

次生盐渍土高光谱特征研究

朱 贇¹, 申广荣^{1,2,3}, 项巧巧^{1,3}, 吴 裕^{1,3}, 支月娥^{1,2}

(1. 上海交通大学 农业与生物学院, 上海 200240; 2. 农业部都市农业(南方)重点实验室, 上海 200240;
3. 国家林业局上海城市森林生态系统国家定位观测研究站, 上海 200240)

摘 要: 基于次生盐渍土修复过程中硝酸盐含量和同步实测光谱数据, 针对原始光谱数据及其不同变换后 7 种光谱数据集, 分别以相关系数极值和间隔偏最小二乘 2 种方法分析其最佳敏感波段范围。在此基础上, 运用偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)方法, 分别基于全波段(400~1 650 nm)和分析获得的最佳敏感波段建立了次生盐渍土壤 NO₃ 含量的光谱反演模型。结果表明, 采用 2 种方法提取的土壤最佳敏感波段, 均集中在 844.5 和 846.18 nm; 基于全波段与最佳敏感波段的土壤 NO₃ 含量光谱反演模型, 均以原始反射光谱经一阶微分处理的结果更为显著; 其中, 基于间隔偏最小二乘法提取的 775~899 和 1 025~1 149 nm 为最佳敏感波段的预测模型, 其决定系数 R_p^2 与标准差(root mean standard error of prediction, RMSEP)分别为 0.962 和 0.057。该研究结果可为今后次生盐渍土中硝酸盐含量的快速无损检测提供重要的科学参考。

关键词: 次生盐渍化土壤; 硝酸盐含量; 微生物修复; 光谱变换; 偏最小二乘法

中图分类号: S 15

文献标识码: A

Spectral characteristics of the secondary saline soil

ZHU Yun^{1,3}, SHEN Guang-rong^{1,2,3}, XIANG Qiao-qiao^{1,3}, WU Yu^{1,3}, ZHI Yue-e^{1,2}

(1. School of Agriculture and Biology, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China;
2. Key Laboratory of Urban Agriculture(South), Ministry of Agriculture, Shanghai 200240, China;
3. Shanghai Urban Forest Ecosystem Research Station of National Positioning and Observation, State Forestry Administration, Shanghai 200240, China)

Abstract: In this paper, the soil nitrate content(NO₃) and the associated spectral reflectance were measured and analysed during the microbial remediation of secondary saline soil. Extrema of correlation coefficients (ECE) and interval partial least squares regression (iPLS) methods were used to find out the optimal sensitive bands for nitrate content detection based on seven spectral data sets. On this basis, partial least squares regression (PLSR) was used to build relational models between nitrate content and spectral reflectance based on full bands (400 - 1 650 nm) and optimal sensitive bands, respectively. The results showed that the optimal sensitive spectral bands selected by two methods were concentrated on 844.5 and 846.18 nm. The Savitzky-Golay first derivative (SGFD) obtained more robust calibration and prediction accuracies than other pre-processing inversion models with respect to the PLSR predicting models of nitrate content based on full bands and optimal bands from two different ways. Among all of the seven spectral data sets, the prediction accuracy of SGFD in optimal bands (775 - 899 and 1 025 - 1 149 nm) was the best,

收稿日期: 2017-01-24

基金项目: 高分国土资源遥感应用示范系统(一期)项目(04-Y30B01-9001-12/15); 上海交大农工交叉项目(Agri-X2015004)

作者简介: 朱 贇(1991-), 女, 硕士生, 研究方向: 盐渍土的光谱特征;

申广荣(1965-)为本文通讯作者, 女, 副教授, 硕士生导师, 研究方向: 地物光谱分析, email: sgrong@sjtu.edu.cn

the corresponding R_p^2 and root mean standard error of prediction (RMSEP) of the predicted model were 0.962 and 0.057, respectively. The results of this study provided a significant scientific reference for the rapid and non-destructive detection of nitrate content in secondary saline soil in the future.

