

doi: 10.6046/zrzyyg.2020333

引用格式: 李双权, 马玉凤, 刘勋, 等. 郑州邙山枣树沟黄土剖面常量元素含量的高光谱反演[J]. 自然资源遥感, 2021, 33(3): 121–129. (Li S Q, Ma Y F, Liu X. et al. Hyperspectral inversion of macro element content in loess based on the profile of Zaoshugou Village, Mangshan Mountain, Zhengzhou City[J]. Remote Sensing for Natural Resources, 2021, 33(3): 121–129.)

郑州邙山枣树沟黄土剖面常量元素含量的高光谱反演

李双权¹, 马玉凤¹, 刘 勋², 李长春², 杜 军¹
(1. 河南省科学院地理研究所, 郑州 450052; 2. 河南理工大学, 焦作 454000)

摘要: 黄土自身的发生和发展过程记录了丰富的历史信息, 其常量元素指标能够准确地反映出气候环境的演变。高光谱遥感技术具有波段多且连续、高分辨率的优点, 可用于探测土壤属性信息的细微差异, 为快速有效地获取黄土基础信息提供了技术支持。本研究以郑州邙山枣树沟村黄土剖面为研究对象, 结合高光谱技术, 通过对平滑处理后的原始光谱、一阶微分(FD)、二阶微分(SD)、去包络线(CR)和倒数对数(Log(1/R))与黄土剖面常量元素数开展相关性分析, 选出相关系数 R 较大的波段作为特征波段建立基于 PLSR (偏最小二乘回归) 的模型进行分析。研究发现: Ga, Fe, Mg 元素在郑州黄土剖面中变化指示了研究区全新世中期约 5 400 aBP 至今经历了冷干–暖湿–冷干的的气候旋回; 黄土不同地层单元的反射光谱特征虽在整体上曲线趋势相似, 但其光谱反射率表现为黄土层 $L_{0-2} > \text{黄土层 } L_{0-1} > \text{过渡层 } L_1 > \text{古土壤层 } S_{0-1} > \text{表土层 } T_s$ 的规律; 基于偏最小二乘法的邙山黄土剖面常量元素反演模型中, Fe_2O_3 , CaO 以及 CaO/MgO 的最佳反演模型为以 FD 光谱变换为自变量的 PLSR 模型, MgO 的最佳反演模型为以 CR 光谱变换为自变量的 PLSR 模型; Fe_2O_3 , CaO 和 CaO/MgO 的最佳反演模型能够较好地地区分不同的气候区和所在区域古气候的旋回变化, MgO 能较好地指示所在区域的古气候演化规律, 有一定的指示参考价值。

关键词: 黄土; 高光谱; 常量元素; 偏最小二乘法
中图法分类号: TP 79 **文献标志码:** A **文章编号:** 2097–034X(2021)03–0121–09

0 引言

黄土自身的发生和发展过程记录了丰富的历史信息, 了解黄土性质演化的特征和效应及其与环境条件变化的相互关系, 为我们解读环境变迁关系提供依据。黄土剖面常用于恢复古环境的方法有理化性质、古生物、古地磁等^[1–2], 在传统黄土记录的古环境研究中, 对环境指标的测试分析具有研究周期长、耗时耗力、成本高等缺点。近年来, 随着计算机和遥感技术的快速发展, 高光谱遥感极高的光谱分辨率在对土壤性质的研究中有较好的效果^[3–4]。高光谱遥感能将特定的土壤与波段相结合, 经过光谱数学变换、统计分析等方法对不同种类的土壤光谱特征和物理化学特性进行相关分析, 建立土壤特性的反演模型, 从而可以达到对土壤特性的快速、定量、低成本的监测^[5–6]。目前, 根据土壤各参数(有机质含量、含水量等)细微

差异变化, 高光谱遥感被广泛应用于国土资源、地质灾害、生态环境、农作物的估产等领域^[3,4]。然而在环境演化研究中, 还较少有将反射光谱对时间序列土壤性质变化进行的分析应用于沉积剖面所反映的古环境变化中。

郑州邙山位于我国第三个黄土沉积区, 该区域是黄土高原与华北平原过渡带上最东南缘的黄土塬。作为平原边缘的黄土带, 包含着丰富的环境变化和东亚季风系统演化信息, 更详实记录了区域古气候短周期的演替旋回^[7], 在环境演变研究中具有重要的地位。黄土地球化学元素特征能够较好地揭示黄土剖面沉积环境的变化, 在黄土–古土壤的沉积序列中, 成壤作用与剖面中化学元素有着很大的关系, 黄土在沉积的过程中化学元素会产生一定的分异, 古土壤就是在这种分异基础上而发育沉积的^[8]。本文选择郑州邙山枣树沟村塬顶处全新世黄土剖面为研究对象, 结合高光谱技术, 分析光谱数据与黄土剖面常量元素之间的相关关系, 从而建立郑州

收稿日期: 2020–10–21; 修订日期: 2021–03–10
基金项目: 河南省重点研发与推广专项“郑州大都市区生态空间优化策略研究”(项目号: 202400410182)和河南省科学院基本科研项目“郑州地区黄土剖面理化性质及其光谱表征研究”(项目号: 200601018)。
第一作者: 李双权(1981–), 男, 博士, 副研究员, 主要研究方向为生资源环境遥感。Email: lishuangquan@mail.bnu.edu.cn。
通信作者: 马玉凤(1981–), 女, 博士, 副研究员, 主要研究方向为环境演变。Email: mayufeng@mail.bnu.edu.cn。

黄土光谱环境参数反演模型,为今后遥感技术在黄土剖面环境演变研究中提供新的思路和技术手段。

1 剖面位置与地层介绍

郑州市地处河南省中部偏北的黄河中下游,横跨中国第二与第三地貌台阶,西部山地丘陵为第二地貌台阶东部边缘,而东部黄淮平原为第三地貌台阶西部边缘^[9]。郑州北 20 km 处有一邙山又称广武山。北临黄河,东接黄河冲积平原,西南是隐约可见的嵩山。邙山呈东西走向,地形上西高东低,蜿蜒于黄河南岸,成为黄河的天然屏障,向东在黄河大桥附近骤然消失。黄土塬面平缓,东西长 18 km,南北宽约 5 km,海拔在 120~262 m,高出黄河水面 35~170 m,向南倾斜,地形坡降约为 0.02;北坡陡峭,被树枝状冲沟切割,较为破碎,但地层剖面出露良好,厚度最大^[10-11]。

