

基于近地传感光谱协同的土壤重金属含量空间分布预测方法

李硕^{1,2} 王雅晋¹ 覃卫林³ 莫晓明⁴ 胡碧峰^{2,5} 郭燕^{2,6}

(1. 华中师范大学地理过程分析与模拟湖北省重点实验室, 武汉 430079;

2. 农业农村部黄淮海智慧农业技术重点实验室, 郑州 450002;

3. 长阳土家族自治县农业综合开发服务中心, 宜昌 443500; 4. 来凤县农业农村局, 恩施 445700;

5. 江西财经大学公共管理学院, 南昌 330013; 6. 河南省农业科学院农业信息技术研究所, 郑州 450002)

摘要: 土壤重金属采样、分析与污染评价耗费大量人力和物力,借助易获取环境协变量信息对提高土壤重金属污染监测效率意义重大。近地光谱是土壤属性综合响应,在反映土壤重金属信息方面有着巨大的研究潜力。为考察近地光谱辅助预测土壤重金属含量的能力,测量了109个表层土样的近红外光谱,并提取与土壤镍密切相关的光谱信息;再以土壤机械组成及其与光谱信息的组合作为辅助变量建立协同克里格模型,并比较土壤镍空间预测制图精度。结果表明:以粉粒含量和光谱2380 nm波段吸收率共同作为辅助变量的模型结果优于只以粉粒含量作为辅助变量的模型,交叉验证决定系数 R_{cv}^2 由0.49提高到0.68,交叉验证均方根误差(RMSECV)由11.3 mg/kg降至9.5 mg/kg。这说明近红外光谱作为一种易获取的辅助信息,可协同土壤机械组成构建空间预测模型以提高区域土壤重金属的调查精度。研究结果可为土壤重金属含量空间分布预测提供一种经济高效的解决方案。

关键词: 土壤重金属; 近地传感; 土壤光谱; 近红外; 协同克里格; 辅助变量

中图分类号: TP79; S151.9

文献标识码: A

文章编号: 1000-1298(2025)03-0451-07

OSID:



Prediction Method for Soil Heavy Metal Content Based on Covariates over Proximally Sensed Spectra

LI Shuo^{1,2} WANG Yajin¹ QIN Weilin³ MO Xiaoming⁴ HU Bifeng^{2,5} GUO Yan^{2,6}

(1. Key Laboratory for Geographical Process Analysis and Simulation of Hubei Province, Central China Normal University, Wuhan 430079, China

2. Key Laboratory of Huang-Huai-Hai Smart Agricultural Technology, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Zhengzhou 450002, China

3. Agricultural Development Service Center of Changyang Tujia Autonomous County, Yichang 443500, China

4. Agriculture and Rural Affairs Bureau of Laifeng County, Enshi 445700, China

5. School of Public Administration, Jiangxi University of Finance and Economics, Nanchang 330013, China

6. Institute of Agricultural Information and Technology, Henan Academy of Agricultural Sciences, Zhengzhou 450002, China)

Abstract: Sampling, analyzing, and assessing soil heavy metal pollution requires significant manpower and resources. Access to easily obtainable environmental covariate information is crucial for enhancing the efficiency of soil heavy metal pollution monitoring. The spectra from proximal soil sensing are a comprehensive response of soil properties, and they have great potential to reveal heavy metal concentrations in soil. Near-infrared spectral characteristics of heavy metals in the surface soil of 109 samples were analyzed, and spectral information closely linked to soil Ni was extracted. This data was then utilized as auxiliary information to develop a co-Kriging model. Subsequently, co-Kriging models were constructed by using soil mechanical composition, and its combination with spectral information as auxiliary variables to compare the accuracy of spatial prediction mapping of Ni concentrations in the soil. The results indicated that the model incorporating silt concentrations in addition to the absorbance at

收稿日期: 2024-10-16 修回日期: 2024-11-12

基金项目: 国家自然科学基金项目(41601370)、农业农村部黄淮海智慧农业技术重点实验室开放基金项目(202305、202410)、河南省农业科学院自主创新项目(2024ZC068)和中央高校基本科研业务费专项资金项目(CCNU22JC022)

作者简介: 李硕(1983—),男,副教授,博士,主要从事土壤遥感与信息技术应用研究,E-mail: shuoguo@zju.edu.cn

通信作者: 郭燕(1983—),女,副研究员,博士,主要从事农业遥感监测与土壤数字制图研究,E-mail: 10914063@zju.edu.cn

2 380 nm as auxiliary variables outperformed the model by using only silt concentrations. The cross-validated coefficient of determination R_{CV}^2 was increased from 0.49 to 0.68, while the cross-validated root mean squared error (RMSECV) was decreased from 11.3 mg/kg to 9.5 mg/kg. These findings suggested that NIR spectra, as readily accessible auxiliary information, can be used with soil mechanical composition to develop spatial prediction models and further enhance the precision of regional soil heavy metal surveys. The research result can offer a cost-effective solution for the spatial prediction of heavy metals in soil.

