

# 土壤有机质高光谱特征及其反演研究

吴裕<sup>1,2</sup>, 申广荣<sup>1,2,3</sup>, 刘璐<sup>1,2</sup>, 支月娥<sup>1,3</sup>

(1. 上海交通大学农业与生物学院, 低碳农业研究中心, 上海 200240; 2. 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; 3. 农业部都市农业重点实验室, 上海 200240)

**摘要:** 具有精细的光谱分辨率, 可获取地物纳米级连续光谱信息的高光谱技术以其简便、快速、精度高和无损等优势成为获取土壤有机质(soil organic matter, SOM)含量的重要手段, 在精确农业发展中发挥着重要作用。本文阐述了高光谱反演土壤有机质的机理, 概述了土壤有机质含量的光谱反射特征, 包括不同土壤类型、不同土壤有机质含量的光谱响应波段, 以及土壤有机质含量的光谱反演方法和模型的研究进展。进一步分析了土壤有机质光谱特征研究中存在的问题并对发展趋势进行了展望和分析, 以期为以后的研究提供一定的参考。

**关键词:** 土壤有机质; 高光谱; 遥感; 特征波段; 反演方法

中图分类号: S15 文献标识码: A

## Hyperspectral characteristics of soil organic matter and inversion methods

WU Yu<sup>1,2</sup>, SHEN Guang-rong<sup>1,2,3</sup>, LIU Lu<sup>1,2</sup>, ZHI Yue-e<sup>1,3</sup>

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

**Abstract:** Hyperspectral technology is playing an important role in precision agriculture. With high spectral resolution and continuous spectral information of objects in nanoscale, it has become a reliable means of monitoring soil organic matter (SOM) for its simplicity, rapidity, high precision and non-destructiveness measurement. This article explains the mechanism of predicating SOM content with hyperspectral technology and summarizes the spectral reflection characteristics of SOM, including the spectral sensitive bands of different soil types, different SOM content, and the modeling methods in predicating SOM. Furthermore, it points out the current problems in the study of hyperspectral characteristics of SOM and shows the development trend of this technology, in order to provide some reference for future research.

**Key words:** soil organic matter; hyperspectral soil; remote-sensing; sensitive band; modeling method

土壤有机质(soil organic matter, SOM)是指存在于土壤中的含碳有机物质, 主要包括动物、植物残体和微生物体及其分解或合成的各种有机质, 是土

壤碳库的重要组成部分<sup>[1]</sup>。土壤碳库是陆地生态系统最大的碳库, 其中土壤有机质作为土壤碳库主要的存在形式, 对全球碳循环的平衡起着重要作用<sup>[2]</sup>。

收稿日期: 2018-12-11

基金项目: 国家重点研发计划(2017YFD0800204); 上海交大农工交叉项目(Agri-X2015004)

作者简介: 吴裕(1994-), 男, 硕士生, 研究方向: 农业高光谱遥感, email: 1973613621@sjtu.edu.cn;

申广荣(1964-)为本文通讯作者, 女, 博士, 副教授, 研究方向: 农业遥感, email: sgrong@sjtu.edu.cn

另一方面,土壤有机质中腐殖质可以促进土壤团聚体形成,增加土壤孔隙度和通透性,并且腐殖质与磷、铁、铝等离子形成络合物可抑制难溶性磷酸盐的产生,提高土壤有效养分。因此在一定程度上,土壤有机质含量决定着土壤肥力水平<sup>[3]</sup>,准确测量土壤有机质含量对土壤肥力评价、环境保护以及农林业发展等方面具有重要的意义。常规方法采样后进行室内化学分析,实测精度较高,但费时费力,使用化学试剂导致成本相对较高,破坏性采样方式造成环境污染,其局限性较为明显,难以实时动态监测大面积土壤有机质。

