

# 基于修正系数法的抗水分干扰土壤有机质近红外预测模型研究

胡晓艳, 崔旭, 韩小平, 张志勇, 秦刚, 宋海燕\*

山西农业大学工学院, 山西 太谷 030801

**摘要** 土壤有机质(SOM)是植物生长必需的营养物质,也是土壤属性检测的重要参数。快速、高效地获取土壤有机质信息对精细农业的发展具有重要意义。近红外光谱技术具有快捷、低成本等优势,被应用到土壤有机质的测量中,然而土壤水分在近红外光谱(780~2 500 nm)中具有很强的吸收特性,对土壤有机质的检测形成了一定的干扰。分析了50个土样在不同含水率(约17%,15%,10%,5%和干土)下的近红外吸光度谱图特性,利用水分敏感波段2 210,1 415和1 929 nm构建了水分修正系数(MDI),并在此基础上对不同含水率土样进行了重构,以消除水分对土壤有机质预测模型的影响。结果如下:(1)经MDI校正重构后的吸光度谱图与对应的干土土样吸光度谱图相近,能较好地反映其干土土样的吸光度谱图特性。(2)采用偏最小二乘(PLS)法建立了干土土样的有机质定量预测模型,并对重构后的不同含水率土样进行了预测,其统计参数分别为:预测相关系数( $R_p$ )0.90,预测标准误差(SEP)0.802和预测均方根误差(RMSEP)1.09;与原始未经MDI校正的预测结果相比,相关系数上升了0.032,预测标准误差降低了0.113,预测均方根误差降低了0.25。结果表明,本研究提出的水分校正算法可以降低水分对土壤有机质预测的干扰,提高利用干土土样有机质定量预测模型预测不同含水率土样的精度,可为基于近红外光谱技术的土壤有机质实时测定技术的推广提供理论依据。

**关键词** 近红外光谱;土壤有机质;水分校正算法;偏最小二乘法

**中图分类号:** S152.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)04-1059-04

## 引言

土壤有机质(soil organic matter, SOM)是土壤环境质量的重要属性,是主要植物和微生物营养物质的重要来源<sup>[1]</sup>。利用近红外光谱(near infrared reflectance, NIR)预测土壤有机质含量对土壤质量快速评估和碳核算是非常重要的<sup>[2]</sup>。然而,NIR对外部环境条件非常敏感,土壤水分对近红外光谱的影响已被许多研究学者报道<sup>[3-7]</sup>。一些研究也提出了消除水分干扰的方法,Minasny<sup>[8]</sup>等和Ge<sup>[9]</sup>等利用外部参数正交化(EPO)算法去除水分对近红外光谱预测土壤有机碳含量的影响;Nuwan K Wijewardane<sup>[10]</sup>等提出了深度EPO算法,并用来去除水分对土壤Vis-NIR检测的影响;安晓飞<sup>[11]</sup>等提出通过水分吸收校正方法(PMAI)修正原始光谱数据,来消除土壤水分干扰;Bogrecki<sup>[4]</sup>等采用重建湿土光谱去除水分含量影响,结果表明可大大提高土壤碳素的预测能力;Ji<sup>[12-13]</sup>等提出可运用直接标准化算法(DS)来去除土壤表面水

分、环境光、温度等对土壤近红外光谱预测的影响。

本研究的目的是比较和分析不同含水率(17%,15%,10%和5%)和干土土样的吸光度光谱特性曲线;利用水分敏感波段构建水分修正系数,进而实现对不同含水率土样吸光度光谱特性曲线的重构;采用已建立的干土土壤有机质定量预测模型,估算重构后不同含水率土壤的有机质含量,最终实现减少或消除水分对基于光谱特性的土壤有机质定量预测模型的影响。