Key words: soil heavy metal; proximal sensing; soil spectra; near-infrared; co-Kriging; auxiliary variable

0 引言

土壤是人类赖以生存发展的物质基础和基本条件,也是污染物的过滤器和缓冲器。若污染物输入量超过土壤有限的消纳能力,将导致污染物在环境中扩散,引起土壤污染等一系列的连锁反应^[1-3]。土壤重金属具有生物累积性、间接危害性和不可生物降解性,不仅对生物体的健康生长不利,还对生态系统的稳定性构成潜在威胁。镍(Ni)是引起我国土壤污染的八大重金属之一,据2014年发布的《全国土壤污染状况调查公报》显示^[4],土壤Ni点位超标率高达4.8%,而人类活动如工业生产和矿业活动等是造成土壤Ni含量过高的主要原因^[5]。因此,监测土壤中的Ni含量对污染土壤修复具有重要现实意义。

传统的土壤重金属监测方法受实地采样条件限制,导致成本高、周期长、效率低,无法满足快速、大范围、长期的动态监测需求。经典统计学研究的是属性特征,一般不涉及空间分布,难以有效地对土壤属性的空间分布特征进行分析、解释和说明。而地统计学在考虑采样点属性值的前提下,同时关注了采样点方位以及采样点之间的距离,极大地弥补了前者在采样点空间方位上的空白^[6-8]。克里格插值是地统计学的重要核心,提供了一种无偏最优估值方法。协同克里格是在普通克里格基础上,利用辅助变量以提高插值精度。此外还有基于最小二乘法的回归克里格,其预测值由辅助变量加权值与待测点残差加和而成。

然而,基于有限样点的空间预测结果存在一定的不确定性,但增加样本量又会耗费大量的人力和物力。通过有效融合易获取的相关辅助信息,来提高目标变量的空间预测精度已成为土壤调查领域的共识。除了自然环境和人为因素,土壤重金属积累还受到土壤属性的影响,诸多研究强调pH值、有机碳含量、机械组成等土壤属性对重金属稳定和效力的重要性^[9-10]。其中,土壤机械组成如黏粒(Clay)、粉粒(Silt)、砂粒(Sand)对土壤中的重金属

迁移和固定起着重要作用。如刘波等^[11]使用黏粒、粉粒、铁氧化物含量作为辅助变量,提高了利用协同克里格法预测土壤Ni含量的精度。基于稀疏的采样点和适宜的辅助变量可以有效地获取土壤重金属的精细空间信息,探寻并提取适宜的辅助因子对于构建行之有效的土壤重金属调查方法至关重要。

近30年,光谱学逐渐兴起并发展成为一种重要的实验室土壤定量分析方法,如有机质(或有机碳^[12-13])、全氮、黏土矿物、机械组成、含水率等^[14-15],以及土壤重金属^[16-17]。文献[18-20]的研究都将可见近红外(vis-NIR)反射光谱作为辅助变量,相对于传统回归模型,研究涉及的土壤理化属性预测精度普遍得到显著提升。这是由于vis-NIR光谱的吸收波段与土壤矿物质及有机成分相对应,进而直接或间接测定基本的土壤属性。文献[21]指出“vis-NIR光谱对重金属的响应不敏感,水分和表面粗糙度等因素有待深入考虑”。土壤光谱是土壤理化属性的综合响应,在克服含水率和表面粗糙度等影响下,尚未知vis-NIR光谱可否以协同的方式提升对土壤重金属的预测性能。综上,本文直接在土壤因子基础上加入vis-NIR光谱波段,提取并分析与土壤Ni密切相关的近地土壤光谱特征信息,比较机械组成、光谱信息单独或组合作为辅助变量的协同克里格模型,提出一套基于近地光谱协同的土壤重金属空间分布预测方法,以期改善土壤重金属预测精度。

1 材料与方法

1.1 研究区域与土壤数据

如图1所示,所用109个0~20 cm表层土样于2010年10月采自湖北省武汉市青山区,域内属亚热带湿润季风气候。青山区是武汉重工业城区,也是我国重要钢铁生产和化工基地,化石燃料燃烧等人为活动加剧了该地区土壤重金属污染^[22]。样点分布于武汉钢铁集团公司附近城乡结合部。