Key words: secondary saline soil; nitrate content; microbial remediation; pre-processing transformations of spectral; PLSR

土壤次生盐渍化是国内外的设施栽培中普遍存在的技术难题^[1]。在设施蔬菜生产过程中,由于人类不合理的灌溉、耕作栽培措施及大棚内高温高湿的环境等原因,促使盐离子随着水分逐渐上升并在地表积聚,土壤中盐分含量尤其是硝酸盐含量增加。土壤次生盐渍化的重要特征是土壤表层硝酸盐的积累,随着大棚使用年限的增加,盐分的积累越来越严重,传统理化实验测定土壤硝酸盐含量较为费时费力,而土壤光谱响应模式与土壤化学成分、物理性质等有着密切的关系,因此,应用高光谱技术便捷有效地对次生盐渍化土壤中硝酸根离子进行诊断、监测具有重要意义。

由于光谱数据的信息量较大,全波段光谱包含较多光谱变量,在建立校正模型前,进行最佳敏感波段选择以提高模型校正的速度和建模效率十分必要。已有许多盐渍土光谱特征及其敏感波段的分析研究^[2-6],但关于次生盐渍土硝酸盐含量的光谱分析还鲜见报道。现有研究大多基于食品中硝酸盐含量光谱数据的测定分析,如小松菜叶片的敏感波段范围为 677~967 nm^[7]、青菜叶柄的敏感波段范围为 560、902、884 和 906 nm^[8]、日本萝卜的敏感波段范围为 560~906 nm^[9]、菠菜中硝酸盐含量的最佳波段范围为 600~1 200 nm^[10]。选取最佳敏感波段采用的方法大多数为相关系数极值法^[8]和间隔偏最小二乘法^[10-12]。其中应用较多的间隔偏最小二乘法(interval partial least squares regression, iPLS) (Norgaard^[11]),是以偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)模型最终的预测结果作为最佳敏感波段选择标准,自变量之间的多重相关性在 PLSR 提取主因子的过程中得以消除,该方法能对模型预测能力有较明显

的改进,是获得性能更佳模型^[12]的一种方法。不同研究对象中硝酸盐含量的最佳敏感波段主要集中在可见光-近红外区域,而对于土壤中硝酸盐含量的光谱测定及其光谱特征的研究还有待深入分析研究。因此,定量地研究盐渍土中硝酸盐含量的光谱响应特性,分析其最佳敏感波段并建立土壤硝酸盐含量光谱反演模型具有重要的意义,是探索次生盐渍化土壤中硝酸盐含量快速、无损、有效地检测的重要内容。

本文结合次生盐渍化土壤微生物修复整个过程中同步实测的硝酸盐含量和光谱数据,通过对光谱数据变换分析,并进一步采用 iPLS 及相关系数极值法提取最佳敏感波段范围,在此基础上,利用 PLSR 建立土壤硝酸盐的光谱监测模型,为基于高光谱快速无损监测检测次生盐渍土中硝酸盐含量提供理论基础和技术支撑。

1 材料与方法

1.1 实验设计及材料

本研究供试土壤样品来源于上海市嘉定上海绿望蔬果合作社的 1-3-8 号设施栽培大棚(北纬 31°37',东经 121°14')。此大棚从该农民专业合作社 2011 年成立开始,一直种植蔬菜,由于施用肥料过多,自然淋洗少和不科学的管理措施等原因,土壤已呈现出次生盐渍化现象。在该研究区的土壤盐分中,阴离子以 NO_3^- 和 SO_4^{2-} 为主,其中, NO_3^- 占阴离子总量的 39%,其他的阴离子含量很少;阳离子以 Ca^{2+} 为主,占阳离子总量的 60%,余下的依次为 Na^+ 、 Mg^{2+} 和 K^+ ,其基本理化性质如表 1 所示。

表 1 供试土壤的基本理化性质

Tab. 1 The physico-chemical characteristics of the tested soil

指标 Indicator	pH	有机质 Organic matter	Ca^{2+}	Mg^{2+}	Na^+	K^+	NO_3^-	Cl^-	HCO_3^-	SO_4^{2-}
实测值 Measured value	7.440	26.850	2.104	0.625	0.649	0.132	0.714	0.385	0.107	0.629

施用对次生盐渍化土壤有较好改良和修复效果的菌株 NCT-2 (巨大芽孢杆菌, *Bacillus megaterium*)^[13] 制成微生物菌剂进行修复实验。土壤修复实验共设 4 个处理(对照、NCT-2 菌剂+常规施肥、秸秆粉+常规施肥和常规施肥), 每个处理设左、中和右 3 个重复, 采用的自然光照与耕作管理措施均与田间情况相同。在整个盐渍土的修复过程中, 同步进行次生盐渍土壤硝酸盐含量和高光谱的测定分析。