## 1 实验部分

### 1.1 样本

在山西省晋中、太原和吕梁等地(34°34'—40°44'N和110°14'—114°33'E),分别采集了50个土壤类型为壤土的代表性样品。

样品经风干后分为两部分,一部分根据GB 9834—88标准化学方法进行土壤有机质含量的测量,得到有机质含量范

收稿日期:2018-03-08,修订日期:2018-08-12

基金项目:国家自然科学基金项目(41201294)和自走式荞麦联合收获机研发(2016YFD0701804)资助

作者简介:胡晓艳,女,1990年生,山西农业大学硕士研究生 e-mail: 531150281@qq.com

\* 通讯联系人 e-mail: yybbao@163.com

围为 0.402%~7.920%，平均值和标准差分别为 2.220% 和 1.22%。另一部分用于实验室光谱测量，所有待测样品先过 2.5 mm 的网筛，然后根据公式  $\theta_m = M_w/M_s \times 100$  配制不同含水量的土壤，其中  $\theta_m$  为含水率(%)； $M_w$  为水分质量； $M_s$  为烘箱干燥后土样的质量。具体步骤：(1)将过筛后的样品烘干，取 1 200 g 平均分为四份，分别置于 1 000 mL 烧杯；(2)将 51, 45, 30 和 15 mL 的水依次加入四份土样中，配制成含水率约为 17%，15%，10%和 5%的土样；(3)用保鲜膜密封烧杯；(4)摇动烧杯以保证水分扩散均匀；(5)密封 3 d 后测量所有土样的光谱。

### 1.2 光谱测量

光谱数据采集在室温下进行，所用仪器为 ASD Field-spec3 光谱仪(350~2 500 nm)。测量时，先采用三角尺将置于直径为 12.5 cm 培养皿中的土壤样本刮平，再放入自制的暗室(以确保没有外界因素的影响)内进行光谱反射率( $R$ )采集。每个样本在三个不同的方向进行测量，其夹角约 120°，每个角度反射光谱扫描 3 次，每个样品的总扫描量为 9 次，固定扫描时间为 0.1 s。光谱数据处理软件为 ViewSpec，经过均值(Mean)、拼接校正(Splice Correction)、反射率求对数(Log1/ $R$ )后得到横坐标为波长、纵坐标为吸光度的光谱图。

### 1.3 建模方法

偏最小二乘法(PLS)集成了压缩和回归步骤，可以选择连续正交因素，最大限度地提高预测变量和响应变量之间的协方差<sup>[14]</sup>。本研究在 780~2 500 nm 范围内建立了土壤有机质 PLS 预测模型，该方法是在 MATLAB2010Rb (The MathWorks, Inc., Natick, MA)中实现的。所建模型的统计参数包括校正相关系数( $R_c$ )和预测相关系数( $R_p$ )；校正标准误差(SEC)和预测标准误差(SEP)；校正均方根误差(RMSEC)和预测均方根误差(RMSEP)。一个好的模型应该具有较高的相关系数，较低的 RMSEC, SEP 和 RMSEP 值。

## 2 结果与讨论

### 2.1 不同含水率土壤样品的吸光度光谱特征

以有机质含量为 0.402%的土壤样品为例，该样品在不同含水率下的土壤吸光度光谱图如图 1 所示。

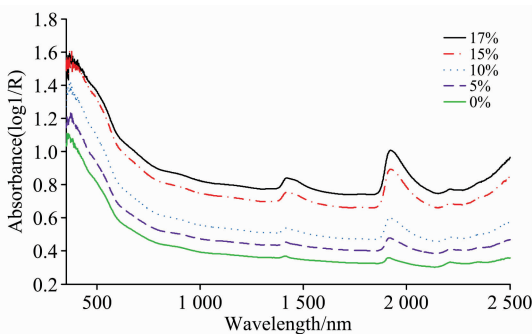


图 1 有机质含量为 0.402%的不同含水率土壤样品光谱图  
Fig. 1 Spectra of a soil sample with 0.402% SOM content under different moisture content

由图可知，所有样本都具有典型的土壤光谱特性曲线特

征，可见光波段吸光度较高，近红外波段较低。随着含水率的增加，其吸光度值明显增加，与 Minasny 等<sup>[8]</sup>的研究结论一致；在 1 400, 1 900 和 2 200 nm 附近有吸收峰，Bishop 等<sup>[15]</sup>也指出 1 400 和 1 900 nm 的吸收峰主要是由水分子中 O—H 键的振动引起，王世芳等<sup>[16]</sup>采用二维相关光谱分析也得出随着含水率的增加，在 1 480, 1 931 和 2 200 nm 附近有自相关峰产生。上述研究均表明水分会掩盖表征土壤有机质的光谱信息。

对不同含水率下的土壤样品进行主成分分析，PC1, PC2 和 PC3 的得分散点图如图 2 所示。由图可以看出，干土土样(含水量近似为 0%)明显不同于湿土样品(5%, 10%, 15%, 17%)分散点紧密集中在一起；含水率为 10%和 5%的土壤样品，虽然有个别样品不易分辨，但其总体规律仍存在；含水率为 17%和 15%的土壤样品，由于含水率相对较接近，很难区分。