按照常规的土壤调查采样方法,每个采样点取1 kg混合样。采集的土样经风干、研磨、过筛后通过

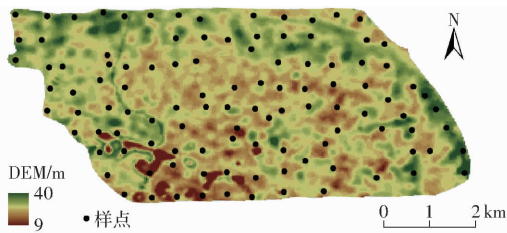


图 1 研究区和采样点分布图

Fig. 1 Study region and sampling locations

四分法分成 2 份,一份用于 Ni、全氮(TN)、有机碳(OC)、有效磷(AP)、pH 值和机械组成等理化分析,另一份用于光谱测定。重金属 Ni 含量根据 GB/T 15618—1995《土壤环境质量评价标准》^[23] 进行测定。如表 1 所示,研究区土壤 Ni 含量(质量比)分布范围为 26.5 ~ 90.6 mg/kg,平均值(53.4 mg/kg)高于湖北省背景值(37.3 mg/kg)^[24],总体具有中等空间变异性。

表 1 研究区土壤主要属性统计结果

Tab. 1 Statistics of key soil properties in study region

参数	最小值	最大值	均值	标准差	变异系数/%
Ni 含量/(mg·kg ⁻¹)	26.50	90.60	53.40	13.70	25.66
TN 含量/(g·kg ⁻¹)	0.02	2.54	0.76	0.41	53.58
OC 含量/(g·kg ⁻¹)	1.33	35.27	7.88	5.07	64.36
AP 含量/(g·kg ⁻¹)	2.28	158.42	22.80	25.80	113.17
pH 值	7.07	9.09	8.42	0.33	3.88
黏粒含量/%	5.71	64.96	44.33	10.05	22.71
粉粒含量/%	12.84	56.60	37.93	9.63	25.65
砂粒含量/%	0.26	68.54	17.74	14.62	82.53

1.2 光谱数据采集及预处理

使用赛默飞世尔科技公司的 Antaris II 傅里叶变换近红外光谱仪测量 109 个土壤样品的 NIR 光谱信息。该仪器波数范围 12 000 ~ 4 000 cm⁻¹ (833 ~ 2 500 nm),分辨率为 4 cm⁻¹ (0.3 nm),共计 2 075 个波段。每个土样经 3 次采集后取平均光谱作为该样本的最终光谱数据。为降低高光谱分辨率引起的光谱信息间的多重共线性,所有光谱统一重采样至分辨率 16 cm⁻¹ (1.2 nm),每条光谱共计 501 个波段的吸收率。为提高预测模型准确性和可靠性,采用 Savitzky - Golay (SG) 平滑法(2 阶 3 窗口)结合一阶导数法^[25] 对光谱进行噪声消除和信号增强处理。

1.3 建模方法

协同克里格法的具体表现是在模型中添加一个或多个与目标变量具有空间相关性的辅助变量。协同克里格数据是点状数据,它基于协同区域化变量理论建立半变异函数^[26],通过利用易获取的变量对较难获取的目标变量进行局部估计以提高估值精

度。协同克里格法有助于提高实测值和预测值的拟合精度,且结果中的极值误差范围较小、均方根误差也较低^[27]。

1.4 辅助变量选择

在对土壤属性的预测制图研究中,利用协同克里格插值法的关键是选择与目标变量相关性较高的变量作辅助来提高预测精度。辅助变量选择要满足 2 个条件:①易获取。②能体现土壤空间变化。选取与土壤 Ni 含量皮尔逊相关系数较高的土壤属性,以及与 Ni 含量相关系数最高所在波段的光谱吸收率作为辅助变量。

1.5 评价指标

使用交叉验证决定系数(R_{CV}^2)和交叉验证均方根误差(RMSECV)评估模型精度。 R_{CV}^2 衡量回归模型拟合程度,值越大表明拟合效果越好;RMSECV 衡量预测值与实测值的误差,值越小表示模型预测误差越小。

2 结果与分析

2.1 相关性

2.1.1 土壤理化性质与 Ni 相关性

土壤理化性质(如 TN、OC、AP、pH 值和土壤机械组成等)通过影响重金属的形态、溶解度、吸附性和生物有效性,对其在土壤中的积累和迁移起到重要作用,且作为土壤生态系统的一部分,各理化性质之间也存在一定的相关性。由图 2 可知,黏粒含量和砂粒含量与 Ni 相关性最高,相关系数分别为 0.5 和 -0.5;其次为粉粒含量和 TN,相关系数均为 0.3;pH 值(-0.2)、AP(-0.2)、OC(0.2)均与重金属 Ni 存在较低的相关性。基于此,选取土壤机械组成(黏粒含量、粉粒含量、砂粒含量)作为辅助变量进行对 Ni 的协同克里格建模。