1.2 数据获取

1.2.1 土壤样本的采集与理化分析

土壤修复实验历经 74 d, 分别在种植上海青 (*Brassica chinensis* L.) 后的第 1 天(2014 年 11 月 12 日), 第 7、14、28、42、56 天及青菜收获前(2015 年 1 月 26 日), 进行土壤样品采样分析。采用“S”型土壤采样法, 采集各个样点 0~20 cm 的表层土壤, 每次采集 12 个土壤样本, 7 次共采集 84 个土样。带回实验室后自然风干, 经简单的处理后(除去一些杂草和石头, 手工磨碎), 过 100 目筛(0.15 mm), 装入编号的密封袋中, 分为 2 份, 一份用来测定土壤的理化指标, 另一份用来测定土壤的光谱。

盐分含量分析时按土水比=1:5 制备待测液, 浸提后, 参照《土壤农业化学分析方法》中分析方法分别测定 pH、电导率和可溶性盐离子 (Cl^- 、 SO_4^{2-} 、 HCO_3^- 、 CO_3^{2-} 、 Na^+ 、 K^+ 、 Mg^{2+} 和 Ca^{2+}) 含量; 土壤 NO_3^- 含量是通过称取 4 g 新鲜土壤置于 50 mL 三角瓶中, 用 2 mol/L 的 KCl 溶液浸提新鲜土样, 按土水比=1:5, 在 180 r/min、25 °C 的摇床上振荡 1 h 后静置, 过滤, 采用连续流动分析仪(AA3)测定。土壤样本在自然风干后(含水量均控制在 10% 以下)进行光谱测试, 以尽可能排除水分因素的影响, 保证离子含量对盐渍土光谱反射率影响的单一性及可靠性^[14-15]。

1.2.2 土壤样本的光谱数据测定

实验室光谱测定在暗室内进行, 使用的是荷兰 Avantes 公司生产的 AvaField-2 便携式高光谱地物波谱仪(野外光谱辐射仪), 该光谱仪光谱响应范围 350~1700 nm, 采样间隔在 350~1040 nm 范围为 0.59 nm, 在 1040~1700 nm 范围为 3.8 nm。将研磨后的土样置于直径 10 cm、深 2 cm 的培养皿中, 装满后, 采用直尺将其表面刮平。以 1000 W 的卤素灯作为光谱测量的光源, 调节光照角度使得灯光最亮处位于样品中央, 探头视场角为 5°, 探头垂于土样上方 15 cm。每个土壤样品测量前均进行白板校正, 各土样分别采集 5 条光谱曲线, 取其算术平均作为该土壤样品的反射率。

1.3 研究方法

1.3.1 光谱数据变换分析

本研究尝试了 34 种光谱变换对原始光谱数据进行分析, 选取了各个变换的全波段建模结果理想的变换用于进一步的分析。首先对原光谱数据及每一种变换分析后的光谱数据分别建立全波段 PLSR 预测模型, 然后将每一种变换对应的 PLSR 模型精度与原光谱数据对应的模型精度进行比较, 以模型的相关系数与决定系数显著提高, 标准偏差与标准差变小为评判基准^[16], 挑选模型精度提高的光谱变换进行下一步处理。本文选出的效果较好的光谱变换包括: 一阶微分(差分)(first derivative, FD)、一阶微分(S. Golay)(Savitzky-Golay first derivative, SGFD)、倒数(inverse of R , $1/R$)、对数(logarithm of R , $\text{Log}R$)、对数的倒数(inverse of $\text{Log}R$, $1/\text{Log}R$)、倒数的对数[logarithm of $1/R$, $\text{Log}(1/R)$]6 种光谱变换数据集^[16]。

1.3.2 最佳敏感波段分析

用偏最小二乘法建立盐渍土 NO_3^- 含量预测模型时, 全波段参加建模将有 1336 个波段的光谱反射率作为自变量, 最佳敏感波段的分析是建立有效土壤盐含量光谱反演模型的基础。

针对最佳变换光谱数据, 本文在最佳敏感波段的分析上尝试了 2 种不同的方法。第一种方法为相关系数极值提取法^[17](extrema of correlation coefficients, ECE), 即基于土壤 NO_3^- 含量与光谱反射的相关系数, 选定 NO_3^- 含量与光谱反射率之间相关系数曲线的波峰点(系数最高)的多个波段为最佳波段; 第二种方法为间隔偏最小二乘回归方法^[11], 它是将全波段光谱数据(共 1336 个数据点)等分为 k 个子区间($k=10, 20, 30$), 分别对每个子区间建立 NO_3^- 含量的 PLSR 模型, 以交叉验证均方根(root mean square error of cross-validation, RMSECV)的值越小, 对应校正模型的预测能力越好^[10]为标准, 得到每个间隔区间(10、20、30)下的最佳 2 个子区间内的波段范围为最佳敏感波段。