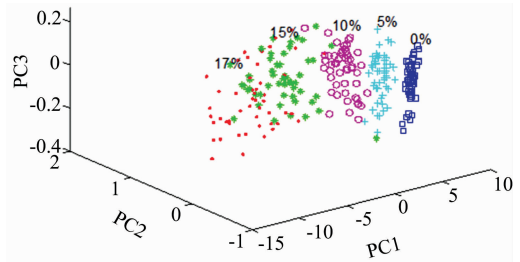


图 2 不同含水率下土壤样品主成分得分图

Fig. 2 Principal component score plot of soil samples under different moisture content

### 2.2 水分修正系数构建及重构谱图的实现

#### 2.2.1 水分修正系数构建

鉴于上述分析，采用 2 210, 1 415 和 1 929 nm 三个水分敏感波段构建水分修正系数(moisture determination index, MDI)。MDI 计算公式如(1)所示

$$MDI = \frac{(A_{\lambda 1415} + A_{\lambda 1929})}{A_{\lambda 2210}} \times \frac{(\sum A_{\lambda 1415} + \sum A_{\lambda 1929})}{\sum A_{\lambda 2210}} \quad (1)$$

其中： $A_{\lambda 1415}$ 是在 1 415 nm 的吸光度值， $A_{\lambda 1929}$ 是在 1 929 nm 的吸光度值， $A_{\lambda 2210}$ 是在 2 210 nm 的吸光度值。

通过式(1)可获得不同的 MDI 值。当土壤样品为风干样品时，其 MDI 值介于 0~1；当土壤样品含水率为 5%时，MDI 值介于 1~2.6 之间；土壤样品含水率为 10%时，MDI 值介于 2.6~2.88 之间；土壤样品含水率大于 15%时，其 MDI 值 > 2.88。

#### 2.2.2 重构谱图的实现

不同含水率土样的重构谱图实现方法见式(2)和式(3)

$$UWA_{\lambda} = \frac{(\sum (WSA_{\lambda} - DSA_{\lambda}))}{n} \quad (2)$$

$$RDSA_{\lambda} = WSA_{\lambda} - (MDI \times UWA_{\lambda}) \quad (3)$$

其中： $WSA_{\lambda}$ 是湿土即不同含水率土样的吸光度值； $DSA_{\lambda}$ 是干土吸光度值； $UWA_{\lambda}$ 是单位含水率，即单位百分比土壤样品的含水量； $RDSA_{\lambda}$ 是校正后的土壤吸光度值， $n$ 是样本数