研究的黄土剖面位于郑州邙山西北部枣树沟村的塬顶上,地理坐标: N34°57'5.76", E113°20'59.03", 海拔 260 m。剖面出露地表 2.3 m,自下而上分为 5 层(图 1): ①层,距地表 0~20 cm,为表土耕作层; ②层,距地表 20~50 cm,灰黄色粉砂土,有较多的根系和虫孔,上部¹⁴C 测年为 1 440±30 a. BP; ③层,50~140 cm,浅棕黄色粘质粉砂土,下部有白色菌丝体发育,为古土壤层。底部¹⁴C 测年为 4 600±30 a. BP,顶部测年为 2 810±30 a. BP; ④层,距地表 140~170 cm,灰黄色粉砂土,有零星白色菌丝体,古土壤与黄土的过渡层,底部¹⁴C 测年 5 400±150 a. BP; ⑤层,距地表 170~230 cm,未见底,灰黄色粉砂土。上部 3 个¹⁴C 测年由美国 BETE 实验室完成,底部过渡层¹⁴C 测年由国土资源部地下水科学与工程重点实验室完成。

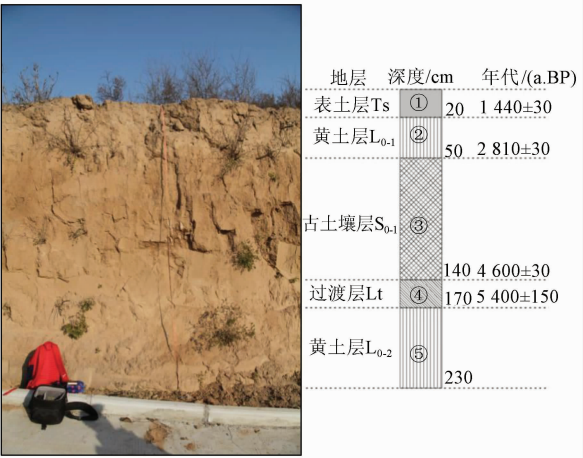


图 1 郑州邙山枣树沟黄土剖面图

Fig. 1 Zaoshugou loess profile in Mangshan of Zhengzhou

2 研究方法

2.1 样品采集与测试分析

郑州邙山枣树沟黄土剖面高 2.3 m,去除顶部扰动层 20 cm,实际采样深度为 2.1 m。去除剖面表层风化面,在新鲜面上以 4.5 cm 的间隔采集样品,共采集 47 个,分为两部分,一部分用于元素测定,一部分用于光谱实验。

气候条件变化是影响常量元素的地球化学特征的最大因素,因此在黄土-古土壤的沉积序列中,成壤作用与剖面中化学元素有着很大的关系。CaO, MgO 属于干旱型的气候特征元素,在常量元素中 Ca 属于最易迁移的元素,在化学风化时非常活跃,即迁移能力最强^[12]。沉积物中 Ga 含量的高低明显地受到气候条件主要是水分条件的控制,因而可根据沉积物中 Ga 含量的变化反演气候的变化。Mg 也是表征环境中活动性很强的元素之一,但其活动性较 Ga 低,但与 Ga 密切相关。Mg 在沉积物中的含量与风化作用密切相关,风化作用强时, Mg 易淋失; 风化作用弱时, Mg 易富集。Fe 是化学活动性极强的变价元素,黄土中的氧化铁含量的变化可揭示气候变化,当 Fe³⁺ 含量较高时代表高温气候,氧化作用较强^[13]。因此本研究选择了 Fe₂O₃, CaO, MgO 这 3 种常量元素作为反映气候环境的测量元素,在河南省科学院地理研究所环境标准实验室采用原子吸收分光光度法分别对 Fe₂O₃, CaO 和 MgO 进行元素测定。

2.2 光谱测试与数据预处理

本实验采用美国 ASD FieldSpec 4 Standard - Res 便携式地物波谱仪进行土壤高光谱数据采集。该地物波谱仪的测量范围为 350~2 500 nm,光谱采样间隔在 350~1 000 nm 时为 1.4 nm,在 1 000~2 500 nm 采样间隔为 2 nm,其光谱分辨率为 3~700 nm, 10~1 400 nm, 10~2 100 nm。

土壤光谱数据是在地物光谱采集规范下进行采集,所用光谱数据在等同于暗室的实验室内进行测定。测量前利用参考白板进行定标优化,获取绝对反射率。将装有样品的铝盒放在厚 3 cm、反射率近似为 0 的黑色橡胶上,采用标准直流锡丝石英卤素灯作为光源,探头视场角为 25°,探头距离为 15 cm。为了减小土壤样品光谱各向异性的影响,测量时转动样品盒 3 次,每次转动 90°,每个样品测量 4 个方向,每个方向采集 5 条光谱曲线,共采集 20 条光谱曲线,对每个样品的 20 条光谱曲线进行算术平均,用于后续的数据处理与分析。

在光谱测量时,去除数据中 350~400 nm 与

2 400 ~ 2 500 nm 首尾噪声影响比较大的数据,然后对光谱曲线进行跳跃点的去除以及光谱曲线平滑处理。高光谱数据信息量大,处理复杂,较难直接利用进行分析,因此对其进行了光谱一阶微分 (first order differential reflectance, FD)、二阶微分 (second order differential reflectance, SD) 和倒数的对数 (LOG (1/R)) 以及去包络线 (continuum removal, CR) 等光谱变换。

2.3 最小二乘法定量反演模型的构建

偏最小二乘回归 (partial least square regress, PLSR) 的方法是多元线性回归、典型相关分析以及主成份分析三者的完美结合。PLSR 不仅能够在自变量存在多重相关性以及样本点数目少于变量数目的条件下进行回归建模,而且能有效地提取若干对系统能力最强的综合变量,并且排除无解释作用的噪声,使所建模型具有说服力^[13-15]。本研究选取经 5 种光谱变换的 Fe₂O₃, CaO, MgO 及 CaO/MgO 等环境参数的光谱特征波段作为为自变量,黄土剖面环境变化指标实测值作为因变量,构建基于偏最小二乘法的黄土剖面常量元素的反演模型。

