联合最优FOD_CWT与光谱指数的盐碱农田土壤有机质估算

左超燕[1], 贾科利[1], 叶静雨[1], 李浩宇[1], 张俊华[2], 丁启东[2]
(1.宁夏大学 地理科学与规划学院, 宁夏 银川 750021; 2.宁夏大学 生态环境学院, 宁夏 银川 750021)

摘　要: [目的] 为实现盐碱农田土壤有机质高精度监测,提出了一种基于分数阶微分(FOD)、连续小波变换(CWT)与光谱指数构建的框架。[方法] 以新疆伽师县两块盐碱农田为试验区域,以地面高光谱反射率数据和野外采样数据为数据源,对原始高光谱反射率实现步长为0.25的微分变换,在此基础上,进行6个尺度连续小波变换,选取最优的微分阶数和小波分解尺度组合构建比值指数(RI)、差值指数(DI)和归一化差异指数(NDI),并构建随机森林(RF)模型、极端梯度提升(XGBoost)模型、支持向量回归(SVR)模型和轻量级梯度提升机(LightGBM)模型定量估算土壤有机质含量。[结果] FOD处理后,0.75阶微分光谱反射率与有机质相关性最高,明显优于原始光谱与整数阶变换;FOD_CWT联合处理后,0.25阶FOD组合2^5尺度表现最优,相关系数达0.726;光谱反射率数据与有机质相关性最高(提升0.197),可有效提升光谱与土壤有机质相关性;FOD_CWT_XGBoost组合的预测性能最优,测试集R^2达0.744。[结论] 分数阶微分与小波变换组合能深度挖掘光谱信息,所构建的模型适用于土壤有机质估算。

关键词: 有机质; 地面高光谱; 分数阶微分; 连续小波变换; 光谱指数; 机器学习
文献标识码: B　　**文章编号:** 1000-288X(2026)04-0160-12　　**中图分类号:** S127, S153.621

文献参数: 左超燕, 贾科利, 叶静雨, 等.联合最优FOD_CWT与光谱指数的盐碱农田土壤有机质估算[J].水土保持通报,2026,46(4):160-171. Zuo Chaoyan, Jia Keli, Ye Jingyu, et al. Estimation of soil organic matter in saline-alkali farmland using optimal FOD_CWT and spectral index [J]. Bulletin of Soil and Water Conservation,2026,46(4):160-171.

DOI:10.13961/j.cnki.stbctb.2026.04.031　　**CSTR:32312.14.stbctb.2026.04.031**

Estimation of soil organic matter in saline-alkali farmland using optimal FOD_CWT and spectral index

Zuo Chaoyan[1], Jia Keli[1], Ye Jingyu[1], Li Haoyu[1], Zhang Junhua[2], Ding Qidong[2]
(1.*School of Geography and Planning, Ningxia University, Yinchuan, Ningxia* 750021, *China*; 2.*School of Ecology and Environment, Ningxia University, Yinchuan, Ningxia* 750021, *China*)

Abstract: [Objective] A framework integrating fractional-order differentiation (FOD), continuous wavelet transform (CWT), and spectral index construction was proposed in order to achieve high-precision monitoring of soil organic matter in saline-alkali farmland. [Methods] Two saline-alkali farmland plots in Jiashi County, Xinjiang, were selected as the study area. Ground-based hyperspectral reflectance data and field sampling data were used as data sources. The original hyperspectral reflectance was subjected to differential transformation with a step size of 0.25. On this basis, continuous wavelet transform was performed at six scales, and the optimal combination of differential order and wavelet decomposition scale was selected to construct a ratio index (RI), difference index (DI), and normalized difference index (NDI). Random forest (RF), extreme gradient boosting (XGBoost), support vector regression (SVR), and light gradient boosting machine (LightGBM) models were built to quantitatively estimate soil organic matter content. [Results] After FOD processing, the 0.75-order

收稿日期:2025-12-10　　**修回日期:**2026-03-12　　**采用日期:**2026-03-13
资助项目:国家重点研发计划项目子课题"西北盐渍化区中低产田土壤盐碱和贫瘠信息快速获取与时空预测技术研究"(2023YFD1900103);宁夏自然科学基金重点项目(2024AAC02021)
第一作者:左超燕(2001—),女(汉族),甘肃省天水市人,硕士研究生,研究方向为土壤盐渍化定量遥感反演。Email:z16063702@163.com。
通信作者:贾科利(1975—),男(汉族),陕西省宝鸡市人,博士,教授,主要从事土壤盐渍化定量遥感反演,土地利用与生态环境效应相关研究。Email:jiakl@nxu.edu.cn。

differential spectral reflectance had the highest correlation with organic matter, significantly outperforming the original spectrum and integer-order transformation. After the combined FOD_CWT processing, the 0.25-order FOD combined with 25-scale CWT showed the best performance, with a correlation coefficient of 0.726. The correlation between spectral reflectance data and organic matter increased by 0.197, effectively enhancing the relationship between the spectrum and soil organic matter. The FOD_CWT_XGBoost combination showed the best prediction performance, with a test set R^2 of 0.744. [Conclusion] The combination of fractional-order differentiation and wavelet transform can deeply extract spectral information, and the constructed model is suitable for estimating soil organic matter.

Keywords: organic matter; ground-based hyperspectral; fractional-order differentiation; continuous wavelet transform; spectral index; machine learning

土壤有机质(soil organic matter, SOM)是衡量土壤肥力水平、生态功能及土地可持续利用能力的核心指标,其含量不仅影响土壤的理化性质与养分供应能力,还在农业生产、陆地碳循环过程以及生态系统健康维持中发挥关键作用[1]。因此,开展土壤有机质的准确监测与评估,对于指导土壤改良与培肥,推动土地资源高效利用,支撑生态环境保护和区域可持续发展具有重要的科学意义和实践价值[2]。

近年来,随着成像光谱与地面高光谱观测技术的发展,基于高光谱数据开展土壤有机质反演研究已成为土壤遥感领域的重要方向[3]。围绕土壤有机质的高光谱反演,众多学者开展了大量研究并取得了丰富成果[4-5],相关研究表明,高光谱数据结合机器学习模型在土壤有机质精细反演方面具有良好应用潜力[6]。然而,现有研究多侧重于敏感波段或光谱指数筛选以及不同建模算法的对比分析,对光谱信号的深度挖掘相对不足。在盐碱农田复杂背景下,仅依赖原始光谱或简单变换难以充分表征有机质信息,从而制约反演精度与模型稳健性。因此,如何通过有效的光谱变换方法强化有机质相关光谱信息,是提升盐碱农田土壤有机质高光谱反演能力的关键问题。

分数阶微分变换(fractional order derivative, FOD)因其具有连续可调的微分阶数,在增强光谱细节和突出与目标变量相关特征方面表现出更高灵活性和适应性,被广泛应用于土壤光谱分析研究[7-8]。研究表明,与传统整数阶微分相比,FOD能够更有效地强化光谱细节并提高光谱反射率与土壤理化参数之间的相关性[9-10]。与此同时,连续小波变换(continuous wavelet transform, CWT)具备良好的多尺度局部特征提取能力,在揭示光谱曲线局部结构变化方面具有明显优势[11-12]。尽管上述方法在光谱特征增强方面取得了一定成效,但单一光谱变换方式往往难以兼顾光谱平滑性与细节保持能力,导致光谱增强效果存在一定局限。近年来,分数阶微分与连续小波变换相结合的联合处理思路逐渐受到关注。相关研究表明,FOD_CWT联合变换能够在多尺度层面同步强化光谱细节特征与局部形态信息,有效提升光谱与目标变量之间的相关性及特征波段的稳定性,可显著改善模型估测效果[13],在土壤参数建模中表现出更优的建模效果[14]。此外,仅依赖光谱变换仍难以充分揭示土壤光谱与理化性质之间复杂的非线性关系。为进一步增强目标信息的可识别性,研究中常在预处理光谱基础上构建各类光谱指数,通过融合不同波段的关键信息放大光谱响应差异[15]。基于光谱指数构建的机器学习模型已被证实能够在一定程度上提升反演精度与模型稳定性[16]。