量,  $i$  是土壤样本含水量百分比,  $\lambda$  是波长(780~2 500 nm)。

图 3(a)~(d) 分别为同一有机质含量的干土土样、不同含水率(5%, 10%, 15% 和 17%) 土样和经 MDI 校正重构后

土样的吸光度谱对照图。由图可见, MDI 校正重构后的土样吸光度谱更接近于干土土样, 说明 MDI 可消除或减少水分对土壤近红外光谱特性的影响。

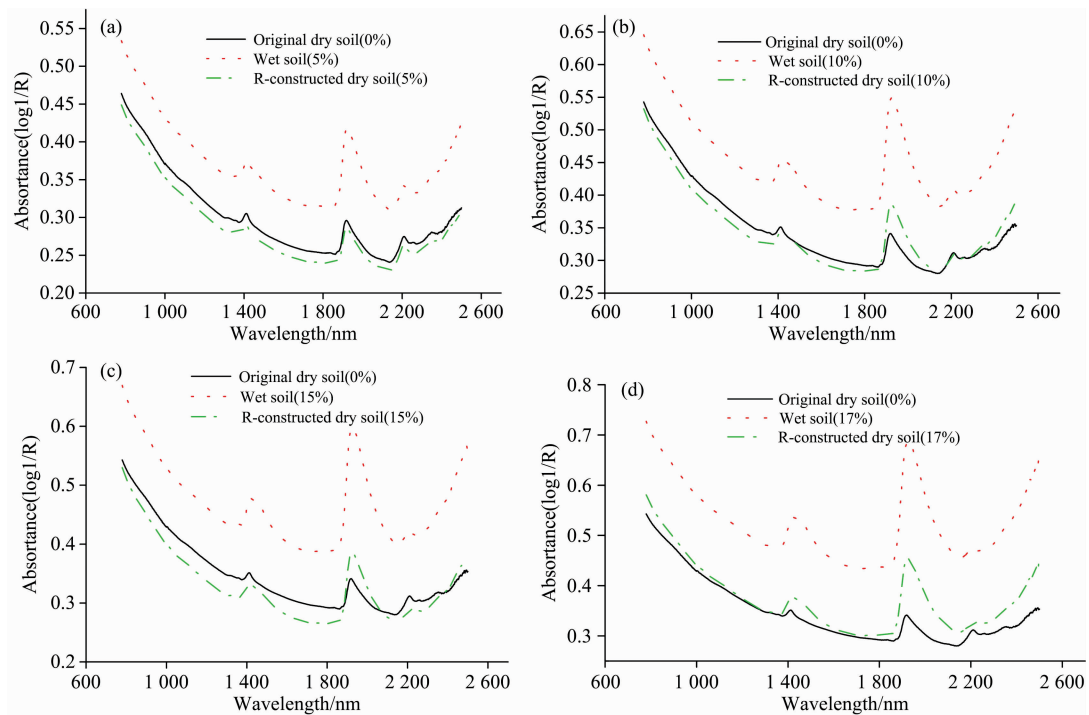


图 3 不同含水率土壤样品的校正光谱

(a): 5%; (b): 10%; (c): 15%; (d): 17%

Fig. 3 Spectra of reconstructed soil samples in different moisture content

(a): 5%; (b): 10%; (c): 15%; (d): 17%

### 2.3 PLS 模型预测

为了定量评价 MDI 校正算法, 在 780~2 500 nm 波段内建立了土壤有机质的 PLS 定量预测模型。建模样本为 41 个干土土样, 预测样本为 9 个土样在不同含水率(干土, 5%, 10%, 15% 和 17%) 下的 45 个样本。所建模型统计参数  $R_c$ , SEC, RMSEC 分别为 0.962, 0.358 5%, 和 0.383%, 校正样本实际值与预测值的相关特性曲线如图 4 所示。

的 SOM 含量进行了预测, 统计参数如表 1 所示。可以看出, 重构后的  $R_p$  值达到 0.9, 提高了 0.032; 预测 SEP 值降低了 0.113, RMSEP 值降低了 0.25。SEC 和 SEP, RMSEC 和 RMSEP 均比较接近, 模型具有较好的预测效果。表明 MDI 算法可以提高土壤有机质模型的预测精度。

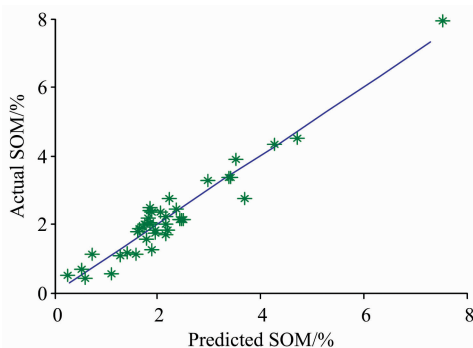


图 4 校正样本的预测值与实际值的相关性

Fig. 4 Predicted versus actual values of SOM for calibration samples

表 1 SOM 含量预测统计参数对比

Table 1 Statistical parameters of SOM content prediction for both the original and reconstructed soil spectra

Sample Set	$R_p$	SEP/%	RMSEP/%
Original soil spectra	0.868	0.915	1.340
reconstructed soil spectra	0.90	0.802	1.09

### 3 结论

提出了一种水分校正算法, 用于降低土壤水分对有机质含量预测的影响, 主要研究结论为:

(1) 分析了不同含水率土壤样品的吸光度光谱特性, 结果表明水分对土壤光谱特性影响较大, 随着水分含量的增加, 光谱吸光度值明显增加。

(2) 利用水分敏感波段 2 210, 1 415 和 1 929 nm 构建了水分修正系数 MDI, 并实现了不同含水率土样的谱图重构。

采用该模型分别对重构和原始的 45 个不同含水率样本

(3)建立了干土样本的土壤有机质定量预测模型,并对重构后不同含水率土样的有机质含量进行了预测,通过重构前后预测集参数  $R_p$ , SEP, RMSEP 的比较分析,得出 MDI