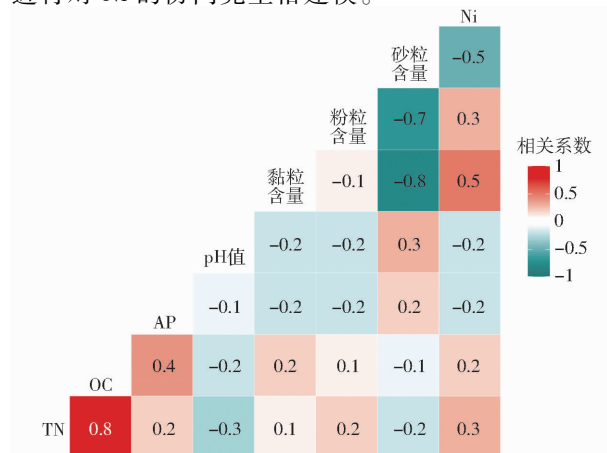


图 2 土样理化性质相关系数矩阵图

Fig. 2 Correlogram among tested soil physicochemical properties

2.1.2 光谱相关性

图3为所有土壤样本的NIR光谱吸收率曲线。在红色暖色调背景明亮区域展示了吸收率与波长之间的密度关系,色调越冷表示该区域光谱曲线越密集。每条土壤光谱形状非常相似,833~1000 nm范围内的光谱吸收率曲线斜率较高,下降速度较快;1000~2500 nm范围内,光谱吸收率下降趋缓,但有显著起伏。1400 nm和1900 nm处出现的明显吸收峰与自由水的O—H和H—O—H伸缩振动的倍频有关;而在2200 nm处的吸收峰主要由粘土矿物如高岭石产生^[28]。

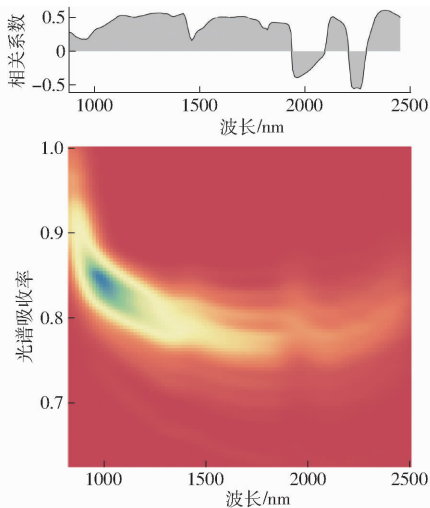


图3 土壤近红外吸收光谱及其与Ni的相关系数曲线

Fig.3 Correlation coefficient maps between measured Ni and absorption of wavelengths pair

图3显示,整体光谱范围与Ni含量呈正或负的线性相关,相关系数从约0.5附近(如,1400、2200、2380 nm处的峰值)到-0.5附近(如,1970、2290 nm处的谷值)。

2.2 模型精度检验与对比

如表2所示,CK1、CK2和CK3模型仅以机械组成作为辅助变量,CK4和CK5仅以近红外光谱信息作为辅助变量,CK6、CK7和CK8模型同时考虑机械组成和近红外光谱信息作为辅助变量。

模型精度如表2所示,仅以机械组成作辅助变量的模型中,CK2较CK1和CK3模型精度最高($R_{CV}^2 = 0.49$, RMSECV为11.3 mg/kg);而仅以光谱作辅助变量的CK4和CK5模型的RMSECV相同(10.7 mg/kg),但前者 R_{CV}^2 (0.46)较后者(0.45)略高。但考虑到近红外平均光谱信息需7个波段的信息以及作进一步平均处理,即相比之下近红外光谱2380 nm波段吸收率的数据更易获得,故近红外平均光谱信息不再同机械组成结合作进一步考察。

CK6、CK7和CK8模型是在以黏粒含量、粉粒含量和砂粒含量作为辅助变量的基础上,分别加入近

表2 协同克里格模型精度评价指标对比

Tab.2 Comparison of accuracy evaluation indicators of co-Kriging models

协同克里格模型	辅助变量	R_{CV}^2	RMSECV/($\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$)
CK1	黏粒含量	0.35	12.5
CK2	粉粒含量	0.49	11.3
CK3	砂粒含量	0.36	12.6
CK4	近红外光谱2380 nm波段吸收率	0.46	10.7
CK5	近红外平均光谱信息	0.45	10.7
CK6	黏粒含量+近红外光谱2380 nm波段吸收率	0.36	12.5
CK7	粉粒含量+近红外光谱2380 nm波段吸收率	0.68	9.5
CK8	砂粒含量+近红外光谱2380 nm波段吸收率	0.36	12.6

注:近红外平均光谱信息指中心波长2350、2360、2370、2380、2390、2400、2410 nm的7个波段吸收率平均值。

红外光谱2380 nm波段吸收率再次进行对比;CK6、CK8模型与CK1、CK3模型相比预测精度未改善;而CK7模型与CK2模型相比,模型预测精度得到显著提升, R_{CV}^2 从0.49提高到0.68, RMSECV从原来11.3 mg/kg降至9.5 mg/kg。综上,以机械组成的粉粒含量结合近红外光谱2380 nm波段吸收率共同作为辅助变量的CK7模型在对土壤重金属Ni含量预测中表现最为出色。

