

基于 PLSR 的土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱特性

马 创¹, 申广荣², 杜宝明¹, 王紫君¹, 朱 赟¹, 刘春江^{1,2}

(1. 上海交通大学 低碳农业研究中心, 上海 200240; 2. 农业部都市农业(南方)重点实验室, 上海 200240)

摘 要: 为探究土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱特性, 对庐山土壤进行 VIS-NIR 光谱测试和响应特征分析, 分别使用相关性分析和逐步缩小采样间隔的方法确定了 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱响应最佳波段, 应用 PLSR 构建了 $\delta^{13}\text{C}$ 含量与光谱反射率的关系模型。结果表明: 土壤中的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量随着土壤海拔高度的增加而增加, 在同一海拔下 $\delta^{13}\text{C}$ 含量随土壤深度的增加而降低。 $\delta^{13}\text{C}$ 的光谱特性与有机质的光谱特性具有较好的一致性, 其光谱反射率均与 $\delta^{13}\text{C}$ 含量呈负相关关系; 580~800 nm 波段为 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的敏感波段, 在该波段所建模型优于以全波段的光谱反射率为自变量的关系模型。

关键词: $\delta^{13}\text{C}$ 含量; 光谱特性; 最佳波段; PLSR; 关系模型

中图分类号: S 127; S 153.6

文献标识码: A

Research of Spectral Feature on Soil $\delta^{13}\text{C}$ Concentration Based on PLSR

MA Chuang, SHEN Guang-rong, DUBao-ming, WANG Zi-jun, ZHU Yun, LIU Chun-jiang

(1. SJTU Research Center for Low Carbon Agriculture, Shanghai, 200240;

2. Key Laboratory of Urban Agriculture(South), Ministry of Agriculture, Shanghai 200240, China)

Abstract: In order to explore the spectral feature on soil $\delta^{13}\text{C}$ concentration, the spectral reflectance of Lushan soil was analyzed. The optimal band that spectral reflectance affected ^{13}C concentration was determined using method of correlation analysis and gradually narrowed the sample interval, on which the relationship model between ^{13}C concentration and spectral reflectance was constructed. Results showed that the $\delta^{13}\text{C}$ concentration of the soil increased with the altitude, decreased with the soil depth at the same altitude. The spectral reflectance was negatively correlated with $\delta^{13}\text{C}$ concentration especially at 580~800nm which is the sensitive band of $\delta^{13}\text{C}$ concentration and is in agreement with organic matter concentration. The relationship model of $\delta^{13}\text{C}$ concentration with sensitive band has higher precision than that with full band, which emphasized the importance of selecting sensitive band.

Key words: $\delta^{13}\text{C}$ concentration; spectral feature; optimal band; PLSR; relationship model

在陆生植物生态系统中, 土壤中 $\delta^{13}\text{C}$ 的含量通常高于植物, 生物地球化学过程中 $\delta^{13}\text{C}$ 和 ^{12}C 的不同分馏造成了这一现象^[1-2], 因此, 常借助碳同位素技

术进行有机碳相关方面的研究。在过去的 30 年中, C 同位素技术已经发展成为一个非常有用的方法, 它可以用来解释水分缺失对植物的影响^[3-4]、土壤中有

收稿日期: 2014-09-24

基金项目: 国防科工局项目(04-Y30B01-9001-12/15)

作者简介: 马 创(1989-), 男, 硕士生, 研究方向: 地物光谱响应及其相关特征建模反演, E-mail: machuangzj@163.com; 申广荣(1964-)为本文通讯作者, 女, 博士, 副教授, 硕士生导师, 研究方向: 地物光谱及 3s 技术应用研究, E-mail: sgrong@sztu.edu.cn

碳(SOC)的动态变化^[5-7]和气候演变过程^[8]。

$\delta^{13}\text{C}$ 是研究生态系统对气候变化的响应以及反演 C 通量的重要指标^[9-10]。 $\delta^{13}\text{C}$ 是 C 元素唯一可以稳定存在于自然界中的同位素,从某种程度上来说, $\delta^{13}\text{C}$ 含量的变化能直观的反应气候的变化情况,监测 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的变化是了解气候变化历史的重要手段。研究发现,植物叶片中的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量与生态系统的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量高度相关,在寒带混交林和禾本科苔原中由于长期的干冷气候导致了 $\delta^{13}\text{C}$ 的长期积累^[10]。传统的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的监测方法是在样地内取样后,置于实验室内进行测定。此方法费时费力,难以满足快速监测土壤中 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的要求。因此,探索 $\delta^{13}\text{C}$ 的快速无损监测方法对气候变化研究和有机碳的动态变化过程意义重大。

