

基于可见光谱的不同质地土壤有机质快速测定*

宋海燕¹ 秦刚² 韩小平¹ 刘海芹¹

(1. 山西农业大学工学院, 太谷 030801; 2. 山西农业大学林学院, 太谷 030801)

【摘要】 在可见光区域内对不同质地土壤(粘土、砂土、壤土)共156个样本的光谱特性进行了研究,并建立了不同质地土壤间有机质含量的互测模型。为了消除土壤质地对有机质含量预测的影响,引入了正交信号处理(OSC)谱图预处理方法。结果表明:粘土和壤土作为建模样本建立的土壤有机质偏最小二乘(PLS)和OSC-PLS校正模型的相关系数分别为0.809和0.823;砂土和壤土分别为0.837和0.734;粘土和砂土相应值分别为0.887和0.823。采用上述模型对另一质地土壤有机质含量进行预测,砂土的相关系数分别为0.572和0.864;粘土的相应值分别为0.555和0.540;壤土的相应值分别为0.643和0.721。预测效果说明OSC预处理可提高不同质地间土壤有机质的互预测能力。

关键词: 土壤有机质 测定 可见光谱 正交信号处理 偏最小二乘法

中图分类号: S152.3; O657.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2012)07-0069-04

Rapid Prediction of Soil Organic Matter by Using Visible Infrared Spectral Technology

Song Haiyan¹ Qin Gang² Han Xiaoping¹ Liu Haiqin¹

(1. College of Engineering, Shanxi Agricultural University, Taigu 030801, China

2. College of Forestry, Shanxi Agricultural University, Taigu 030801, China)

Abstract

A total of 156 soil samples with different textures (sand soil(51), clay soil(54) and land soil(51)) were collected, and the spectra of all soil samples were scanned with spectrophotometer (ASD FieldSpec3) from 325 to 2 500 nm. Orthogonal signal correction (OSC) was applied to eliminate the influence of the textures. Soil organic matter (SOM) prediction models of different textural soil samples were then obtained by using partial least square analysis (PLS) and OSC-PLS. The result showed that when the calibration sample was clay and land soil, the correlation coefficients of PLS and OSC-PLS model were 0.809 and 0.823; when the calibration sample was sand and land soil, the correlation coefficients were 0.837 and 0.734; and when the calibration sample was clay and sand soil, the correlation coefficients were 0.887 and 0.823, respectively. SOM content of another textural soil samples were predicted by using above models, the result showed that the predictive correlation coefficients of PLS and OSC-PLS to sand soil were 0.572 and 0.864; to clay soil were 0.555 and 0.540; and to land soil were 0.643 and 0.721, respectively. The results indicate that OSC can eliminate the influence of texture and improve the prediction precision and solidity of the model.

Key words Soil organic matter, Prediction, Visible spectra, Orthogonal signal correction, Partial least square

收稿日期: 2011-09-14 修回日期: 2011-10-10

* “十一五”国家科技支撑计划资助项目(2009BADB5B03)、山西省科技攻关项目(20100311066-5)和山西农业大学科技创新项目(2010011)

作者简介: 宋海燕, 副教授, 博士, 主要从事田间信息检测技术研究, E-mail: yybbao@163.com

引言

有机质是土壤的重要组成部分,是衡量土壤肥力的一个重要指标,它不仅能提供作物所需的各种营养元素,而且对土壤结构的形成及改善土壤物理性状有决定性的作用。因此,探测土壤有机质的含量是了解土壤肥力的重要途径。

随着传感器技术的不断发展,许多关于土壤信息传感器的研究相继出现,其中近红外光谱技术因其具有速度快、成本低和非破坏性等优点受到人们的重视。采用近红外光谱预测土壤中的有机质含量已成为国内外学者研究的重点^[1~5]。研究表明,在可见光区域内,550~700 nm 波段内土壤有机质有光谱响应^[6~9];土壤成分预测模型受土壤类型的影响^[10~12]。由于近红外区域内仪器和部件的结构、价格要比可见光区域内复杂和昂贵得多^[13],为此本文在可见光光谱范围内对不同质地的土壤进行研究,并分析土壤质地对有机质预测的影响。

1 材料与方法

1.1 土壤样本获取

本研究主要从山西省境内的关帝山、太谷五马河、山西农业大学试验田、右玉等地采集了3种不同类型的土壤,共156个样本,其中砂土为51个,粘土为54个,壤土为51个。将采回的样本在室内摊开,自然风干后,分成两部分,一部分经2.5 mm筛进行预处理用于光谱分析,另一部分用于实验室化学分析。用于化学分析的土壤样本,根据化学测量要求对其进行过筛处理,采用重铬酸钾法测得有机质质量分数的范围为0.670%~3.636%。