1.3.3 关系模型的建立及模型评价指标

首先对土壤样本进行预处理, 即建模集中异常样本的剔除和建模集样本的选取。所谓异常样本, 是指浓度标准值或光谱数据存在较大误差的样品。本研究将去除异常样本后的 77 个样本分为建模样本 51 个(2/3)和校正样本 26 个(1/3)^[4]。建模样本的选取采用含量梯度法, 即将样本集中的样品按 NO_3^- 含量值范围分为 8 个子范围, 然后统计落入各

个子范围内的样品数,最后在这些子范围内根据落入样品数的多少随机选取 51 个样本作为建模样本,剩余的 26 个样本作为校正样本。

偏最小二乘回归是将因子分析和回归分析相结合的方法,它不仅仅考虑因变量与自变量集合的回归建模,还采用成分提取的方法,在变量系统中提取对系统有最佳解释能力的新综合变量,再对它们进行回归建模^[18]。本文采用 PLSR 的建模方法对盐渍土中 NO_3^- 含量进行预测,分别以全波段的反射率和 2 种方法选取的最佳敏感波段的反射率为自变量建立土壤硝酸盐光谱反演模型,建模的过程中的验证方法采用交叉验证(full cross validation),模型因子数直接采用软件建议的个数。

对模型精度和质量的分析,通过计算比较模型的决定系数(R^2)、建模样本的标准偏差(standard error of calibration, SEC)与标准差(root mean standard error of calibration, RMSEC)、校正样本的标准偏差(standard error of prediction, SEP)与标准差(root mean standard error of prediction, RMSEP)来评价并判断选择最优模型^[19]。决定系数越大、标准偏差与标准差越小的模型,其预测能力越强、稳定性越高^[16]。对原始光谱数据进行变换处理以及建立偏最小二乘回归模型均应用 The Unscrambler 9.7 软件完成。

2 结果与分析

2.1 修复过程中土壤 NO_3^- 含量及其光谱反射率的变化

盐渍土 74 d 的修复过程中,土壤 NO_3^- 含量及其光谱反射率的变化如图 1 a 所示。其中, NO_3^- 含量为每个修复时间段内 12 个土壤样品的均值,反射率为 775~899 和 1 025~1 149 nm 波段光谱反射率的均值。 NO_3^- 含量的变化整体呈现大幅降低,然后逐步回升后再次降低的态势,从修复前的 0.714 g/kg 降至修复 1 d 的 0.521 g/kg、修复 7 d 的 0.220 g/kg 及修复 14 d 的 0.208 g/kg,修复 28 d 稍有回升为 0.426 g/kg,在修复 42 d 再次降低到 0.357 g/kg,然后在修复 56 d 升到 0.514 g/kg 后,最终在修复 74 d 定格在 0.435 g/kg,低于修复前的 NO_3^- 含量,由此说明微生物菌剂对降低土壤中 NO_3^- 含量有效。相应地,同步测量的土壤光谱反射率呈基本相似的变化趋势,特别是在修复的 7 到 14 d 及 28 到 74 d,土壤 NO_3^- 含量变化曲线的斜率在修复 7 到 14 d、28 到 42 d、42 到 56 d 和 56 到 74 d 分别为 -0.002、-0.005、0.011 和 -0.004,相应的光谱曲线斜率分别是 -0.001、-0.001、0.003 和 -0.002。