近年来,关于碳同位素 VIS-NIR 光谱特性的研究以有机质为主,期望通过有机质的敏感波段、吸收特征等光谱特性实现有机质含量的快速检测^[11-16]。已有研究表明,土壤的光谱不因有机质含量的增减出现吸收峰或吸收谷,光谱反射随着波长的增加整体呈现缓慢上升的趋势。光谱反射率随着有机质含量的增加呈下降趋势,而这一趋势在可见光波段更为明显。对不同类型的土壤研究发现 600~800 nm 是具有普适性的土壤有机质光谱响应最佳波段^[11-16]。在光谱分析及反演模型研究方面,因为偏最小二乘法回归(Partial Least Square Regression, PLSR)具有能够在自变量存在严重多重相关性的条件下进行回归建模和偏最小二乘回归模型更易于辨识系统信息与噪声等优势,被广泛应用于土壤属性、盐分含量、植物氮素含量等光谱反演模型的建立,取得了较好的模型精度^[17-20]。目前对于土壤中 $\delta^{13}\text{C}$ 的光谱特性及响应波段和 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的 PLSR 回归模型的研究还鲜见报道。

本文以采自庐山 4 个不同海拔高度 6 种不同深度的 72 个土壤样品作为研究对象,通过对 $\delta^{13}\text{C}$ 含量与光谱反射率的相关性分析和逐步减小采样间隔提取最佳波段,并在此基础上,应用 PLSR 算法分析研究区域内土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 光谱响应特征及其关系模型,为丰富土壤光谱数据库及其土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 普适性光谱模型的建立提供数据支持和参考。

1 材料与方法

1.1 试验区概况

研究区是位于江西省九江市的庐山自然保护区

(29°31' ~ 29°41'N, 115°51' ~ 116°07'E)。该区占地面积约 300 km²,海拔高度:50~1 474 m,是位于扬子江中下游平原中心处的独立山体。属于亚热带季风气候,平均年降水量(MAP)1 308~2 068 mm,年平均温度(MAT)11.6~17.1℃。

1.2 土样采集及 $\delta^{13}\text{C}$ 含量分析

在研究区内共选取 4 个样地,海拔高度依次为 219、405、780 和 1 268 m。每个海拔高度随机选择 3 个采样点(20 m×20 m),使用 2 cm 采样器分别采集 0~10、10~20、20~30、30~40、40~50、50~60 cm 的土样,并将每个深度的土样混合均匀,作为该样地的土样。

土样在室温下自然风干(水分含量 10%以下),用于化学分析的土样过 0.149 mm 筛后进行分析,光谱测试土样除去杂质后过 2 mm 筛。 $\delta^{13}\text{C}$ 的测定采用元素分析-稳定同位素质谱仪测定,测定工作在上海交通大学分析测试中心完成,结果按照偏离稳定同位素质谱的千分比表示,其计算方法如下:

$$\delta^{13}\text{C} = (\delta_{\text{样品}} / \delta_{\text{样品}} - 1) \times 1000\% \quad (1)$$

其中 $\delta_{\text{样品}}$ 和 $\delta_{\text{样品}}$ 分别表示样品和参考标准中 ^{13}C 与 ^{12}C 的比值。

表 1 采样点地理气候特征

Tab. 1 Features of geographical climate in different plots

地点 Location	海拔/m Altitude	平均降水量/mm MAP	平均温度/℃ MAT
通远 Tongyuan	219	1429	16.2
赛阳 Saiyang	405	1549	15.3
贝云庵 Beiyun	780	1794	13.6
仰天坪 Yangtianping	1628	2112	11.3

Note: MAT; mean annual temperature; MAP; mean annual precipitation

1.3 光谱数据测量

光谱测量在室内进行,光源是能够提供平行光的卤光灯,位于土样正上方 15 cm 处。探头视场角为 5°,探头垂直对准土样,距离约 15 cm,土样置于干净器皿中,器皿直径 10 cm,土样厚度 2 cm。光谱测量采用荷兰产的 AvaField-2 便携式高光谱地物波谱仪,其光谱响应范围 300~1 700 nm,在 300~1 040 nm 范围内采样间隔为 0.59 nm,在 1 040~1 700 nm 范围内采样间隔为 3.8 nm。每个土样采集 5 条光谱曲线,取平均值为土样的实际反射光谱数据。

1.4 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱响应模型的建立

敏感波段的获取是建立有效 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱响应模型的基础,本研究采用两种方法进行敏感波段

分析。

(1) 皮尔逊两两相关分析,选取较高相关系数和显著差异水平波段获得;

(2) 逐步缩小采样间隔的最佳波段分析方法获得最佳波段,即先调整光谱曲线的采样间隔使变量数目减少,筛选出部分较显著波段,然后再缩小采样间隔,再筛选,直至采样间隔变为原始采样间隔再终止。

