

基于分数阶微分的土壤重金属高光谱遥感图像反演

丁松滔^{1,2}, 张霞¹, 尚坤³, 李儒¹, 孙伟超¹

1. 中国科学院空天信息创新研究院, 北京 100101;

2. 中国科学院大学, 北京 100049;

3. 自然资源部国土卫星遥感应用中心, 北京 100048

摘要: 高光谱成像技术在实现低成本大范围的土壤重金属快速监测方面独具潜力。针对高光谱图像反演中突出的小样本问题, 本文基于分数阶微分FOD (Fractional Order Derivative) 提出一种面向高光谱图像的土壤重金属反演方法。首先, 利用土壤采样点的邻近像元进行样本扩充, 增加样本的光谱差异性; 其次, 采用FOD突出光谱特征同时保留微分光谱的渐变信息; 进而通过竞争自适应重加权采样CARS (Competitive Adaptive Reweighted Sampling) 优选波段, 采用偏最小二乘方法 (PLSR) 建立反演模型。以新疆维吾尔自治区哈密市黄山南矿区获取的72个土壤样本和航空高光谱图像为研究数据, 对铅 (Pb)、锌 (Zn)、镍 (Ni) 3种重金属进行反演, 结果表明: 样本扩充不仅缓和了模型的过拟合现象, 还提升了重金属反演精度; 最佳阶数的分数阶微分能有效增强光谱特征, 提高反演精度; CARS相对于相关系数法CC (Correlation Coefficient)、遗传算法GA (Genetic Algorithm) 选出的波段组合反演精度更优, 对研究区重金属Pb、Zn、Ni的反演精度 R^2 分别为0.7974、0.8690和0.8303, 反演方法具有较好的鲁棒性。

关键词: 分数阶微分, 高光谱遥感图像, CARS, 土壤重金属, 小样本, 可见近红外, 短波红外

中图分类号: P2

引用格式: 丁松滔, 张霞, 尚坤, 李儒, 孙伟超. 2023. 基于分数阶微分的土壤重金属高光谱遥感图像反演. 遥感学报, 27(9): 2191-2205

Ding S T, Zhang X, Shang K, Li R and Sun W C. 2023. Estimating soil heavy metal from hyperspectral remote sensing images base on fractional order derivative. National Remote Sensing Bulletin, 27(9): 2191-2205 [DOI: 10.11834/jrs.20232513]

1 引言

成像高光谱遥感能够获取图像上连续且精细的土壤反射光谱, 具有低成本大范围快速监测土壤重金属含量的潜力 (Khosravi 等, 2018)。然而目前大多数研究采用实验室理想条件下采集的光谱, 基于高光谱图像的重金属反演研究较少 (Ding 等, 2022), 并且由于土壤样本采集受制于地形、交通可达性等因素, 且土壤样本的重金属实验室化验分析成本高, 导致样本不充足的问题普遍存在, 而对于高光谱图像而言, 图像上的土壤像元数量与土壤样本数相差悬殊, 小样本问题更加突出。光谱特征选择是解决小样本问题的有效途径之一, 而服务于光谱特征选择的特征增强方法也是研究

热点, 研究显示经过特征增强的光谱曲线比原始光谱曲线可以更有效地提取出光谱的特征波段 (沈强 等, 2019)。

微分处理是常用的增强光谱特征的方法, 一阶微分和二阶微分是最常用的光谱微分方式, 能够突出土壤光谱中与重金属相关的光谱信息, 提高反演精度 (郭学飞 等, 2020)。然而, 传统的整数阶微分 (即一阶、二阶微分) 缺乏对可能包含土壤重金属有益信息的渐变倾斜度或曲率的敏感性 (Hong 等, 2018)。分数阶微分作为整数阶微分的扩展, 对光谱微分的处理更加细致, 阶数上更精细的量化意味着能更敏感地捕捉各波段的曲率和倾斜度变化, 突出光谱特征。已有学者将FOD

收稿日期: 2022-10-14; 预印本: 2023-01-07

基金项目: 中国科学院战略性先导科技专项 (编号: XDA28080500); 国家自然科学基金 (编号: 42001282)

第一作者简介: 丁松滔, 研究方向为土壤重金属高光谱遥感反演。E-mail: dingsongtao20@mails.ucas.ac.cn

通信作者简介: 张霞, 研究方向为高光谱定量遥感研究。E-mail: zhangxia@radi.ac.cn

应用于实验室光谱 (Chen 等, 2022), 成功地反演了土壤重金属 Cr、Pb、Zn 的含量; Meng 等 (2021) 将 FOD 应用于 GF-5 图像, 使用 FOD 处理后的像元光谱计算光谱指数作为自变量, 构建的有机质反演模型精度 R^2 达到 0.84, 但 FOD 应用于高光谱图像上进行土壤重金属反演的有效性还有待验证。

特征选择算法通过选出特征性较强的波段, 提高模型的反演性能。现有很多研究都已经证明, 使用优选出的特征波段比使用全波段可以获得更好的反演结果 (Tan 等, 2020; Zhang 等, 2021), 这表明波段选择的重要性。土壤重金属反演中最为常见的筛选方法是皮尔森相关系数法, 但该方法只考虑单个波段与理化性质间的关系 (周冰 等, 2021), 没有考虑多个波段间的共线性。GA 是一种以“适者生存”为原则的优化算法, 以最大化精度为目标, 在特征空间中进行启发式搜索, 可以快速获取近似最优解 (柏晗 等, 2022), 已有将其应用于遥感图像上反演重金属含量的先例 (Wang 等, 2022), 然而 GA 的缺点是会过早收敛, 导致结果难以跳出局部解 (Pavez-Lazo 和 Soto-Cartes, 2011)。CARS 同样是遵循“适者生存”的一种筛选算法 (Li 等, 2009), 通过逐步去除冗余和不重要变量来选择信息, 使模型计算效率与稳定性提升 (Vohland 等, 2017), 能够从全波段数据中选择最优的波段组合 (Vohland 等, 2016), Cheng 等 (2021) 在土壤全氮反演研究中指出 CARS 算法在

有效变量的选择上优于 GA。综上所述, CARS 算法在这 3 种算法中有利于筛选出更有效的波段组合, 达到全局最优解。

本文以新疆维吾尔自治区哈密市的黄山南矿区为研究区, 应用航空高光谱图像开展对土壤重金属 Pb、Zn、Ni 含量的反演研究, 提出了一种基于 FOD 估算高光谱图像上土壤重金属浓度的反演方法, 通过扩充样本、FOD 增强光谱特征、CARS 筛选波段选取优光谱特征, 探索高光谱图像反演中小样本问题的解决途径, 分析确定了研究区 3 种重金属反演的最佳 FOD 阶数, 并将 CARS 与 CC、GA 的建模结果进行对比; 进一步分析了 CARS 的波段筛选结果, 得出对 3 种重金属反演贡献最高的波段范围及其物理意义, 分析了重金属含量分布图的可靠性。

2 研究区与研究数据

2.1 研究区概况

研究区位置如图 1 所示, 位于新疆维吾尔自治区哈密市黄山南铜镍矿区, 是重要的铜、镍、铁、铅、锌等大型矿床集中区 (王京彬 等, 2006), 该矿区于 2007 年开始勘探, 至今仍在开采中。地处新疆维吾尔自治区东部, 属于典型的温带大陆性干旱气候, 干燥少雨, 年降水量 33.8 mm, 年蒸发量 3300 mm, 夏季酷热、蒸发强。研究区内主要为空旷戈壁, 无植被覆盖, 土壤表面多为裸露状态。

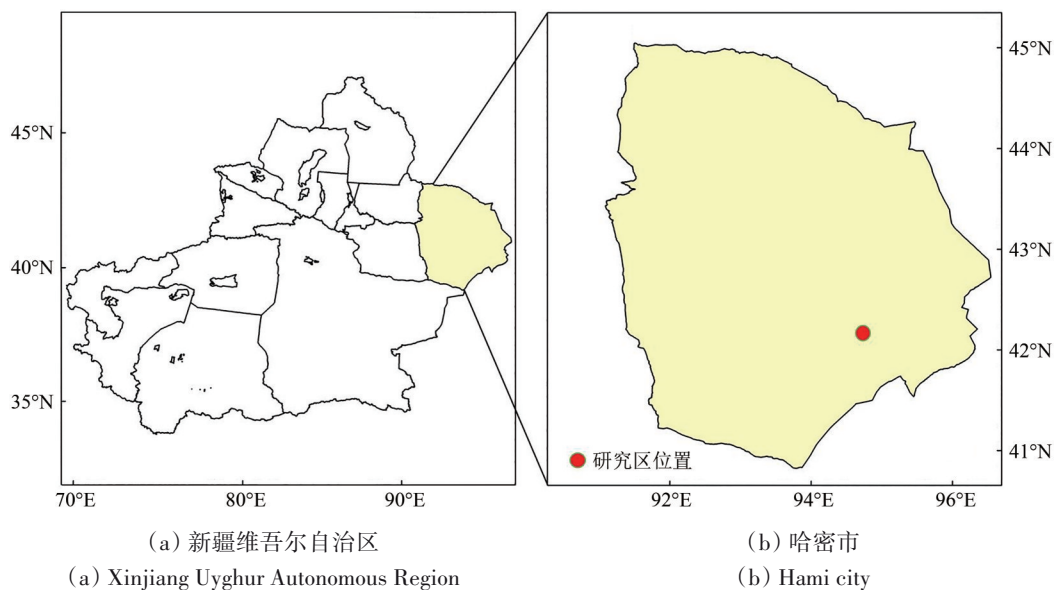


图 1 研究区位置示意图

Fig. 1 The geographical location of the study area

2.2 数据获取及预处理

航空高光谱图像获取于2021年8月23号，传感器为中国科学院上海技术物理研究所研制的全谱段多模态成像光谱仪，本次航飞航高3 km，波长范围覆盖350—2500 nm，350—1000 nm光谱区间的空间分辨率为0.5 m，有251个波段，1000—2500 nm波长范围空间分辨率为1 m，有508个波段。研究区由两条航带所覆盖，图像经过辐射定标、大气校正后得到地表反射率数据，对两航带图像进行配准、拼接等处理后，裁剪出研究区，经纬度范围为：42.197°N—42.216°N，94.625°E—94.684°E。