2.3 两种辅助变量预测的Ni含量空间表征

在以土壤黏粒含量为辅助变量对土样重金属Ni进行协同克里格插值时,选择默认的稳定模型,CK1模型块基比为39.57%(>25%),表明土壤重金属Ni的空间相关性较强,达到了用地统计方法预测空间分布的前提要求。图4a~4c分别为CK1、CK2和CK3模型的插值结果,土壤Ni含量空间分布特征总体比较相似,均呈南高北低、西南最高东部最低的空间分布趋势。其中,CK2模型插值结果(图4b)与CK1、CK3相比展现出更多的细节。具体表现为: Ni含量低于背景值(37.3 mg/kg)时,图4a~4c均未展现出明显分布区; Ni含量高于平均值(53.4 mg/kg)时,图4b在研究区南侧局部区域凸显了一处Ni含量高值分布区; Ni含量介于两者之间时,图4b与图4a、4c相比在研究区北部、西部、西北部和东北偏东部展现出的Ni含量分布区域更加细化。

加入近红外光谱2380 nm波段吸收率后,从图4d~4f可以看出,CK6和CK8模型的插值结果没有显著改变,而CK7模型(图4e)展现出显著的细节差异。其中,与图4b相比,图4e在研究区西部、中部、东北部和东南偏东部展现了4块离散的

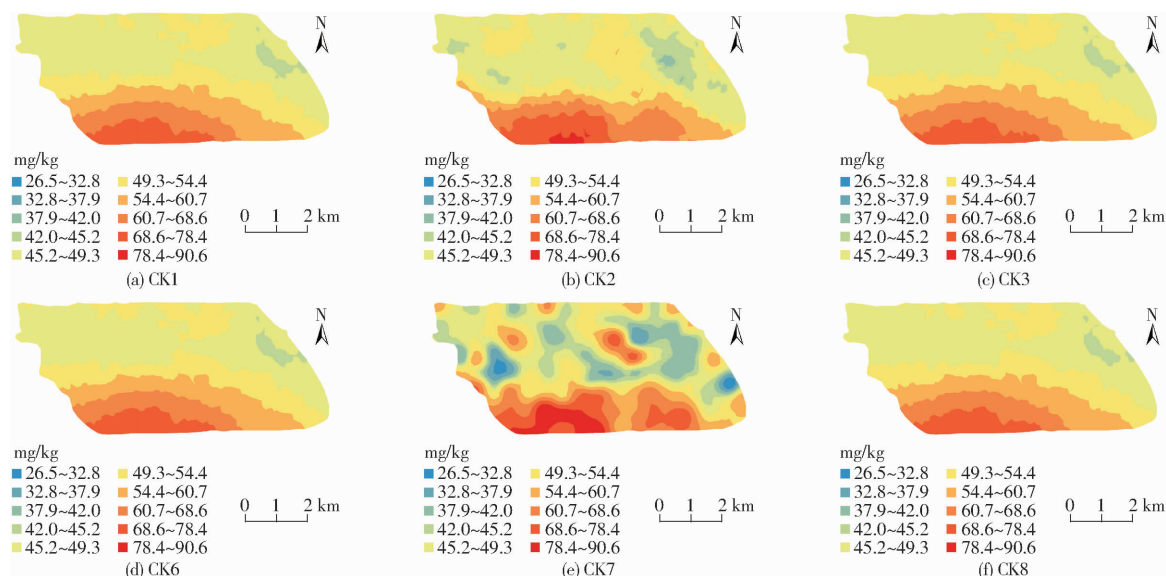


图4 土壤 Ni 含量空间分布

Fig. 4 Spatial distributions of Ni content in soil

Ni 含量低值分布区;在西北部、东北部和边缘展现了多处高值分布区;研究区最北部、西部和中部偏东地区的 Ni 含量分布区域更加精细。综上,对 Ni 含量预测,仅以粉粒含量作为辅助变量与以粉粒含量 + 近红外光谱 2 380 nm 波段吸收率作为辅助变量的结果相比存在一定高估。

3 讨论

研究区土壤样本重金属 Ni 含量变异系数为 25.66%,表明这组土样中 Ni 含量具有中等程度的空间变异性,其空间变异受到人为和自然因素的共同影响。未受人为干扰的土壤中重金属一般来源于矿物颗粒,与成土母质密切相关,重金属含量往往与土壤特性表现出较强的相关性。土样 Ni 平均含量高于背景值,表明人类活动推动了土壤中 Ni 的积累。土壤中 Ni 的高含量通常与化学工业和钢铁工业相关,从区位因素来看, Ni 含量分布总体与工业产业分布一致。研究区北部主要以住宅区建筑物为主, Ni 含量总体较低;研究区南部,钢铁集团、建材公司以及工业园区等产业逐渐开始聚集,尤其集中在研究区西南部,导致西南方向的 Ni 含量较其他地区明显增加。