高光谱技术具有精细的光谱分辨率,可获取地物纳米级的连续光谱信息,能够有效反映出不同物质或同一物质不同含量下光谱的细微差异特征,因而为监测或反演土壤有机质提供了可能;同时高光谱技术是以非接触方式获取地物光谱信息,具有快速、动态、无损等特点,为实现动态快速监测区域土壤有机质含量提供了便利<sup>[4]</sup>。因此从上个世纪 60 年代以来,土壤有机质含量的高光谱研究受到了国内外学者普遍关注<sup>[5-11]</sup>。近年来随着计算机技术、高光谱技术及化学计量学快速发展,光谱仪分辨率和信噪比越来越高,高光谱遥感器光谱分辨率达至数纳米级别,土壤有机质高光谱特征及其反演模型在精确农业特别是土壤遥感监测中愈显重要。目前土壤有机质高光谱研究主要从以下两个方面展开:首先探究土壤光谱反演有机质的机理,并建立相应的估算模型;其次基于高光谱遥感技术,利用机载或星载高分辨率光谱仪进行区域尺度上土壤有机质监测与定量分析。

本文在分析阐述高光谱反演土壤有机质机理的基础上,总结了土壤有机质光谱响应特征,包括土壤有机质光谱影响因子,土壤有机质光谱响应波段以及土壤有机质光谱反演方法与模型研究进展,进一步分析了土壤有机质光谱特征研究中存在的问题,并对发展趋势进行了展望和分析,以期对相关研究提供参考。

## 1 土壤有机质含量高光谱响应机理

土壤中某些物质的分子会产生伸缩振动和弯曲振动,相应地会吸收不同的光能,从而产生特定的吸收光谱。土壤有机质的吸收光谱主要在可见光-近红外(VNIR)和中红外(MIR)两个波段中产生<sup>[12]</sup>。大部分有机物质分子振动在中红外光谱区产生基频吸收,而在近红外光谱区产生倍频吸收和合频吸收,近红外

光谱结果主要是受含氢基团 X-H(X=C、N、O)的倍频和合频的重叠主导<sup>[13]</sup>。不同化合物具有不同的红外吸收光谱特征,其谱带的强度、位置、形状及数目均与化合物种类及其状态有关。土壤有机质具有多种官能团(如:羟基、羧基等)分别在红外光谱区域有特征性吸收<sup>[14]</sup>,且不同波段的吸收强度与该物质的分子结构及浓度存在对应关系,因此土壤有机质的组成、含量等属性可以在红外光谱上得到反映。部分文献中可见光吸收光谱应用于土壤有机质研究中主要是有机质中的发色基团在可见光区域有一定吸收<sup>[15]</sup>。近红外光谱区吸收强度与中红外光谱区域相比较弱,背景复杂,谱峰重叠严重,直接分离解析难以提取出足够有用的信息,需要用化学计量学方法从光谱数据中提取相关信息<sup>[16]</sup>。相比于可见光和近红外,中红外可能更有估算土壤属性的潜在优势<sup>[17]</sup>。Pirie 等<sup>[18]</sup>利用主成分分析法建立土壤有机质光谱校正和预测模型后,发现中红外光谱相较于紫外线-可见光-近红外光谱得到的模型预测精度更高。

表 1 概述了不同类型有机物中各种化学键在中红外光谱区的基频和近红外光谱区的倍频及合频情况<sup>[19]</sup>。土壤中有有机质主要包括碳水化合物、含氮化合物、木质素等物质,另外还有一些脂溶性物质。在分解作用下,土壤有机质在不同时期有机成分组成也不一样,因而,其高光谱特征并不相同,取决于相关化合物或化学键的波谱特征。