关系模型的建立采用 PLSR 方法,PLSR 回归能很好的解决自变量之间具有很好的共线性的建模

问题,适用于此研究,使用 Simca - P 11. 5 实现。Simca - P 系列软件是 1987 年由伍德和他的和作者们开发的,它在 Windows 操作系统下运行,用以支持偏最小二乘回归的计算和结果解释。

2 结果与分析

2.1 土壤样品 $\delta^{13}\text{C}$ 含量统计分析

对 72 个土样的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量进行统计分析,其最大值、最小值、平均值等如表 2 所示:

表 2 $\delta^{13}\text{C}$ 含量统计分析
Tab. 2 Statistical analysis of $\delta^{13}\text{C}$ concentration

海拔高度/m Altitude	土壤深度/cm Soil depth	样本容量 Sample size	$\delta^{13}\text{C}$ 含量/% $\delta^{13}\text{C}$ concentration								
			0~4	4~10	10~20	20~30	30~40	40~50	50~60	60~70	>80
219	0 ~ 10	3	0	0	0	2	1	0	0	0	0
	10 ~ 20	3	0	0	3	0	0	0	0	0	0
	20 ~ 30	3	0	0	3	0	0	0	0	0	0
	30 ~ 40	3	0	1	2	0	0	0	0	0	0
	40 ~ 50	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0
	50 ~ 60	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0
405	0 ~ 10	3	0	0	0	2	0	1	0	0	0
	10 ~ 20	3	0	0	3	0	0	0	0	0	0
	20 ~ 30	3	0	1	2	0	0	0	0	0	0
	30 ~ 40	3	0	2	1	0	0	0	0	0	0
	40 ~ 50	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0
	50 ~ 60	3	2	1	0	0	0	0	0	0	0
780	0 ~ 10	3	0	0	0	0	1	1	1	0	0
	10 ~ 20	3	0	0	0	3	0	0	0	0	0
	20 ~ 30	3	0	0	1	2	0	0	0	0	0
	30 ~ 40	3	0	1	2	0	0	0	0	0	0
	40 ~ 50	3	0	2	1	0	0	0	0	0	0
	50 ~ 60	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0
1628	0 ~ 10	3	0	0	0	0	0	0	0	1	2
	10 ~ 20	3	0	0	0	0	0	0	2	1	0
	20 ~ 30	3	0	0	0	0	2	1	0	0	0
	30 ~ 40	3	0	0	0	2	1	0	0	0	0
	40 ~ 50	3	0	0	1	1	1	0	0	0	0
	50 ~ 60	3	0	0	3	0	0	0	0	0	0
合计 Total		72	2	20	22	12	6	3	3	2	2
		最大值 Maximum value	83.04	最小值 Minimum value	3.34	平均值 Average	22.13	标准差 Standard deviation	17.96		

从表中可以看出,随着海拔高度的增加土壤中 $\delta^{13}\text{C}$ 含量也在增加,而随着土壤深度的增加 $\delta^{13}\text{C}$ 含量则呈现下降趋势。

2.2 土壤光谱曲线特性分析

对 72 个土壤样品进行光谱测试后的光谱曲线

如图 1 所示,其中 a、b、c、d 分别代表 219、405、780 和 1 268 m 4 个海拔高度,1、2、3 分别代表每个海拔高度上的样地,0~60 cm 的土壤深度则用 10~60 的数字分别表示,曲线命名 a1-10 代表 219 m 海拔高度上样地 1 处 10 cm 土壤深度土壤的光谱曲线,

其他以此类推。

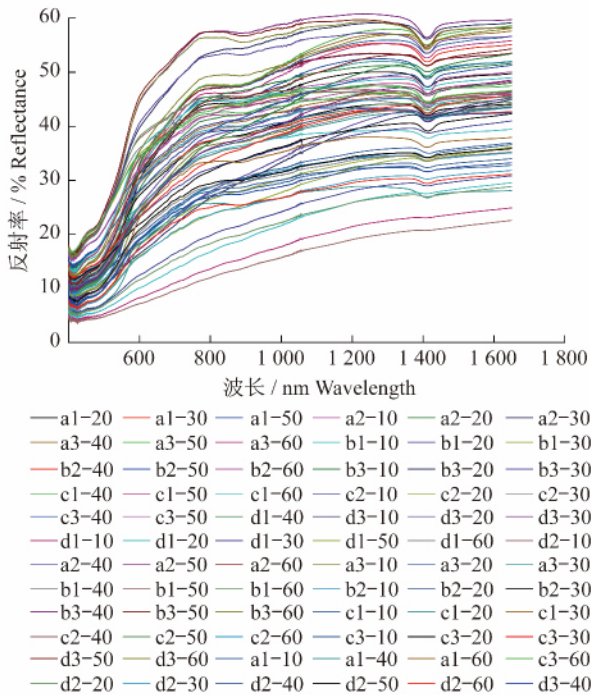


图 1 供试土样的 VIS-NIR 光谱曲线

Fig. 1 The VIS-NIR spectrum curve of tested soil samples

图 1 表明土壤的光谱曲线并没有因为 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的变化出现明显的波峰或波谷, 整个波段范围内

