

# 基于地物光谱的不同质量含水量的土壤反射率光谱模拟模型

地表土壤水分是农业、水文、生态、气候等领域衡量土壤干旱程度的重要指标。土壤含水量的时空分布与变化对土壤温度变化、陆地—大气间热量平衡以及陆面大气环流产生显著的影响。较高精度的区域土壤含水量监测对科学进行农业生产具有重要的指导意义；大尺度乃至全球尺度的土壤水分监测对改善区域及全球气候模式也起着重要的作用。



目前，土壤含水量监测方法可分为 **3** 类：**田间实测法**包括烘干称重法、中子仪法、时间域反射仪法（TDR）等，这些方法需要实地观测，监测周期长，需要大量的人力物力，不能实现大面积的同步观测，因此适用性较差。**土壤水分模型法**是根据物质守恒定律，建立水分平衡方程来求解土壤水分，但是实验需要大量气象数据，估测误差较大。**利用遥感手段**可以实现对土壤含水量大面积实时动态监测。目前，主要有热惯量

法、微波遥感法、植被指数法等。其中，**微波遥感法** 监测精度较高，但是不能消除植被覆盖及地表粗糙度对反演土壤水分的影响；**植被指数法** 在一定的误差范围内能较好的反演土壤含水量，但是只适用于植被覆盖情况下的土壤水分监测。



无疑，利用土壤的反射率光谱特征与土壤含水量之间的相互关系反演土壤含水量是最直接的方法。本工作目的是**借助高光谱遥感手段**，深入探索土壤质量含水量与土壤反射率光谱之间的关系。针对前人反射率光谱模拟模型中实际物理参数不可测的问题，通过观测实验，利用土壤质量含水量将其参数化，获得一个对质量含水量小于田间持水量的不同土壤反射率光谱都能进行较高精度模拟的正演模型，从而为土壤含水量反演建模提供理论依据。

## 实验部分

### 1.1 土壤野外采集

选取北京市 8 个采样点的土壤样品作为实验对象。其中 1 和 2 号采样点位于房山区百花山区，3-5 号采样点位于房山区东部的山麓平原地区，6-8 号采样点位于大兴区中北部的平原裸地（图 1）。8 个采样点的基本信息如表 1 所示。

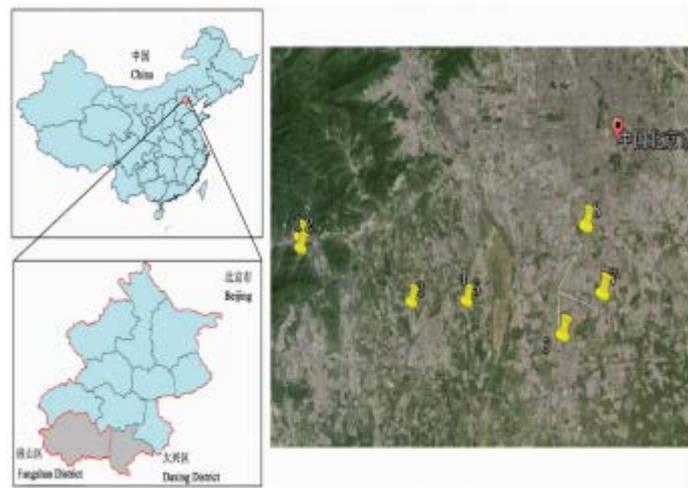


图 1 抽样点的分布

采样点号	纬度(N)	经度(E)	土地利用类型
1	39.799°	115.947°	玉米地
2	39.808°	115.946°	山区裸地
3	39.757°	116.106°	菜地
4	39.758°	116.184°	林地
5	39.758°	116.186°	果园
6	39.778°	116.323°	平原裸地
7	39.778°	116.321°	建筑用地
8	39.778°	116.320°	平原裸地