成像光谱仪在获取光谱数据时，大气中的水汽对1400 nm和1900 nm波长附近的辐射能量存在强吸收，且1900—2500 nm的像元光谱存在较严重噪声。为去除水汽等噪声的影响，并保留尽可能多的波段，剔除1350—1450 nm和1800 nm之后的波段。对剩余的光谱进行SG滤波去噪处理，由于不同区间的光谱噪声不同，对其采用不同的窗口大小进行滤波，350—1000 nm区间的噪声较弱，

采用窗口大小为9的二次多项式，1000—1800 nm区间为中度噪声，采用窗口大小为13的二次多项式。

与航空飞行准同步，2021年7月22日—7月30日开展了土壤样本地面获取实验，由于研究区属于干旱区，且该时段内土壤未受降雨影响，两者获取数据时土壤状况可认为一致。土壤样本采集主要针对采矿区及周边，沿道路两旁选择土壤的颜色和粒径有明显差异的样点，采集0—20 cm表层土，共采集土壤样本72个。图像及土壤样本点位置见图2，根据土壤样本的经纬度信息，提取对应的图像像元反射光谱数据。

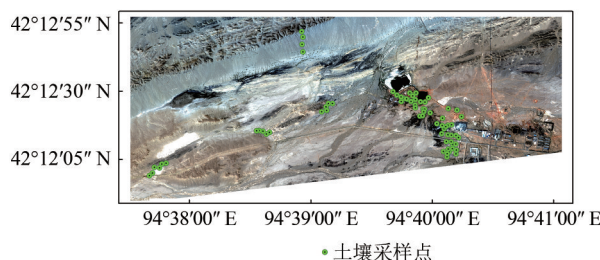


图2 航空遥感图像及采样点位置

Fig. 2 Aerial remote sensing image and sampling locations

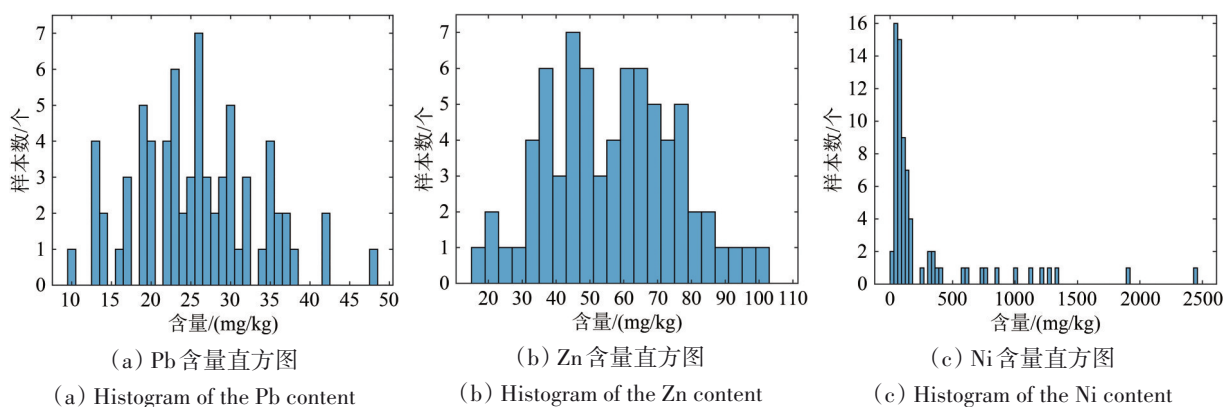


图3 土壤样本的重金属含量直方图

Fig. 3 Histogram of the heavy metal content of soil samples

将土样在实验室风干研磨后过100目筛制成标准样，用火焰原子吸收分光光度法测定重金属含量。图3所示为样本中3种重金属含量的直方图，可见重金属Pb和Zn的含量分布都趋向于正态分布，而重金属Ni含量呈现出明显的偏分布，本文采用对数变换对其进行校正，转换后Ni含量分布如图4所示，偏分布现象得到明显改善。

3 实验方法

图5为本文研究技术路线图，首先根据土壤样本的经纬度提取对应像元和相似的邻近像元光谱，

对像元光谱数据进行SG滤波及分数阶微分处理，处理后的光谱采用CARS算法进行特征波段优选，选出的波段组合用于偏最小二乘回归PLSR (Partial Least Squares Regression) 建立反演模型，最终将构建的最优模型应用于航空高光谱图像上反演重金属含量，获得重金属含量分布图。

3.1 样本扩充

由于研究区的地形较平坦，地表一致性较好，可以认为所采集土壤样本的重金属含量可以代表该样本小范围内的土壤重金属含量，又因为本研

究所获取的高光谱图像空间分辨率为1 m, 可认为邻近像元所对应的土壤中重金属含量差异极小。因此, 本研究根据样本经纬度信息定位到图像上的像元后, 以该像元为中心像元, 提取中心像元以及其八邻域的像元光谱, 依次计算八个邻近像元光谱与中心像元光谱的欧氏距离, 距离越近则认为其与中心像元的相似度越高, 选出欧氏距离最小的两个像元, 将3个像元(中心像元和两个相似邻近像元)的光谱共同作为该土壤样本的反射率光谱信息, 达到将土壤样本的光谱数据扩大3倍的效果。本研究采集的72个土壤样本, 用此方法进行样本扩充后, 获得216条像元反射率光谱数据。

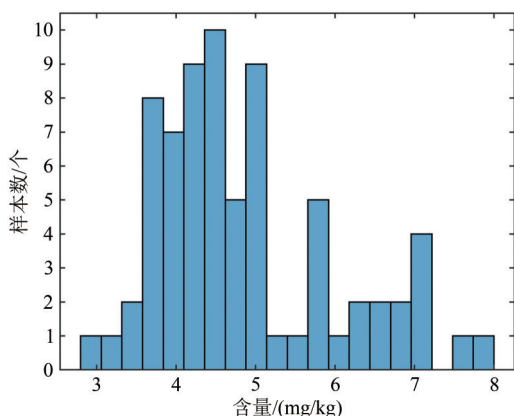


图4 对数变化后Ni含量直方图

Fig. 4 Histogram of the Ni content after log change

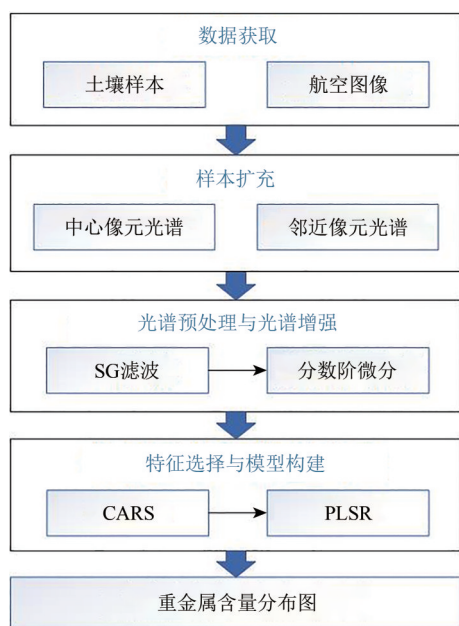


图5 技术路线图

Fig. 5 Flowchart of the proposed method

3.2 分数阶微分(FOD)

分数阶微分是数学中的重要分支, 它将经典的整数阶微分推广为任意阶, 能更敏感地捕捉光谱反射率细节的变化。到目前为止, 还没有一个统一的公式来定义分数阶微分。数学家们从不同的角度分析, 得出了分数阶微积分的不同定义。目前, 分数阶微分常见的表达式主要包括Riemann–Liouville (R–L)、Grunwald–Letnikov (G–L) 和Caputo。其中最常用的形式为G–L (Wang等, 2017), 本研究采用G–L形式进行微分, 其定义如下:

$$d^{\alpha} f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^{\alpha}} \sum_{m=0}^{t-a} (-1)^m \frac{\Gamma(\alpha+m)}{m! \Gamma(\alpha-m+1)} \cdot f(x-mh) \quad (1)$$

式中, α 为任意阶数; h 为微分步长; t 与 α 分别为微分的上、下限; $\Gamma(\alpha)$ 为 Gamma 函数, $\Gamma(\alpha)$ 满足:

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} \exp(-u) u^{\alpha-1} du = (\alpha-1)! \quad (2)$$

令 $h=1$, 式 (1) 能够推导出函数 $f(x)$ 分数阶微分的表达式为

$$\begin{aligned} \frac{d^v f(x)}{dx^v} &\approx f(x) + (-v)f(x-1) + \\ &\quad \frac{(-v)(-v+1)}{2} f(x-2) + \dots + \\ &\quad \frac{\Gamma(-v+1)}{m! \Gamma(-v+m+1)} f(x-m) \end{aligned} \quad (3)$$

式中, v 为阶数; m 为数据长度, $m = \frac{t-\alpha}{h}$ 。

3.3 竞争自适应重加权采样法(CARS)

CARS是一种以“适者生存”为原则的筛选算法, 基于与模型性能相关的统计数据, 通过逐步去除冗余和不重要的变量来选择信息量大的变量, 将其应用于高光谱数据进行筛选时, 其本质是使用自适应加权采样技术来保留回归中绝对系数较大的光谱波段 (Tan等, 2021)。

图6为CARS的方法流程图, CARS通过 N 次蒙特卡罗抽样迭代地选择 N 个波段子集, 最终目的是选择一个能使交叉验证的均方根误差 (RMSEcv) 最低的最佳变量子集。在高光谱数据上使用CARS筛选的具体步骤如下:

(1) 使用蒙特卡罗抽样方法从数据集中随机选择具有固定比例的样本, 然后用这些样本建立PLSR模型。PLSR模型可用公式表达为 $y = bX + e$,

e 为常数项, b 为回归系数向量, $b=[b_1, b_2, \dots, b_n]$, b 中第 i 个元素的绝对值 $|b_i|$ ($1 \leq i \leq n$) 表示第 i 个波段对 y 的贡献, 波段对目标变量的贡献越大, 该波段就越重要。为评价每个波长的重要性, 定义权重 W_i :

$$W_i = \frac{|b_i|}{\sum_{i=1}^n |b_i|}, i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (4)$$