的反射率随着 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的升高而降低, 这一规律在可见光波段尤其明显, 这与现有研究中有机质含量的光谱特性具有一致性。直观的看, 光谱曲线在 600~800 nm 变化差异明显强于其他波段范围。光谱曲线在 1 415 nm 处出现了较明显的吸收谷, 这是由于土壤中有水的存在导致了这一吸收谷的产生, 这与现有研究中的结果相一致^[21-24]。

2.3 光谱反射率对 $\delta^{13}\text{C}$ 含量变化敏感度分析

通过分析发现, 土样的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量随着海拔高度的增加而增加, 相应地, $\delta^{13}\text{C}$ 含量越高的土壤其光谱曲线的反射率就更低。如图 2 所示, 对各个海拔高度的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量和光谱曲线求取平均值, 并绘制海拔高度与 $\delta^{13}\text{C}$ 含量及光谱反射率的关系图。 $\delta^{13}\text{C}$ 含量随着海拔高度的增加呈现上升趋势, 在 219 m 和 405 m 处出现微变, 219 m 海拔处的土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 含量略高于 405 m 处。但对于土壤的光谱曲线, 土壤光谱反射率随其 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的降低而升高。本研究中, 低海拔土壤的光谱曲线处在上方位置, 而 219 m 和 405 m 海拔处的土壤同样出现了微变, 219 m 处土壤的光谱曲线反倒位于 405 m 土壤下方。这说明 $\delta^{13}\text{C}$ 含量与光谱反射率呈负相关关系, 且两者的变化几乎同步, 光谱反射率对于 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的变化比较敏感。

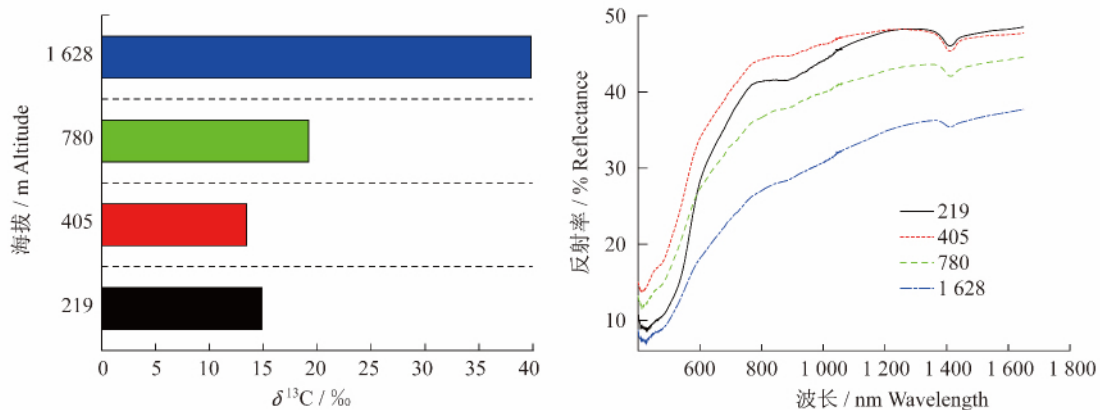


图 2 海拔高度与 $\delta^{13}\text{C}$ 含量及光谱反射率的关系

Fig. 2 The relationship between altitude and $\delta^{13}\text{C}$ spectral reflectance (the average for every altitude)

本研究中每个样地(不同海拔)选取了 6 个土壤深度, 为研究 $\delta^{13}\text{C}$ 含量随着土壤深度的变化特征, 采用 405 m 海拔高度的 3 个样地同一土壤深度的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量平均值进行分析。如图 3 土壤深度与 $\delta^{13}\text{C}$ 含量及光谱反射率的关系图所示, 左图 X 轴从下而上, 分别为 0~10、10~20、20~30、30~40、40~50 和 50~60 cm, $\delta^{13}\text{C}$ 含量依次减小, 其中 40~50 和 50~60 cm 变化幅度微小, 且 40~50 cm 稍低于 50

~60 cm。土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 含量随着土壤深度增加逐渐减小。右图中, 光谱曲线自下而上依次为 0~10、10~20、20~30、30~40、40~50 和 50~60 cm, 表明光谱反射率与 $\delta^{13}\text{C}$ 含量呈负相关关系。

2.4 土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 敏感波段分析

2.4.1 两两相关分析法提取敏感波段

为进一步建立土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 与其光谱反射率之间的关系模型, 对 $\delta^{13}\text{C}$ 的敏感波段进行分析。由于光