表 1 取样点信息

在选定的各个采样点处，先用铲子刮去表层枯枝落叶、石头及其他杂物，露出新鲜土壤层；然后挖取 0-10cm 深度范围内 2kg 以上的新鲜土样放入采样袋中密封编号。

## 1.2 反射率光谱室内实验

对野外采集到的 8 个土壤样品进行以下相同处理：装入 15cmx15cm 圆形土壤盒内，烘箱调制 105℃烘烤 48h；然后称取 1kg 土样，在室温下使用 **ATP9110-25 宽波段野外光谱仪**（波长范围为 **350~2500nm**，其中 350~1000nm 光谱分辨率为 3nm，1000~2500nm 光谱分辨率为 8nm），25°视场角，探头在土壤上方 15cm 处，光谱仪每次扫描时间为 0.1s，输出的光谱线为 10 条原始扫描光谱自动平均所得，所需时间为 1s。

，赞 6

光谱反射系数经专用平面白板标准化。取 5 次光谱数据的平均值作为光谱采集结果（为保证观测时太阳高度角的有效性，光谱测定时间为当地时间 11:00—14:00）；最后称重。这一过程结束之后用量筒注入 25mL 水，密闭并充分摇匀后重复以上测量

光谱和称重的过程。整个实验按照 25, 50, 75, 100, 125, 150, 175, 200, 250, 300, 350 和 400mL 的注水梯度进行。

### 1.3 数据处理

(1) 土壤质量含水量的计算实验过程中会受到水分蒸发等因素的影响，所以用干土和水的总重量作为湿润土壤的重量是不精确的。为了减小实验误差，在每次加水测完光谱之后重新对湿润土壤进行重量测定，以此作为该注水量下的含水土壤的重量。土壤质量含水量的计算公式如下：

$$\theta_m = \frac{W_1 - W_2}{W_1}$$

式中， $\theta_m$ 为土壤质量含水量， $W_1$ 为不同注水量下的含水土壤的重量， $W_2$ 为烘干后干土的重量。当注水量在 0-250mL 时，所有土壤样品的光谱反射率随土壤质量含水量的增加而降低。由于各种土壤的持水能力有差异，当注水量超过 300mL 时，部分土壤样品的含水量已经超过田间持水量，土壤表面膜水层形成镜面反射会使土壤光谱反射率升高。因此只探讨注水量在 0-250mL 范围内的土壤质量含水量（小于田间持水量）与土壤反射率光谱之间的规律。表 2 为 8 个土壤样品质量含水量的计算结果。

ID	注水量/mL									
	0	25	50	75	100	125	150	175	200	250
1	0.000	0.019	0.037	0.054	0.069	0.084	0.103	0.118	0.132	0.161
2	0.000	0.018	0.037	0.055	0.072	0.088	0.104	0.120	0.134	0.166
3	0.000	0.020	0.037	0.055	0.071	0.088	0.102	0.117	0.130	0.159
4	0.000	0.018	0.036	0.054	0.072	0.089	0.105	0.118	0.135	0.166
5	0.000	0.019	0.038	0.056	0.072	0.088	0.105	0.120	0.135	0.164
6	0.000	0.016	0.038	0.056	0.074	0.090	0.107	0.123	0.138	0.169
7	0.000	0.020	0.037	0.054	0.072	0.089	0.104	0.120	0.135	0.163
8	0.000	0.021	0.035	0.053	0.072	0.088	0.105	0.119	0.133	0.163
标准差	0.000 0	0.001 5	0.000 9	0.001 0	0.001 3	0.001 7	0.001 4	0.001 7	0.002 2	0.002 9

表 2 8 个土样在不同注水条件下的质量含水量

(2) 土壤反射率光谱数据的选取如图 2 所示，对土壤样品进行光谱数据采集时，在 1400，1900nm 附近和 2400nm 之后，土壤反射率光谱会受大气水汽的影响，使光谱数据噪声表现非常明显；而在 350~1000nm 范围内，光谱曲线较为平滑，土壤光谱反射率对波长及土壤质量含水量的变化都较为敏感。为了确保模型模拟的准确性，本实验初步决定探讨 350~1000nm 范围内土壤反射率光谱与土壤质量含水量之间的关系。