## 2 土壤有机质的高光谱响应特征

### 2.1 土壤有机质与光谱反射率的相关性

土壤有机质与土壤光谱反射率存在紧密的联系。陈颂超等<sup>[12]</sup>对不同有机质含量水稻土研究发现 VNIR 和 MIR 波段均表现出有机质含量越高土壤光谱吸收率越高的趋势。Bowers<sup>[5]</sup>发现土壤有机质含量与可见光波段的反射率和  $0.62\sim 0.66\ \mu\text{m}$  波段反射率均呈现高度负相关性。徐彬彬等<sup>[8]</sup>认为土壤有机质含量与  $600\ \text{nm}$  波段处的光谱反射率存相应地极显著负相关关系。彭杰等<sup>[20]</sup>研究表明去除土壤有机质后土壤光谱反射率在全波段或是分波段均有明显升高。Chang 等<sup>[21]</sup>认为有机质成分复杂,比如不同类型土壤中胡敏酸和富里酸的含量有所不同,同时这些物质又具有多种官能团,它们的光谱特性差异很大,因此很难解释土壤光谱特征与其所含的官能团对应关系,但总体呈现土壤有机质含量升高,整个谱线反射率逐渐降低的趋势。

表1 有机物在中红外波段的基频和其在可见光-近红外波段所对应的倍频和合频<sup>[19]</sup>

Tab. 1 Band assignments for fundamental mid-IR absorptions of soil organic matters and their overtones and combinations in the vis-NIR

有机物 Organics	基频/cm <sup>-1</sup> Fundamental	vis-NIR 吸收峰/nm vis-NIR wavelength	vis-NIR 吸收模式 vis-NIR mode
芳香族化合物 Aromatics	$\nu_1$ C-H 3 030	1 650	$2\nu_1$
		1 100	$3\nu_1$
		825	$4\nu_1$
胺类 Amine	$\delta$ N-H 1 610 $\nu_1$ N-H 3 330	2 060	$\nu_1 + \delta$
		1 500	$2\nu_1$
		1 000	$3\nu_1$
		751	$4\nu_1$
不对称烷基 对称烷基	$\nu_3$ C-H 2 930 $\nu_1$ C-H 2 850	1 706	$2\nu_3$
		1 754	$2\nu_1$
Alkyl asymmetric symmetric doublet	-	1 138	$3\nu_3$
		1 170	$3\nu_1$
		853	$4\nu_3$
		877	$4\nu_1$
羧酸类 Carboxylic acids	$\nu_1$ C=O 1 725	1 930	$3\nu_1$
		1 449	$4\nu_1$
酰胺类 Amides	$\nu_1$ C=O 1 640	2 033	$3\nu_1$
		1 524	$4\nu_1$
脂肪族化合物 Aliphatics	$\nu_1$ C-H 1 465	2 275	$3\nu_1$
		1 706	$4\nu_1$
		$\nu_1$ C-H 1 445~1 350	2 307~2 469
1 730~1 852	$4\nu_1$		
甲基类 Methyls			
酚类物质 Phenolics	$\nu_1$ C-OH 1 275	1 961	$4\nu_1$
多糖 Polysaccharides	$\nu_1$ C-O 1 170	2 137	$4\nu_1$
		$\nu_1$ C-O 1 050	$4\nu_1$
碳水化合物 Carbohydrates			

## 2.2 土壤有机质高光谱曲线的影响因素

土壤的组成成分较为复杂,不同理化性质的物质会不同程度地对土壤光谱产生影响。其中有机物、含水量和土壤质地是影响土壤光谱反射率的主要因素<sup>[22]</sup>。在室内高光谱研究中通常先对样品进行风干和研磨过筛处理,以减小水分和土壤质地等因素对有机质光谱特征的影响。

### 2.2.1 土壤有机质

土壤有机质含量高低对光谱特征产生不同的影响。Baumgardner 等<sup>[23]</sup>认为土壤有机质含量小于2%时,光谱曲线易受其他成分影响导致不能准确反映由官能团引起的吸收特征,而有机质含量大于2%时,光谱预测有机质含量精度会有显著提高。然而,有机质质量分数为2%并不是绝对的界限,也有研究表明有机质含量高于1.5%时,光谱反射率会随着有机质含量的增高而减少<sup>[24]</sup>。BenDor 等<sup>[25]</sup>比较了有机质含量分别为0~4%和4%~14%的2组土壤样本后,发现两者的近红外光谱预测精度并不一致,存在着明显的差异。