2.4 反演模型精度检验方法

模型精度用来衡量一个模型综合估测能力,建模精度越好说明模型的稳定性越好;验证精度越高说明所建立的模型预测能力越强。本文通过决定系数 (coefficient determination, R²)、均方根误差 (root mean square error, RMSE) 及相对分析误差 (relative percent deviation, RPD) 3 个模型评价指标相结合来确定所建模型的精度及预测能力,公式为:

$$R^2 = \left(\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}} \right)^2, \quad (1)$$
$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2}, \quad (2)$$
$$RPD = STDEV(Y_i)/RMSE, \quad (3)$$

式中: n 为样本个数; Y_i 是样本的实测值; X_i 为样本预测值; $\bar{X}$ 为 X_i 的平均值; $\bar{Y}$ 为 Y_i 的平均值。

根据计算结果将模型精度分为所示 A, B, C, D 共 4 个级别^[16-21] (表 1)。

表 1 模型整体精度评价等级标准^[16-21]

Tab. 1 Model overall accuracy evaluation level standard					
等级	建模 R ²	验证 R ²	RPD		模型预测能力描述
A	≥ 型预测能	≥ 型预测能	≥ 型	最佳	模型精度极好, 可以进行准确估算
B	0.67 ~ 0.89	0.63 ~ 0.79	≥ .63	较好	模型精度较好, 可以达到估算要求
C	0.50 ~ 0.66	0.50 ~ 0.62	≥ .50	一般	模型精度一般, 具备粗略估算能力
D	< 0.5	< 0.5	< 1.4	较差	模型精度较差, 不具备估算能力

3 结果与分析

3.1 剖面常量元素结果分析与沉积环境演变

常量元素的地球化学特征指标对黄土沉积剖面的发育环境有很大的指示作用 (表 2, 图 2): Fe₂O₃ 在古土壤层 (S₀₋₁) 的平均含量为 4.39%, 在整个剖面值最大。2 800 ~ 4 600 a. BP 黄土沉积时成壤作用增强, 越来越多的 Fe²⁺ 被氧化成为 Fe³⁺, 导致沉积物中 Fe₂O₃ 含量不断上升, 形成大量的强磁性矿物 (磁铁矿和磁赤铁矿), 说明在古土壤发育时, 沉积

表 2 郑州市枣树沟全新世黄土 - 古土壤剖面常量元素分布
Tab. 2 Distribution of constant element in the Zaoshugou Holocene loess - soil profile of Zhengzhou

地层单元	样品个数	Fe ₂ O ₃ /%	CaO/%	MgO/%	CaO/MgO
表土层 T _s	5	4.14	5.56	2.14	2.59
黄土层 L ₀₋₁	6	3.62	5.24	2.06	2.54
古土壤层 S ₀₋₁	20	4.39	2.23	1.92	1.16
过渡层 L _t	4	4.21	3.2	2.02	1.58
黄土层 L ₀₋₂	12	3.59	3.54	2.11	1.67

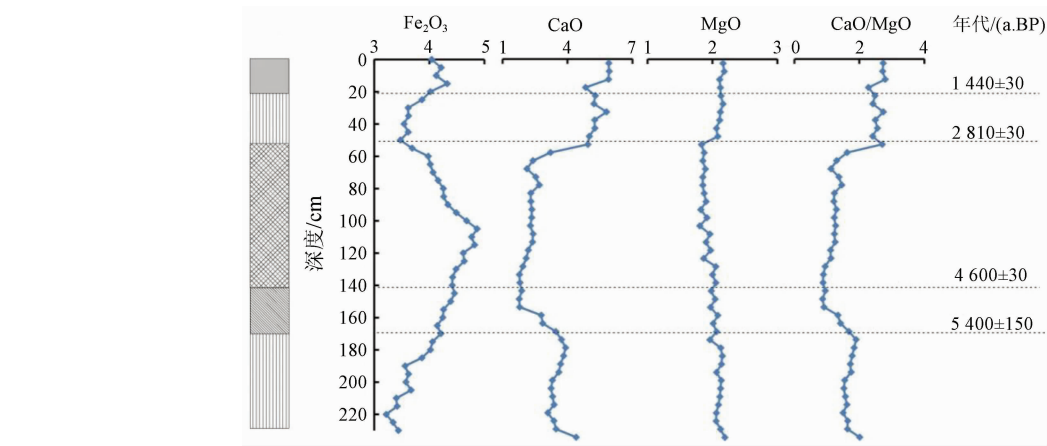


图 2 郑州市枣树沟全新世黄土 - 古土壤剖面常量元素变化曲线
Fig. 2 Constant element variation curve of the Zaoshugou loess - soil profile in Zhengzhou in Holocene

环境比较温暖湿润；全新世黄土层(L_{0-1} 、 L_{0-2})的平均含量分别为 3.62% 和 3.59%,为剖面的次低值和最低值,在全新世中期大约 5 400 a. BP 前后和晚期 2 800 a. BP 以来黄土沉积时风化成壤作用微弱,沉积环境较为干冷。常量元素含量曲线在剖面中的变化,CaO 变化幅度最大,即在黄土化学风化过程中表现比较活跃。CaO 含量曲线在古土壤层中处于波谷的位置,平均含量均低于其余 4 个地层单元,而在黄土层的含量比较高。古土壤成壤发育时 CaO 发生了淋失,在下部的黄土层 L_{0-2} 发生富集,这也反映出古土壤发育时期降水比较丰富、气候湿润易发生元素的淋溶作用。黄土沉积时气候比较干旱,元素的淋溶作用则较难发生。从 MgO 变化曲线来看,在古土壤层之后随着地层深度的增加 MgO 的含量也呈现出平稳上升的趋势,但变化幅度较小,说明 Mg 元素在沉积的过程中也有一定的迁移能力,但由于古土壤沉积过程中 Mg 元素淋溶迁移距离较小,导致其变化幅度不大。

土壤风化程度的度量指标也常用元素氧化物的分子比来表示。CaO/MgO 反映了 Ca、Mg 元素在黄土剖面中的分异程度,比值高表明比较干的沉积环境,反之,则表明较为湿润的沉积环境。CaO/MgO 在剖面的古土壤层中最低,平均比值为 1.16,反映古土壤沉积时温暖湿润的气候环境,Ca、Mg 元素均发生不同程度的淋失迁移,但分异程度则不明显;CaO/MgO 在黄土层中的比值较高,表明黄土堆积过程中干冷的沉积环境,Ca 元素由于有着比 Mg 元素较强的活动性而发生淋失作用,因此二者发生了较强的分异。