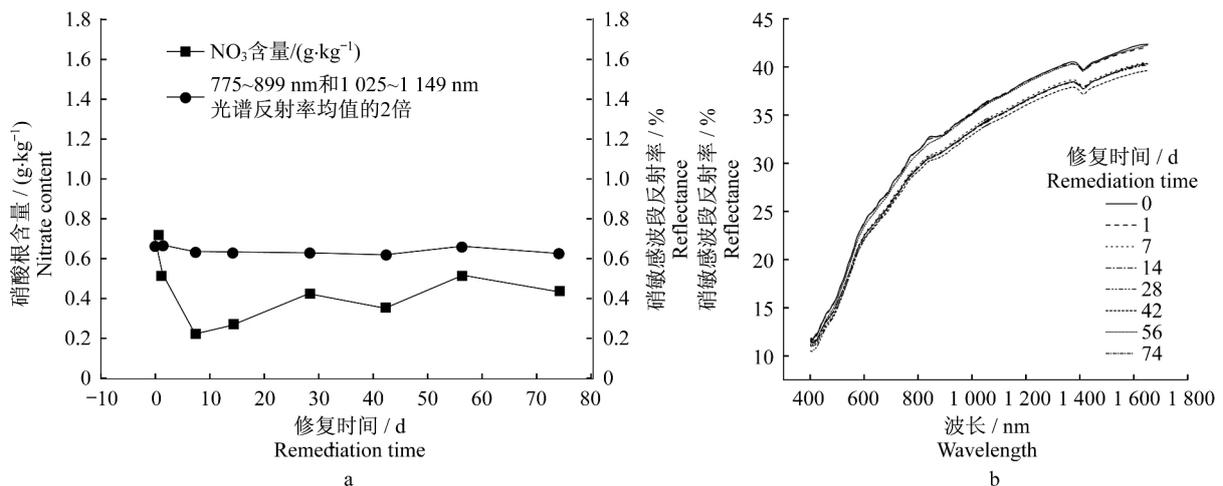


图 1 修复过程中土壤 NO_3^- 含量与光谱反射率的变化(a)及土壤修复不同时间段土壤光谱反射率随波长的变化(b)

Fig. 1 The change of soil nitrate content and spectral reflectance(a), the change of soil spectral reflectance with the different remediation time (b)

不同修复时间段内的土样光谱曲线在总体趋势和形态上基本一致(图 1b),在 400.11~1 376.24 和 1 411.90 ~ 1 649.15 nm 波段范围内,反射率随着波长的增加而增加,以 760 nm 为分界点,760 nm 之

前,土壤反射率随着波长的增加呈现明显的上升趋势;760 nm 之后,光谱反射率增长速度整体缓慢增大并逐渐趋于平缓,在 1 411.90 nm 左右能清晰识别到反映水汽吸收的吸收谷。

2.2 最佳敏感波段选取

2.2.1 极值提取最佳敏感波段范围

基于相关系数极值提取的最佳敏感波段除 FD 和 SGFD 外,大部分光谱数据集的敏感波段数为 3~9 个,且 FD 和 SGFD 的最佳敏感波段范围相同。各变换的最佳敏感波段聚集在 616.94、753.96、754.52、837.79、844.5、846.18、1 144.84、1 148.6、1 322.17、1 325.79、1 415.45、1 419 nm 和 1 635.84 ~ 1 649.15 nm。

2.2.2 间隔偏最小二乘法提取最佳敏感波段范围

选取在盐渍土 NO_3^- 含量的全波段 PLSR 模型中模型精度最高的变换(SGFD)进行间隔偏最小二乘回归法来提取最佳敏感波段。在 iPLS 计算过程中,全波段范围的光谱首先被分为 10、20 和 30 个间隔区域,分别挑选出各间隔区域下的最优的 2 个子区间。

将全波段分为 10 个间隔区域,利用 iPLS 分别将这 10 个间隔区域的光谱作为输入变量建立 PLSR 模型,通过对比各个子区间光谱所建立的模型的 RMSECV 值,得到 775 ~ 899 和 1 025 ~ 1 149 nm 为 10 个子区间下的最优区间,其 RMSECV 值分别为 0.281 和 0.286;将全波段分为 20 个间隔区域,得到 967 ~ 1 029 和 841 ~ 903 nm 为 20 个子区间下的最优区间,其 RMSECV 值分别为 0.285 和 0.289;将全波段分为 30 个间隔区域,得到 967 ~ 1 029 和 841 ~ 903 nm 为 30 个子区间下的最优区间,其 RMSECV 值均为 0.293。

基于 iPLS 方法将全波段分为 10、20 和 30 个子区间,所确定的土壤 NO_3^- 含量最佳光谱响应波段范围基本上是一致的,主要集中在 841 ~ 860 和 1 025 ~ 1 029 nm。本文综合考虑基于 ECE 和 iPLS 2 种

方法分别求出的敏感波段,取 2 种方法的交集波段,得到 NO_3^- 最佳敏感波段范围交集为 844.50 和 846.18 nm。

2.3 土壤 NO_3^- 含量和光谱反射率的关系模型

分别以最佳敏感波段和全波段(400 ~ 1 650 nm)的光谱数据为自变量, NO_3^- 含量为因变量,采用 leave-one-out 交叉验证法确定回归模型中的最佳因子数建立土壤 NO_3^- 含量的 PLSR 模型。