### 2.2.2 土壤水分

土壤水分的存在会改变光的折射率而影响光的

散射<sup>[26]</sup>。Chang 等<sup>[21]</sup>的研究结果表明去除土样水分可以提高有机质高光谱估算精度。王森等<sup>[27]</sup>在土壤水分对光谱估算红壤有机质影响研究中指出随土壤水分的增加,有机质含量与经一阶微分变换后光谱的相关性先增加后减小,当土壤含水率处于10%~15%之间时,有机质估算模型精确度最高。当含水量较低时,其质量分数的变化对有机质估算模型影响不大,Brown 等<sup>[28]</sup>建立风干土样与烘干土样光谱反演模型后,发现有机质估算精度没有明显提高。不过 Fystro<sup>[29]</sup>及 Couillard 等<sup>[30]</sup>人认为湿土样或原状土的有机质高光谱估算精度会高于风干土样。

### 2.2.3 土壤质地

土壤质地与光谱反射的强度紧密相关。一般研究中对土壤样品研磨过2 mm 筛子后进行分析,以减少土壤粒径对光谱分析的影响。周清等<sup>[31]</sup>发现土壤光谱特性在很大程度上依赖于成土母质。马剑等<sup>[32]</sup>在不同粒径土壤的光谱特征研究中发现不同粒径土壤的平均光谱反射率在可见光和红外波段都会随土壤粒径的减小而增加,土壤光谱反射率与土壤粒径呈负相关关系。鲍一丹等<sup>[33]</sup>研究粒径对土

壤近红外光谱的影响后指出,在近红外波段处土壤光谱反射率随颗粒粒径减小而增大。粒径过小会改变光的散射和光程从而对光谱测量产生影响,试验表明,当土壤粒子在 0.5~5 mm 间预测模型精度较好,但当粒径小于 0.25 mm 时,高散射率会影响模型精度<sup>[34]</sup>。在光谱分析土壤有机质研究中保持土壤粒径适中是有必要的,Stenberg 等<sup>[15]</sup>认为较细的颗粒会造成光的散射从而掩盖了有机质的吸收,导致了有机质的反演精度下降。土壤质地对光谱吸收的影响也体现在其组成成分上,不同粒径土壤颗粒具有不同化学组成,其中粘粒部分具有强吸湿作用,在 1 400、1 900、2 200 nm 等处具有明显的水分吸收带。同时粘粒粒径较小吸持水分能力更强,因此土壤颗粒越细光谱反射率越高并不绝对。

### 2.3 土壤有机质高光谱特征波段

由于土壤光谱曲线受多种因素影响,有机质敏感波段的分析和提取是进行土壤有机质高光谱反演的重要内容。大量文献资料表明提取敏感波段后建立的预测模型更加简约,模型的鲁棒性也通常比全

谱模型更高,同时模型的可解释性也大为提高。研究发现,福建漳浦沿海一带的土壤有机质含量在 376、616、724 nm 波段处与光谱反射率有显著的相关性<sup>[35]</sup>。卢艳丽等<sup>[36]</sup>在对东北平原不同土壤类型土壤光谱反射率曲线研究中通过相关分析确定了土壤有机质敏感波段为 650~750 nm。贺军亮等<sup>[37]</sup>指出 511 nm 波段为土壤有机质含量的最佳敏感波段,同时将 450~750 nm 波段反射率均值对 507~516 nm 波段反射率均值标准化比值处理获得有机质诊断指数对土壤有机质含量进行预测,模型精度较高。周萍<sup>[38]</sup>认为利用 762、874 及 1 667 nm 波段反射率预测土壤有机质的模型效果最佳。对多数研究结果的总结发现 600~800 nm 波段可以作为土壤有机质光谱响应波段,更详细信息可参考表 2。需要注意的是,不同研究中土壤有机质光谱特征波段存在较大差异性,原因是土壤有机质敏感波段受土壤类型、土壤组成成分以及有机质含量高低等的影响,而这些影响在光谱预处理中并不能完全排除。