1.2 测量仪器及方法

试验使用ASD公司的FieldSpec3型光谱仪,波长范围为350~2500 nm,扫描获得样本的反射率。试验在室温为20℃左右的环境下进行,测量时将土壤样本置于直径为12.5 cm的培养皿中,并放入一自制的暗室内。光谱采集软件为Rs3标准软件包,数据分析软件为The UnscramblerX 10.1(CAMO AS Oslo, Norway), Matlab V7.0(The Math Works, Natick, USA)。

1.3 光谱预处理方法和定量分析方法选取

在近红外光谱分析中,光谱预处理是定性和定量分析的基础,光谱预处理方法对建立预测能力强、稳健性好的分析模型至关重要。考虑到常用谱图预处理方法只是对谱图本身数据进行处理,并未考虑浓度阵的影响,而正交信号处理(orthogonal signal correction,简称OSC)方法可以通过正交的数学方法

将光谱阵与浓度阵正交,滤除光谱与浓度阵不相关的正交主成分,最大量地保留与浓度阵信息有关的光谱特征。为此本研究选用该方法进行谱图预处理。

偏最小二乘(partial least square,简称PLS)可以将因子分析和回归分析相结合,是可见近红外光谱分析中使用最多和效果最好的一种方法^[14]。本文选用该方法建立土壤有机质的定量模型。

2 试验结果与分析

2.1 不同类型土壤可见吸收光谱特性

3类土壤(砂土、壤土和粘土)的可见光谱曲线如图1所示。从图中可以看出,3类土壤的谱图变化趋势基本一致,在波长600 nm左右有一吸收谷,在波长700 nm左右有一吸收峰且有交替出现的现象,为此本文主要在波长550~700 nm范围内进行研究。

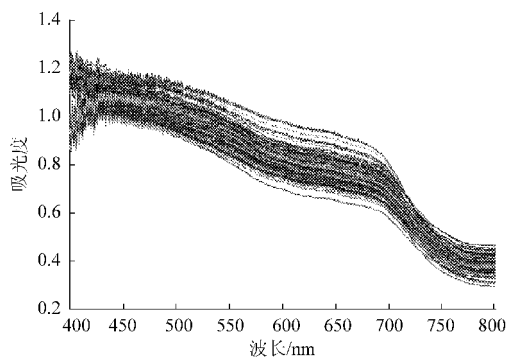


图1 不同质地土壤的可见光谱图

Fig.1 Visible spectra of different textural soil samples

2.2 OSC 谱图预处理

OSC有多种算法,其中常用的有:Wold S算法、Fearn算法、OSC算法和DO算法。DO算法是直接光谱阵与浓度阵正交来滤除无关的信号的方法,该方法算法简单,运行速度快,因此本文选用该方法,其运算步骤如下^[15]:①将原始校正集光谱阵 $X(n \times m)$ 和浓度阵 $Y(n \times 1)$ 进行标准化处理。②计算 $M = X'Y(Y'Y)^{-1}$ 。③计算 $Z = X - YM'$ 。④对 Z 进行主成分分析,取前 f 个需正交处理的得分矩阵 T_f 和载荷矩阵 P_f 。⑤计算新的 $T_{fnew}, T_{fnew} = XP_{f'}$ 。⑥计算 $X_{OD} = X - T_{fnew}P_{f'}$ 。⑦对于预测向量 X_{new} ,由载荷 P_f 求出校正后的光谱: $T = X_{new}P_{f'}$, $X'_{OD} = X_{new} - TP_{f'}$ 。

在用正交信号校正算法对光谱进行预处理时,光谱阵正交处理所用主因子数的选取非常重要。本文中的OSC预处理运行程序在Matlab环境中实现,正交主因子数的选取是根据累计贡献率来确定的,即选取累计贡献率达到85%以上所对应的因子数为最佳主因子数。

2.3 PLS 定量模型的建立

将上述 OSC 处理后的光谱数据分别选取砂土和壤土作为校正样本,粘土为预测样本;砂土和粘土作为校正样本,壤土为预测样本;粘土和壤土作为校

正样本,砂土为预测样本,在 UnscramblerX 10.1 的环境内建立 PLS 定量预测模型。表 1 分别为 OSC – PLS 模型、PLS 模型的统计参数和其对应的预测参数。