土壤光谱综合反映土壤属性和环境影响因素。与 TN、OC、pH 值等基本土壤属性相比,对 Ni 的估测虽然不直接与光谱能量相互作用,但由于土壤重金属与土壤中的黏土矿物和碳酸盐存在“次要”关联^[29-30],因此能通过 NIR 光谱对 Ni 等非基本土壤属性进行合理估测。SUN 等^[16]利用 vis-NIR 光谱预测湖南省郴州市和衡阳市土壤中重金属镍浓度,决定系数 R^2 分别为 0.577、0.672。DVORNIKOV 等^[31]

使用克里格插值法预测研究区土壤镍,其 R^2 为 0.5 左右。以光谱作为辅助变量有效地改善了 co-Kriging 模型性能,提高了重金属 Ni 含量预测准确性。COBO 等^[32]以及 QU 等^[33]在对土壤理化属性及重金属铅进行地统计分析时,选用土壤中红外光谱的主成分信息或 X 荧光全波段光谱作为辅助变量,也得出了一致的结论。在 CHEN 等^[7]预测 8 种土壤重金属空间分布的研究中,以近地土壤 vis-NIR 反射光谱作为辅助变量的插值结果优于只以土壤属性作为辅助变量的结果。这说明光谱信息对预测土壤重金属起到重要的辅助作用。

土壤湿度、气温、光照等外部环境因素易干扰野外土壤近地光谱的测量准确性,相比之下实验室获取的数据可避免许多自然、人为因素的影响^[34-35]。对土壤近地光谱进行预处理可降低噪声、提升信噪比、减少外来杂散光的影响,还可降低数据维度以高效计算、增强吸收特征等。但选择何种光谱预处理方法并不唯一也不绝对,因此会进一步使预测结果产生一定差异。如肖洁芸等^[36]对城郊耕地土壤重金属污染的研究中使用 4 种光谱预处理方法,发现不同光谱变换和模型组合的模拟精度显著不同。联合国粮食及农业组织的全球土壤实验室网络 (GLOSOLAN) 建议采用探索式的策略,即比较几种不同的光谱预处理方案后,再选择能够提升模型预测精度的预处理方法^[37]。尽管重金属元素与光谱组分的关联性在不同研究中略有差别,导致重金属元素的光谱特征具有特异性,但相关分析结果显示可靠的光谱预处理方法能够消除噪声等误差的影响^[38],从而增强数据可靠性,说明光谱数据是进行土壤重金属

协同克里格插值的理想辅助变量。

4 结束语

构建了以土壤机械组成和以机械组成结合土壤近红外光谱信息为辅助变量共计 6 种协同克里格模型,探究了武汉市青山区境内武汉钢铁集团公司周边土壤表层重金属 Ni 含量在空间上的分布特征,并比较了模型预测精度。结果表明,以粉粒含量结合

土壤近红外光谱 2 380 nm 波段吸收率为辅助变量的模型预测精度最高。该模型预测的 Ni 含量分布总体呈南高北低、西南最高东部最低的空间分布趋势,与其他模型相比能显现出更多、更显著的细节差异。研究表明相较于单一的土壤属性辅助变量,较易获取的近地光谱数据能有效融入空间预测模型,可提供更精准的重金属元素分布信息,并提高区域土壤重金属的调查精度。