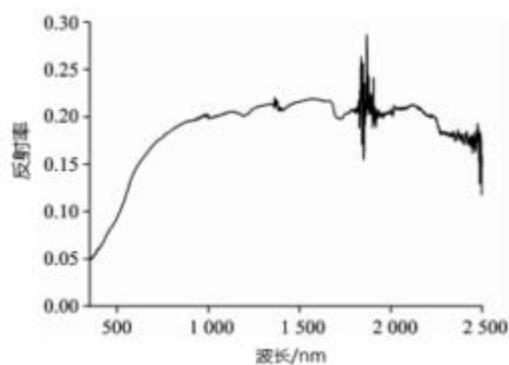


图 2 1 号样品质量含水量为 0.019 时的光谱反射率曲线

## 模型构建

William Philpot 于 2010 年提出了一个简单的含水土壤反射率光谱模拟模型，他认为土壤中的水分通过镜面反射和吸收对土壤光谱反射率产生影响，因此传感器接收到的含水土壤的反射光线由两部分组成：土壤颗粒表面水膜的镜面反射部分（图 3 中的光线 A）和进入土壤内部的光子经过土壤的散射、吸收之后又反射出来的部分（图 3

中的光线 B)。图中灰色椭圆代表土壤颗粒，椭圆之间的空隙代表土壤颗粒之间的自由水。

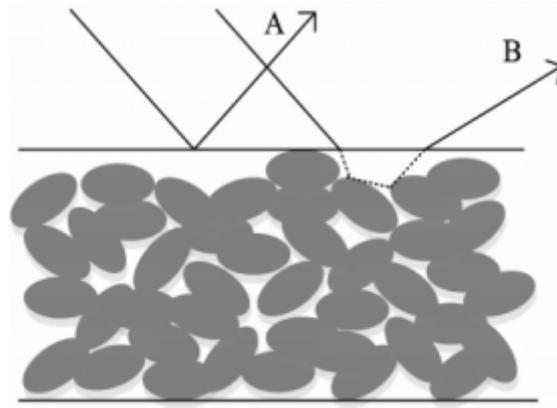


图 3 湿土表面光路

基于此，建立了含水土壤光谱反射率的表达式：

$$R = f_w \rho_w + (1 - f_w) \rho_s e^{da_w}$$

其中为  $R$  含水土壤光谱反射率， $f_w$  是土壤近表面水的镜面反射部分所占的比例系数， $\rho_w$  是水的镜面反射率， $\rho_s$  是干土的反射率， $d$  是光子在土壤中穿越的路径， $a_w$  是在不同波长位置对光子的吸收系数。William 提到， $f_w$  和  $d$  这两个参数可能与土壤含水量有关。因此在其原有的理论假设及含水土壤光谱反射率表达式 [ 即式 ( 2 ) ] 的基础上来探索  $f_w$  和  $d$  这两个参数与土壤质量含水量之间的关系。首先假设在同一土壤质量含水量情况下，进入土壤内部的光子所穿越的路径  $d$  是定值，只随土壤质量含水量的变化而变化； $f_w$  也是如此； $\rho_s$  为实验中测得的干土光谱反射率； $\rho_w$  和  $a_w$  是固定值，可以通过查阅前人文献得到。由于只获得了 380-1000nm 波段范围内的  $a_w$  值，

因此最终决定在 380-1000nm 波段范围内建立土壤反射率光谱模拟模型。各个波长处水的吸收系数  $a_w$  及水的镜面反射率  $\rho_w$  如图 4 所示。