2.3.1 全波段模型的建立

以原始光谱数据及其 6 种光谱变换数据分别与土壤 NO_3^- 含量建立的 PLSR 全波段模型表明,相比于原始反射率来看,SGFD 和 FD 变换对全波段反演模型的精度具有明显的改善作用,而 1/R、LogR、1/LogR 和 Log(1/R)处理后模型精度有所上升,但改善模型精度作用稍弱。其中,SGFD 能显著改善模型的预测效果,其校正集的相关系数和决定系数最高,分别为 0.932 和 0.869,并且建模集和校正集的标准差较接近,分别为 0.109 和 0.107, RMSEP 由原始光谱 0.262 的下降到 0.107,下降了 59%。因此,在本研究中,采用该光谱变换形式建立的全波段盐渍土 NO_3^- 含量 PLSR 预测模型最为理想。

2.3.2 基于最佳敏感波段土壤 NO_3^- 含量光谱模型的建立

基于 2 种最佳敏感波段提取方法的敏感波段光谱数据作为自变量, NO_3^- 含量作为因变量,利用交叉验证的方法分别建立偏最小二乘模型。综合来看,用 SGFD 建立的 ECE 最佳波段土壤 NO_3^- 含量反演模型最优(表 2),其校正集的决定系数为 0.505,SEP 为 0.210, RMSEP 为 0.207,与建模样本的标准偏差和标准差均很接近。

表 2 基于相关系数极值下土壤 NO_3^- 含量的 PLSR 建模结果

Tab. 2 The PLSR model accuracy by ECE for nitrate content of soil

光谱变换形式 Pre-processing trans formations of spectra	主成分数 PC	建模集 Calibration set			校正集 Validation set		
		R_p^2	SEC	RMSEC	R_p^2	SEP	RMSEP
R	1	0.191	0.275	0.272	0.296	0.252	0.247
FD	2	0.536	0.208	0.206	0.501	0.211	0.208
SGFD	2	0.532	0.209	0.207	0.505	0.210	0.207
1/R	1	0.192	0.275	0.272	0.291	0.253	0.248
LogR	1	0.192	0.275	0.272	0.294	0.252	0.247
1/LogR	1	0.193	0.275	0.272	0.294	0.252	0.247
Log(1/R)	1	0.192	0.275	0.272	0.295	0.252	0.247

在间隔偏最小二乘法提取最佳敏感波段的方法下,分析表明,当全波段被分为 10 个间隔子区间时,其 RMSECV 值最小的 2 个子区间建立的 NO_3^- 含量

反演模型精度最高(表 3),其校正集样本的决定系数 R_p^2 达到了 0.962,校正集样本的标准偏差(SEP)为 0.056,校正标准差(RMSEP)为 0.057,与建模样

本的标准偏差 (SEC) 0.031 和标准差 (RMSEC) 0.031 均很接近, 说明其预测效果好。

表 3 基于间隔偏最小二乘下土壤 NO₃ 含量的 PLSR 建模结果
Tab.3 The PLSR model accuracy by iPLS for nitrate content of soil

方法 Method	主成分数 PC	建模集 Calibration set			校正集 Validation set		
		R _c ²	SEC	RMSEC	R _p ²	SEP	RMSEP
II 10	8	0.989	0.031	0.031	0.962	0.056	0.057
II 20	3	0.821	0.129	0.128	0.852	0.115	0.113
II 30	3	0.777	0.145	0.143	0.837	0.120	0.119

* II10 分别指将全波段分割为 10 个子区间下的最佳 2 个子区间, 其他的以此类推。

校正集的预测值和实测值相关图是判断验证模型结果最为直观的方法。首先, 选取了全波段以及 2 种最佳敏感波段中的次生盐渍土最佳 PLSR 预测模型, 然后以校正集 NO₃ 含量实测值为 X 轴, NO₃ 含量预测值为 Y 轴, 做出散点图, 并添加趋势线。