通过CARS算法去掉的变量, 其权重 W_i 均设为0;

(2) 利用指数递减函数 EDF (Exponentially Decreasing Function) 和自适应重加权采样 ARS (Adaptive Reweighted Sampling) 分别强行和竞争性地消除权重低的波段;

(3) 重复步骤 (1)—(2), 直到达到 N 次采样运行, 最后选择 RMSECV 最低的波段子集作为最优波段组合。

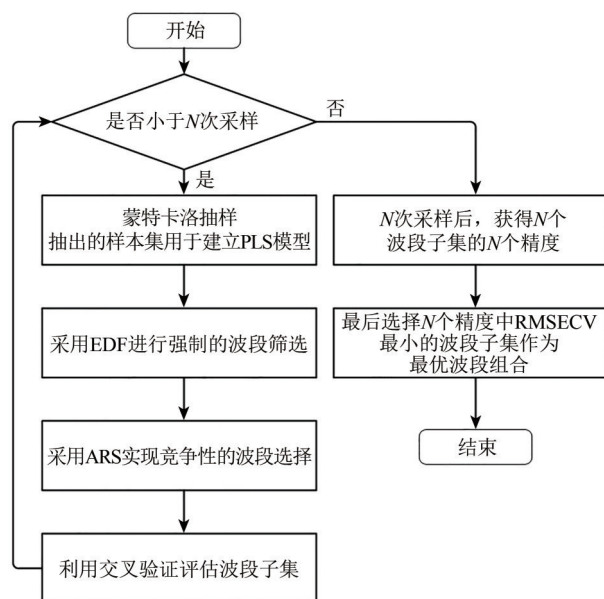


图6 CARS算法流程图

Fig. 6 Flowchart of CARS

由于蒙特卡洛抽样每次迭代抽取固定比例的样本参与运算, 不使用所有样本, 因此选出的波段组合具有更好的适应性; 步骤 (2) 中使用指数递减函数去除波段, 能在迭代前期筛选掉大量重要性低的波段, 使筛选过程的运算量显著下降。根据多次实验结果, 将蒙特卡洛抽样次数设置为50次, 每次迭代抽取90%的样本用于运算。

3.4 模型构建与评价指标

PLSR 是土壤光谱分析中最为常用的反演模

型, 在处理共线性强、计算复杂度高的问题上具有天然优势 (Rossel 和 Behrens, 2010), 能够应对自变量多于样本个数的情况, 因此其非常适合处理高光谱数据, 并且已被广泛的应用于土壤重金属反演。本文采用CARS+PLSR的模型构建方法, 先通过CARS筛选出特征波段, 再将特征波段输入PLSR建立反演模型。在PLSR建模中, 通过留一交叉验证的最小均方根误差确定PLSR的潜变量个数。由于CARS的蒙特卡罗抽样具有随机性, 为了避免实验的偶然性影响, 本文对每组反演实验均进行5次, 以5次反演实验中的精度最优值作为该模型精度将精度最优的模型应用于高光谱图像, 得到土壤重金属的含量分布图。

精度评定采用预测均方根误差 RMSEP (Root Mean Square Error of Prediction)、相对分析误差 RPD (Ratio of Prediction to Deviation) 和决定系数 R^2 (Coefficient of Determination) 3个评价指标。3个评价指标, RMSEP值越小, RPD值越大, R^2 值越接近1, 说明反演模型的精度越高; 反之, RMSEP值越大, RPD值越小, R^2 值越小, 说明反演模型的精度越低, 本文模型优劣参考现有的土壤属性含量高光谱反演的评价标准 (Wang 等, 2014): 出色模型, $R^2 > 0.9$; 良好模型, $0.9 > R^2 > 0.8$; 近似模型, $0.8 > R^2 > 0.65$; 具有一定反演能力, $0.65 > R^2 > 0.50$; 不具备反演能力, $0.50 > R^2$ 。

4 实验结果与分析

反演中将216个样本按照2:1的比例划分为训练集和测试集。由于样本扩充出的3个样本重金属含量相同, 如果将样本重金属含量排序后采用分层抽样方法, 按2:1进行划分, 会使训练集和测试集的样本含量分布完全一样, 从而导致反演精度偏高。为了解决该问题, 选出具有代表性的训练集, 采用 Kennard-Stone (KS) 算法 (Zhang 等, 2017) 来划分样本集, 具体的实施步骤如下:

(1) 首先计算两两样本之间的光谱欧氏距离, 选择光谱距离最大的两个样本;

(2) 然后分别计算剩余样本与已选两样本之间的光谱欧氏距离;

(3) 对于每个剩余样本而言, 计算其与已选各样本之间的最短光谱距离, 选择这些最短光谱距离中相对最大的距离所对应的样本, 作为新入选的样本;

(4) 重复步骤 (3), 直至所选样本的个数等于事先设定的数目为止。

通过 KS 算法选出 144 个样本作为训练集, 剩下的 72 个样本作为测试集, 样本集划分结果通过

直方图展示于图 7, 3 种重金属的训练集、测试集和总样本集的含量直方图分布一致且有一定差异性, 表明该方法划分出的训练集和测试集具有较好的代表性。

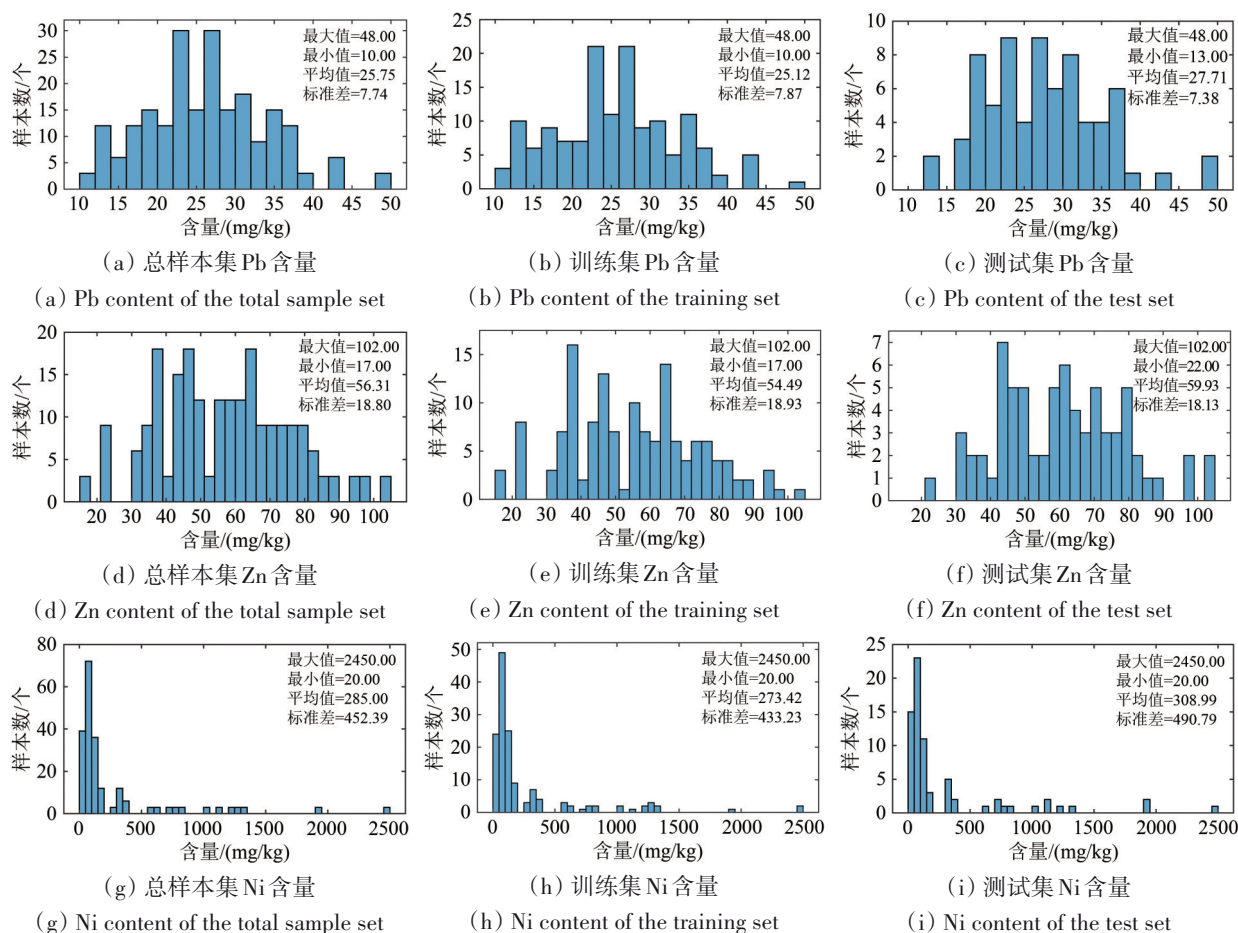


图7 各样本集的重金属含量直方图

Fig. 7 Histogram of heavy metal content for each sample set

4.1 分数阶微分的最佳阶数确定

由于分数阶微分需使用相邻的波段进行计算, 理想条件下的土壤反射率光谱应是一条连续的光滑曲线, 相邻波段的反射率不应出现较大变化。本研究使用的航空高光谱图像采集 350—1000 nm 和 1000—2500 nm 波长范围的传感器不同, 导致光谱在 1000 nm 波长处的反射率曲线不够平滑。此外, 由于 1350—1450 nm 的水汽吸收带被剔除后, 导致该光谱区间两端波长相差 100 nm 的两个波段变为相邻波段。为了确保微分时相邻波段反射率的差异在合理范围内, 将光谱分为 350—1000 nm、1000—1350 nm 和 1450—1800 nm 这 3 个区间来分别进行分数阶微分处理。