参 考 文 献

- [1] YANG Q, LI Z, LU X, et al. A review of soil heavy metal pollution from industrial and agricultural regions in China: pollution and risk assessment[J]. *Science of the Total Environment*, 2018, 642: 690 – 700.
- [2] RINKLEBE J, ANTONIADIS V, SHAHEEN S M, et al. Health risk assessment of potentially toxic elements in soils along the Central Elbe River, Germany[J]. *Environment International*, 2019, 126: 76 – 88.
- [3] 魏洪斌, 罗明, 吴克宁, 等. 长江三角洲典型县域耕地土壤重金属污染生态风险评价[J]. *农业机械学报*, 2021, 52(11): 200 – 209, 332.
WEI Hongbin, LUO Ming, WU Kening, et al. Ecological risk assessment of heavy metal pollution in cultivated soil at typical county level in Yangtze River Delta[J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2021, 52(11): 200 – 209, 332. (in Chinese)
- [4] 环境保护部, 国土资源部. 全国土壤污染状况调查公报[J]. *国土资源通讯*, 2014(8): 26 – 29.
- [5] LI W, JIANG Y, YE Y, et al. Spatiotemporal interpretable mapping framework for soil heavy metals[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2024, 468: 143101.
- [6] 胡碧峰, 王佳昱, 傅婷婷, 等. 空间分析在土壤重金属污染研究中的应用[J]. *土壤通报*, 2017, 48(4): 1014 – 1024.
HU Bifeng, WANG Jiayu, FU Tingting, et al. Application of spatial analysis on soil heavy metal contamination: a review[J]. *Chinese Journal of Soil Science*, 2017, 48(4): 1014 – 1024. (in Chinese)
- [7] CHEN T, CHANG Q, LIU J, et al. Identification of soil heavy metal sources and improvement in spatial mapping based on soil spectral information: a case study in Northwest China[J]. *Science of the Total Environment*, 2016, 565: 155 – 164.
- [8] XIE Y, CHEN T, LEI M, et al. Spatial distribution of soil heavy metal pollution estimated by different interpolation methods: accuracy and uncertainty analysis[J]. *Chemosphere*, 2011, 82(3): 468 – 476.
- [9] WU Z, CHEN Y, HAN Y, et al. Identifying the influencing factors controlling the spatial variation of heavy metals in suburban soil using spatial regression models[J]. *Science of the Total Environment*, 2020, 717: 137212.
- [10] HOU D, AL-TABBAA A, O'CONNOR D, et al. Sustainable remediation and redevelopment of brownfield sites[J]. *Nature Reviews Earth & Environment*, 2023, 4(4): 271 – 286.
- [11] 刘波, 陈东湘. 基于 Cokriging 的土壤重金属空间变异研究——以昆山市为例[J]. *环境保护科学*, 2013, 39(2): 34 – 37, 51.
LIU Bo, CHEN Dongxiang. Study on spatial variation of heavy metals in soil based on Cokriging method—taking Kunshan City as example[J]. *Environmental Protection Science*, 2013, 39(2): 34 – 37, 51. (in Chinese)
- [12] 唐澳华, 杨贵军, 杨悦, 等. 基于中红外光谱特征增强和集成学习的土壤有机碳含量估算模型研究[J]. *农业机械学报*, 2024, 55(8): 382 – 390.
TANG Aohua, YANG Guijun, YANG Yue, et al. Estimation model of soil organic carbon content based on mid-infrared spectral characteristics enhancement and ensemble learning [J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2024, 55(8): 382 – 390. (in Chinese)
- [13] ZHOU Y, BISWAS A, HONG Y, et al. Enhancing soil profile analysis with soil spectral libraries and laboratory hyperspectral imaging[J]. *Geoderma*, 2024, 450: 117036.
- [14] LI S, VISCARRA ROSSEL R A, WEBSTER R. The cost-effectiveness of reflectance spectroscopy for estimating soil organic carbon[J]. *European Journal of Soil Science*, 2022, 73(1): e13202.
- [15] VISCARRA ROSSEL R A, SHEN Z, LOPEZ L R, et al. An imperative for soil spectroscopic modelling is to think global but fit local with transfer learning[J]. *Earth-Science Reviews*, 2024, 254: 104797.
- [16] SUN W, ZHANG X, SUN X, et al. Predicting nickel concentration in soil using reflectance spectroscopy associated with organic matter and clay minerals[J]. *Geoderma*, 2018, 327: 25 – 35.
- [17] ZOU Z, WANG Q, WU Q, et al. Inversion of heavy metal content in soil using hyperspectral characteristic bands-based machine learning method[J]. *Journal of Environmental Management*, 2024, 355: 120503.
- [18] GE Y, THOMASSON J A, MORGAN C L, et al. VNIR diffuse reflectance spectroscopy for agricultural soil property determination based on regression-Kriging[J]. *Transactions of the ASABE*, 2007, 50(3): 1081 – 1092.