次生盐渍土 NO₃ 含量实测值与反演模型预测值的散点图如图 2 所示, 图 2a 为全波段 SGFD 实测值和模型预测值的散点图, 图 2b 为间隔偏最小二乘提取的最佳敏感波段 SGFD 实测值和模型预测值的散点图, 图 2c 为相关系数极值提取的最佳敏感波段 SGFD 实测值和模型预测值的散点图。以校正集的预测值和测量值拟合趋势线接近 1:1 为标准, NO₃ 含量的预测值与实测值在全波段、iPLS 和 ECE 方法下的决定系数分别为 0.869、0.962 和 0.505。这表明, 模型的准确性是可以接受的。以 SGFD 变换下的 iPLS 预测模型最佳, 其反演效果优于全波段的 PLSR 模型, 且自变量个数由 1336 个简化为 317 个, 以 SGFD 变换下的 ECE 预测模型虽在模型精度上略低于其他 2 个模型, 但它变量个数最少, 可适用于对模型精度要求不高的场合。

3 结论

3.1 在跟踪土壤修复过程的 74 d 中, 775~899 nm 和 1025~1149 nm 波段范围的平均光谱反射率与土壤 NO₃ 含量的变化总体一致。在土壤修复的 28~74 d, 土壤 NO₃ 含量和光谱反射率趋势几近一致, 在修复第 28 和 56 天, 设施土壤 NO₃ 含量略有回升, 平均反射率也呈不同程度的增强。光谱反射率对于土壤 NO₃ 含量渐变过程的敏感, 说明土壤光谱反射率对盐渍土 NO₃ 含量变化具有较好的指示作用。

3.2 基于相关系数的极值和间隔偏最小二乘 2 种方法提取的土壤 NO₃ 含量最佳敏感波段, 集中在 844.50 和 846.18 nm 波段范围, 且与领域内已有

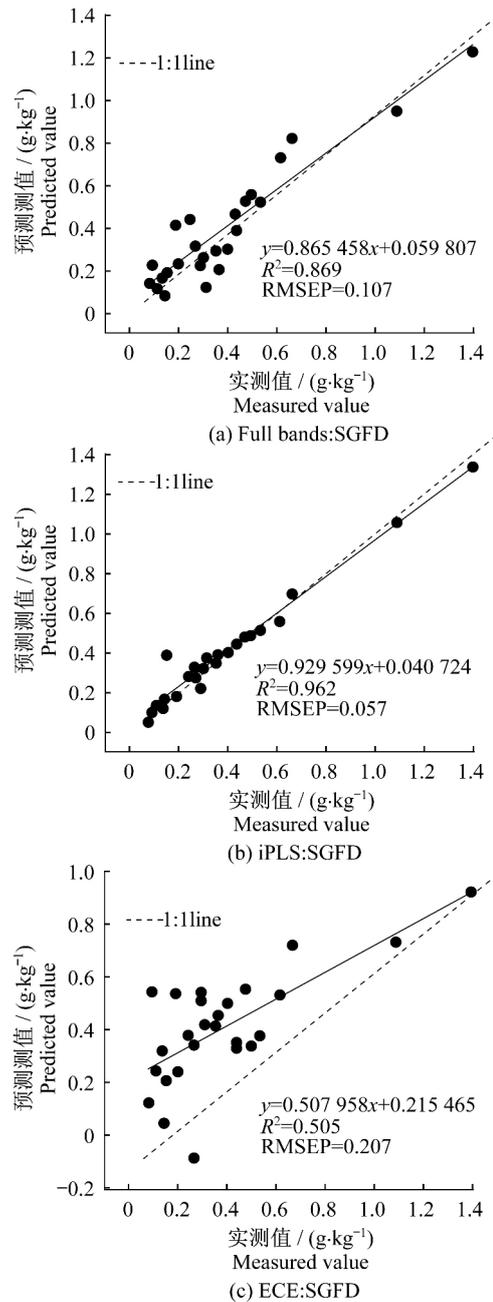


图 2 NO₃ 含量实测值和模型预测值的散点图
Fig.2 The scatterplot of measured values and predicted values of model for nitrate content

相关研究结果基本一致^[7,9-10]一致。在相关系数极值提取法下的自变量波段个数大多为3~14个,自变量个数较少,从波段的数目上明显优于间隔偏最小二乘法,但所建模型精度低于间隔偏最小二乘法提取最佳敏感波段建立的模型。

3.3 应用PLSR方法,基于全波段和最佳敏感波段光谱反射率建立的不同变换下土壤NO₃含量预测模型,以间隔偏最小二乘法下提取的775~899和1025~1149 nm为最佳敏感波段在预测次生盐渍化土壤NO₃含量中取得了较高的模型精度,相应的预测模型R_p²最高值达到了0.962, RMSEP为0.057。同时,本研究中预测大棚盐渍土NO₃含量的全波段与最佳敏感波段模型中最理想的光谱变换均为原始反射光谱经一阶微分处理,这与已有研究结果一致^[10]。