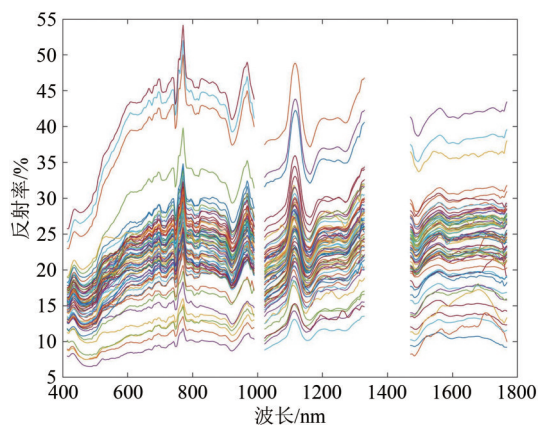
从图 8 中可以看出, 随着阶数的增加, 光谱的特征变的越来越明显, 峰谷差异越发增大; 0—1 阶的微分结果显示, 阶数增大的过程中, 平缓区间的波段反射率值越发趋近于 0, 而波峰波谷区间的波段反射率值被逐渐放大; 1—2 阶的微分结果中, 反射率曲线的波形已较为相似 (由于 1—2 阶内的微分曲线较为相似, 图 8 中仅展示 1 阶、1.5 阶和 2 阶的微分结果), 均与原始光谱曲线差异较大, 特征放大的效果明显, 随着阶数的增加, 变化主要体现光谱曲线的极值不断增大。

在不同阶数的微分处理后, 反射率曲线中的光谱信息有明显差异, 为了选出适合于反演各重金属的最佳微分阶数, 在 0—2 阶的范围内, 以 0.1 阶为

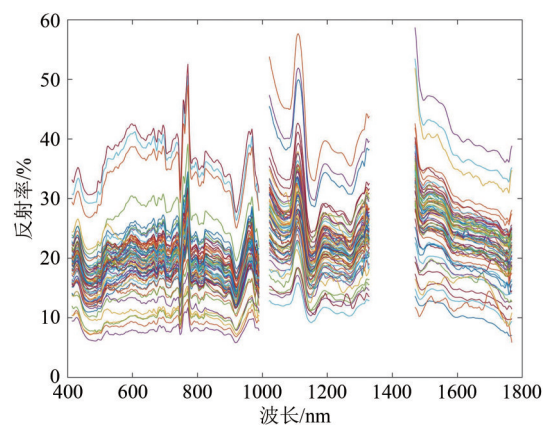
间隔, 将不同阶数微分后的光谱输入 CARS+PLSR 构建反演模型, 以测试集精度为选择依据。为了避免实验的偶然性影响, 确保选出的阶数能使反演精度达到最优, 每组阶数下均进行了 5 次反演建模。

图9显示了在不同阶数微分条件下, CARS+PLSR 反演 3 种重金属的测试集 R^2 最大值和平均值。对于 Pb, 阶数为 1.2 时测试集精度的最大值和平均值都达到了峰值 (分别为 0.7974 和 0.7431); 对于 Zn,

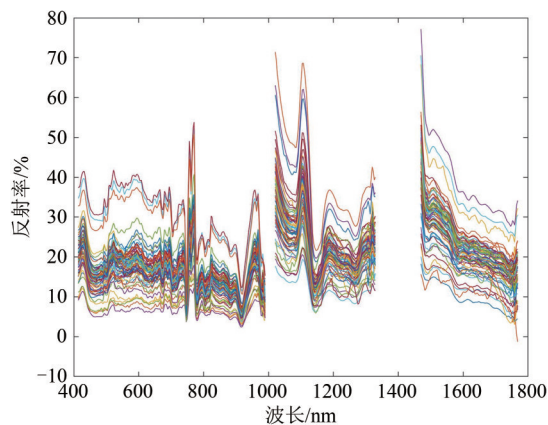
当阶数为 0.8 时, R^2 最大值曲线达到峰值 0.8690, 此时平均值曲线的值为 0.8096, 与平均值曲线的峰值 0.8126 相差极小, 因此将阶数 0.8 认为是反演重金属 Zn 的最佳微分阶数; 对于 Ni, 当阶数为 0.3 时最大值曲线和平均值曲线均达到峰值 (分别为 0.8303 和 0.7681)。同时考虑精度的最优值和平均值, 保证选出的最佳阶数能实现反演精度最优且模型稳定性好。



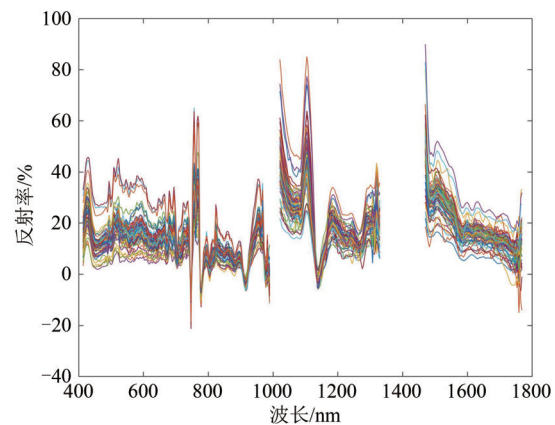
(a) 原始像元光谱
(a) Original image spectra



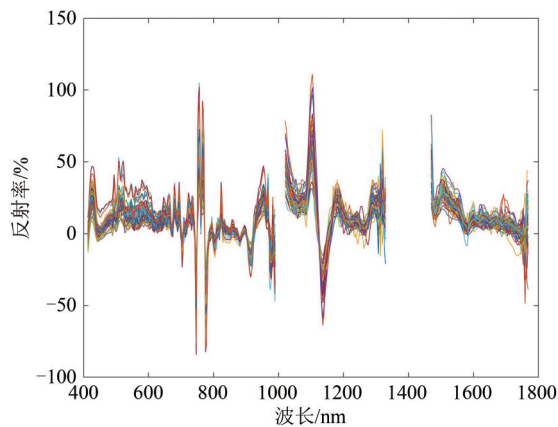
(b) Differential spectra of order 0.2



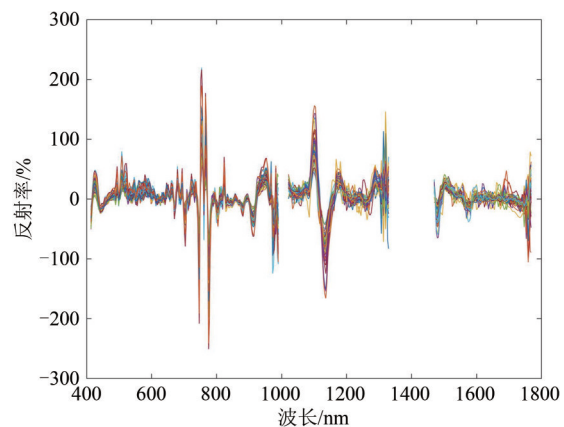
(c) 0.4 阶
(c) Differential spectra of order 0.4



(d) 0.6 阶
(d) Differential spectra of order 0.6



(e) 0.8 阶
(e) Differential spectra of order 0.8



(f) 1.0 阶
(f) Differential spectra of order 1.0

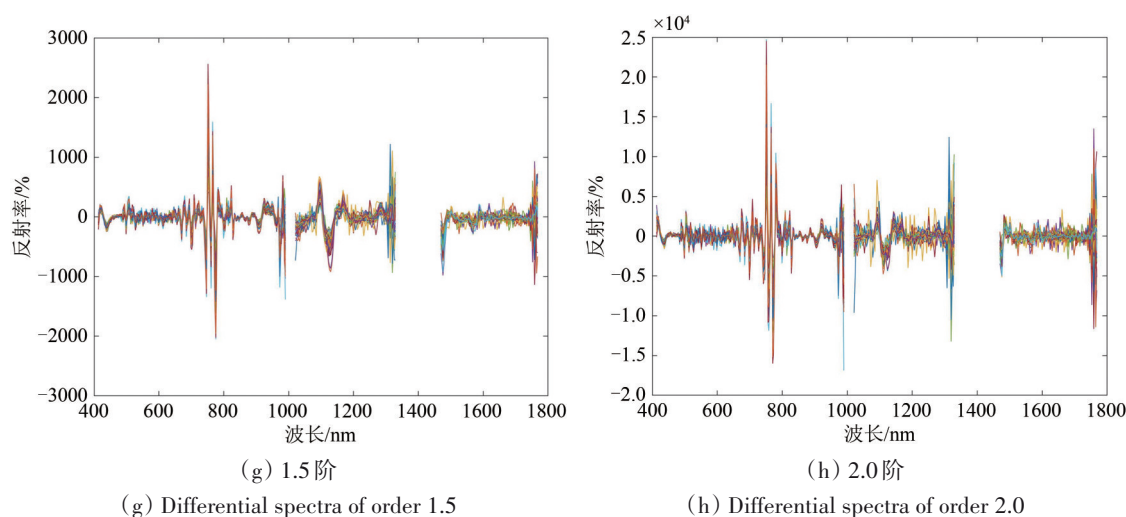


图8 不同阶数微分后的像元光谱反射曲线

Fig. 8 Image spectral curves with different orders of differential

每种重金属反演时光谱区间内对不同种类重金属敏感有效的波段不同,即各重金属的特征波段不同,不同阶数的微分处理后对各区间波段的特征化效果有所差异,因此各重金属的最佳微分阶数不尽相同。图9中当阶数为0时,代表不做微分处理使用原始像元光谱,当阶数为1和2时相当于使用一阶微分和二阶微分,3种重金属的反演结果都显示出使用最佳阶数分数阶微分的精度高于

原始像元光谱、一阶微分和二阶微分光谱的反演精度,证明了使用分数阶微分能够有效增强光谱特征,提高重金属反演精度,并且分数阶微分比整数阶微分能更敏感地突出对土壤重金属反演有益的光谱信息。根据本节的实验结果,本文在反演重金属Pb、Zn、Ni的各项实验中,分别选定1.2、0.8和0.3阶的分数阶微分对像元光谱进行处理。