基于上述认识,本文以新疆伽师县典型盐碱农田为研究对象,利用地面高光谱反射率数据与实测土壤有机质数据,以FOD_CWT联合变换为核心光谱预处理手段,构建光谱指数,并结合随机森林(RF)、XGBoost、支持向量回归(SVR)和LightGBM模型开展土壤有机质高精度估算研究,以期为干旱区盐碱耕地质量评价与地力提升提供技术参考。

1　材料与方法

1.1　试验区概况

试验区位于新疆伽师县克孜勒苏乡(39°39′—39°40′N,76°43′—76°49′E)一处棉花种植区。试验田总面积约0.22 km^2,作物类型为棉花,为当地典型连片盐碱化农田。试验区地处喀什市噶尔河流域冲积平原中下游,属于典型的温带大陆性干旱气候,年均降雨量64.4 mm,年均蒸发量2 051.5 mm,蒸降比达到32∶1,土壤类型以潮土和灌淤土为主,是中国重要的粮棉及优质果品生产基地。然而由于地势低洼,排水不畅,加之不合理灌溉,地下水位较浅以及排盐体系老化等因素共同作用,区域土壤盐碱化持

续加剧，导致土壤结构退化、团聚体稳定性下降，土壤有机质含量偏低且空间差异显著。

1.2 数据获取与处理

1.2.1 地面高光谱数据获取

野外采样前，利用ArcGIS 10.8软件在试验田内构建50 m×50 m网格化样点布设方案。于2025年3月中旬春季灌溉前的裸土期进行采样工作，共在两块试验区采集样本74个。土壤光谱反射率测定采用FieldSpec 4便携式地物光谱仪，其光谱波段探测范围可达350～2 500 nm。其中，350～1 000 nm分辨率为3.5 nm，1 000～1 500 nm分辨率为10 nm，1 500～2 100 nm分辨率为7 nm。选择天气晴朗无风无云的天气，每天12:00—16:00进行采集。测量前使用标准白板进行辐射定标，探头距地面50 cm，每个样点重复测量5次，取其平均值作为该样点的地面光谱反射率。对野外获取的原始光谱数据通过ViewSpec Pro软件进行整理与导出。为降低野外测量噪声及仪器边缘效应影响，剔除噪声较大的350～399 nm和2 401～2 500 nm波段，保留400～2 400 nm作为有效分析波段。随后，采用Savitzky-Golay滤波对有效波段光谱进行平滑处理，以提高光谱信噪比并保持光谱曲线的形态特征[9]。

1.2.2 土壤样本数据采集与处理

光谱数据测定后原位采集土壤样本，采样范围控制在光谱探头视场角覆盖区域附近，在测量点周围采用五点取样法采集0—20 cm深度土样，并充分混合后作为该测点的代表样品。在取样时记录采样点编号、坐标信息、土地利用类型和植被覆盖等信息，带回实验室，经剔除杂质、自然风干、研磨，过2 mm筛，采用外加热-重铬酸钾法测定有机质。

根据第二次全国土壤普查标准[17]，将SOM划分为6个等级（表1）。从表1可以看出，试验区SOM集中在“很缺乏”与“缺乏”两个等级，占总样本的94.6%，无中等以上含量样本，显示出试验区土壤有机质匮乏。3类样本变异系数均小于30%，样本分布呈中等离散状态，可以用于建模。

表1 各指标样本等级统计

Table 1 Statistics on sample levels of each indicator

指标	有机质含量/(g·kg^{-1})	等级	样本数	占比/%	平均值	最大值	最小值	标准差	变异系数C_V/%
SOM	<6	极缺乏	4	5.4	5.36	5.89	4.75	0.50	9.3
	6～10	很缺乏	35	47.3	8.15	9.89	6.07	0.99	12.2
	10～20	缺 乏	35	47.3	10.20	18.60	12.72	1.82	14.3
	20～30	中 等	0	—	—	—	—	—	—
	30～40	丰 富	0	—	—	—	—	—	—
	>40	很丰富	0	—	—	—	—	—	—

1.3 研究方法

1.3.1 分数阶微分变换

分数阶微分（fractional order derivative，FOD）作为一种先进信号处理工具，为高光谱数据处理提供了新思路[18]。目前，分数阶微分主要有3种定义形式，包括Grünwald-Letnikov，Riemann-Liouville和Caputo定义。Grünwald-Letnikov（GL）定义是将整数阶微积分的差分极限直接推广而来，适用于数值求解。本研究基于GL算法，采用公式（1）在Matlab 2016b中编程处理高光谱反射率数据，实现步长为0.25的0—2阶分数阶变换。

$$\frac{\mathrm{d}^{\alpha}f(x)}{\mathrm{d}x^{\alpha}}\approx f(x)+(-\alpha)f(x-1)+\frac{(-\alpha)(-\alpha+1)}{2}f(x-2)+\cdots+\frac{\tau(-\alpha+1)}{n!\ \tau(-\alpha+n+1)}f(x-n) \tag{1}$$

式中：x为自变量，α为阶数，τ为Gamma函数，n是微分上下限差，$\alpha=0.0$表示原始光谱，$\alpha=1.0$表示一阶微分，$\alpha=2.0$表示二阶微分。

1.3.2 连续小波变换

连续小波变换（continuous wavelet transform，CWT）是一种线性变换方法，应用一系列小波基函数对微分变换后光谱反射率数据进行内积运算，获取不同分解尺度和波长的小波变换系数，从而实现光谱数据的不同尺度分解[19]。计算公式如下：

$$\omega_{ij}=\int_{-\infty}^{+\infty}v_{ij}\varphi_{ab}(j)\mathrm{d}j \tag{2}$$

式中：ω_{ij}和v_{ij}分别表示第i个土壤样本的第j个波段的小波系数和反射率，a为尺度因子，b为平移因子，$v_{ij}\varphi_{ab}$代表小波基函数。

$$\varphi_{ab}(j)=\frac{1}{\sqrt{a}}\varphi\left(\frac{j-b}{a}\right) \tag{3}$$

CWT包含多种小波基函数，不同小波基函数及

尺度参数的选择会对光谱分解结果产生显著影响,因此需结合数据特性合理确定小波基函数及分解尺度。根据前人研究成果,本文选用Mexican hat(Mexh)小波基函数,并对各阶分数阶微分光谱分别进行连续小波变换,在2^1～2^6共6个尺度上提取小波特征用于后续分析[20]。

1.3.3　敏感波段筛选

采用皮尔逊相关系数(Pearson correlation coefficient, PCC)计算FOD处理、FOD_CWT处理后光谱数据与SOM的相关性及显著性。具体而言,PCC用于度量每个波段反射率与SOM的相关强度,其值范围为－1到1,正值表示正相关,负值表示负相关,绝对值越大表明相关性越强。以最大绝对相关系数为0.5,$p<0.05$显著条件为组合,进行初步敏感波段筛选。竞争自适应重加权采样(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)是一种基于偏最小二乘回归(PLS)回归系数的光谱特征选择方法,其核心思想是通过模拟"生物进化"的竞争淘汰过程筛选与目标变量贡献最大的波段[21]。具体步骤如下:先采用蒙特卡洛抽样随机抽取样本建立PLS模型,并以回归系数绝对值衡量各波段重要性;随后利用指数衰减函数逐步减少保留波段数量,并通过自适应重加权采样策略强化重要波段的保留概率;最终通过交叉验证计算均方根误差(RMSECV),选取最优波段子集。本研究每次随机抽取80%的样本建立PLS回归,自适应淘汰回归系数最低5%的波段。