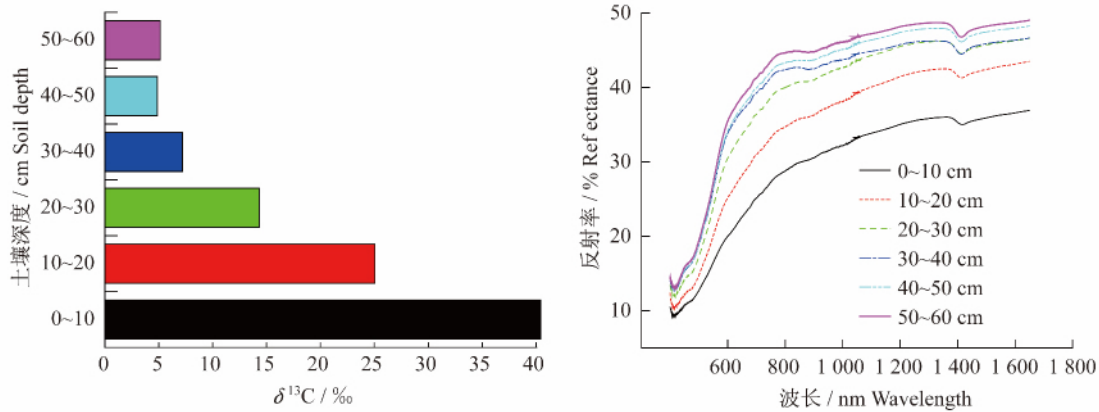


图 3 土壤深度与 $\delta^{13}\text{C}$ 含量及光谱反射率的关系

Fig. 3 The relationship between soil depth and $\delta^{13}\text{C}$, spectral reflectance

谱仪测量的波段范围为 300~1 700 nm,而实际测量中测得范围为 350~1 650 nm,在 350~400 nm 范围内,噪声干扰很大且出现了不同程度的光谱信息缺失,故在数据处理时去除不稳定和噪声大的波段范围。对 $\delta^{13}\text{C}$ 含量和 1 336 个波段的光谱反射率做两两相关分析,二者呈负相关关系,其中相关系数绝对值最大的范围出现在 580~800 nm 范围内。如图 4 所示,相关系数的绝对值从 350 nm 处逐渐增大,并在 620 nm 处达到最大值 0.810,而后逐渐下降。580~800 nm 的最佳波段范围与有机质敏感波段的研究结果相一致^[21-24],这是因为有机质主要由 C、N、O 等元素构成,而其中以 C 元素含量最多。 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的最佳波段应该与有机质含量表现出较好的一致性。自然界中碳元素含 2 种稳定同位素, $\delta^{13}\text{C}$:1.11‰, ^{12}C :98.89‰,比例大约为 89:1^[25]。

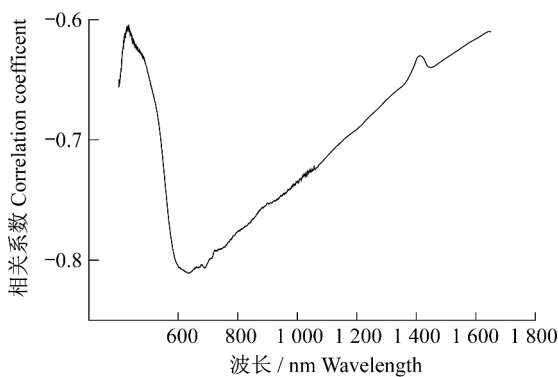


图 4 $\delta^{13}\text{C}$ 含量与光谱反射率的相关系数曲线

Fig. 4 The correlation coefficient curve of $\delta^{13}\text{C}$ and spectral reflectance

2.4.2 逐步减小采样间隔法提取最佳波段

对 $\delta^{13}\text{C}$ 含量和 1336 个波段的光谱反射率采用 1.4 中所述方法二进行最佳波段提取,结果如表 3

所示。使用该方法获得的最佳波段,更加具体且条带更窄,更易应用于建模过程中。所有波段均位于方法一得到的最佳波段(580~800 nm)范围内,从另一方面也证明了所用方法的可行性。

表 3 $\delta^{13}\text{C}$ 最佳光谱响应波段

Tab. 3 The sensitive band of $\delta^{13}\text{C}$

成分 Component	敏感波段 Sensitive bands	相关系数 Correlation coefficient
$\delta^{13}\text{C}$	635.92~637.64 nm	0.811**
	638.79 nm	0.811**
	639.94 nm	0.811**
	642.24 nm	0.811**

注: **表示极显著(P<0.01)。

Note: ** Indicates highly significant(P<0.01).