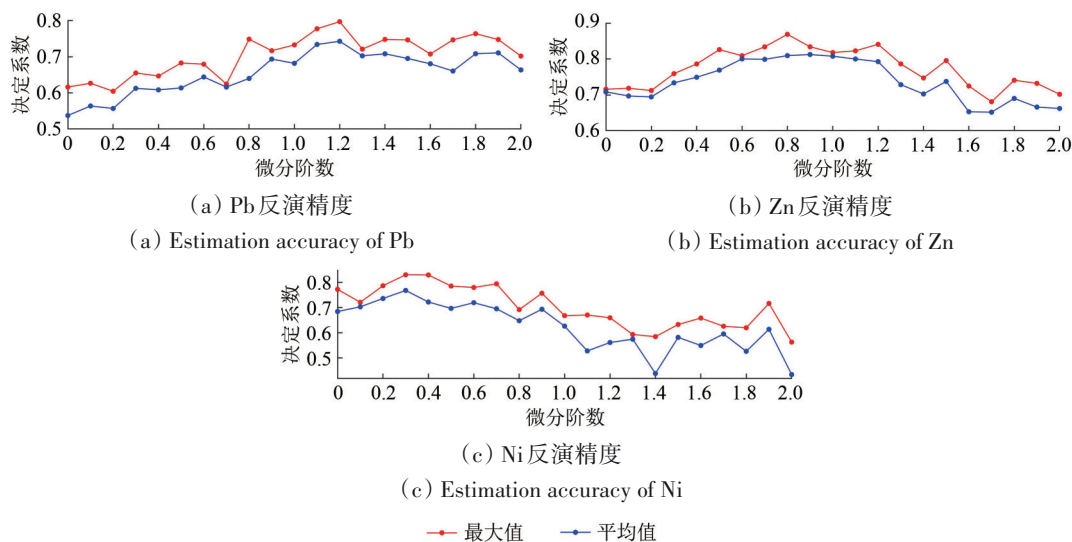


图9 不同阶数下反演3种重金属的测试集精度

Fig. 9 Estimation accuracy of three heavy metals at different orders

4.2 样本扩充有效性分析

为验证样本扩充的有效性,每种重金属均进行两组反演实验,一组对样本进行扩充,使用216个样本参与建模,另一组不扩充样本,使用72个样本,反演每种重金属时,都以其最佳阶数对像元

光谱进行微分处理后,建立CARS+PLSR模型。

表1中展示了各重金属的两组对照实验结果,在没有进行样本扩充前,小样本问题引起的过拟合现象明显,3种重金属的反演模型训练集精度 R^2 都大于0.98,然而只有Zn的测试集精度为0.8178,

Pb和Ni的测试集精度都较低， R^2 小于0.7；对样本集进行扩充后建立的反演模型，过拟合现象得到了很好的缓解，3种重金属的训练集精度和测试集精度的 R^2 差距小于0.05。样本扩充后测试集的精度都得到了明显的提升，Pb的测试集 R^2 从0.6128

提升到0.7974，Zn的精度从0.8178提升到0.8690，Ni的 R^2 从0.6969提升到0.8303。由此可见，样本扩充不仅缓和了模型的过拟合现象，还有效地提升了3种重金属的反演精度。

表1 样本扩充前后的3种重金属反演精度 (R_c^2 和 R_v^2 分别代表训练集和测试集的反演精度 R^2)

Table 1 The estimation accuracies of three heavy metals before and after sample expansion (R_c^2 and R_v^2 represent the inversion accuracies R^2 of the training and test sets, respectively)

样本集扩充情况	Pb反演精度		Zn反演精度		Ni反演精度	
	R_c^2	R_v^2	R_c^2	R_v^2	R_c^2	R_v^2
样本扩充前	0.9872	0.6128	0.9962	0.8178	0.9625	0.6663
样本扩充后	0.8491	0.7974	0.8808	0.8690	0.7858	0.8303

图10展示了样本扩充前后重金属Ni的反演结果散点图，样本中Ni含量大于2000 mg/kg的高含量样本仅有两个，从图10 (a) (b) 可以看出，两个高含量样本均被选入训练集，测试集中未包含高含量样本，难以通过测试集精度评估该模型应用于图像后在高含量区域的反演能力。从图10 (c) (d)

可以看出，样本扩充后训练集和测试集都包括了高含量的样本，因此测试集精度可以代表在高含量区域的反演效果。在使用3.1节所述的样本扩充条件下，使用KS算法划分样本集能够确保高含量样本存在于训练集和测试集，使本研究方法在反演含量偏分布的重金属时，能够得到可靠性较高的反演模型。

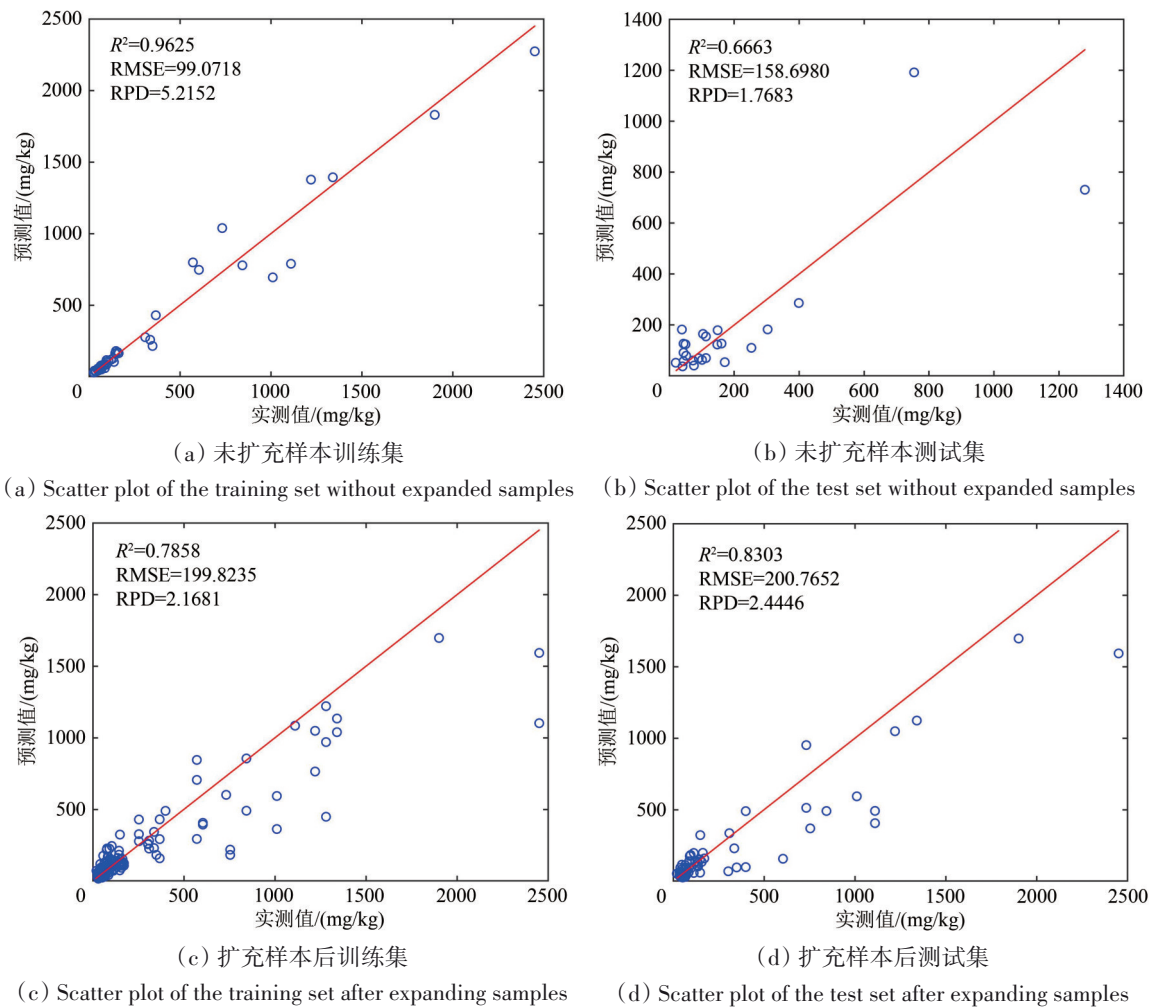


图10 样本扩充前后重金属Ni反演散点图

Fig. 10 Scatter plot of Ni estimation results before and after sample expansion

4.3 波段选择算法的建模精度对比分析

GA 在 PLSR 建模中被认为是一种有效的波段选择算法 (Leardi 和 González, 1998)。此外, 相关系数法在土壤重金属反演中被广泛使用, 因此本研究将 GA+PLSR、CC+PLSR 两种建模方法与 CARS+PLSR 进行对比分析。参考已有的 GA+PLSR 研究 (Sun 等, 2022), GA 的参数设置为染色体个数 20, 迭代次数 150, 代际间隙 90%, 基因变异概率 10%。CC 的相关性筛选阈值通过在 0—1 范围内, 以 0.1 为间隔设置阈值进行 3 种重金属的反演实验, 以 CC+PLSR 的反演精度最优为原则设置阈值的参数。

通过分数阶微分对扩充后的 216 条像元光谱进行处理后, 分别用 CC、GA 和 CARS 等 3 种算法筛选波段, 选出的 3 组波段组合分别构建 PLSR 反演模型。

表 2 展示了 3 种重金属在使用不同波段选择算法下的反演精度, 表中的 T (s) 代表单次模型构建所花费的秒数, R_c^2 和 R_v^2 分别代表训练集和测试集的反演精度 R^2 。3 种建模方法中, CC+PLSR 构建的模型测试集精度最低, 甚至在反演 Pb 时 $R^2 < 0.5$, 模型没有估算能力, 并且在 3 种重金属反演中均出现过拟合现象, 反演 Pb 和 Zn 时过拟合最为显著, 训练集精度远高于测试集精度。