1.3.4　光谱指数

光谱反射率波段两两组合计算形成对地表参量的有效度量[22],应用筛选到的显著波段组合计算光谱指数,指数具体计算公式见表2。

表2　光谱指数计算公式

Table 2　Spectral index calculation formulas

光谱指数	计算公式
比值指数[23]	$RI_{i,j}=\frac{R_i}{R_j}$
差值指数[23]	$DI_{i,j}=R_i-R_j$
归一化差异指数(NDI)[23]	$NDI_{i,j}=\frac{R_i-R_j}{R_i+R_j}$

注:i,j代表筛选得到的波段组合

1.3.5　机器学习模型与评价指标

(1)建模方法。为建立土壤光谱特征与土壤有机质之间的定量关系,本文采用多种机器学习方法构建土壤有机质估算模型。随机森林(random forest, RF)是一种基于集成学习思想的模型,因其强大的非线性建模能力与鲁棒性,被广泛应用于土壤盐分、有机质、水分等理化指标的估算[24]。极端梯度提升(extreme gradient boosting, XGBoost)是基于梯度提升决策树的集成学习算法,适用于处理高维小样本非线性建模任务,已成为土壤参数遥感反演与建模分析中的主流算法之一[25]。支持向量回归(support vector regression, SVR)在处理高维非线性光谱数据时兼具稳定性与精度优势,是构建土壤光谱反演模型的重要方法之一[16]。轻量级梯度提升机(light gradient boosting machine, LightGBM)能够有效处理光谱反射率、植被指数、环境因子等多源异质特征,具备较强的非线性建模能力与特征重要性解释性[26]。本文利用上述模型分别构建土壤电导率(EC)和土壤有机质(SOM)的光谱反演模型。上述模型均在PyCharm环境中完成,按照8∶2比例划分训练集和测试集,采用K折交叉验证以避免过拟合和信息泄露,通过贝叶斯优化确定关键参数。

(2)评价指标。为有效比较各个模型土壤SOM反演精度,计算各个模型的决定系数(R^2)、均方根误差(RMSE)以及平均绝对误差(MAE)进行综合评价。

2　结果与分析

2.1　微分变换光谱曲线特征分析

对原始高光谱反射数据进行步长为0.25的0—2阶微分变换,共计9阶。由图1可知,0阶光谱曲线特征较为明显,光谱反射率在0.02～0.8,在1 300 nm和1 800 nm附近出现反射峰,在1 400 nm和1 900 nm附近出现吸收谷;当分数阶次从0增加到1时,光谱曲线在400～1 400 nm间由平稳上升转为缓慢下降;1.25阶后光谱曲线基本不变。

2.2　分数阶微分变换与SOM相关性分析

采用FOD方法对0—2阶分数阶微分光谱与SOM进行皮尔逊相关分析,结果如表3所示。表3显示,随着微分阶次的增加,光谱反射率与SOM之间的最大绝对相关系数整体呈现先升高后降低的变化趋势,其中0.75阶微分光谱的相关性最高,其最大绝对相关系数达到0.699,对应的敏感波段位于1 996 nm。与原始光谱(0阶)、一阶和二阶微分结果相比,最大绝对相关系数分别提高了0.091,0.031,0.158。在显著相关波段数量及其比例方面,0.75阶在保持较高最大相关系数的同时,仍保留较大比例的显著相关波段,表明其在增强局部光谱特征的同时,能够较好维持与SOM相关信息的稳定性。