- [19] BILGILI A V, AKBAS F, VAN ES H M. Combined use of hyperspectral VNIR reflectance spectroscopy and Kriging to predict soil variables spatially[J]. *Precision Agriculture*, 2011, 12: 395 – 420.
- [20] 刘艳芳, 宋玉玲, 郭龙, 等. 结合高光谱信息的土壤有机碳密度地统计模型[J]. *农业工程学报*, 2017, 33(2): 183 – 191.
LIU Yanfang, SONG Yuling, GUO Long, et al. Geostatistical models of soil organic carbon density prediction based on soil hyperspectral reflectance[J]. *Transactions of the CSAE*, 2017, 33(2): 183 – 191. (in Chinese)
- [21] BAVEYE P, LABA M. Visible and near-infrared reflectance spectroscopy is of limited practical use to monitor soil contamination by heavy metals[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2015, 285: 137 – 139.
- [22] HOU D, O'CONNOR D, NATHANAIL P, et al. Integrated GIS and multivariate statistical analysis for regional scale assessment of heavy metal soil contamination: a critical review[J]. *Environmental Pollution*, 2017, 231: 1188 – 1200.
- [23] 中国环境保护部南京环境科学研究所. 土壤环境质量评价标准: GB/T 15618—1995[S]. 北京: 中国环境保护部, 1995.
- [24] 国家环境保护局, 中国环境监测总站. 中国土壤元素背景值[M]. 北京: 中国环境科学出版社, 1990.
- [25] SAVITZKY A, GOLAY M J E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures[J]. *Analytical Chemistry*, 1964, 36(8): 1627 – 1639.
- [26] 朱阿兴, 杨琳, 樊乃卿, 等. 数字土壤制图研究综述与展望[J]. *地理科学进展*, 2018, 37(1): 66 – 78.
ZHU Axing, YANG Lin, FAN Naiqing, et al. The review and outlook of digital soil mapping[J]. *Progress in Geography*, 2018, 37(1): 66 – 78. (in Chinese)
- [27] 郭龙, 张海涛, 陈家赢, 等. 基于协同克里格插值和地理加权回归模型的土壤属性空间预测比较[J]. *土壤学报*, 2012, 49(5): 1037 – 1042.
GUO Long, ZHANG Haitao, CHEN Jiaying, et al. Comparison between co-Kriging model and geographically weighted regression model in spatial prediction of soil attributes[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2012, 49(5): 1037 – 1042. (in Chinese)
- [28] PENG J, LI S, MAKAR R S, et al. Proximal soil sensing of low salinity in southern Xinjiang, China[J]. *Remote Sensing*, 2022, 14(18): 4448.
- [29] 李硕, 汪善勤, 张美琴. 基于可见-近红外光谱比较主成分回归、偏最小二乘回归和反向传播神经网络对土壤氮的预测研究[J]. *光学学报*, 2012, 32(8): 289 – 293.
LI Shuo, WANG Shanqin, ZHANG Meiqin. Comparison among principal component regression partial least squares regression and back propagation neural network for prediction of soil nitrogen with visible – near infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(8): 289 – 293. (In Chinese)
- [30] VISCARRA ROSSEL R A, BEHRENS T, BEN-DOR E, et al. Diffuse reflectance spectroscopy for estimating soil properties: a technology for the 21st century[J]. *European Journal of Soil Science*, 2022, 73(4): e13271.
- [31] DVORNIKOV Y, SLUKOVSKAYA M, YAROSLAVTSEV A, et al. High-resolution mapping of soil pollution by Cu and Ni at a polar industrial barren area using proximal and remote sensing[J]. *Land Degradation & Development*, 2022, 33(10): 1731 – 1744.
- [32] COBO J G, DERCON G, YEKEYE T, et al. Integration of mid-infrared spectroscopy and geostatistics in the assessment of soil spatial variability at landscape level[J]. *Geoderma*, 2010, 158(3 – 4): 398 – 411.
- [33] QU M, CHEN J, LI W, et al. Correction of in-situ portable X-ray fluorescence (PXRF) data of soil heavy metal for enhancing spatial prediction[J]. *Environmental Pollution*, 2019, 254: 112993.
- [34] LI S, SHI Z, CHEN S, et al. In situ measurements of organic carbon in soil profiles using vis-NIR spectroscopy on the Qinghai – Tibet plateau[J]. *Environmental Science & Technology*, 2015, 49(8): 4980 – 4987.
- [35] 李硕, 李春莲, 陈颂超, 等. 基于野外可见近红外光谱和水分影响校正算法的土壤剖面有机碳预测[J]. *光谱学与光谱分析*, 2021, 41(4): 1234 – 1239.
LI Shuo, LI Chunlian, CHEN Songchao, et al. Removing the effects of water from visible-near infrared spectra in soil profiles for the estimation of organic carbon[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2021, 41(4): 1234 – 1239. (in Chinese)
- [36] 肖洁芸, 周伟, 石佩琪. 土壤重金属含量高光谱反演[J]. *生态环境学报*, 2023, 32(1): 175 – 182.
XIAO Jieyun, ZHOU Wei, SHI Peiqi. Hyperspectral inversion of soil heavy metals[J]. *Ecology and Environmental Sciences*, 2023, 32(1): 175 – 182. (in Chinese)
- [37] GE Y, WADOUX A, PENG Y. A primer on soil analysis using visible and near-infrared (vis-NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopy[M]. Rome: FAO, 2022.
- [38] 刘彦平, 罗晴, 程和发. 高光谱遥感技术在土壤重金属含量测定领域的应用与发展[J]. *农业环境科学学报*, 2020, 39(12): 2699 – 2709.
LIU Yanping, LUO Qing, CHENG Hefa. Application and development of hyperspectral remote sensing technology to determine the heavy metal content in soil[J]. *Journal of Agro-Environment Science*, 2020, 39(12): 2699 – 2709. (in Chinese)