GA+PLSR 的模型精度较高, 3 种重金属反演结果仅略低于 CARS+PLSR 模型, 反演 Zn 时的测试集精度 R^2 为 0.8119, 属于良好模型, 反演 Pb 和 Ni 时测试集精度 R^2 也均大于 0.78, 模型没有显示出过拟合现象。但由于 GA 在筛选波段时, 需要多次迭代选择最优波段组合, 每次迭代中所有波段均参与运算, 并且由于 GA 算法中有种群机制的设置, 在本研究的参数设置下, 每次迭代需生成 20 种波段组合, 意味着有 20 倍的总波段数参与运算, 导致整个模型的构建时间较长, 3 种重金属的 GA+PLSR 反演模型构建时间都在 300 s 以上, 耗费时间远远多于 CARS 和 CC 两种筛选方法。

CARS+PLSR 在 3 种建模方法中获得了最高的反演精度, Zn 和 Ni 的反演精度 R^2 都高于 0.8, Pb 的反演精度 R^2 也达到 0.7974, 并且模型没有呈现出明显的过拟合现象, 训练集和测试集都保持着较高的精度。此外, 虽然 CARS 和 GA 算法都需要多次迭代寻找最优波段组合, 但由于 CARS 内的 EDF 和 ARS 算法在迭代初期就快速、强力的去除重要性低的波段, 因此迭代中后期仅有少数波段参与运算, 所需的建模时间显著缩短。因此 CARS 是 3 种方法中最优的波段选择算法, 能够更快筛选出最优波段组合, 使模型具有更好的反演能力。

表 2 不同波段选择算法的重金属反演精度

Table 2 Heavy metal estimation accuracy of different band selection algorithms

波段选择算法	Pb			Zn			Ni		
	R_c^2	R_v^2	T(s)	R_c^2	R_v^2	T(s)	R_c^2	R_v^2	T(s)
CC	0.7250	0.4330	2.6	0.9340	0.6570	2.6	0.8250	0.6390	2.6
GA	0.7709	0.7804	374.5	0.8124	0.8119	319.7	0.7137	0.6830	379.7
CARS	0.8491	0.7974	3.2	0.8808	0.8690	3.2	0.7858	0.8303	3.2

4.4 CARS 的波段选择结果分析

图 11 展示了 CARS 选出的最优波段组合的直方图, 直方图内柱形图越高代表该波长范围内选择的波段越多, 3 种重金属的 CARS 筛选结果在不同波段区间选择的波段数量不同, 说明各波长范围对不同重金属反演的贡献不同。土壤反射光谱分析表明土壤在 VNIR-SWIR 区间的吸收特征主要由土壤有机质、铁氧化物等土壤光谱活性物质引起 (Kooistra 等, 2003)。由于土壤光谱活性物质在土壤中对重金属的吸附具有主导作用, 可据此推算土壤重金属浓度, 这是通过反射光谱间接反

演重金属的主要机理 (Rathod 等, 2013)。然而有机质、铁氧化物等土壤光谱活性物质对于不同的重金属吸附强度不同, 因此反演不同重金属时起主导作用的土壤组分不同 (Covelo 等, 2007), 现有研究表明土壤铁氧化物对重金属 Pb 的吸附作用是土壤反射光谱反演 Pb 含量的主要机理, 土壤有机质对重金属 Ni、Zn 的吸附作用是土壤反射光谱反演 Ni、Zn 的主要机理, 铁氧化物的吸收特征在 500 nm (Wu 等, 2007), 而 600—800 nm 附近的吸收峰被认为是土壤有机质的吸收特征 (徐彬彬等, 1991)。已有研究证明 500 nm 的铁氧化物特征波

段对反演重金属 Pb 是有效的 (张霞 等, 2022), Sun 等 (Sun 和 Zhang, 2017; Sun 等, 2018) 证明了使用 600—800 nm 的有机质特征谱段对反演 Zn 和 Ni 是有效的。根据图 11 所示, 在反演 Pb 时, CARS 筛选结果的直方图中 500 nm 范围内的柱形图最高; 在反演 Zn 和 Ni 时, 直方图内最高的柱形图落在

600—800 nm 区间和 1600 nm 范围内, Li 等 (2022) 指出有机质的官能团对 1600 nm 光谱影响显著, 证明 1600 nm 同样是对有机质敏感的特征波段。综上所述 CARS 的波段选择结果与已有反演机理研究保持一致, 证明 CARS 能够筛选出对反演重金属有益且合理的特征波段。

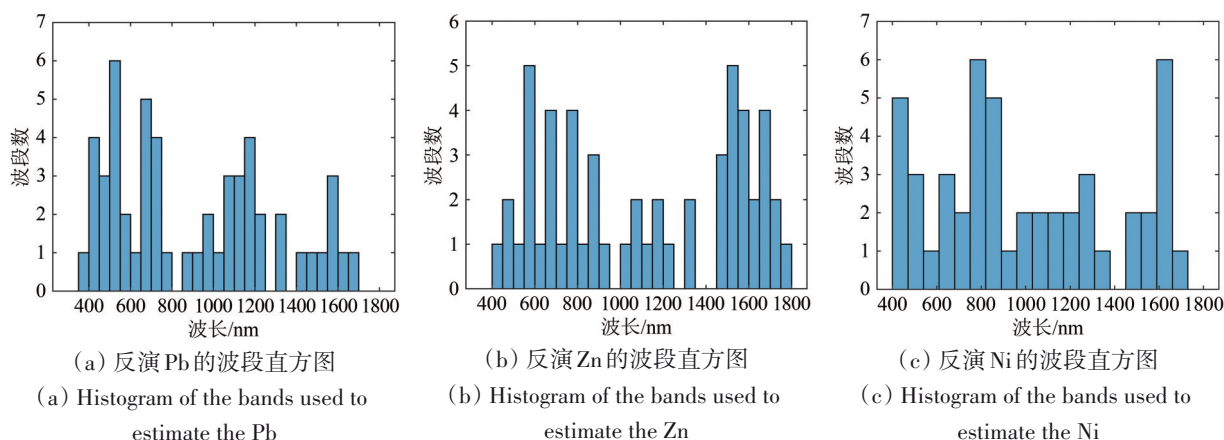


图 11 3 种重金属反演模型的 CARS 优选波段结果

Fig. 11 Results of CARS band selection for three heavy metal estimation models

4.5 重金属含量分布图分析

为了保证模型应用到高光谱图像上时反演结果的可靠性, 通过光谱角匹配法 (Ramirez-Lopez 等, 2013) 筛选出图像上与土壤样本像元光谱相似度高的区域, 将 3 种重金属的最优模型分别应用于该区域进行重金属含量反演, 图 12 (b) (c) (d) 展示了依据此方法制作出的 3 种重金属含量分布图。由于 Ni 的含量区间跨度较大, 连续的图例难以体现出含量差距, 图 12 (d) 的 Ni 含量分布图中采用了分级图例进行展示, 根据 2018 年发布的《土壤环境质量 建设用地土壤污染风险管控标准》(GB 36600-2018) 相关规定, 矿区作为二类用地, Ni 含量的筛选值 (可能存在风险) 为 900 mg/kg, 因此设置 900—2500 mg/kg 的级别代表超过筛选值, 用于表示对人体健康可能存在风险的区域, 900 mg/kg 以下采用分位数法进行分级, 确保每一级别内所含的像元个数大致相等。

研究区属于镍铜矿山区域, 可以看出 Ni 在整个研究区范围内的含量偏高, 但几乎没有超过筛选值的情况, 大部分区域的 Ni 含量明显高于 Pb 和 Zn 的含量值, 彭再华和蒋素芳 (2018) 研究也表明在哈密黄山南矿山中最主要的有价元素为铜和

镍, 其他金属元素含量较低。重金属 Pb 和 Zn 具有相似的分布趋势, 李玲等 (2020) 在新疆矿区的研究也指出 Pb、Zn 含量表现出显著相关性。3 种重金属分布的共同点为: 在北部以及南部区域的重金属含量较高, 在靠近居住区的东部区域含量较低。

图 13 展示了研究区的高程分布, 可以看出研究区的地势呈现出东北高, 西南低。经实地调研得知图 12 (a) 中的 A 区域用于堆放采矿渣, 图 12 (a) 中的 B 区域是采矿区, 采矿被认为是重金属污染的最重要因素之一, 重金属会伴随尾矿渣, 废水等进入土壤 (王海洋 等, 2022), 该采矿区于 2007 年开始勘探, 已在此地进行了多年的采矿活动, 由于研究区西南地势较低, 重金属在重力作用下不断发生迁移, 长时间作用下导致研究区南部、西南部区域受到污染, 因此 3 种重金属在南部的含量较高。

研究区北部含量较高的区域对应图 13 中高程出现显著变化的部分, 图 12 (a) 中可看出该区域图像与周围有明显差异, 根据实地调研得知该区域为山体斜坡, 坡上的土壤粒径极小呈细砂状, 坡面平滑。在坡面上采集的 4 个土壤样本重金属含