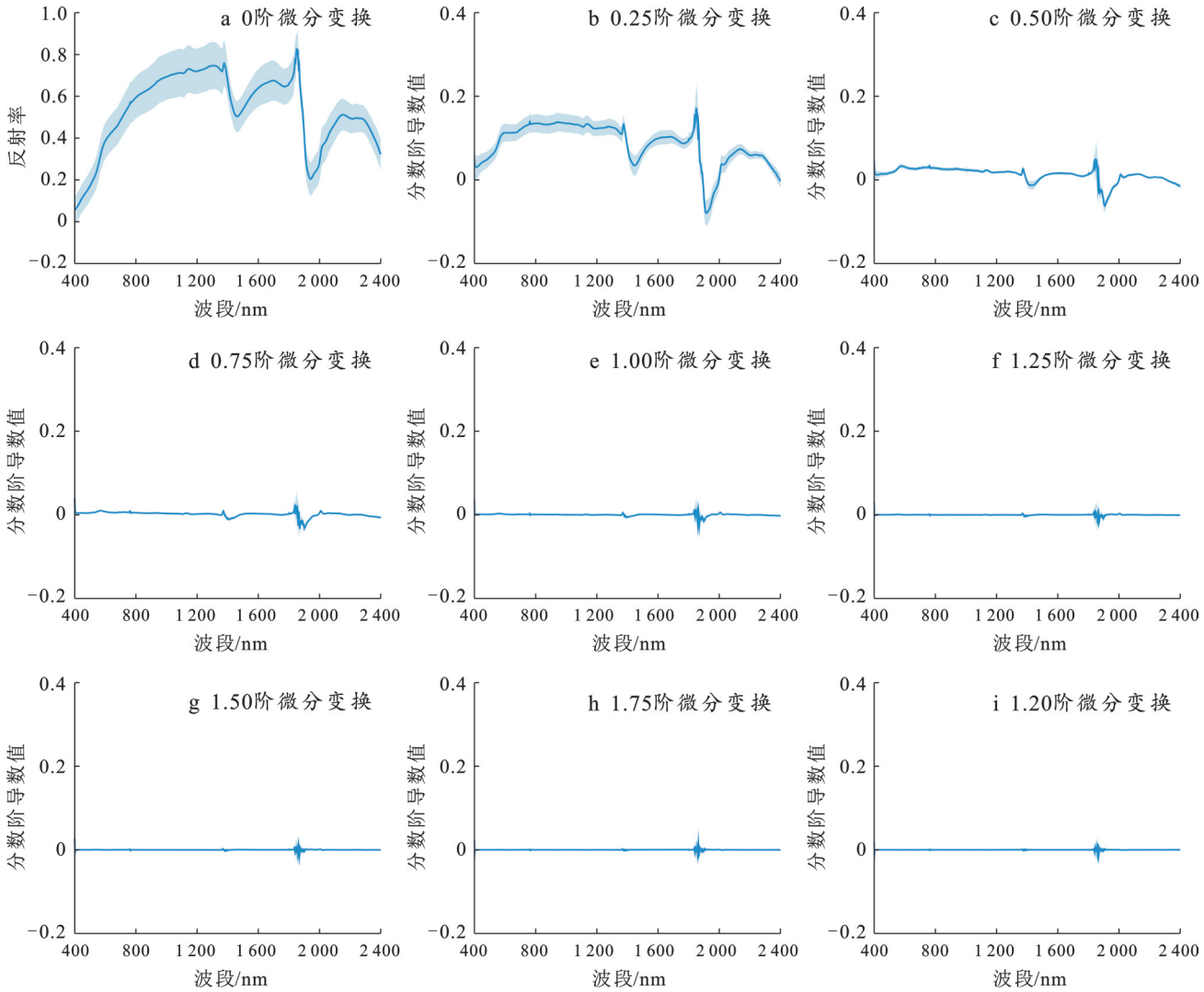


图 1 0—2 阶微分变换后光谱曲线

Fig.1 Spectral curves after 0—2 order differential transformation

2.3 多尺度连续小波变换与有机质相关性分析

为优选最佳 FOD 与 CWT 尺度组合，对每阶 FOD 结果做 6 个分解尺度的 Mexh 函数小波基变换，并对生成的小波系数与 SOM 进行相关性分析。由图 2 可知，相关性较高区域主要集中于 1 100 nm～1 700 nm 与 1 900 nm～2 300 nm 范围。从不同分解尺度来看，相关性差异较大，1—4 尺度变换后与 SOM 相关性不明显，第 5，6 尺度变换后相关性明显优于其他尺度，且 CWT 的 5，6 尺度相关性较高区域集中分布在近红外和短波红外波段，这与李铠等[27]研究发现尺度为 1—10 时，中等分解尺度在特定光谱波段去除噪声，提高相关性方面最佳的结论一致。

图 3 统计了不同分数阶与尺度下的最大相关系数、最大相关波段及显著波段数量（$p<0.05$）。从相关性来看，与表 3 中经过 FOD 处理相比，经 FOD_CWT 处理后各阶光谱与 SOM 相关性均有所提升，各阶最大相关系数最高提高 0.197，表明 FOD_CWT 联合处理能增强光谱与土壤 SOM 之间的相关性。从图 3 中折线位置来看，相关性较高的波段主要集中在 750～1 000 nm 和 1 800～2 200 nm 波段范围内。

此外，就显著波段数量而言，经 FOD_CWT 联合处理后显著波段数量较 FOD 处理整体减少，说明联合 FOD_CWT 处理更突出与 SOM 密切相关的关键特征波段，使光谱特征更加集中。

在所有分数阶组合中，0.25 阶 FOD 与尺度为 2^5 的 CWT 组合表现最优，其最大相关系数为 0.726，较单一 FOD 处理，相关性提高 0.106，对应波段约为 1 900 nm，显著相关波段数量为 80 个。因此，本研究选取 FOD 的 0.25 阶、CWT 的 2^5 尺度作为最优组合，用 CARS 算法对其显著波段进行进一步筛选，以获取最具代表性的敏感波段。

2.4 特征波段筛选与光谱指数构建

采用 CARS 算法对 0.75 阶 FOD 结果、0.25 阶

FOD组合2^5尺度CWT光谱数据进行特征波段优选,以PLS回归系数的绝对值衡量波段重要性,逐步剔除贡献较小的变量。模型每次随机抽取80%的样本建立PLS回归,自适应淘汰回归系数最低5%的波段,优选关键波段用于构建光谱指数作为模型输入变量。根据表2公式,构建光谱指数见表4。

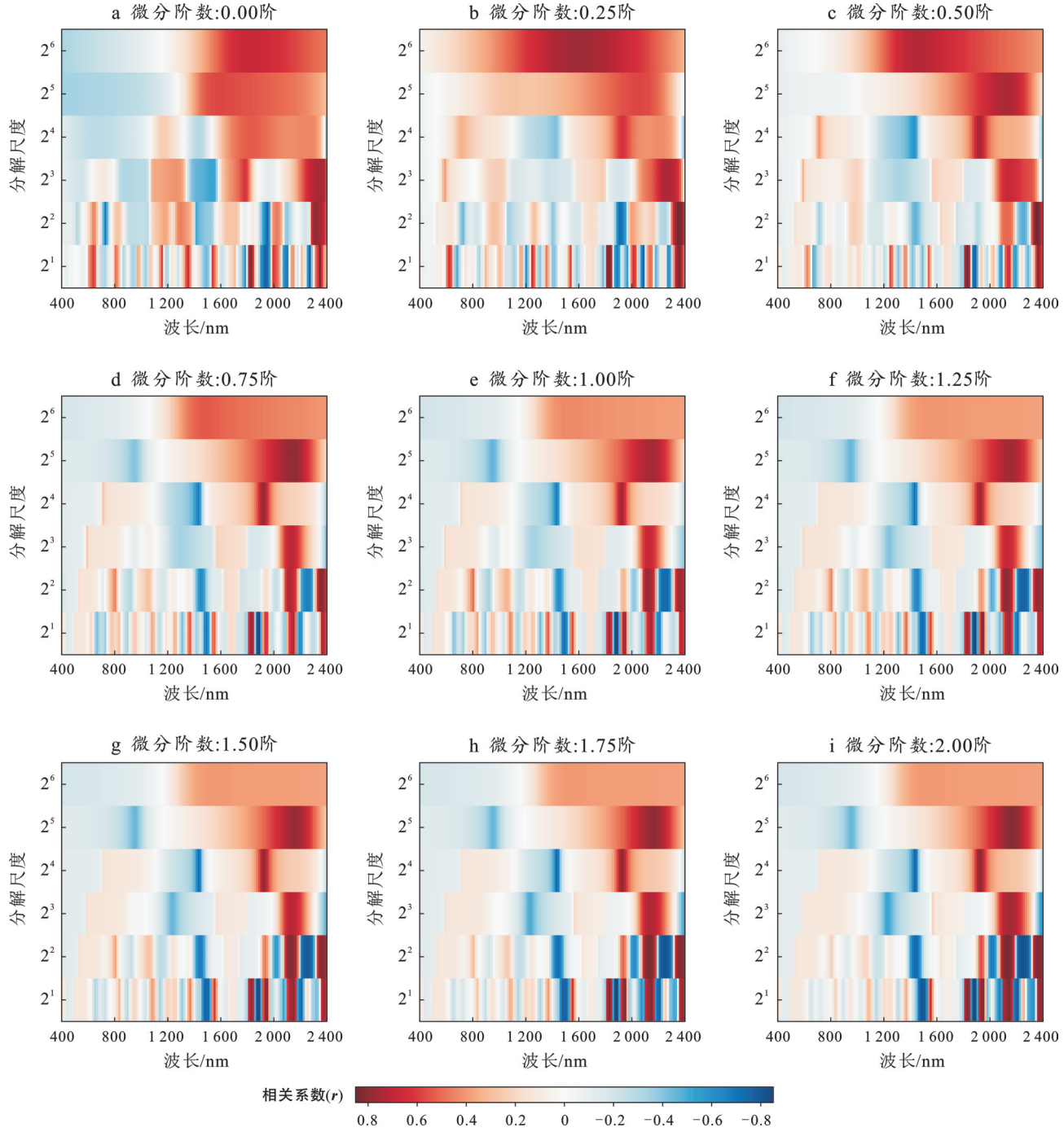


图2　0—2阶小波系数与土壤SOM含量相关系数

Fig.2　Correlation coefficients between 0—2 order wavelet coefficients and soil SOM content

2.5　SOM估算模型建立与验证

分别以FOD光谱指数,FOD_CWT光谱指数为自变量,SOM为因变量,构建基于RF,XGBoost,SVR和LightGBM的SOM估算模型,并进行精度验证。从表5可以看出,XGBoost模型在引入FOD_CWT特征后预测性能提升最为显著,测试集R^2提升0.128,RMSE和MAE分别降低0.388,0.15,表明FOD_CWT处理能够有效增强XGBoost模型对土壤有机质信息的表达能力;相比之下,RF模型在FOD_CWT处理后模型性能改善幅度有限;

