10 王海江,张花玲,任少亭,等. 基于高光谱反射特性的土壤水盐状况预测模型研究[J/OL]. 农业机械学报,2014,45(7):133-138. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20140721&flag=1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2014.07.021.
- WANG Haijing, ZHANG Hualing, REN Shaoting, et al. Prediction model of soil water-salt based on hyperspectral reflectance characteristics[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2014, 45(7):133-138. (in Chinese)
- 11 SHI T, CHEN Y, LIU Y, et al. Visible and near-infrared reflectance spectroscopy—an alternative for monitoring soil contamination by heavy metals[J]. Journal of Hazardous Materials, 2014, 265(2):166-176.
- 12 徐明星,吴绍华,周生路,等. 重金属含量的高光谱建模反演:考古土壤中的应用[J]. 红外与毫米波学报,2011,30(2):109-114.
XU Mingxing, WU Shaohua, ZHOU Shenglu, et al. Hyperspectral reflectance models for retrieving heavy metal content: application in the archaeological soil[J]. Journal of Infrared and Millimeter Waves, 2011,30(2):109-114. (in Chinese)
- 13 宋练,简季,谭德军,等. 万盛采矿区土壤 As,Cd,Zn 重金属含量光谱测量与分析[J]. 光谱学与光谱分析,2014,34(3):812-817.
SONG Lian, JIAN Ji, TAN Dejun, et al. Estimation of soil's heavy metal concentrations (As, Cd and Zn) in Wansheng Mining Area with geochemistry and field spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2014,34(3):812-817. (in Chinese)
- 14 马伟波,覃琨,李海东,等. 基于超限学习机的矿区土壤重金属高光谱反演[J]. 生态与农村环境学报,2016,32(2):213-218.
MA Weibo, TAN Kun, LI Haidong, et al. Hyperspectral inversion of heavy metals in soil of a mining area using extreme learning machine[J]. Journal of Ecology and Rural Environment, 2016,32(2):213-218. (in Chinese)
- 15 TAN Kun, YE Yuanyuan, DU Peijun, et al. Estimation of heavy metal concentrations in reclaimed mining soils using reflectance spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2014, 34(12):3317-3322.
- 16 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)
- 17 袁中强,曹春香,鲍达明,等. 若尔盖湿地土壤重金属元素含量的遥感反演[J]. 湿地科学,2016,14(1):113-116.
- 18 郑光辉,周生路,吴绍华. 土壤砷含量高光谱估算模型研究[J]. 光谱学与光谱分析,2011,31(1):173-176.
ZHENG Guanghui, ZHOU Shenglu, WU Shaohua. Prediction of As in soil with reflectance spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2011,31(1):173-176. (in Chinese)
- 19 WANG Junjie, CUI Lijuan, GAO Wenxiu, et al. Prediction of low heavy metal concentrations in agricultural soils using visible and near-infrared reflectance spectroscopy[J]. Geoderma,2014,216(1):1-9.
- 20 侯燕平,吕成文,项宏亮,等. 土样处理方式对室内土壤高光谱测试稳定性影响探讨[J]. 土壤通报,2015,46(2):287-291.
HOU Yanping, LÜ Chengwen, XIANG Hongliang, et al. Treatment effects on soil hyperspectral stability in laboratory test [J]. Chinese Journal of Soil Science, 2015, 46(2):287-291. (in Chinese)
- 21 刘伟,赵众,袁洪福,等. 光谱多元分析校正集和验证集样本分布优选方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2014,34(4):947-951.
LIU Wei, ZHAO Zong, YUAN Hongfu, et al. An optimal selection method of samples of calibration set and validation set for spectral multivariate analysis [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis,2014,34(4):947-951. (in Chinese)
- 22 孙敬水. 计量经济学学习指导与EViews应用指南[M]. 北京:清华大学出版社,2010:372-380.
- 23 VISCARRA ROSSEL R A, TAYLOR H J, MCBRANTNEY A B. Multivariate calibration of hyperspectral γ -ray energy spectra for proximal soil sensing[J]. European Journal of Soil Science,2007, 58(1):343-353.
- 24 郑昭佩,刘新作. 土壤质量及其评价[J]. 应用生态学报,2003,14(1):131-134.
ZHENG Zhaopei, LIU Xinzuo. Soil quality and its evaluation[J]. Chinese Journal of Applied Ecology,2003,14(1):131-134. (in Chinese)
- 25 邵丰收,周皓韵. 河南省主要元素的土壤环境背景值[J]. 河南农业,1998(10):28.