表 1 不同模型的校正样本和预测样本统计参数
Tab.1 Statistics of different models

模型	校正样本统计参数				预测样本统计参数		
	校正样本	相关系数	均方根误差	主成分数	预测样本	相关系数	均方根误差
PLS	粘土和砂土	0.887	2.495	4	壤土	0.643	3.630
	粘土和壤土	0.809	2.850	4	砂土	0.572	3.071
	砂土和壤土	0.837	2.216	4	粘土	0.555	3.550
OSC – PLS	粘土和砂土	0.823	3.165	3	壤土	0.721	2.867
	粘土和壤土	0.823	2.900	3	砂土	0.864	1.730
	砂土和壤土	0.734	2.823	2	粘土	0.540	3.752

综合考虑表 1 中的相关系数和均方根误差,可以看出 PLS 校正样本的统计参数要比 OSC – PLS 好,但从预测样本的相关系数和均方根误差来看,OSC – PLS 的预测效果要比 PLS 好。这是因为,土壤质地是指土壤中不同粒径矿物颗粒的组合状况,它不仅会影响土壤的蓄水能力从而影响谱图,而且土壤颗粒大小对土壤反射率也有显著影响。在建立 PLS 模型时,由于校正样本中不包括另一质地土壤的信息,因此其预测能力有所下降。另外,从主成分数上也可以看出,PLS 建模时选用的主成分数要比 OSC – PLS 多,这样很可能 PLS 在建模时将与质地有关的信息也作为一主成分加入到模型中,因此当用其预测另一质地的土壤样本时,其预测能力有所降低;当使用 OSC 校正后,OSC 可以通过正交的

方式将与浓度有关的信息保留,消除或减少了由土壤质地引起的信息,因此经 OSC 预处理后模型的预测能力和稳健性有所提高。由此可见,OSC 处理可以提高不同质地土壤之间有机质的预测精度。

3 结束语

在可见光区域内,对不同质地土壤的光谱特性进行了研究,并对土壤中的有机质含量进行了预测。为了消除或减少土壤质地对模型的影响,提高模型的预测精度和稳健性,引入了 OSC 谱图预处理方法。结果表明:经 OSC 谱图预处理后,不同土壤质地间土壤有机质的预测能力有所提高,这为消除土壤质地影响提高模型预测能力提供了借鉴,同时为土壤有机质可见光区域内传感器的设计提供了依据。

参 考 文 献

1 宋海燕,何勇. 基于 OSC 和 PLS 的土壤有机质近红外光谱测定[J]. 农业机械学报,2007,38(12):113 ~ 115,189.
Song Haiyan, He Yong. Near infrared determination of organic matter content in soils based on OSC and PLS [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2007, 38(12):113 ~ 115,189. (in Chinese)

2 蔡剑华,王先春,胡惟文. 基于 EMD 的土壤有机质含量近红外光谱检测[J]. 农业机械学报,2010,41(9):182 ~ 186.
Cai Jianhua, Wang Xianchun, Hu Weiwen. Near-infrared spectrum detection of soil organic matter content based on empirical mode decomposition [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2010, 41(9):182 ~ 186. (in Chinese)

3 Fidencio P H, Poppi R J, Andrade J C. Determination of organic matter in soils using radial basis function networks and near infrared spectroscopy [J]. Analytica Chimica Acta, 2002, 453(1):125 ~ 134.

4 Wetterlind J, Stenberg B, Söderström M. Increased sample point density in farm soil mapping by local calibration of visible and near infrared prediction models [J]. Geoderma, 2010, 156(3 ~ 4):152 ~ 160.

5 Volkan Bilgili A, van Es H M, Akbas F, et al. Visible-near infrared reflectance spectroscopy for assessment of soil properties in a semi-arid area of Turkey [J]. Journal of Arid Environments, 2010, 74(2):229 ~ 238.

6 沙晋明,陈鹏程,陈松林. 土壤有机质光谱响应特性研究[J]. 水土保持研究,2003,10(2):21 ~ 24.
Sha Jinming, Chen Pengcheng, Chen Songlin. Characteristics analysis of soil spectrum response resulted from organic material [J]. Research of Soil and Water Conservation, 2003, 10(2):21 ~ 24. (in Chinese)