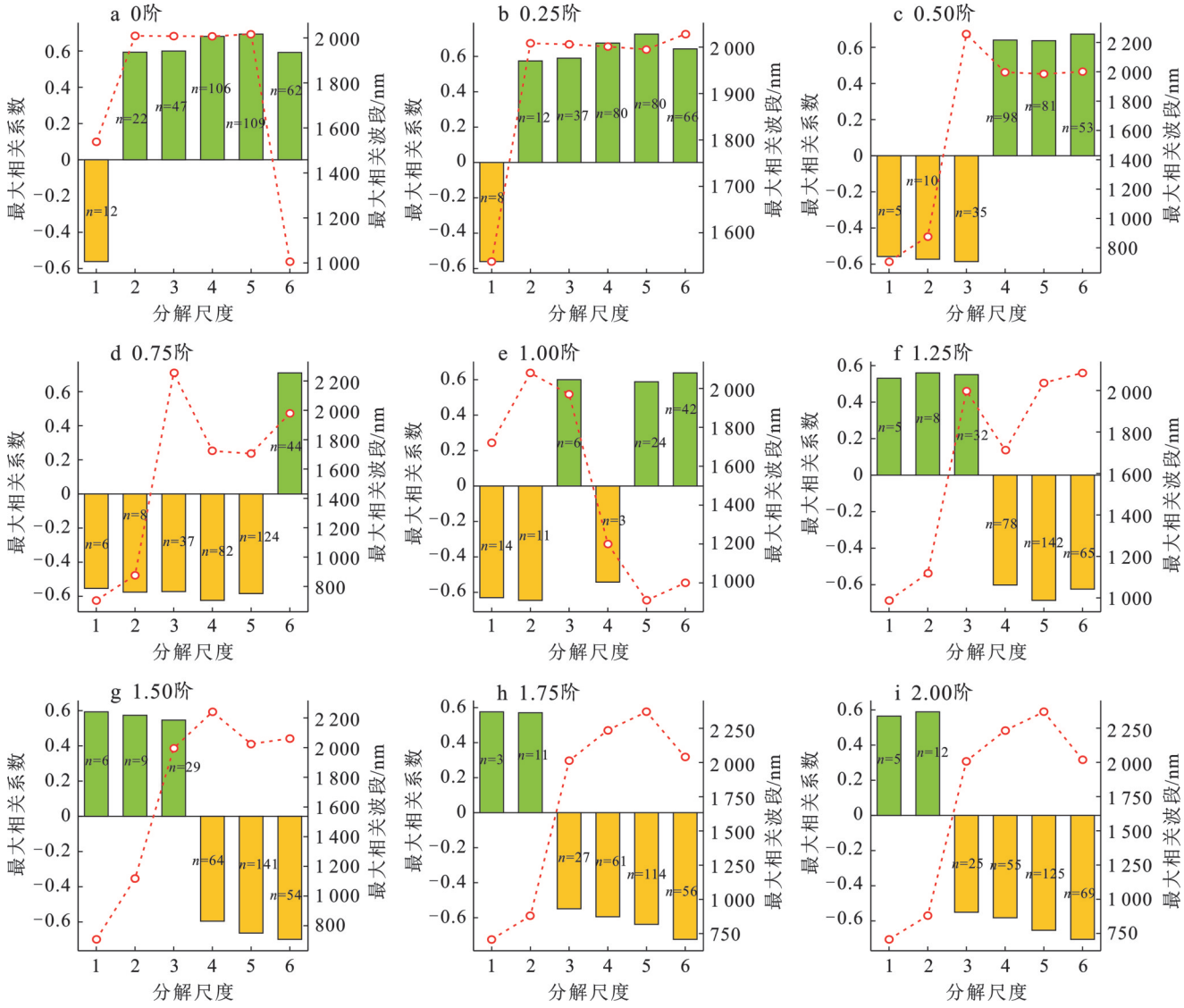
LightGBM 模型测试集 R^2 提高至 0.475，误差指标亦略有降低，整体提升不明显。对于 SVR 模型，FOD_CWT 处理并未带来明显优势，其测试集 R^2 由 0.645 小幅下降至 0.626，RMSE 与 MAE 变化较小，说明该模型对 FOD_CWT 特征的敏感性较弱。这可能与 FOD_CWT 特征在增强局部谱形与多尺度信息的同时，引入较强非线性与冗余特征有关，树模型对复杂特征空间的适应能力更强，而核方法模型对特征变换的稳定性相对敏感。在仅采用 FOD 特征时，SVR 模型在测试集上表现相对最优，而在引入 FOD_CWT 特征后，XGBoost 模型的综合性能最优。上述结果表明，FOD_CWT 处理对模型精度的提升具有明显的依赖性，其对树模型，尤其是 XGBoost 的促进作用更为显著。

表 3 分数阶微分与有机质相关系数最大值

Table 3 Maximum correlation coefficients between fractional-order derivatives and soil organic matter

微分阶数	|r|	对应波长/nm	显著波段数	显著相关波段比例/%
0	0.608	1 508	1 406	70.3
0.25	0.620	1 559	1 355	67.7
0.50	0.607	1 202	1 086	54.3
0.75	0.699	1 996	967	48.3
1	0.668	988	650	32.5
1.25	0.633	881	515	25.7
1.50	0.578	881	255	12.7
1.75	0.527	990	192	9.6
2.00	0.541	710	188	9.4

注：①|r|为最大绝对相关系数；②显著相关波段指通过显著性检验（$p<0.05$）的波段。



注：①分解尺度指连续小波变换分解尺度为 $2^1,2^2,2^3,2^4,2^5,2^6$；②n 为显著波段数量；③折线代表各分解尺度下最大相关波段出现的位置。

图 3 各尺度小波系数与 SOM 含量的相关性统计图

Fig.3 Statistical chart of correlation coefficients between wavelet coefficients at various scales and SOM

表4　用不同处理方式构建的光谱指数参数
Table 4　Parameters of spectral index constructed with different treatment methods

处理方式	光谱指数	波长1/nm	波长2/nm
FOD	RI	1 920	2 247
		1 156	2 247
		1 920	1 156
	DI	1 920	2 247
		1 156	2 247
		1 920	1 156
	NDI	1 920	2 247
		1 156	2 247
		1 920	1 156
FOD_CWT	RI	2 169	1 995
		878	1 995
		2 169	878
	DI	2 168	1 995
		878	1 995
		2 169	878
	NDI	2 169	1 995
		878	1 995
		878	1 995

为探讨不同机器学习模型对估算土壤SOM稳定性的影响,筛选最适合SOM估算的模型,对经过FOD处理和联合FOD_CWT处理后的4种机器学习模型的预测SOM值与实测SOM值进行拟合分析,并绘制散点图及95%置信区间(图4)。从图4a—4d可以看出,经过FOD处理后,SVR模型表现最佳,测试集置信区间最窄,表明其预测结果稳定性和可靠性较高。RF与LightGBM模型的精度和置信区间居中,XGBoost模型预测精度较高,但测试集拟合结果的置信区间相对较宽,其稳定性略低于SVR模型。相比之下,经过最优FOD_CWT组合处理后的结果(图4e—4h)显示,XGBoost模型测试集R^2提升至0.744,表现出最高的预测精度和较窄的置信区间,表明FOD_CWT_XGBoost模型对增强后的多尺度光谱特征响应最为敏感,在测试集上获得最高的预测精度,并兼顾较好的泛化能力,是本研究条件下较为适合开展SOM估算的模型。