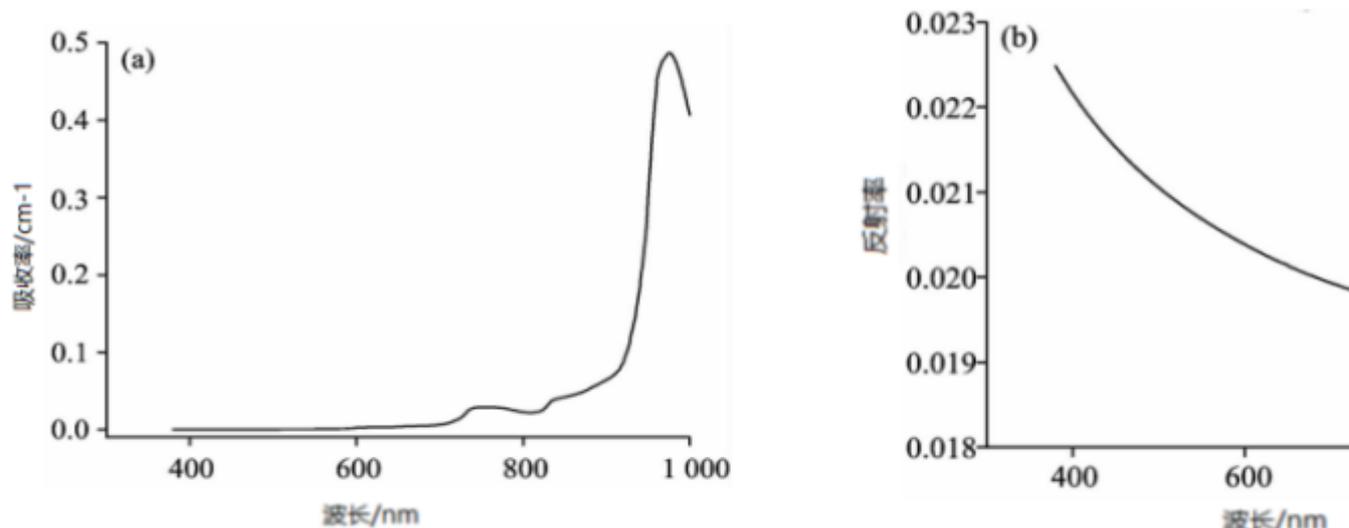


图 4  $a_w$  值和  $\rho_w$  值

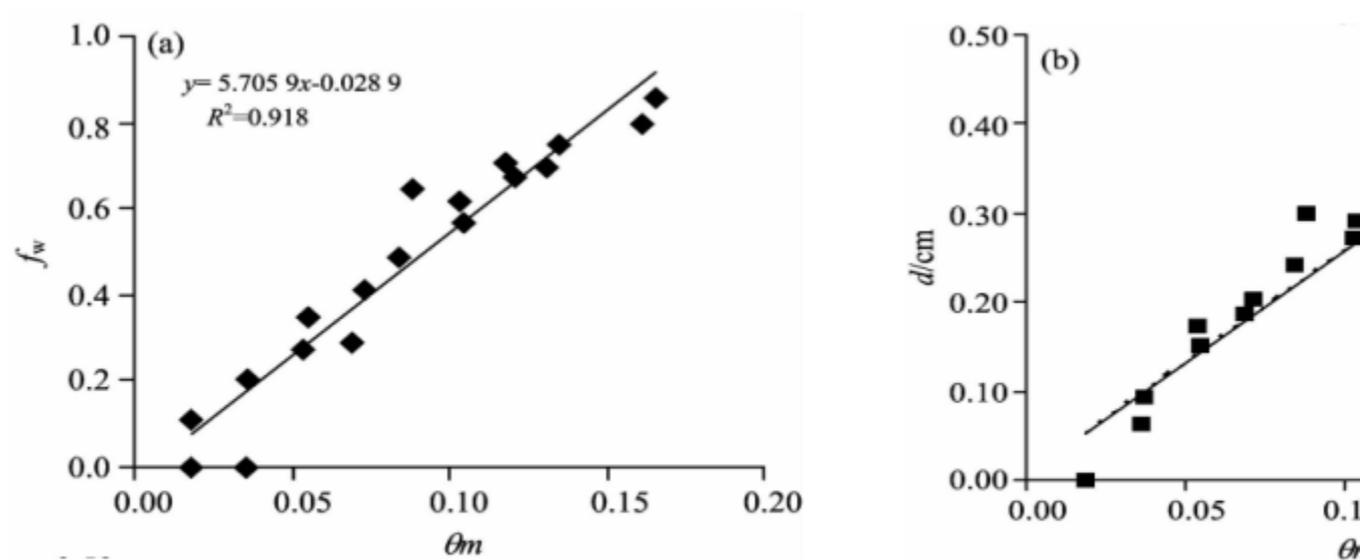


图 5  $f_w$  与  $\theta_m$  的关系及  $d$  与  $\theta_m$  的相关性

本实验采用爬山算法确定不同土壤质量含水量下  $d$  和  $f_w$  的最优参数组合。爬山算法是一种简单的贪心搜索算法，该算法每次从当前解的临近解空间选择一个最优解作为当前解，直到达到一个局部最优解。选取 1 号、2 号土壤样品数据进行模型构建，用模拟光谱与实测光谱的残差平方和 (re-sidual sum of square, RSS) 作为最优参数