Ga、Fe、Mg 元素在黄土-古土壤序列剖面中的迁移淋失反映出,全新世中期约 5 400 a. BP 至今研究区经历了冷干—暖湿—冷干的的气候旋回。由于受气候环境的影响,同一剖面不同地层单元黄土的常量元素含量有所差异,不同地层单元的黄土反射光谱曲线也表现出各自的特征与差异。如图 3 所示,5 个地层单元反射光谱曲线整体相似,表现为在可见光范围内光谱呈上升趋势,整体变化幅度较大,之后光谱曲线平稳上升,变化幅度较小。在 1 400 nm,1 900 nm 与 2 200 nm 附近有强烈的光谱吸收峰,这主要是由于土壤含水量与粘土矿物影响而致。对比这 5 种地层的平均反射光谱曲线黄土层 L_{0-2} > 黄土层 L_{0-1} > 过渡层 L_t > 古土壤层 S_{0-1} > 表土层 T_s 。表土层 T_s 含有大量的动植物残体,光谱吸收能力强,其光谱反射率较低;古土壤层 S_{0-1} 在 400~800 nm 光谱反射率大于表土层,该层含有较多的氧化铁,其在 400~800 nm 波段范围内对光谱的贡献较大;黄土

层 L_{0-1} 的氧化铁含量为最低值,结构紧实且含有大量的 CaO,因此光谱反射率最高。

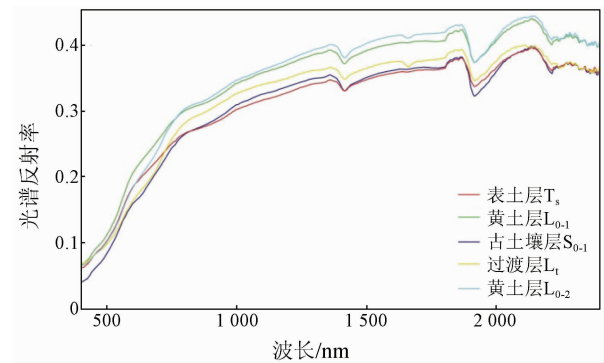


图 3 不同地层单元平滑后原始光谱反射率曲线
Fig. 3 Original spectral reflectance curve after smoothing of different stratigraphic units

3.2 常量元素与反射光谱相关性分析

对平滑处理后的原始光谱、一阶微分(FD)、二阶微分(SD)、去包络线(CR)和倒数对数(Log(1/R))与黄土剖面常量元素 Fe_2O_3 、CaO、MgO 及 CaO/MgO 进行相关性分析(表 3)。从最大相关系数及其所对应的波段来看,与原始光谱相比,黄土光谱反射率在经过光谱变换后与黄土常量元素各参数的显著相关性均有不同程度的增加,其中二阶微分光谱与 Fe_2O_3 、MgO 相关性最高,最大相关系数分别为 0.67、0.55,所对应的波段分别为 766 nm、904 nm;一阶微分光谱与 CaO、CaO/MgO 相关性最高,两者较相似,最大相关系数 R 分别为 -0.75 和 -0.74,与其所对应的波段均为 661 nm。土壤原始光谱经过数学变换后能够明显地突出土壤所隐藏的光谱反射率特征,有效地增强相关性。本文选用置信区间

表 3 不同变换光谱反射率与剖面常量元素相关系数的最值及对应波段

光谱变换		原始光谱	一阶微分	二阶微分	去包络线	倒数对数
波段数	Fe_2O_3	82	296	219	639	57
	CaO	1 188	540	172	432	1574
	MgO	—	349	182	288	310
	CaO/MgO	1 187	535	179	417	1 440
最大相关系数	Fe_2O_3	-0.47	0.67	-0.54	0.57	0.47
	CaO	-0.44	-0.75	-0.57	-0.53	0.45
	MgO	—	-0.52	0.55	-0.45	0.29
	CaO/MgO	-0.43	-0.74	0.51	-0.54	0.44
对应波段/nm	Fe_2O_3	400	766	766	879	400
	CaO	883	661	875	894	907
	CaO/MgO	883	661	1759	894	916

为 95% ,即为 $P=0.05$ 水平的显著性检验,选取土壤光谱显著相关波段作为自变量用于构建反演模型。

3.3 常量元素的偏最小二乘法定量反演

在枣树沟黄土剖面常量元素的模型构建中选取经 5 种光谱变换的 Fe_2O_3 , CaO , MgO 及 CaO/MgO 等环境参数的光谱特征波段作为为自变量,构建基于偏最小二乘法的黄土剖面常量元素的反演模型。其中 4 种环境参数的建模样本均为 32 个,验证样本 15 个。

3.3.1 Fe_2O_3 的模型反演

根据 R^2 , $RMSE$ 及 RPD 这 3 个模型评价指标来确定 Fe_2O_3 的所建模型的精度及预测能力(表 4)。基于偏最小二乘法的黄土剖面 Fe_2O_3 的建模效果比较一般,除了经 FD 变换的光谱模型精度较好,能够达到较为精确的预测效果以外,其余 4 种变换的光谱模型精度等级为 D,都不能够达到预测黄土剖面 Fe_2O_3 的能力,说明 Fe_2O_3 与黄土反射光谱之间的相关性较差。其中,经 FD 变换的光谱建模 R^2 (0.79) 与验证 R^2 (0.68) 均为 5 种光谱变换的最大值,建模 $RMSE$ (0.19) 与验证 $RMSE$ (0.27) 均为 5 种光谱变换的最低值,相对分析误差 PRD 为 1.62,模型精度等级为 B,具有较好的黄土剖面 Fe_2O_3 预测能力。整

体来看,基于偏最小二乘法的黄土剖面 Fe_2O_3 的建模效果较差,经光谱变换后 FD 模型具有较好的预测能力,其余变换均不能够达到预测的要求,不具备黄土剖面 Fe_2O_3 的反演能力。

表 4 Fe_2O_3 的偏最小二乘法模型的建模与验证
Tab.4 Calibration and validation of Fe_2O_3 by PLSR model

光谱变换	建模精度		验证精度			精度等级
	R^2	$RMSE/(g \cdot kg^{-1})$	R^2	$RMSE/(g \cdot kg^{-1})$	RPD	
原始光谱	0.47	0.30	0.46	0.34	1.25	D
FD	0.79	0.19	0.68	0.27	1.62	B
SD	0.40	0.28	0.47	0.41	0.90	D
CR	0.51	0.34	0.35	0.42	1.04	D
LOG(1/R)	0.44	0.32	0.54	0.32	1.37	D