3　讨　论

当前,高精度土壤SOM估算模型的建立主要以高光谱数据为数据源,然而光谱数据受到诸多因素影响,常出现噪声干扰与曲线畸变,因此,本研究联合FOD_CWT对光谱数据进行处理。结果显示,就单一FOD处理而言,0.75阶光谱反射率与SOM含量相关性最高,0.75阶后光谱信息被过度平滑。这表明适当分数阶微分优于原始和整数阶微分,体现了FOD处理光谱数据的优越性。潘昊等[28]与吴梦红等[29]的研究表明合理选取分数阶微分阶数在非线性特征增强方面的有效性,与此结论一致。引入FOD_CWT联合处理后,除了0.75阶,各阶经FOD_CWT处理后光谱与SOM的相关系数均较FOD阶段有所提升,证实FOD_CWT联合可显著放大SOM相关信号。不同微分阶数与小波变换尺度的组合对光谱特征增强效果存在明显差异。

表5　SOM估算模型训练集与测试集的精度
Table 5　Accuracy of SOM estimation models on training and test sets

处理方式	模型	训练集			测试集		
		R^2	RMSE	MAE	R^2	RMSE	MAE
FOD	RF	0.650	1.603	1.275	0.540	2.329	1.775
	XGBoost	0.760	1.326	0.939	0.616	2.127	1.555
	SVR	0.652	1.596	1.209	0.645	2.047	1.644
	LightGBM	0.436	2.033	1.642	0.443	2.562	1.932
FOD_CWT	RF	0.661	1.577	1.271	0.596	2.182	1.937
	XGBoost	0.748	1.360	1.010	0.744	1.739	1.405
	SVR	0.574	1.768	1.200	0.626	2.099	1.509
	LightGBM	0.566	1.784	1.434	0.475	2.488	1.845

因此,合理确定最优组合是提升模型精度与稳定性的重要条件。就最优组合尺度选取而言,0.25阶微分结合2^5尺度的组合表现最佳。此组合能有效增强与SOM相关的吸收特征,这样的组合能实现信噪比与有机特征幅度的同步增益,故该组合对SOM的敏感性最高。

从光谱信息增强机制来看,相较于单一数学变换方法,FOD_CWT能够同时刻画光谱曲线的局部

形态变化与多尺度结构特征，有助于缓解盐碱农田背景下水分与盐分对有机质弱光谱响应的掩盖效应，使SOM相关信息在复杂背景中更加突出。这表明，FOD与CWT的组合不仅能够提高光谱与SOM之间的统计相关性，而且在光谱特征表达层面增强了有机质弱响应信号的稳定性与可分离性。

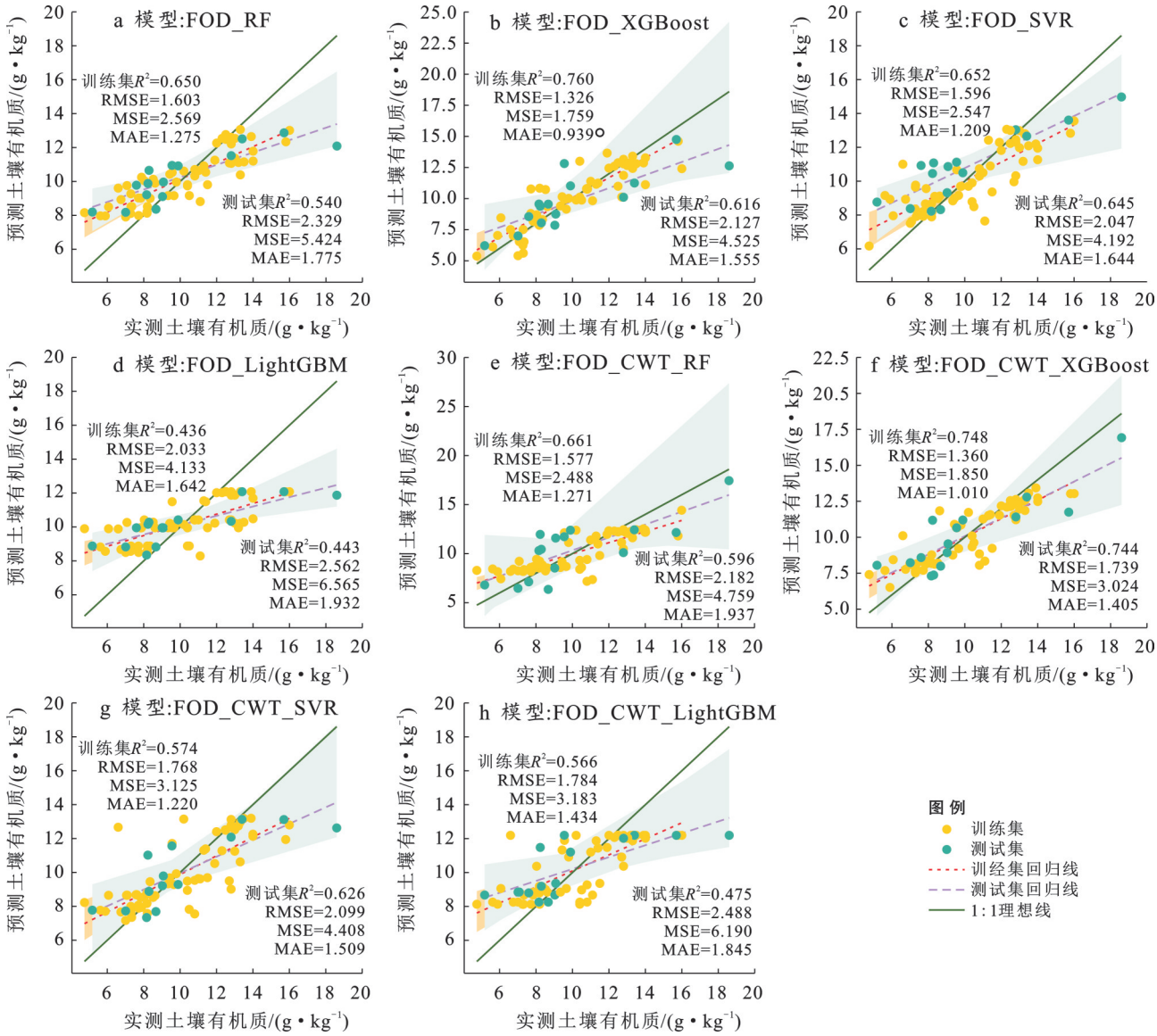


图4 FOD与FOD_CWT处理下SOM估算模型估算值和实测值散点图

Fig.4 Scatter plots of SOM estimation model-predicted values and measured values under FOD and FOD_CWT processing

为建立土壤光谱特征与土壤有机质之间的定量关系，以FOD光谱指数与FOD_CWT光谱指数作为机器学习模型输入特征，比较了4类机器学习模型用于土壤SOM含量估算的精度。结果表明，与单一FOD变换相比，联合处理后XGBoost模型受益最大，成为最优单模型。这是由于XGBoost在多维非线性特征拟合方面表现最为稳定，在小块农田中，其基于梯度提升的弱学习器集成机制，能自适应捕捉复杂的非线性关系，减少过拟合风险，提高模型的泛化能力[30]。LightGBM与RF也有提高，但对局部波段特征的敏感性略低；而SVR模型出现“负优化”，这是由于小波高频分量放大了SVR对异常支持向量的敏感度。已有研究指出，在样本数量较少、地物背景复杂的情况下，基于梯度提升框架的模型在高光谱反演中具有更优的鲁棒性与特征学习能力，再次证明FOD_CWT_XGBoost模型是区域尺度SOM高精度估算的可靠技术路径。