量均不低, 其中3个样本的Pb、Zn含量高于平均值, 2个样本的Ni含量远高于平均值, 且其中1个

达1220 mg/kg, 表明该区域土壤的重金属含量偏高, 反演结果与采样分析结果一致。

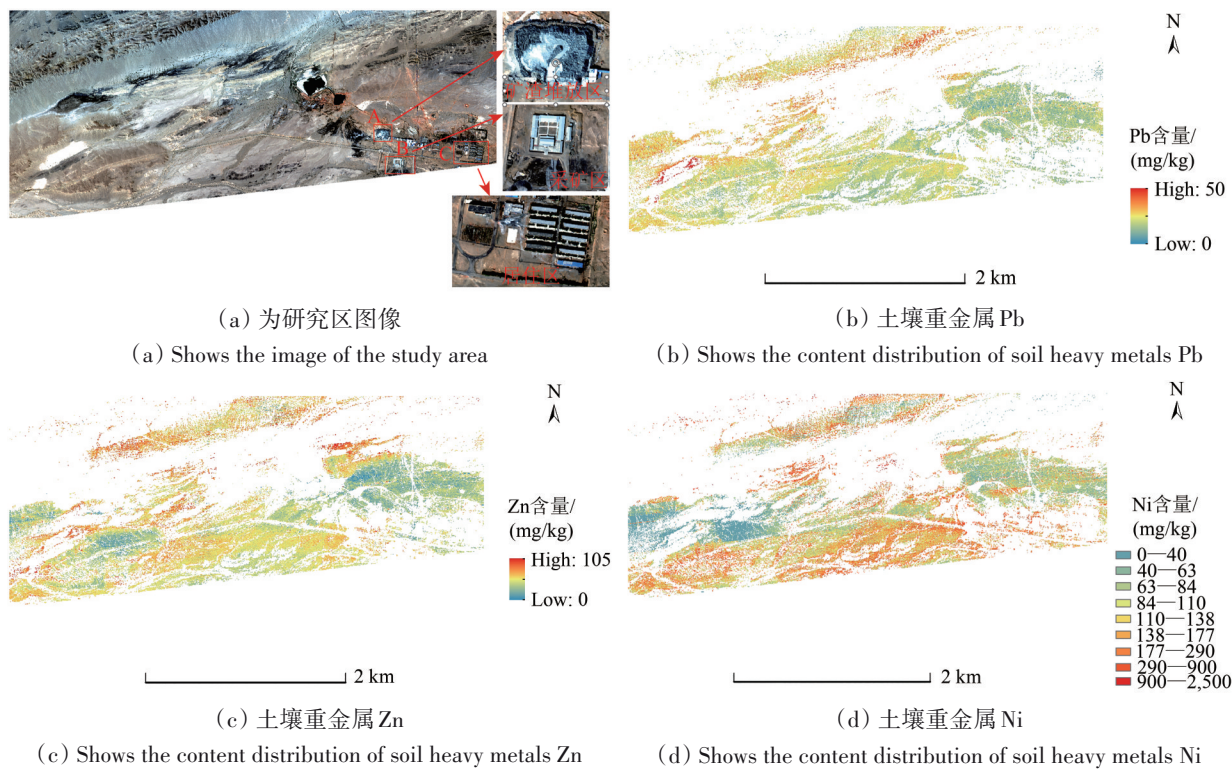


图 12 重金属含量分布图

Fig. 12 Heavy metal content distribution map

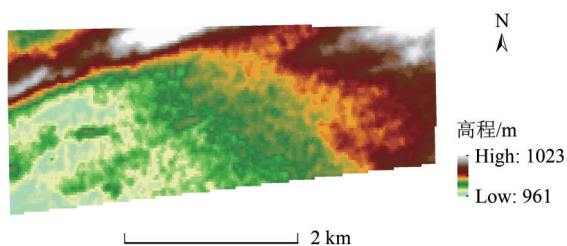


图 13 研究区高程图

Fig. 13 Elevation map of the study area

5 结 论

目前针对高光谱图像的重金属反演研究较少, 本文以3种重金属Pb、Zn、Ni为例, 开展面向高光谱图像的反演研究。由于土壤样本点与图像土壤像元数差距悬殊, 通过提取采样点邻近像元的方法扩充样本数据, 同时增加样本的光谱多样性; 采用FOD增强对重金属反演有益的光谱信息, 提高反演精度; 由于高光谱数据的波段众多, 使用CARS算法选出特征波段以建立反演模型, 从降维角度减弱小样本的影响。以新疆哈密黄山南铜镍矿区为研究区, 分析了该反演方法的有效性。

研究表明, 样本扩充有效地提升了3种重金属的测试集反演精度, 缓解了模型的过拟合问题, 扩充前3种重金属的训练集精度 R^2 均在0.98以上, 远高于测试集精度, 模型明显过拟合, 而样本扩充后, 3种重金属的测试集反演精度都得到了提升, 同时, 训练集 R^2 也在0.8以上, 与测试集精度相近, 过拟合问题得到显著改善。

3种重金属在最佳阶数分数阶微分下的模型反演精度均高于使用整数阶微分的反演精度, 说明分数阶微分能够更加有效地突出对土壤重金属反演有益的光谱信息。在最佳阶数微分的基础上, 将CARS与常用的CC和GA两种波段选择算法进行了对比, CARS+PLSR模型的精度最高, 并且建模耗时短, 本研究认为CARS是3种算法中最优的波段选择策略。

对CARS的波段选择结果进行分析, 反演Pb时, 选出的波段大多位于500 nm范围内, 该区间是对Pb敏感有效的铁氧化物的特征波段, 反演Zn、Ni时, 选出的波段大多位于600—800 nm和1600 nm附近, 该波长范围属于对Zn、Ni敏感的有机质特

征谱段, 与现有反演机理研究相一致, 证明 CARS 算法能够有效地筛选出光谱中对反演重金属有益的特征波段。

本研究方法应用于航空高光谱图像上反演土壤重金属 Pb、Zn、Ni 的含量, 反演精度较高, 并且反演出的 3 种重金属分布图与实际相符, 表明该方法有很好的鲁棒性, 具有反演多种土壤重金属的能力。但该方法尚需要在其它矿区、农作区验证其适用性, 且土壤类型的影响也需要进一步探讨。

参考文献 (References)

- Bai H, Yang Y, Cui Q F, Jia P and Wang L X. 2022. Retrieval of heavy metal content in soil using GF-5 Satellite images based on GA-XGBoost model. *Laser and Optoelectronics Progress*, 59(12): 1230001 (柏晗, 杨耘, 崔琴芳, 贾鹏, 王丽霞. 2022. 基于 GA-XGBoost 模型的 GF-5 卫星影像土壤重金属含量反演研究. *激光与光电子学进展*, 59(12): 1230001) [DOI: 10.3788/LOP202259.1230001]
- Chen L H, Lai J, Tan K, Wang X, Chen Y and Ding J W. 2022. Development of a soil heavy metal estimation method based on a spectral index: combining fractional-order derivative pretreatment and the absorption mechanism. *Science of the Total Environment*, 813: 151882 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.151882]
- Cheng H, Wang J and Du Y K. 2021. Combining multivariate method and spectral variable selection for soil total nitrogen estimation by Vis-NIR spectroscopy. *Archives of Agronomy and Soil Science*, 67(12): 1665-1678 [DOI: 10.1080/03650340.2020.1802013]
- Covelo E F, Vega F A and Andrade M L. 2007. Simultaneous sorption and desorption of Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, and Zn in acid soils: I. Selectivity sequences. *Journal of Hazardous Materials*, 147(3): 852-861 [DOI: 10.1016/j.jhazmat.2007.01.123]
- Ding S T, Zhang X, Sun W C, Shang K and Wang Y B. 2022. Estimation of soil lead content based on GF-5 hyperspectral images, considering the influence of soil environmental factors. *Journal of Soils and Sediments*, 22(5): 1431-1445 [DOI: 10.1007/s11368-022-03169-0]
- Guo X F, Cao Y, Jiao R C and Nan Y. 2020. Overview of Hyperspectral Remote Sensing Monitoring Method of Soil Heavy Metals. *Urban Geology*, 15(3): 320-326 (郭学飞, 曹颖, 焦润成, 南赞. 2020. 土壤重金属污染高光谱遥感监测方法综述. *城市地质*, 15(3): 320-326) [DOI: 10.3969/j.issn.1007-1903.2020.03.015]
- Hong Y S, Chen Y Y, Yu L, Liu Y F, Liu Y L, Zhang Y, Liu Y and Cheng H. 2018. Combining fractional order derivative and spectral variable selection for organic matter estimation of homogeneous soil samples by VIS-NIR spectroscopy. *Remote Sensing*, 10(3): 479 [DOI: 10.3390/rs10030479]
- Khosravi V, Ardejani F D, Yousefi S and Aryafar A. 2018. Monitoring soil lead and zinc contents via combination of spectroscopy with extreme learning machine and other data mining methods. *Geoderma*, 318: 29-41 [DOI: 10.1016/j.geoderma.2017.12.025]
- Kooistra L, Wanders J, Epema G F, Leuven R S E W, Wehrens R and Buydens L M C. 2003. The potential of field spectroscopy for the assessment of sediment properties in river floodplains. *Analytica Chimica Acta*, 484(2): 189-200 [DOI: 10.1016/s0003-2670(03)00331-3]
- Leardi R and González A L. 1998. Genetic algorithms applied to feature selection in PLS regression: how and when to use them. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 41(2): 195-207 [DOI: 10.1016/s0169-7439(98)00051-3]
- Li H D, Liang Y Z, Xu Q S and Cao D S. 2009. Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration. *Analytica Chimica Acta*, 648(1): 77-84 [DOI: 10.1016/j.aca.2009.06.046]
- Li L, Shao L M, Li Y W, Xu J and Zhang F W. 2020. Characteristics and risk assessment of heavy metal pollution in soil of a polymetallic mine in Xinjiang. *Environment and Development*, 32(8): 23-26 (李玲, 邵龙美, 李永武, 徐娟, 张峰玮. 2020. 新疆某多金属矿土壤重金属污染特征及风险评价. *环境与发展*, 32(8): 23-26) [DOI: 10.16647/j.cnki.cn15-1369/X.2020.08.012]
- Li T C, Mu T H, Liu G W, Yang X G, Zhu G C and Shang C Q. 2022. A method of soil moisture content estimation at various soil organic matter conditions based on soil reflectance. *Remote Sensing*, 14(10): 2411 [DOI: 10.3390/rs14102411]
- Meng X T, Bao Y L, Ye Q, Liu H J, Zhang X L, Tang H T and Zhang X H. 2021. Soil organic matter prediction model with satellite hyperspectral image based on optimized denoising method. *Remote Sensing*, 13(12): 2273 [DOI: 10.3390/rs13122273]
- Pavez-Lazo B and Soto-Cartes J. 2011. A deterministic annular crossover genetic algorithm optimisation for the unit commitment problem. *Expert Systems with Applications*, 38(6): 6523-6529 [DOI: 10.1016/j.eswa.2010.11.089]
- Peng Z H and Jiang S F. 2018. Study on the ore dressing experiment of Huangshan south copper-nickel ore in Hami, Xinjiang. *Hunan Nonferrous Metals*, 34(5): 25-30 (彭建华, 蒋素芳. 2018. 新疆哈密黄山南铜镍矿选矿试验研究. *湖南有色金属*, 34(5): 25-30) [DOI: 10.3969/j.issn.1003-5540.2018.05.007]
- Ramirez-Lopez L, Behrens T, Schmidt K, Rossel R A V, Dematté J A M and Scholten T. 2013. Distance and similarity-search metrics for use with soil vis-NIR spectra. *Geoderma*, 199: 43-53 [DOI: 10.1016/j.geoderma.2012.08.035]
- Rathod P H, Rossiter D G, Noomen M F and van der Meer F D. 2013. Proximal spectral sensing to monitor phytoremediation of metal-contaminated soils. *International Journal of Phytoremediation*, 15(5): 405-426 [DOI: 10.1080/15226514.2012.702805]
- Rossel R A V and Behrens T. 2010. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma*, 158(1/2): 46-54 [DOI: 10.1016/j.geoderma.2009.12.025]
- Shen Q, Zhang S W, Ge C, Liu H L, Zhou Y, Chen Y P, Hu Q Q, Ye H C and Huang Y F. 2019. Hyperspectral inversion of heavy metal