进一步研究中可针对多个敏感波段进行组合运算的方法以减少波段个数,简化模型。另外,期望通过更多光谱变换组合的方法更好地突出次生土壤光谱的吸收特征,为可见光-近红外提取次生盐渍土信息提供更多有效方法。

参考文献:

- [1] 郭文忠,刘声锋,李丁仁,等.设施蔬菜土壤次生盐渍化发生机理的研究现状与展望[J].土壤,2004,36(1):25-29.
- [2] 马创,申广荣,杜宝明,等.基于PLSR的土壤 $\delta^{13}C$ 含量光谱特性[J].上海交通大学学报(农业科学版),2015(5):11-18.
- [3] 马创,申广荣,王紫君,等.不同粒径土壤的光谱特征差异分析[J].土壤通报,2015,46(2):292-298.
- [4] Zhu Y, Shen G, Xiang Q. Quantitative analysis of salinized soil reflectance spectra during microbial remediation processes based on PLSR[A]//In Agro-Geoinformatics(Agro-Geoinformatics),2016 Fifth International Conference on [C]. 2016:1-6.
- [5] Ma C, Shen G, Zhi Y, et al. Spectral Characteristics of Salinized Soils during Microbial Remediation Processes [J]. **Spectroscopy and Spectral Analysis**, 2015,35(9):2602-2608.
- [6] 李晓明,韩霖昌,李娟.典型半干旱区土壤盐分高光谱特征反演[J].光谱学与光谱分析,2014,34(4):1081-1084.
- [7] Itoh H, Kanda S, Matsuura H, et al. Measurement of nitrate concentration distribution in vegetables by Near-Infrared hyperspectral imaging [J]. **Environmental Control in Biology**, 2010,48(2):37-49.
- [8] Ito H, Idezawa F. Non-destructive determination of nitrate ion in leaf stalk of Qing gin cai using visible (VIS)-near infrared(NIR) spectroscopy [A]//In IV International Conference on Managing Quality in Chains-The Integrated View on Fruits and Vegetables Quality 712 [C],2006:363-370.
- [9] Ito H, Horie H, Ippoushi K, et al. Potential of Visible-Near Infrared (VIS-NIR) Spectroscopy for Non-destructive Estimation of Nitrate Content Oin Japanese Radishes [A]//In International Conference on Quality in Chains. An Integrated View on Fruit and Vegetable Quality 604 [C]. 2003:549-552.
- [10] Srivichien S, Terdwongworakul A, Teerachaichayut S. Quantitative prediction of nitrate level in intact pineapple using Vis - NIRS [J]. **Journal of Food Engineering**, 2015,150:29-34.
- [11] Norgaard L, Saudland A, Wagner J, et al. Interval partial least-squares regression(iPLS):a comparative chemometric study with an example from near-infrared spectroscopy [J]. **Applied Spectroscopy**, 2000,54(3):413-419.
- [12] 孔庆明,苏中滨,沈维政,等. IPLS-SPA 波长选择方法在近红外秸秆生物量中的应用研究[J]. 光谱学与光谱分析,2015,35(5):1233-1238.
- [13] 黄红艳.次生盐渍化土壤的微生物多样性及微生物改良效应研究[D].上海:上海交通大学,2012.
- [14] 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.
- [15] Nawar S, Buddenbaum H, Hill J. Estimation of soil salinity using three quantitative methods based on visible and near-infrared reflectance spectroscopy: a case study from Egypt [J]. **Arabian Journal of Geosciences**, 2015(8):1-14.
- [16] 彭杰,刘焕军,史舟,等.盐渍化土壤光谱特征的区域异质性及盐分反演[J].农业工程学报,2014,30(17):167-174.
- [17] Gao X, Yang Y, Zhang W, et al. Visible-near infrared reflectance spectroscopy for estimating soil total nitrogen contents in the Sanjiang Yuan Regions, China: a case study of Yushu County and Maduo County, Qinghai province [A]//In SPIE Asia Pacific Remote Sensing [C],2014:92631O-92631O-12.
- [18] 尹力,王惠文.偏最小二乘相关算法在系统建模中的两类典型应用[J].系统仿真学报,2003,15(1):135-137.
- [19] 杨福芹,冯海宽,李振海,等.基于赤池信息量准则的冬小麦叶面积指数估算[J].农业机械学报,2015,46(11):112-120.