研究通过FOD_CWT结合光谱指数与机器学习模型的集成框架，表现出较强的稳定性与泛化能力，为复杂干旱区有机质的高精度反演与区域土壤质量监测提供了可靠参考方法。然而，本研究数据主要来源于地面高光谱测量，样本数量有限且空间覆盖

范围较小,可能导致模型的泛化能力受到一定限制。后续研究可结合无人机或卫星高光谱影像,实现从地面尺度向区域尺度的扩展与验证。

4　结　论

(1) FOD变换与土壤SOM的相关性最高者为0.75阶,较原始光谱、一阶与二阶相关性分别提升了0.091,0.031,0.158。这表明适当分数阶微分变换显著提升了光谱与SOM的相关性。

(2) FOD_CWT联合处理后,0.25阶FOD组合2^5尺度表现最优,相关系数达0.726,光谱在多尺度空间较单一的FOD处理表现出更优的稳定性与预测性能,估算模型整体R^2较FOD处理提升约0.05~0.128。这表明FOD与CWT结合可有效提取多频段光谱细节,改善模型的泛化能力。

(3) FOD_CWT_XGBoost组合的预测性能最优,测试集R^2达0.744,RMSE为1.739。这表明它适用于SOM估算,可为干旱区有机质高精度反演与区域土壤质量监测提供参考。

参考文献(References)

[1] 时鸣,史杨,林飞,等.土壤有机质遥感反演与制图研究进展[J].遥感技术与应用,2025,40(4):1052-1066.
Shi Ming, Shi Yang, Lin Fei, et al. Application progress and prospect of remote sensing technology in soil organic matter inversion and mapping [J]. Remote Sensing Technology and Application, 2025,40(4):1052-1066.

[2] 贾鲁净,杨联安,冀泳帆,等.卫星遥感反演土壤有机质研究进展[J].遥感信息,2023,38(2):1-9.
Jia Lujing, Yang Lian'an, Ji Yongfan, et al. Review on inversion of soil organic matter using satellite remote sensing [J]. Remote Sensing Information, 2023,38(2):1-9.

[3] 吴裕,申广荣,刘璐,等.土壤有机质高光谱特征及其反演研究[J].上海交通大学学报(农业科学版),2019,37(4):37-44.
Wu Yu, Shen Guangrong, Liu Lu, et al. Hyperspectral characteristics of soil organic matter and inversion methods [J]. Journal of Shanghai Jiaotong University (Agricultural Science), 2019,37(4):37-44.

[4] 王世芳,宋海燕.土壤有机质可见-近红外反射光谱特性研究[J].中国农业科技导报,2024,26(7):183-188.
Wang Shifang, Song Haiyan. Study on characteristics of visible and near infrared reflectance spectra of soil organic matter [J]. Journal of Agricultural Science and Technology, 2024,26(7):183-188.

[5] 刘锦盛,王世航,刘东,等.基于高光谱遥感和机器学习技术的黑龙江友谊县土壤有机质含量反演[J].土壤通报,2025,56(5):1212-1221.
Liu Jinsheng, Wang Shihang, Liu Dong, et al. Retrieval of soil organic matter contents in black soil region based on hyperspectral remote sensing and machine learning techniques [J]. Chinese Journal of Soil Science, 2025,56(5):1212-1221.

[6] 丁启东,王怡婧,张俊华,等.利用CARS算法联合协变量估算盐碱农田土壤水分和有机质含量[J].应用生态学报,2024,35(5):1321-1330.
Ding Qidong, Wang Yijing, Zhang Junhua, et al. Estimation of soil moisture and organic matter content in saline alkali farmland by using CARS algorithm combined with covariates [J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2024,35(5):1321-1330.

[7] 丁松滔,张霞,尚坤,等.基于分数阶微分的土壤重金属高光谱遥感图像反演[J].遥感学报,2023,27(9):2191-2205.
Ding Songtao, Zhang Xia, Shang Kun, et al. Estimating soil heavy metal from hyperspectral remote sensing images base on fractional order derivative [J]. Journal of Remote Sensing, 2023,27(9):2191-2205.

[8] 马瑜蔓,段博,徐宾灿,等.基于分数阶微分和无人机高光谱指数优选的油菜产量预测[J].农业工程学报,2025,41(10):166-175.
Ma Yuman, Duan Bo, Xu Bincan, et al. Rapeseed yield prediction based on fractional-order differentiation and UAV hyperspectral index optimization [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2025,41(10):166-175.

[9] 王怡婧,陈睿华,张俊华,等.基于分数阶微分技术的土壤水盐信息高光谱反演[J].应用生态学报,2023,34(5):1384-1394.
Wang Yijing, Chen Ruihua, Zhang Junhua, et al. Hyperspectral inversion of soil water and salt information based on fractional order derivative technology [J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2023,34(5):1384-1394.

[10] 刘佳琳,王飞,韩剑桥,等.基于分数阶微分的土壤含盐量光谱特征及定量估算研究[J].遥感技术与应用,2025,40(2):344-358.
Liu Jialin, Wang Fei, Han Jianqiao, et al. Study on spectral characteristics and quantitative estimation of soil salinity based on fractional order derivative [J]. Remote Sensing Technology and Application, 2025, 40(2): 344-358.

[11] 周磊,何秀芹,贾德伟,等.基于CWT-CARS的黄土高原东部陕州区农田表层有机碳含量高光谱反演[J].遥感技术与应用,2025,40(1):60-68.
Zhou Lei, He Xiuqin, Jia Dewei, et al. Hyperspectral retrieval of organic carbon content in farmland surface in Shanzhou District of eastern Loess Plateau based on CWT-CARS [J]. Remote Sensing Technology and

Application, 2025,40(1):60-68.

[12] 王凡,陈龙跃,段丹丹,等.小波分析的茶鲜叶全氮含量高光谱监测[J].光谱学与光谱分析,2022,42(10):3235-3242.
Wang Fan, Chen Longyue, Duan Dandan, et al. Estimation of total nitrogen content in fresh tea leaves based on wavelet analysis [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022,42(10):3235-3242.

[13] 郭艳萍,王雪梅,赵枫,等.基于最优数学和小波变换的绿洲耕层土壤盐分RF高光谱反演[J].农业工程学报,2025,41(3):83-93.
Guo Yanping, Wang Xuemei, Zhao Feng, et al. Hyperspectral inversion of the RF model for soil salinity in oasis tillage layer based on optimal mathematics and wavelet transform [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2025, 41(3): 83-93.

[14] 李泽昕,黄立超,王勇,等.基于分数阶微分与连续小波变换的冻结黑土含水率高光谱估算模型[J].节水灌溉,2025(9):95-104.
Li Zexin, Huang Lichao, Wang Yong, et al. A hyperspectral estimation model for frozen black soil moisture content based on fractional-order derivatives and continuous wavelet transform [J]. Water Saving Irrigation, 2025(9):95-104.

[15] 张笑寒,孟祥添,唐海涛,等.优化光谱输入量的土壤有机质随机森林预测模型[J].农业工程学报,2023,39(2):90-99.
Zhang Xiaohan, Meng Xiangtian, Tang Haitao, et al. Random forest prediction model for the soil organic matter with optimized spectral inputs [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2023,39(2):90-99.

[16] 龚明冲,汪泓,张磊,等.基于光谱指数与连续小波变换的土壤有机碳含量估算[J].激光与光电子学进展,2025,62(3):350-358.
Gong Mingchong, Wang Hong, Zhang Lei, et al. Estimation of soil organic carbon content based on spectral indices and continuous wavelet transform [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2025,62(3):350-358.