将 Fe_2O_3 实测值和预测值最佳拟合曲线与直线 $y=x$ 作对比,从中可以看出,大多数样本都集中分布在直线 $y=x$ 附近,并且验证集样本的实测值与预测值之间的相关系数 R 均通过了 $P=0.05$ 水平上的显著性检验。通过对比分析可知,5 种变换中经 FD 变换的光谱实测值和预测值的拟合曲线与直线 $y=x$ 最为接近,其余 4 种拟合效果较差,均不具备反演能力,因此 FD 光谱变换为自变量的 PLSR 模型为反演黄土剖面 Fe_2O_3 最佳模型。

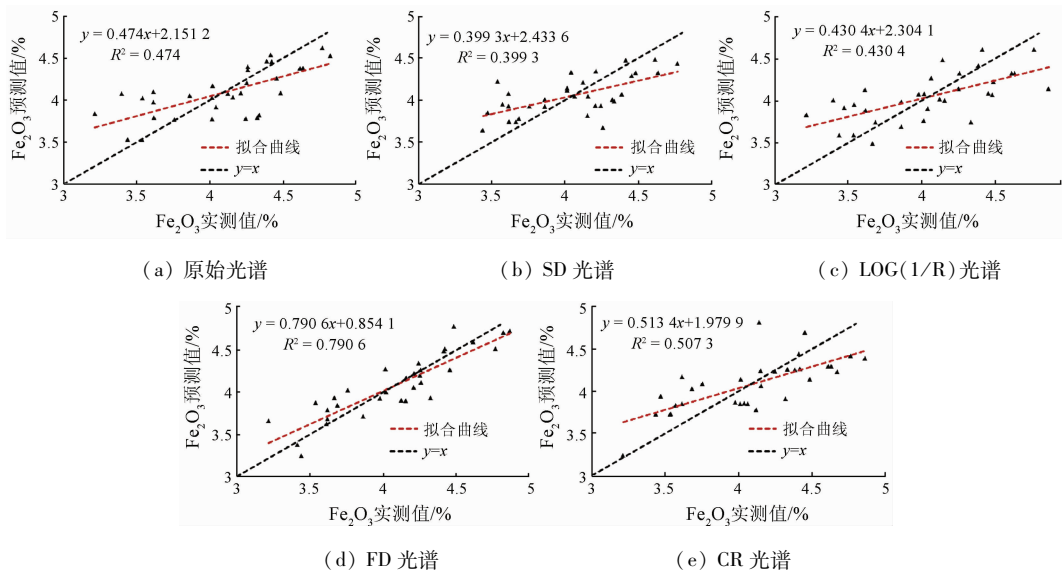


图 4 Fe_2O_3 实测值与预测值拟合散点图

Fig.4 Scatter diagram of Fe_2O_3 measured and prediction values by PLSR model

3.3.2 CaO , MgO 及 CaO/MgO 的模型反演

根据 R^2 , $RMSE$ 及 RPD 这 3 个模型评价指标相结合来确定 CaO , MgO 及 CaO/MgO 所建模型的精度及预测能力,建模精度及结果见表 5。基于偏最小二乘法的黄土剖面 CaO 与 MgO 的建模效果较好, CaO 经 FD 变换的光谱建模 R^2 (0.68) 与验证 R^2 (0.68) 均为光谱变换后的最大值,建模

$RMSE$ (0.75) 与验证 $RMSE$ (0.84) 均为光谱变换后的最低值,相对分析误差 PRD 为 1.61,模型精度等级为 B,具有较好的黄土剖面 CaO 预测能力; MgO 经 CR 变换的光谱建模 R^2 (0.67) 与验证 R^2 (0.63) 均为光谱变换后的最大值,建模 $RMSE$ (0.06) 与验证 $RMSE$ (0.07) 均为光谱变换后的最低值,相对分析误差 PRD 为 1.80,模型精度等级

表5 CaO,MgO 及 CaO/MgO 的偏最小二乘法模型的建模与验证
Tab.5 Calibration and validation of CaO,MgO and CaO/MgO by PLSR model

常量元素	光谱变换	建模精度		验证精度		精度等级
		R^2	$RMSE/(g \cdot kg^{-1})$	R^2	$RMSE/(g \cdot kg^{-1})$	
CaO	FD	0.68	0.75	0.68	0.84	1.61
	SD	0.44	0.91	0.38	1.19	1.04
MgO	FD	0.48	0.08	0.52	0.09	1.19
	SD	0.43	0.08	0.38	0.11	1.06
	CR	0.67	0.06	0.63	0.07	1.8
CaO/MgO	FD	0.66	0.33	0.57	0.41	1.41

为 B, 具有较好的黄土剖面 MgO 预测能力; CaO/MgO 经 FD 变换的光谱建模 R^2 (0.66) 与验证 R^2 (0.57), 建模 $RMSE$ (0.33) 与验证 $RMSE$ (0.41), 相对分析误差 PRD 为 1.41, 模型精度等级为 C, 对黄土剖面 CaO/MgO 预测能力基本达到要求; CaO, MgO 及 CaO/MgO 经其余变换的光谱模型精度等级为 D, 都不能够达到预测黄土剖面 CaO, MgO 及 CaO/MgO 的能力, 即不具备黄土剖面 CaO, MgO 及 CaO/MgO 的反演能力。