选取的评价标准。通过分析可以发现， $d$ ， $f_w$ 与土壤质量含水量的线性相关系数均达到 0.85 以上，基本满足线性关系（图 5）。当土壤质量含水量为 0 时，所测得的土壤反射率光谱理论上为干土的光谱，即式（2）中的 $f_w$ ， $d$  应为 0。基于此建立两者与土壤质量含水量之间的经验公式：

$$f_w = 5.7 \times \theta_m$$

$$d = 2.5 \times \theta_m$$

将式（3）和式（4）代入式（2）得

$$R = 5.7 \times \theta_m \rho_w + (1 - 5.7 \times \theta_m) \times \rho_s e^{2.5 \times \theta_m a_w}$$

式（5）即为最终构建的含水土壤反射率光谱模拟模型，该模型在式（2）的基础上建立了土壤质量含水量  $\theta_m$ 与土壤光谱反射率  $R$ 之间的直接关系。

## 模型验证

### 3.1 利用实验室测量数据进行验证

利用剩下 6 个土壤样品的实验室测量数据对该模型的普遍适用性进行检验。以 8 号土壤样品土壤质量含水量为 0.072 的情况为例，模拟结果如图 6，模型模拟值与实测值拟合程度较高，在 380-580nm 范围内略高于实测值，在 580-900nm 范围内略低于实测值，这与 William Philpot 的研究结果相一致，原因可能是实验时注入土壤中水的吸收系数与我们通过查阅文献获得的纯水的吸收系数有所不同。但总体上来说模拟值与实测值之间的差异十分微小，两者的残差平方和为 0.0773。

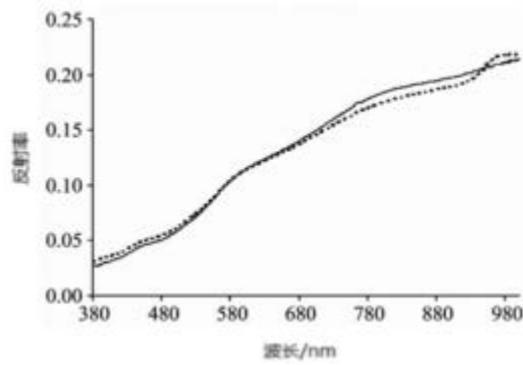


图 6 8 号样品质量含水率为 0.072 时的光谱反射率

**注：**实线表示测量的光谱反射率，虚线表示模拟的光谱反射率表 3 为 6 个验证样品不同质量含水量下土壤反射率光谱的模拟值与实测值在 380-1000nm 波段范围内的残差平方和。对比不同含水量情况下的光谱模拟精度可以发现，在注水量为 25 和 75mL 时的残差平方和均值最小，为 0.07 左右，其他注水量下为 0.17 左右，效果也比较理想，说明该模型适合对含水量小于田间持水量的土壤进行反射率光谱模拟。而对不同土壤样品进行比对可以发现，3 号土壤样品的残差平方和最小，可达 0.0020，其他样品的残差平方和也不大，说明该模型对这 6 种不同类型的土壤都适用。

注水量/mL	3 号	4 号	5 号	6 号	7 号	8 号
25	0.222 4	0.034 3	0.007 6	0.060 0	0.089 2	0.050 3
50	0.251 6	0.033 9	0.559 6	0.246 4	0.217 2	0.141 2
75	0.003 5	0.003 4	0.180 1	0.007 4	0.165 9	0.077 3
100	0.047 8	0.201 9	0.147 7	0.175 3	0.172 5	0.251 5
125	0.001 7	0.116 3	0.233 1	0.289 7	0.337 3	0.630 5
150	0.039 9	0.399 4	0.039 9	0.540 5	0.173 1	0.235 8
175	0.155 9	0.080 4	0.221 8	0.146 1	0.772 6	0.183 1
200	0.008 2	0.121 3	0.444 0	0.204 0	0.290 4	0.347 2
250	0.002 0	0.082 9	0.413 1	0.262 8	0.015 7	0.327 0