- 7 刘炜,常庆瑞,郭曼,等. 土壤导数光谱小波去噪与有机质吸收特征提取[J]. 光谱学与光谱分析,2011,31(1):100~104.
Liu Wei, Chang Qingrui, Guo Man, et al. Extraction of first derivative spectrum features of soil organic matter via wavelet de-noising [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2011,31(1):100~104. (in Chinese)
- 8 Krishnan P, Alexander J D, Butler B J, et al. Reflectance technique for predicting soil organic matter [J]. Soil Science Society of America Journal, 1980, 44(6): 1 282~1 285.
- 9 Galvão L S, Vitorello Í. Variability of laboratory measured soil lines of soils from Southeastern Brazil [J]. Remote Sensing of Environment, 1998, 63(2): 166~181.
- 10 张焕军,张柏,张渊智,等. 基于反射光谱特性的土壤分类研究[J]. 光谱学与光谱分析,2008,28(3):624~628.
Zhang Huanjun, Zhang Bo, Zhang Yuanzhi, et al. Soil taxonomy on the basis of reflectance spectral characteristics [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(3):624~628. (in Chinese)
- 11 张娟娟,田永超,朱艳,等. 不同类型土壤的光谱特征及其有机质含量预测[J]. 中国农业科学,2009,42(9): 3 154~3 163.
Zhang Juanjuan, Tian Yongchao, Zhu Yan, et al. Spectral characteristics and estimation of organic matter contents of different soil types [J]. Scientia Agricultura Sinica, 2009, 42(9):3 154~3 163. (in Chinese)
- 12 张雪莲,李晓娜,武菊英,等. 不同类型土壤总氮的近红外光谱技术测定研究[J]. 光谱学与光谱分析,2010,30(4): 906~910.
Zhang Xuelian, Li Xiaona, Wu Juying, et al. Study on the determination of total nitrogen (TN) in different types of soil by near infrared spectroscopy (NIS) [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(4):906~910. (in Chinese)
- 13 李民赞. 基于可见光光谱分析的土壤参数分析[J]. 农业工程学报,2003,19(5):36~41.
Li Minzan. Evaluating soil parameters with visible spectroscopy [J]. Transactions of the CSAE, 2003, 19(5):36~41. (in Chinese)
- 14 刘飞,孙光明,何勇. 基于波长选择方法 Modeling Power 的黑木耳产地判别研究[J]. 光谱学与光谱分析,2010,30(1): 62~65.
Liu Fei, Sun Guangming, He Yong. Geographical origin discrimination of *Auricularia Auricula* using variable selection method of modeling power [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(1):62~65. (in Chinese)
- 15 褚小立,袁洪福,陆婉珍. 近红外分析中光谱预处理及波长选择方法进展与应用[J]. 化学进展,2004,16(4):528~542.
Chu Xiaoli, Yuan Hongfu, Lu Wanzhen. Progress and application of spectral data pretreatment and wavelength selection methods in NIR analytical technique [J]. Progress in Chemistry, 2004, 16(4):528~542. (in Chinese)

(上接第 62 页)

- 17 毛华明,朱仁俊,冯仰廉. 饲喂复合化学处理大麦秸颗粒对泌乳牛生产性能的影响[J]. 云南农业大学学报,1999, 14(2):167~170.
Mao Huaming, Zhu Renjun, Feng Yanglian. Effects on the performances of Holstein cows fed pelleted barley straw treated with urea and calcium hydroxide [J]. Journal of Yunnan Agricultural University, 1999, 14(2): 167~170. (in Chinese)
- 18 杨培岭,罗远培,石元春. 用粒径的重量分布表征的土壤分形特征[J]. 科学通报,1993,38(20):1 896~1 899.
Yang Peiling, Luo Yuanpei, Shi Yuanchun. Fractal features of soils characterized by the weight of particle size distribution [J]. Chinese Science Bulletin, 1993, 38(20):1 896~1 899. (in Chinese)
- 19 黄冠华,詹卫华. 土壤水分特征曲线的分形模拟[J]. 水科学进展,2002,13(1):55~60.
Huang Guanhua, Zhan Weihua. Modelling soil water retention curve with fractal theory [J]. Advances in Water Science, 2002, 13(1): 55~60. (in Chinese)
- 20 马爱生,刘思春,吕家珑,等. 黄土高原地区几种土壤的水分状况与能力水平[J]. 西北农林科技大学学报:自然科学版,2005,33(11):117~120.
Ma Aisheng, Liu Sichun, Lü Jialong, et al. Moisture characteristics and energy balance of several soils Loess Plateau [J]. Journal of Northwest A & F University: Natural Science Edition, 2005, 33(11): 117~120. (in Chinese)
- 21 解文艳,樊贵盛,周怀平,等. 秸秆还田方式对旱地玉米产量和水分利用效率的影响[J]. 农业机械学报,2011,42(11): 60~67.
Xie Wenyan, Fan Guisheng, Zhou Huaiping, et al. Effect of straw-incorporation on corn yield and water use efficiency in arid farming areas [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2011, 42(11):60~67. (in Chinese)