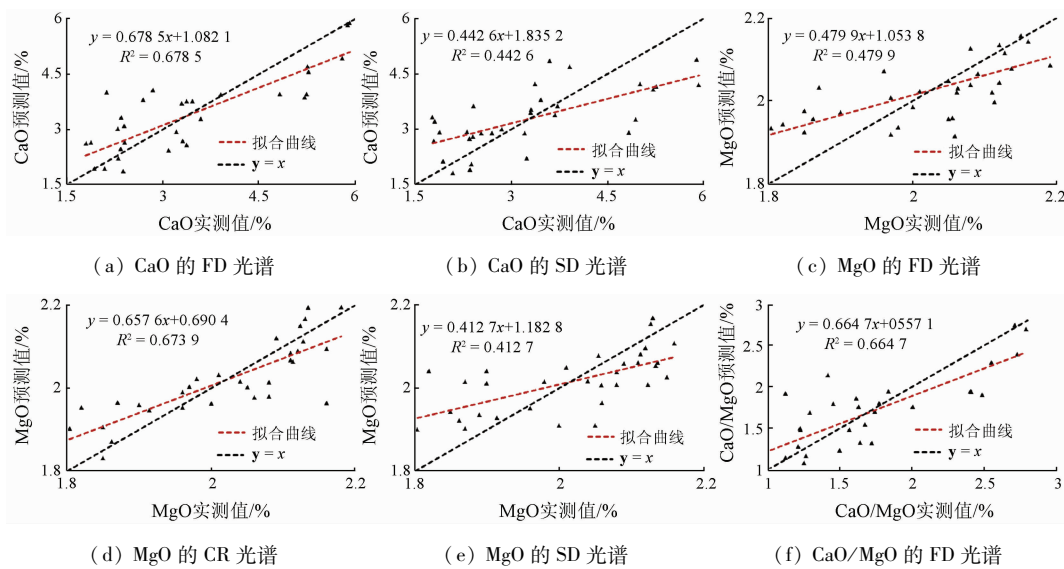


图5 CaO、MgO 及 CaO/MgO 实测值与预测值拟合散点图

Fig.5 Scatter diagram of CaO,MgO and CaO/MgO measured and prediction values

图5为CaO,MgO及CaO/MgO实测值和预测值拟合散点图,将实测值和预测值的最佳拟合曲线与直线 $y=x$ 作对比可看出,大多数样本都集中分布在直线 $y=x$ 附近,并且验证集样本的实测值与预测值之间的相关系数 R 均通过了 $P=0.05$ 水平上的显著性检验。通过对比分析可知,CaO经FD变换的光谱实测值和预测值的拟合曲线与直线 $y=x$ 最为接近;MgO经CR变换的光谱实测值和预测值的拟合曲线与直线 $y=x$ 最为接近;其余几种光谱变换后拟合效果较差,均不具备反演能力。CaO/MgO与黄土反射光谱之间的相关性较差,5种光谱变换后只有经过FD变换的光谱所建模型精度级别达到C,其余均较差。因此经FD光谱变换、CR光谱变换与FD光谱变换为自变量的PLSR模型为反演黄土剖面CaO,MgO及CaO/MgO为最佳模型。

3.4 反演模型对古环境的指示性

在同一时期,不同区域,黄土中常量元素的化学成分有差异,自西北向东南逐渐变化。据最佳反演模型以全新世古土壤的化学元素含量为例,黄土高原的东南缘枣树沟剖面古土壤的 Fe_2O_3 平均含量为

4.39%(表2),对比黄土高原腹地洛川全新世古土壤的 Fe_2O_3 平均含量3.31%^[2]高出了1%,模型的预测值平均为4.29%,真实值和预测值之间的平均误差为0.16%,最大0.59%, Fe_2O_3 反演的模型可以区分不同气候区的环境特征;研究区枣树沟剖面古土壤中的CaO平均含量为2.23%(表2),反演模型的预测值为2.67%,两者间的平均误差为0.65%,最大误差为1.86%。气候较为干旱的洛川全新世古土壤的CaO平均含量达8.77%^[2],两区域对比,研究区的远远低于黄土高原腹地,CaO反演的模型在误差范围内可以较明显区分不同气候区的环境特征;枣树沟剖面全新世古土壤中MgO的平均含量为1.92%(表2),预测值为1.95%,洛川全新世古土壤中MgO的平均含量1.98%^[2],尽管研究区古土壤MgO含量的误差值最大为0.13%,但2个不同气候区MgO的含量区别不明显,仅单独依据MgO的特征值较难区分不同的气候区;由上,黄土高原腹地和东南缘的CaO含量差异大而MgO含量接近,因此CaO/MgO在2个区域有明显的区分。同一地区,不同时期,黄土中常量元素化学成分具有很大的

差异,其中黄土与古土壤之间的差别尤为显著。因此,可以根据黄土中常量元素的这种差异来探讨古气候环境的变化规律。如图 6 所示,各元素的预测值增减规律与实测值的变化趋势是一致的,反演模型的预测值能够较好指示区域全新世中期至今经历

的冷干—暖湿—冷干的气候旋回。然而反演模型的预测值在误差范围内有上下的波动,这样在局部时间段或者细节性的古环境指示中很难反映,如在剖面深度 95 cm 处(图 6), Fe_2O_3 的预测值过低,剖面深度 50 ~ 75 cm 段 CaO 的预测值在局部偏高等。