### 3.2 利用土壤实地测量数据进行验证

采用实验室测量数据对模型进行验证之后，为增加结论的可信度，又利用北京大学校园内三个采样点的原地反射率光谱测量数据对模型进行检验，通过烘干称重法可知三

个采样点的土壤质量含水量均小于田间持水量。图 7 为这三个采样点反射率光谱模拟值与实测值散点图，可以看出模拟值与实测值具有较高的拟合度，两者之间的均方根误差都在 0.0096 以下，最小可达 0.0058，这进一步说明该土壤反射率光谱模拟模型能够对质量含水量小于田间持水量的不同类型土壤的反射率光谱进行较高精度的模拟。

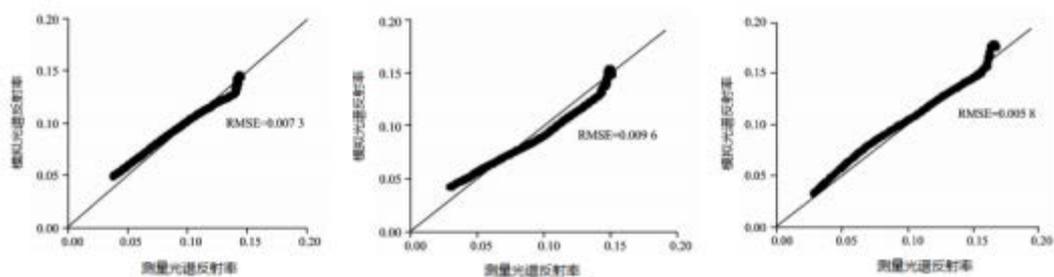


图 7 北京大学校园三个采样点的模拟结果

## 结论

借助地物光谱手段，利用测定的实验数据，在借鉴前人研究成果的基础上构建了不同质量含水量的土壤反射率光谱模拟模型，确立了土壤光谱反射率与土壤质量含水量之间的关系。模型构建完成之后，利用剩余的土壤样品实验室测量数据以及北京大学校园内三个采样点原地反射率光谱测量数据对模型进行了验证，通过验证发现，该模型能很好的模拟含水量小于田间持水量的不同类型土壤的反射率光谱曲线（380-1000nm 范围内），模拟值与实测值的均方根误差最小可达到 0.0058，效果比较理想。但是通过验证也发现在土壤质量含水量过高的情况下，其拟合效果不太理想。原

因是当土壤质量含水量较高时（即  $\theta_m$  较高），镜面反射比例系数  $f_w$  接近于 1，失去其物理意义。**综上所述，该模型可有效地对不同类型的土壤在土壤质量含水量小于田间持水量情况下进行反射率光谱模拟，确立了土壤质量含水量与土壤反射率光谱之间的直接关系。**在以后的研究中，可以利用其他地区的土壤数据对构建的土壤反射率光谱模拟模型进行验证；也可以进一步研究该模型在其他光谱波段范围内对土壤反射率光谱进行模拟的有效性。

**奥谱天成**致力于开发国际领先的光谱分析仪器，立志成为国际一流的光谱仪器提供商，基于特有的光机电一体化、光谱分析、云计算等技术，形成以拉曼光谱为拳头产品，光纤光谱、高光谱成像仪、地物光谱、荧光光谱、LIBS 等多个领域，均跻身于世界前列，已出口到全球 50 多个国家。

- ◆ 承担“厦门市海洋与渔业发展专项资金项目”（总经费 4576 万元）；
- ◆ 2021 福建省科技小巨人科技部；
- ◆ 刘鸿飞博士入选科技部“创新人才推进计划”；
- ◆ 国家高新技术企业；
- ◆ 刘鸿飞博士获评福建省高层次人才 B 类；
- ◆ 主持制定《近红外地物光谱仪》国家标准；
- ◆ 国家《拉曼光谱仪标准》起草单位；
- ◆ 福建省《便携式拉曼光谱仪标准》评审专家单位；
- ◆ 厦门市“双百人才计划”A 类重点引进项目（最高等级）；
- ◆ 国家海洋局重大产业化专项项目承担者；

- ◆ “重大科学仪器专项计划”承担者。