2.5 $\delta^{13}\text{C}$ 含量与光谱反射率关系模型建立

PLSR 是最近几年光谱分析中最常用、认可度也最高的方法。本研究中使用 PLSR 分别以敏感波段和全波段的光谱反射率数据为自变量, $\delta^{13}\text{C}$ 含量为因变量建立关系模型(表 3),其中建模样本容量为 48(其中 $\delta^{13}\text{C}$ 含量 0~3‰有 1 个,4‰~10‰有 14 个,10‰~20‰有 15 个,20‰~30‰有 8 个,30‰~40‰有 4 个,40‰~50‰有 2 个,50‰~60‰有 2 个,60‰~70‰有 1 个,>80‰有 1 个),验证样本容量为 24(其中 $\delta^{13}\text{C}$ 含量 0~3‰有 1 个,4‰~10‰有 6 个,10‰~20‰有 7 个,20‰~30‰有 4 个,30‰~40‰有 2 个,40‰~50‰有 1 个,50‰~60‰有 1 个,60‰~70‰有 1 个,>80‰有 1 个)。敏感波段的光谱反射率数据明显好于全波段,这是因为通过相关性分析剔除了相关性较差的波段,排除了过多对于模型的干扰。通过 PLSR 建立的关系

模型, R^2 达到了 0.892, 同时调整 R^2 (为了克服样本决定系数随自变量数目增加而增大的缺点, 我们把 R^2 给予适当的修正, 使得只有加入“有意义”的变量时, 经过修正的样本决定系数才会增加, 这才是所谓的自由度调整复决定系数, 也就是调整 R^2 [26]) 也达到了 0.882, 说明模型的精度较好。R3 也同时具有较小的 R^2 , 这是由于平均值降维的方法削减了自变量对于因变量 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的解释率。0.658 的 R^2 仍在可接受范围内, 何晓群等指出拟合优度并不是检验模型优劣的唯一标准, 有时为了使得模型从结构上有较合理的解释, 在 n 较大时, R^2 等于 0.7 左右也应该对回归模型给予肯定 [26]), 且该模型具有最小的自变量数目, 在实际应用中更易实现, 这说明逐步减小采样间隔提取最佳波段的方法能够被应用于更多的研究中。

表 4 $\delta^{13}\text{C}$ 含量与光谱反射率关系模型Tab. 4 The relationship model of $\delta^{13}\text{C}$ and spectral reflectance

模型 Model	Y 变量 Y variables	X 变量 X variables	变量数目 The number of variables	调整 R^2 Adjusted R^2	R^2
R1	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	敏感波段 1	388	0.882	0.892
R2	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	全波段	1336	0.703	0.712
R3	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	敏感波段 2	4	0.658	0.658
R4	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	敏感波段 2	1	0.653	0.658

2.6 模型的预测性检验

模型精度评价标准包括回归方程显著性水平, 均方根误差和相对误差。由表 3、4 可以看出, 以最佳波段 1 的反射率光谱为自变量构建的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量模型具有最高的决定系数, 最小的 RMSEC 和 RMSEV, 因此以最佳波段的反射率光谱为自变量建立的关系模型较为可靠的。

通过逐步减小采样间隔的方法得到的敏感波段 2, 在自变量数目上完全占优, 将自变量数目控制在 4 个和 1 个, 但同时也导致了 R^2 和调整 R^2 的降低以及 RMSEC 和 RMSEV 的升高。 R^2 、调整 R^2 、RMSEC 和 RMSEV 并不是判断模型精度的唯一标准, 图 5 是验证集的模型值与实测值相关图, R1、R2、R3、R4 四个模型的模型值与实测值的拟合直线的调整决定系数分别为 0.947、0.94、0.931、0.928。而四个模型的 RMSEC 和 RMSEV 均在较高水平,

调整决定系数大是由于建模数据中 $\delta^{13}\text{C}$ 含量多位于 4~30 区间, 很集中。

表 5 $\delta^{13}\text{C}$ 含量关系模型预测性检验结果Tab. 5 Forecasting test results of relationship models for $\delta^{13}\text{C}$

模型 Model	Y 变量 Y variables	X 变量 X variables	RMSEC	RMSEV
R1	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	敏感波段 1	0.295	4.9
R2	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	全波段	0.377	6.58
R3	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	敏感波段 2	0.459	5.38
R4	$\delta^{13}\text{C}$ 含量	敏感波段 2	3.47	5.36

注: RMSEC: 定标均根方差, RMSEV: 验证均根方差。

Note: RMSEC: Root mean square error of calibration; RMSEV: Root mean square error of validation.