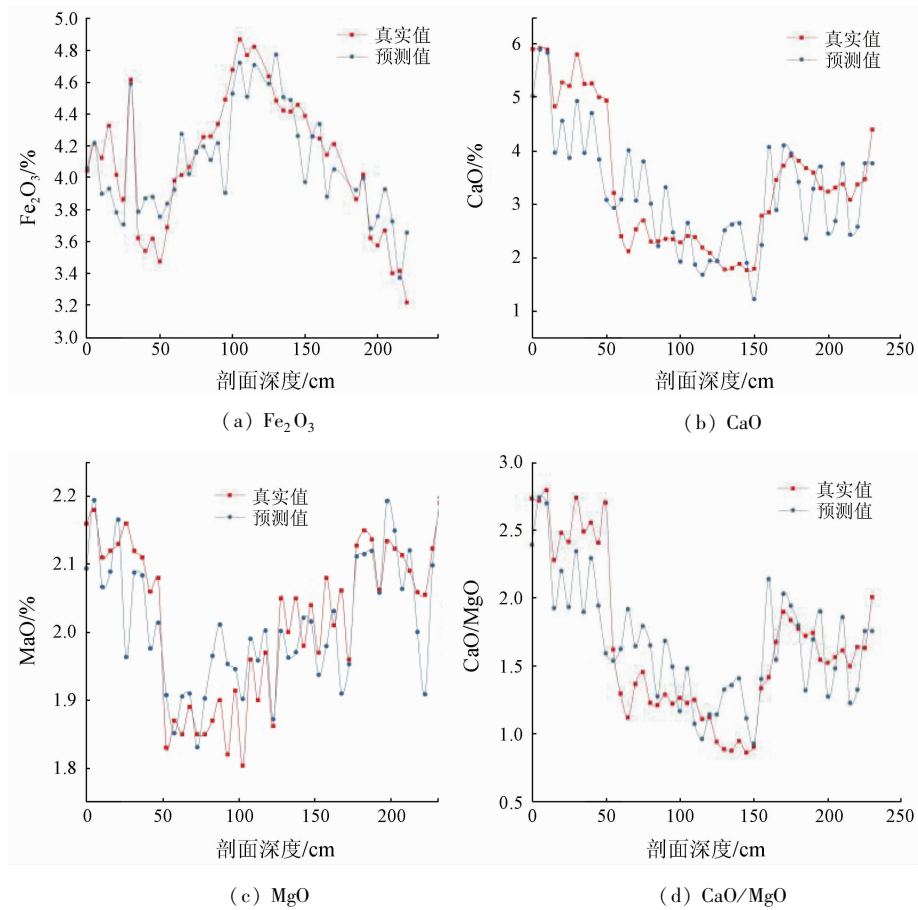


图 6 Fe_2O_3 , CaO , MgO 和 CaO/MgO 实测值和预测值在枣树沟剖面中的变化趋势
Fig. 6 The variation trend of Fe_2O_3 , CaO , MgO and CaO/MgO measured and prediction values measured and predicted values in Zaoshugou profile

4 结论与讨论

1) Ca , Fe , Mg 元素在郑州邙山枣树沟黄土—古土壤序列剖面中变化指示了不同时期黄土的发育环境,2 800 ~ 4 600 a. BP 黄土沉积时成壤作用增强,沉积环境比较温暖湿润;全新世中期大约 5 400 a. BP 前后和晚期 2 800 a 以来黄土沉积成壤作用微弱,沉积环境较为干冷。郑州西部全新世中期约 5 400 a. BP 至今研究区经历了冷干—暖湿—冷干的气候旋回。

2) 由于受气候环境的影响,同一剖面不同地层单元黄土的元素含量有所差异,不同地层单元的黄土反射光谱曲线也表现出各自的特征与差异。5 个地层单元反射光谱曲线整体相似,表现为在可见光

范围内光谱呈上升趋势,整体变化幅度较大,之后光谱曲线平稳上升,变化幅度较小。对比这 5 种地层的平均反射光谱曲线,黄土层 L_{0-2} > 黄土层 L_{0-1} > 过渡层 Lt > 古土壤层 S_{0-1} > 表土层 T_s 。与原始光谱相比,黄土光谱反射率在经过光谱变换后与黄土常量元素各参数的显著相关性均有不同程度的增加,其中二阶微分光谱与 Fe_2O_3 , MgO 相关性最高,一阶微分光谱与 CaO , CaO/MgO 相关性最高。

3) 在邙山枣树沟黄土剖面常量元素的反演模型中,基于偏最小二乘法 Fe_2O_3 的建模效果较差, CaO 与 MgO 的建模效果较好, CaO/MgO 的建模效果基本达到要求。 Fe_2O_3 , CaO 以及 CaO/MgO 的最佳反演模型为以 FD 光谱变换为自变量的 PLSR 模型; MgO 的最佳反演模型为以 CR 光谱变换为自变量的 PLSR 模型。

4) 研究选择的古环境指示元素 Fe_2O_3 , CaO 和 CaO/MgO 的最佳反演模型能够较好地区分不同的气候区和所在区域古气候的旋回变化。然而, 尽管 MgO 不易区分不同的气候区, 但其反演模型所呈现的变化趋势能较好指示所在区域的古气候演化规律, 有一定的指示参考价值。

本研究就郑州邙山枣树沟黄土剖面中黄土层 - 古土壤层 - 过渡层 - 黄土层的一个沉积序列进行了常量元素 Ca , Fe , Mg 环境参数的反演模型构建, 为黄土环境的研究方法提供了新的思路和应用, 在长时间尺度的环境演变中, 光谱反演对气候周期的变化有较好的指示。但黄土剖面常常记录多次的气候旋回, 发育多个黄土 - 古土壤序列, 且因气候环境不同古土壤的发育强弱也不同; 此外不同气候区的黄土发育存在着差别, 该项研究缺乏同一区域长时间序列和多个区域上的对比研究。黄土环境变化的研究中, 指示环境的指标多样, 像 Al , Si , K , Na 等常量元素、微量元素、稀土元素等, 有机碳、氮含量, 沉积物粒度, 磁化率等多项理化指标, 在今后的研究中, 我们将从空间上和时间上对更多的黄土环境参数的反演做进一步的对比分析, 增强研究结果的说服力和应用区域。

本研究的主要研究手段为室内光谱实验分析, 通过不同数学变换对光谱数据与黄土剖面环境参数相关性分析, 但未结合高光谱影像反演到区域上。今后的工作中需要结合高光谱影像从而得到最优的模型方法应用到黄土环境参数反演中, 增强其实用性及适用性。

参考文献 (References):