算法能够在一定程度上消除土壤水分对有机质预测的干扰,提高预测精度。

## References

- [ 1 ] Conforti M, Castrignanò A, Robustelli G, et al. *Catena*, 2015, 124: 60.
- [ 2 ] Christy C D. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2008, 61: 10.
- [ 3 ] Lobell D B, Asner G P. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 2002, 66(3): 722.
- [ 4 ] Bogrekcı I, Lee W S. *Transactions of the ASABE*, 2006, 49: 1175.
- [ 5 ] Minasny B, McBratney A B, Pichon L, et al. *Australian Journal of Soil Research*, 2009, 47: 664.
- [ 6 ] Brickleyer R S, Brown D J. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2010, 70: 209.
- [ 7 ] Kuang B, Mouazen A M. *Precision Agric.*, 2011, 12: 585.
- [ 8 ] Minasny B, McBratney A B, Bellon-Maurel V, et al. *Geoderma*, 2011, 167-168: 118.
- [ 9 ] Ge Y, Morgan C L S, Ackerson J P. *Geoderma*, 2014, 213: 61.
- [10] Nuwan K, Wijewardane, Yufeng Ge, et al. *Geoderma*, 2016, 267: 92.
- [11] An Xiaofei, Li Minzan, Zheng Lihua, et al. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2014, 112(c): 47.
- [12] Ji W, Li S, Chen S, et al. *Soil & Tillage Research*, 2016, 155: 492.
- [13] Ji W, Viscarra Rossel R A, Shi Z. *Eur J. Soil Sci.*, 2015, 66(3): 555.
- [14] Viscarra Rossel R A, T Behrens. *Geoderma*, 2010, 158: 46.
- [15] Bishop J L, Pieters C M, Edwards J O. *Clay Clay Miner.*, 1994, 42: 702.
- [16] WANG Shi-fang, CHENG Xu(王世芳, 程 旭). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2016, 36(10): 3249.

# Study on Soil Organic Matter Prediction Model Based on Moisture Correction Algorithm and Near Infrared Spectroscopy

HU Xiao-yan, CUI Xu, HAN Xiao-ping, ZHANG Zhi-yong, QIN Gang, SONG Hai-yan\*

College of Engineering, Shanxi Agricultural University, Taigu 030801, China

**Abstract** Soil organic matter (SOM) is a necessary nutrient for plant growth and an important parameter for Soil property detection. Rapid and efficient acquisition of soil organic matter information is of great importance to the development of fine agriculture. Near infrared spectrum technology, which has the advantages such as rapidness and low cost, is widely applied to the measurement of soil organic matter, however, the soil moisture in the near infrared spectrum (780~2 500 nm), has a strong absorption properties in detection of soil organic matter formed certain interference. This study analyzed the characteristics of near-infrared absorbance spectra of 50 soil samples at different moisture contents (about 17%, 15%, 10%, 5%, and dry soil), and constructed MDI (Moisture determination index) using moisture sensitive bands 2 210, 1 415, and 1 929 nm. On this basis, soil samples with different moisture contents were reconstructed to eliminate the effect of water on the prediction model of soil organic matter. The results are as follows: (1) the absorbance spectrogram after MDI correction and reconstruction is similar to the corresponding absorbance spectrogram of dry soil samples, which can reflect the characteristics of dry soil samples. (2) By using Partial least square (Partial further squares, PLS) method to establish the dry soil organic matter of soil sample quantitative prediction model, and the reconstruction after the soil samples obtained from different moisture content prediction, the statistical parameters are: prediction correlation coefficient ( $R_p$ ) 0.90, standard error (SEP) 0.802 and the root mean square prediction error (RMSEP) 1.09; Compared with the original prediction results without MDI correction, the correlation coefficient increased by 0.032, the prediction standard error decreased by 0.113, and the prediction root mean square error decreased by 0.25. Results showed that the moisture correction algorithm proposed in this study can reduce the moisture content of soil organic matter prediction of interference, improve the use of dry soil of soil organic matter quantitative prediction model to predict the precision of different moisture content of soil samples, can be based on near infrared spectrum technology spread and provide theoretical basis for real-time measurement of soil organic matter.

**Keywords** Near infrared reflectance spectroscopy; Soil organic matter; Moisture correction algorithm; Partial least squares

\* Corresponding author

(Received Mar. 8, 2018; accepted Aug. 12, 2018)