[17] 张俊华,尚天浩,陈睿华,等.基于光谱FOD与优化指数的银川平原土壤有机质含量反演[J].农业机械学报,2022,53(11):379-387.
Zhang Junhua, Shang Tianhao, Chen Ruihua, et al. Inversion of soil organic matter content in Yinchuan Plain using field spectral fractional-order derivatives combined with spectral optimization index [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2022,53(11):379-387.

[18] 张雨晴,赵起超,刘其悦,等.基于FOD和最优光谱特征的高光谱水质参数反演模型[J].光谱学与光谱分析,2025,45(3):842-851.
Zhang Yuqing, Zhao Qichao, Liu Qiyue, et al. Inversion model of hyperspectral water quality parameters based on FOD and optimal spectral characteristics [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2025, 45(3): 842-851.

[19] 安柏耸,王雪梅,黄晓宇,等.基于连续小波变换的土壤重金属镉含量的高光谱估测[J].地球与环境,2023,51(2):246-253.
An Bai Song, Wang Xuemei, Huang Xiaoyu, et al. Hyperspectral estimation of heavy metal cadmium content in soil based on continuous wavelet transform [J]. Earth and Environment, 2023,51(2):246-253.

[20] 玉米提·买明,王雪梅.连续小波变换的土壤有机质含量高光谱估测[J].光谱学与光谱分析,2022,42(4):1278-1284.
Yumiti Maimin, Wang Xuemei. Hyperspectral estimation of soil organic matter content based on continuous wavelet transformation [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022,42(4):1278-1284.

[21] 谷玲霄,方涛,杜林丹,等.基于CA/SPA-CARS算法的小麦条锈病特征波段优选与监测模型构建[J].农业机械学报,2025,56(6):487-498.
Gu Lingxiao, Fang Tao, Du Lindan, et al. Feature band selection and construction of monitoring model of wheat stripe rust based on CA/SPA-CARS algorithm [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2025,56(6):487-498.

[22] 张子鹏,丁建丽,王敬哲,等.利用三维光谱指数定量估算土壤有机质含量:以新疆艾比湖流域为例[J].光谱学与光谱分析,2020,40(5):1514-1522.
Zhang Zipeng, Ding Jianli, Wang Jingzhe, et al. Quantitative estimation of soil organic matter content using three-dimensional spectral index: A case study of the Ebinur Lake basin in Xinjiang [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020,40(5):1514-1522.

[23] 黄华雨,丁启东,张俊华,等.基于地面高光谱的宁夏银北地区农田不同土层盐碱化信息反演[J].应用生态学报,2024,35(11):3073-3084.
Huang Huayu, Ding Qidong, Zhang Junhua, et al. Ground-based hyperspectral inversion of salinization and alkalinization of different soil layers in farmland in Yinbei area, Ningxia, China [J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2024,35(11):3073-3084.

[24] 焦扬庆,张世文,颜芳,等.基于特征筛选与随机森林的土壤有机质空间预测[J].农业环境科学学报,2025,44(11):2864-2874.
Jiao Yangqing, Zhang Shiwen, Yan Fang, et al. Spatial prediction of soil organic matter based on feature screen-

ing and random forests [J]. Journal of Agro-Environment Science, 2025,44(11):2864-2874.

[25] 刘尊方,雷浩川,盛海彦.基于XGBoost模型的湟水流域耕地土壤养分遥感反演[J].干旱区地理,2023,46(10):1643-1653.
Liu Zunfang, Lei Haochuan, Sheng Haiyan. Remote sensing inversion of soil nutrient on farmland in Huangshui River basin based on XGBoost model [J]. Arid Land Geography, 2023,46(10):1643-1653.

[26] Lin Nan, Shao Xiaofan, Wu Huizhi, et al. Heavy metal concentration estimation for different farmland soils based on projection pursuit and LightGBM with hyperspectral images [J]. Sensors, 2024,24(10):3251.

[27] 李铠,常庆瑞,陈倩,等.基于连续小波变换耦合CARS算法的冬小麦冠层叶片含水量估算[J].麦类作物学报,2023,43(2):251-258.
Li Kai, Chang Qingrui, Chen Qian, et al. Estimation of water content in canopy leaf of winter wheat based on continuous wavelet transform coupled CARS algorithm [J]. Journal of Triticeae Crops, 2023,43(2):251-258.

[28] 潘昊,陈诗扬,李祎森,等.分数阶微分数据变换在滨海盐渍土盐分反演中的适用性[J].农业工程学报,2025,41(3):73-82.
Pan Hao, Chen Shiyang, Li Yisen, et al. Applicability of fractional-order differential transformation for salinization monitoring in coastal saline soils [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2025,41(3):73-82.

[29] 吴梦红,窦森,林楠,等.联合FOD-sCARS的土壤有机质高光谱机器学习估测模型[J].光谱学与光谱分析,2025,45(1):204-212.
Wu Menghong, Dou Sen, Lin Nan, et al. Hyperspectral estimation of soil organic matter based on FOD-sCARS and machine learning algorithm [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2025,45(1):204-212.

[30] 叶森,朱琳,刘旭东,等.基于连续小波变换、SHAP和XGBoost的土壤有机质含量高光谱反演[J].环境科学,2024,45(4):2280-2291.
Ye Miao, Zhu Lin, Liu Xudong, et al. Hyperspectral inversion of soil organic matter content based on continuous wavelet transform, SHAP, and XGBoost [J]. Environmental Science, 2024,45(4):2280-2291.

（上接第149页）

[32] 杨彦,于云江,魏伟伟,等.常州市浅层地下水重金属污染对城区、城郊居民健康风险评价[J].环境化学,2013,32(2):202-211.
Yang Yan, Yu Yunjiang, Wei Weiwei, et al. Health risk assessment of heavy metals in shallow groundwater in urban and suburban areas of Changzhou [J]. Environmental Chemistry, 2013,32(2):202-211.

[33] 段海静,申浩欣,彭超月,等.基于APCS-MLR模型的开封市公交站周边灰尘重金属源解析及健康风险评估[J].环境科学,2024,45(6):3502-3511.
Duan Haijing, Shen Haoxin, Peng Chaoyue, et al. Source apportionment and health risk assessment of heavy metals in dust around bus stops in Kaifeng City based on APCS-MLR model [J]. Environmental Science, 2024,45(6):3502-3511.

[34] 刘德新,孟凡磊,段海静,等.基于APCS-MLR和PMF的污灌与工业复合区农田土壤重金属来源解析[J].环境科学,2024,45(8):4812-4824.
Liu Dexin, Meng Fanlei, Duan Haijing, et al. Analysis of heavy metal sources in farmland soil of sewage irrigation and industrial complex area based on APCS-MLR and PMF [J]. Environmental Science, 2024,45(8):4812-4824.

[35] 罗静,王承军,刘小林,等.基于PCA-PMF模型的城乡结合部沉积物重金属源解析[J].环境科学与技术,2025,48(10):161-171.
Luo Jing, Wang Chengjun, Liu Xiaolin, et al. Source apportionment of heavy metal in sediments on urban-rural fringe based on PCA-PMF model [J]. Environmental Science & Technology, 2025,48(10):161-171.

[36] 王若师,许秋瑾,张娴,等.东江流域典型乡镇饮用水源地重金属污染健康风险评价[J].环境科学,2012,33(9):3083-3088.
Wang Ruoshi, Xu Qiujin, Zhang Xian, et al. Health risk assessment of heavy metals in typical township water sources in Dongjiang River basin [J]. Environmental Science, 2012,33(9):3083-3088.