- [1] 尹爱华, 陈翠峰, 石 敢. 中国黄土研究的新进展[J]. 经济研究导刊, 2010, 76(2): 248 - 250.
Yin A H, Chen C F, Shi G. New progress in loess studies in China [J]. Economic Research Guide, 2010, 76(2): 248 - 250.
- [2] 刘东生. 黄土与环境[M]. 北京: 科学出版社, 1985.
Liu D S. Loess and environment [M]. Beijing: Science Press, 1985.
- [3] Lillesand T M, Kiefer R W. Remote sensing and image interpretation (3rd Edition) [M]. New York: John Wiley & Sons, 1994, 75.
- [4] 丁式江, 陈颖民. 海南省(岛)国土环境资源遥感应用研究[M]. 北京: 地质出版社 2007.
Ding S J, Chen Y M. Remote sensing application of land, environment and resources in Hainan Province [M]. Beijing: Geological Publishing House, 2007.
- [5] 彭 杰, 张杨珠, 周 清, 等. 湖南省几种主要类型土壤反射光谱的剖面变化特性[J]. 土壤通报, 2006, 37(2): 236 - 240.
Peng J, Zhang Y Z, Zhou Q, et al. Reflecting spectral changes in the depth profile of Major in Hunan Province [J]. Chinese Journal of Soil Science, 2006, 37(2): 236 - 240.
- [6] 黄应丰, 刘腾辉. 华南主要土壤类型的光谱特性与土壤分类[J]. 土壤学报, 1995, 32(1): 58 - 68.
Huang Y F, Liu T H. Spectral characteristics of main types of soils in southern China and soil classification [J]. Acta Pedologica Sinica, 1995, 32(1): 58 - 68.
- [7] 刘东生, 孙继敏, 吴文祥. 中国黄土研究的历史、现状和未来——一次事实与股市相结合的讨论[J]. 第四纪研究, 2001, 21(3): 185 - 207.
Liu D S, Sun J M, Wu W X. Past, present and future of the Chinese Loess Research: A discussion on the reality of facts and myth [J]. Quaternary Sciences, 2001, 21(3): 185 - 207.
- [8] Yang S L, Ding F, Ding Z L. Pleistocene chemical weathering history of Asian arid and semi - arid regions recorded in loess deposits of China and Tajikistan [J]. Geochimica et Cosmochimica Acta, 2006, 70(7): 1695 - 1709.
- [9] 叶青超, 陆中陈, 杨毅芬. 黄河下游河流地貌[M]. 北京: 科学出版社, 1990.
Ye Q C, Lu Z C, Yang Y F. Fluvial landscape of the lower Yellow River [M]. Beijing: Science Press, 1990.
- [10] 王德甫, 王 超, 王朝栋, 等. 禹茱泽古黄河的一块天然滞洪区[J]. 湖泊科学, 2012, 24(2): 320 - 326.
Wang D F, Wang C, Wang C D, et al. Lake Yuxingze, a natural flood detention area of the Yellow River in ancient time [J]. Journal of Lake Sciences, 2012, 24(2): 320 - 326.
- [11] 于 革. 郑州地区湖泊水系沉积与环境演化研究[M]. 北京: 科学出版社, 2016.
Yu G. Sedimentology of lake - river systems and environmental evolutions in Zhengzhou Regions [M]. Beijing: Science Press, 2016.
- [12] 张 华. 大别山北麓罗山黄土古土壤古环境信息研究[D]. 合肥: 合肥工业大学, 2012.
Zhang H. Study on Paleoenvironment Information of Luoshan Loess in the North of Dabie Mountain [D]. Hefei: Hefei University of Technology, 2012.
- [13] 杨守业, 李从先, 李徐生, 等. 长江下游下蜀黄土化学风化的地球化学研究[J]. 地球化学, 30(4): 402 - 406.
Yang S Y, Li C X, Li X S, et al. Geochemical records of chemical weathering of the Xiashu Loess in the lower reaches of the Changjiang River [J]. Geochimica, 30(4): 402 - 406.
- [14] 张 利. 基于 Hyperion 高光谱数据的土壤盐渍化定量反演方法研究[D]. 南京: 东南大学, 2010.
Zhang L. Research on quantitative inversion method of soil salinization based on Hyperspectral data of Hyperion [D]. Nanjing: Southeast University, 2010.
- [15] 吴昀昭. 南京城郊农业土壤重金属污染的遥感地球化学基础研究[D]. 南京: 南京大学, 2005.
Wu J Z. Heavy metal pollution in suburban soils of the Nanjing area of Archaeology [D]. Nanjing: Nanjing University, 2005.
- [16] 陈奕云. 基于可见 - 近红外光谱的土壤部分重金属含量提取[D]. 武汉: 武汉大学, 2011.
Chen Y Y. Estimation of heavy metal content in soil using VNIR spectra [D]. Wuhan: Wuhan University, 2011.
- [17] 乔 璐. 基于高光谱数据和 MODIS 影像的土壤特性的定量估算[D]. 哈尔滨: 东北林业大学, 2013.
Qiao L. Quantitative estimation of soil characteristics based on hyperspectral data and modis images [D]. Harbin: Northeast Forestry

University, 2013.

[18] 褚小立. 化学计量学方法与分子光谱分析技术[M]. 北京: 化学工业出版社, 2011.

Chu X L. Molecular spectroscopy analytical technology combined with chemometrics and its applications[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2011.

[19] Chang C, David Laird A. Near – infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N[J]. Soil Science, 2002(167): 110 – 116.

[20] Pirie A, Singh B, Islam K. Ultra – Violet, visible, near – infrared and mid – infrared diffuse reflectance spectroscopis techniques to predict several soil properties[J]. Australian Journal of soil Research, 2005, 6(43): 713 – 721.

[21] Razakamanarivo R H, Grinand C, Razafindrakoto M A. Mapping organic carbon stocks in eucalyptus plantations of the central highlands of Madagascar: A multiple regression approach[J]. Geoderma. 2011, 3/4(162): 335 – 346.

Hyperspectral inversion of macro element content in loess based on the profile of Zaoshugou Village, Mangshan Mountain, Zhengzhou City

LI Shuangquan¹, MA Yufeng¹, LIU Xun², LI Changchun², DU Jun¹

(1. *Institute of geography, Henan Academy of Sciences, Zhengzhou 450052, China*; 2. *Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China*)

Abstract: The occurrence and development themselves of loess have recorded abundant historical information, and the macro element content of loess can accurately reflect the environmental evolution. Hyperspectral remote sensing technology enjoys the advantages of being multi – band, continuous, and high – resolution. Therefore, it can be used to detect subtle differences in soil attributes and thus provide technical support for the fast and effective acquisition of basic loess information. In this paper, the loess profile of Zaoshugou Village, Zhengzhou City is studied. Combining the hyperspectral technology, the correlation between the spectral data and the macro elements of the loess was analyzed according to smoothed original spectra, first – order differential (FD), second – order differential (SD), de – envelope (CR), and reciprocal logarithm ($\text{Log}(1/R)$). A partial least square regression (PLSR) model was established using the wave band with a larger correlation coefficient R as the characteristic band. The main conclusions are as follows. The variations in Ga, Fe, and Mg elements in the loess profile indicate that the study area has experienced a cold dry – warm wet – cold dry climate cycle since the Middle Holocene about 5400 aBP. The reflectance spectra of the loess in different stratigraphic units show the characteristics with similar trends. However, their spectral reflectance is in the order of $L_{0-2} > L_{0-1} > L_t > S_{0-1} > T_s$. According to the method of partial least squares, the optimal inversion models of Fe_2O_3 , CaO, and CaO/MgO are the PLSR model with FD spectral transformation as the independent variable, while the best inversion model of MgO is the PLSR model with CR spectral transformation as the independent variable. The optimal inversion model of Fe_2O_3 , CaO, and CaO/MgO can effectively distinguish different climate zones and indicate palaeoclimate cycle changes in the region where the study area falls. The optimal inversion model of MgO can better indicate the palaeoclimate evolution law of the region where the study area falls and thus has a certain reference value.

Keywords: loess; hyper – spectral; macro element; partial least squares method

(责任编辑: 李 瑜)