验证数据集中这部分数据也很集中, 各数据点间间隔又小, 导致直线拟合时多以这部分数据为准, 而其他区间数据误差较大, 所以导致了调整决定系数高而 RMSEC 和 RMSEV 也高的原因。

3 结论与讨论

在可见光—近红外波段范围, 土壤反射率随着 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的升高而降低, 且在可见光波段尤为明显, 其光谱反射率均与 $\delta^{13}\text{C}$ 含量呈负相关关系。基于相关分析法和逐步减小采样间隔的方法分析得到的 $\delta^{13}\text{C}$ 敏感波段位于 580~800 nm 范围内, 表明土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 与有机质的光谱特性具有较好的一致性。基于逐步减小采样间隔的方法获得的敏感波段, 极大地降低了最佳波段数目, 为建立有效的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱响应模型奠定了基础。应用 PLSR 算法建立的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱响应模型, 以敏感波段的光谱反射率为自变量的关系模型, 精度优于以全波段的光谱反射率为自变量的关系模型, 凸显分析筛选敏感波段的重要性。

本研究采用的数据是供试土壤于室内测量的高光谱反射率数据, 数据测量环境稳定、确定的土壤类型、测量时间集中、仪器波长范围一定, 得到的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱特性及其基于 PLSR 方法建立的光谱响应模型有待更多不同土壤类型等条件的检验, 特别是野外检测, 外界土壤光谱的测试受外界环境水汽吸收影响较大, 需要考虑更多的因素。尽管如此, 本研究探索分析获得的 $\delta^{13}\text{C}$ 含量光谱特性及其相关模型可为进一步丰富和发展土壤 $\delta^{13}\text{C}$ 含量的光谱监测方法提供重要参考。

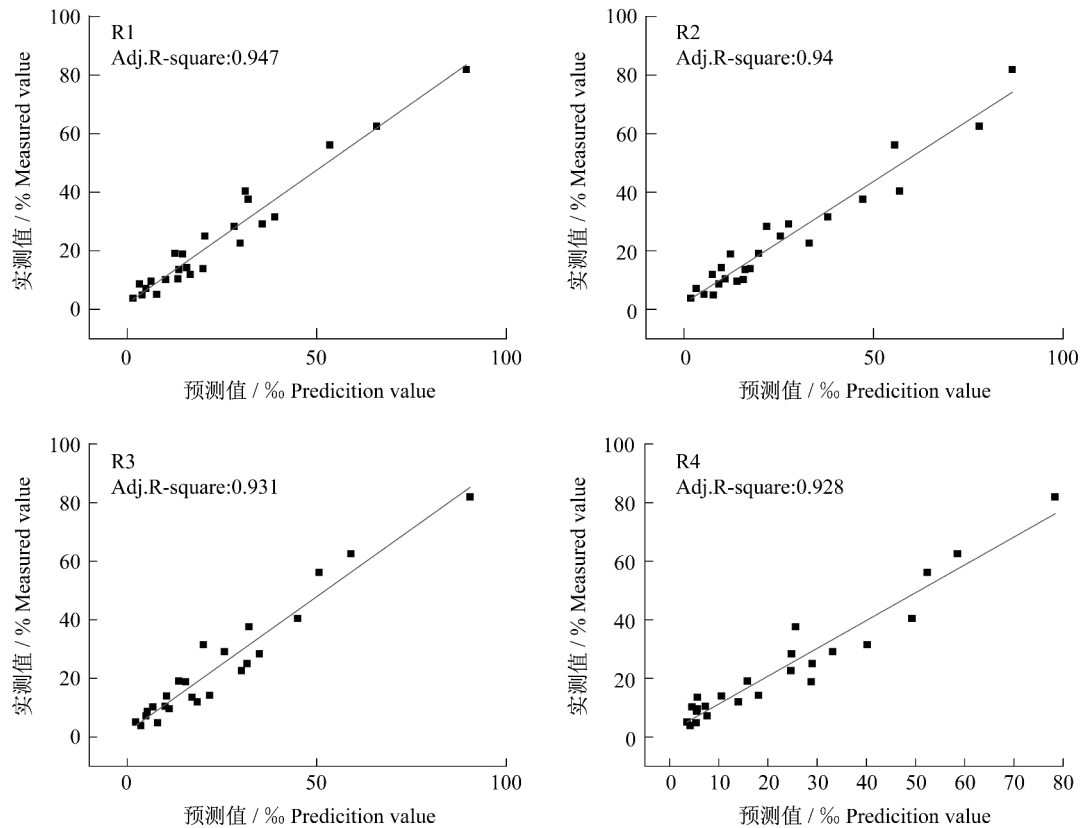


图5 验证集数据的模型值与实测值相关图

Fig. 5 Correlation diagram of model value and the measured value for validation data

参考文献:

- [1] Garten C T, Cooper L W, Post III W M, *et al.* Climate controls on forest soil C isotope ratios in the southern Appalachian mountains [J]. **Ecology**, 2000, 81: 1108-1119.
- [2] Bostrom B, Comstedt D, Ekblad A. Isotope fractionation and ^{13}C enrichment in soil profiles during the decomposition of soil organic matter [J]. **Oecologia**, 2007, 153: 89-98.
- [3] Gouveia A, Freitas H. Modulation of leaf attributes and water use efficiency in *Quercus suber* along a rainfall gradient [J]. **Trees**, 2009, 23: 267-275.
- [4] Hartman G, Danin A. Isotopic values of plants in relation to water availability in the Eastern Mediterranean region [J]. **Oecologia**, 2010, 162: 837-852.
- [5] Ehleringer J R, Buchmann N, Flanagan L B. Carbon isotope ratios in belowground carbon cycle processes [J]. **Ecological Applications**, 2000, 10: 412-422.
- [6] Bowling D R, Pataki D E, Randerson J T. Carbon isotopes in terrestrial ecosystem pools and CO_2 fluxes [J]. **New Phytologist**, 2008, 178: 24-40.
- [7] Chen P, Wang G, Han J, *et al.* ^{13}C difference between plants and soil organic matter along the eastern slope of Mount Gongga [J]. **Chinese Science Bulletin**, 2010, 1: 55-62.
- [8] Kohn MJ. Carbon isotope compositions of terrestrial C_3 plants as indicators of (paleo)ecology and (paleo)climate [J]. **Proc Natl Acad Sci U S A**, 2010, 107: 19691-19695.
- [9] Ito A. A global-scale simulation of the CO_2 exchange between the atmosphere and the terrestrial biosphere with a mechanistic model including stable carbon isotopes, 1953-1999 [J]. **Tellus B**, 2003, 55: 596-612.
- [10] Kaplan J O, Prentice I C, Buchmann N. The stable carbon isotope composition of the terrestrial biosphere; Modeling at scales from the leaf to the globe [J]. **Global Biogeochemical Cycles**, 2002, 16 (4): 8-1-8-11.
- [11] 张娟娟, 余华, 乔红波, 等. 基于高光谱特征的土壤有机质含量估测研究 [J]. **中国生态农业学报**, 2012, 20 (5): 566-572.
- [12] 于世凯, 姚艳敏, 王德营, 等. 基于高光谱的土壤有机质含量反演研究 [J]. **中国农学通报**, 2013, 29 (23): 146-152.

- [13] Conforti M, Buttafuoco G, Leone A P, *et al.* Studying the relationship between water-induced soil erosion and soil organic matter using Vis-NIR spectroscopy and geomorphological analysis: A case study in southern Italy [J]. *Catena*, 2013, 110: 44-58.
- [14] Tian Y, Zhang J, Yao X, *et al.* Laboratory assessment of three quantitative methods for estimating the organic matter content of soils in China based on visible/near-infrared reflectance spectra [J]. *Geoderma*, 2013, 202: 161-170.
- [15] 纪文君, 史舟, 周清, 等. 几种不同类型土壤的 VIS-NIR 光谱特性及有机质响应波段[J]. 红外与毫米波学报, 2012, 31(3): 277-282.
- [16] Obade Vincent de Paul, Vincent, LAL Rattan. Assessing land cover and soil quality by remote sensing and geographical information systems (GIS) [J]. *Catena*, 2013, 104: 77-92.
- [17] 翁永玲, 戚浩平, 方洪宾, 等. 基于 PLSR 方法的青海茶卡—共和盆地土壤盐分高光谱遥感反演[J]. 土壤学报, 2010, 47(6): 1255-1263.
- [18] 李晓明, 王曙光, 韩霁昌. 基于 PLSR 的陕北土壤盐分高光谱反演 [J]. 国土资源遥感, 2014, 26(3): 113-116.
- [19] 彭杰, 迟春明, 向红英, 等. 基于连续统去除法的土壤盐分含量反演研究 [J]. 土壤学报, 2014, 5(3): 459-469.
- [20] 李峰, Alchanatis V, 赵红, 等. 基于 PLSR 方法的马铃薯叶片氮素含量机载高光谱遥感反演[J]. 中国农业气象, 2014, 35(3): 338-343.
- [21] Stoner E R, Baumgardner M F. Characteristic variations in reflectance of surface soils [J]. *Soil Science Society of America Journal*, 1981, 45(6): 1161-1165.
- [22] 何挺, 王静, 陈焯. 土壤水分光谱特征研究[J]. 土壤学报, 2006, 43(6): 1027-103
- [23] 陈祯. 基于近红外光谱分析的土壤水分信息的提取和处理[D]. 武汉: 华中农业大学, 2010.
- [24] 何文寿, 刘阳春, 何进宇. 宁夏不同类型盐渍化土壤水溶盐含量与其电导率的关系[J]. 干旱地区农业研究, 2010, 28(1): 111-116.
- [25] <http://baike.baidu.com/link?url=HR2IqjArQ7jiyvtgFRhc4NBnKtLPMgkFxf1U2k7R0AFsuSk2MomjQ3tajWOvffHhTuWJeoPuSiaozeWaVyUiwK>, 碳 13[N/OL]. 百度百科.
- [26] 何晓群, 刘文卿. 应用回归分析[M]. 北京: 中国人民大学出版社, 2011: 133-134.