- content in soils reconstituted by mining wasteland. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 39(4): 1214-1220 (沈强, 张世文, 葛畅, 刘慧琳, 周妍, 陈元鹏, 胡青青, 叶回春, 黄元仿. 2019. 矿业废弃地重构土壤重金属含量高光谱反演. *光谱学与光谱分析*, 39(4): 1214-1220) [DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)04-1214-08]
- Sun W C, Liu S, Zhang X and Li Y. 2022. Estimation of soil organic matter content using selected spectral subset of hyperspectral data. *Geoderma*, 409: 115653 [DOI: 10.1016/j.geoderma.2021.115653]
- Sun W C and Zhang X. 2017. Estimating soil zinc concentrations using reflectance spectroscopy. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 58: 126-133 [DOI: 10.1016/j.jag.2017.01.013]
- Sun W C, Zhang X, Sun X J, Sun Y L and Cen Y. 2018. Predicting nickel concentration in soil using reflectance spectroscopy associated with organic matter and clay minerals. *Geoderma*, 327: 25-35 [DOI: 10.1016/j.geoderma.2018.04.019]
- Tan K, Ma W B, Chen L H, Wang H M, Du Q, Du P J, Yan B K, Liu R Y and Li H D. 2021. Estimating the distribution trend of soil heavy metals in mining area from HyMap airborne hyperspectral imagery based on ensemble learning. *Journal of Hazardous Materials*, 401: 123288 [DOI: 10.1016/j.jhazmat.2020.123288]
- Tan K, Wang H M, Chen L H, Du Q, Du P J and Pan C C. 2020. Estimation of the spatial distribution of heavy metal in agricultural soils using airborne hyperspectral imaging and random forest. *Journal of Hazardous Materials*, 382: 120987 [DOI: 10.1016/j.jhazmat.2019.120987]
- Vohland M, Harbich M, Ludwig M, Emmerling C and Thiele-Bruhn S. 2016. Quantification of soil variables in a heterogeneous soil region with VIS-NIR-SWIR data using different statistical sampling and modeling strategies. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 9(9): 4011-4021 [DOI: 10.1109/jstars.2016.2572879]
- Vohland M, Ludwig M, Thiele-Bruhn S and Ludwig B. 2017. Quantification of soil properties with hyperspectral data: selecting spectral variables with different methods to improve accuracies and analyze prediction mechanisms. *Remote Sensing*, 9(11): 1103 [DOI: 10.3390/rs9111103]
- Wang H Y, Han L, Xie D N, Hu H J, Liu Z H and Wang Z. 2022. Distribution characteristics of heavy metals in farmland soils around mining areas and pollution Assessment. *Environmental Science*, 43(4): 2104-2114 (王海洋, 韩玲, 谢丹妮, 胡慧娟, 刘志恒, 王祯. 2022. 矿区周边农田土壤重金属分布特征及污染评价. *环境科学*, 43(4): 2104-2114) [DOI: 10.13227/j.hjlx.202106218]
- Wang J J, Cui L J, Gao W X, Shi T Z, Chen Y Y and Gao Y. 2014. Prediction of low heavy metal concentrations in agricultural soils using visible and near-infrared reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 216: 1-9 [DOI: 10.1016/j.geoderma.2013.10.024]
- Wang J Z, Tiyyip T, Ding J L, Zhang D, Liu W, Wang F and Tashpolat N. 2017. Desert soil clay content estimation using reflectance spectroscopy preprocessed by fractional derivative. *PLoS ONE*, 12(9): e0184836 [DOI: 10.1371/journal.pone.0184836]
- Wang J B, Wang Y W and He Z J. 2006. Ore deposits as a guide to the tectonic evolution in the East Tianshan Mountains, NW China. *Geology in China*, 33(3): 461-469 (王京彬, 王玉往, 何志军. 2006. 东天山大地构造演化的成矿示踪. *中国地质*, 33(3): 461-469) [DOI: 10.3969/j.issn.1000-3657.2006.03.002]
- Wang Y B, Zhang X, Sun W C, Wang J N, Ding S T and Liu S H. 2022. Effects of hyperspectral data with different spectral resolutions on the estimation of soil heavy metal content: from ground-based and airborne data to satellite-simulated data. *Science of the Total Environment*, 838: 156129 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2022.156129]
- Wu Y Z, Chen J, Ji F F, Gong P, Liao Q L, Tian Q J and Ma H R. 2007. A mechanism study of reflectance spectroscopy for investigating heavy metals in soils. *Soil Science Society of America Journal*, 71(3): 918-926 [DOI: 10.2136/sssaj2006.0285]
- Xu B B, Ji G S and Zhu Y H. 1991. A preliminary research of geographic regionalization of China land background and spectral reflectance characteristics of soil. *Remote Sensing of Environment*, 6(2): 142-151 (徐彬彬, 季耿善, 朱永豪. 1991. 中国陆地背景和土壤光谱反射特性的地理分区的初步研究. *环境遥感*, 6(2): 142-151)
- Zhang L N, Li G, Sun M X, Li H X, Wang Z N, Li Y X and Lin L. 2017. Kennard-Stone combined with least square support vector machine method for noncontact discriminating human blood species. *Infrared Physics and Technology*, 86: 116-119 [DOI: 10.1016/j.infrared.2017.08.020]
- Zhang X, Ding S T, Cen Y, Sun W C and Wang J N. 2022. Soil heavy metal Pb content estimation method by combining field spectra with laboratory spectra. *Geomatics and Information Science of Wuhan University*, 47(9): 1479-1485 (张霞, 丁松滔, 岑奕, 孙伟超, 王晋年. 2022. 结合野外与实验室光谱的土壤Pb含量反演. *武汉大学学报(信息科学版)*, 47(9): 1479-1485) [DOI: 10.13203/j.whugis.20200386]
- Zhang Z P, Ding J L, Zhu C M, Wang J Z, Ma G L, Ge X Y, Li Z S and Han L J. 2021. Strategies for the efficient estimation of soil organic matter in salt-affected soils through Vis-NIR spectroscopy: optimal band combination algorithm and spectral degradation. *Geoderma*, 382: 114729 [DOI: 10.1016/j.geoderma.2020.114729]
- Zhou B, Li B X, He X, Liu H X and Wang F Z. 2021. Classification of camouflages using hyperspectral images combined with fusing adaptive sparse representation and correlation coefficient. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 41(12): 3851-3856 (周冰, 李秉璇, 贺宣, 刘贺雄, 王法臻. 2021. 融合自适应稀疏表示和相关系数的高光谱伪装分类方法. *光谱学与光谱分析*, 41(12): 3851-3856) [DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)12-3851-06]

Estimating soil heavy metal from hyperspectral remote sensing images base on fractional order derivative

DING Songtao^{1,2}, ZHANG Xia¹, SHANG Kun³, LI Ru¹, SUN Weichao¹

1. Aerospace Information Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3. Land Satellite Remote Sensing Applications Center, MNR, Beijing 100048, China

Abstract: Hyperspectral imaging technology has the unique potential for the low-cost, large-scale, and rapid monitoring of soil heavy metals. For hyperspectral images, the number of soil image elements differs greatly from the number of soil samples, so the problem of small samples is prominent. In this paper, a soil heavy metal estimation method based on Fractional-Order Derivative (FOD) for hyperspectral images is proposed.

First, the neighboring pixels of soil samples were extracted to expand the samples and increase the spectral variability. Second, FOD was used to highlight the spectral features. Then, the bands were selected by Competitive Adaptive Reweighted Sampling (CARS), and partial least squares (PLSR) was used to construct the model. Seventy-two soil samples and aerial hyperspectral images obtained from the Huangshan South mine in Hami, Xinjiang were used to estimate three heavy metals, namely, lead (Pb), zinc (Zn), and nickel (Ni).

After sample expansion, the estimation accuracy of the test set was improved for three heavy metals, the test set R² improved from 0.6128 to 0.7974 for Pb, from 0.8178 to 0.8690 for Zn, and from 0.6969 to 0.8303 for Ni, while the R² of the training set was above 0.8. The accuracy of estimation model for three heavy metals with the best fractional-order differentiation was better than that using integer-order differentiation. CARS+PLSR obtained higher estimation accuracy than the modeling approaches of GA+PLSR and CC+PLSR. The estimation accuracies R² were 0.7974, 0.8690, and 0.8303 for Pb, Zn, and Ni, respectively.

Sample expansion alleviated the overfitting phenomenon and improved the estimation accuracy. The FOD of the optimal order could effectively enhance the spectral features and improve the estimation accuracy. CARS was more accurate than CC and GA.

Key words: fractional order derivative, hyperspectral remote sensing images, Competitive Adaptive Reweighted Sampling (CARS), soil heavy metal, small sample size, visible and near-infrared band, short-wave infrared band

Supported by Strategic Priority Research Program of the Chinese Academy of Sciences (No. XDA28080500); National Natural Science Foundation of China (No. 42001282)