表 2 土壤有机质含量最佳敏感波段的文献简述

Tab. 2 A short overview of optimal sensitive bands of SOM

文献 Reference	光谱测量仪 Equipment	土壤类型 Soil types	土壤干燥 Drying	土壤粒径/mm Sizes	最佳敏感波段/nm Optimal sensitive bands
[13]	FieldSpec-FR, ASD	盐渍土	风干	≤2	600, 900
[39]	Hand-held SVC-HR 1024	—	烘干	≤2	600
[40]	ASD FieldSpec 4	粗面岩质火山土壤	风干	≤2	415, 445~605, 795~935
[41]	FOSS NIRSystems Inc., Denmark	耕种地、牧草地、林地	风干	≤2	600
[42]	Spectral device(ASD)	砂质新成土	—	—	440, 560, 625, 740, 1 336
[11]	MOD09DA; EOS Terra	黑土	风干	≤2	620~810
[12]	FieldSpec-FR VINR	水稻土	风干	≤2	530 cm <sup>-1</sup> , 2 360 cm <sup>-1</sup> , 2 000 cm <sup>-1</sup> , 1 890 cm <sup>-1</sup> , 1 560 cm <sup>-1</sup> , 1 220 cm <sup>-1</sup> , 103 cm <sup>-1</sup> , 810 cm <sup>-1</sup>
[43]	FieldSpecProFR, ASD	玉米地	风干	≤2	424, 445, 495, 868
[44]	ISI921VF512 光谱仪	草甸土、灌淤土、盐渍土、 水稻土混合样	风干	≤2	539.2, 600.05
[45]	ASD field SpecPro FRTM 型光谱仪	青紫泥、红黄泥	烘干	≤1	430, 480~600, 670, 2250
[35]	VF991	丘陵土	—	—	376, 616, 724
[46]	ASDFR2500	黑土	风干	≤2	570~590
[3]	ASD Field Hand 便携式光谱仪	农田土壤	烘干	≤1	823, 914, 1 431, 1 460, 1 903, 1 984, 2 027, 2 106, 2 149, 2 194, 2 227, 2 271, 2 307, 2 330, 2 343, 2 452, 2 476, 2 481

## 3 土壤有机质含量的高光谱反演

土壤有机质高光谱反演研究主要包括光谱数据预处理、敏感波段选取和预测模型建立 3 个步骤,这个过程主要依赖于化学计量方法的应用。

### 3.1 光谱数据预处理

光谱预处理通过对光谱反射率曲线进行线性或非线性变换弱化甚至去除噪音,突出光谱有效信息,从而提高预测模型的鲁棒性。光谱预处理方法包括常用的 FFT 滤波器平滑(FFT filters, FFT)、归一化(normalization, N)、标准正态变量变换(standard

normal variate, SNV)、多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、一阶导数(first derivative, FD)和连续统去除(continuum removal, CR)<sup>[47]</sup>,还有较新的正交信号校正(orthogonal signal correction, OSC)、小波变换(wavelet transform, WT)等。Reeves等<sup>[17]</sup>在对土壤总碳、有机碳及全氮测定时对近红外光谱进行了标准正态变量变换,模型精度有所提高。但Shepherd和Walsh<sup>[48]</sup>认为标准正态变量变换对提高模型精度的作用不明显。导数变换是预测土壤碳含量常用预处理方式。Brunet等<sup>[49]</sup>在建立土壤总碳的预测模型时对比了一阶导数结合标准正态变量变换以及二阶导数结合标准正态变量变换,发现经一阶导数变换后模型精度优于二阶导数。多数研究通常比较多种光谱预处理方法,选择最优的预处理方法。其中光谱一阶导数变换在多数土壤有机质高光谱研究中被证明是非常有效的光谱变换方式。

### 3.2 土壤有机质特征波段的选择

一般而言连续波段间光谱反射率会呈线性相关关系,因此使用全波段光谱分析时,会出现冗余信息较多的情况,通过特定方法筛选特征波段能够剔除不相关或非线性的变量,得以简化模型,提高校正模型的精度。在多元校正分析中,特征波段选择方法主要包括相关系数极值法(extremums of correlation coefficients, ECE)<sup>[50]</sup>、方差分析法(analysis of variance, ANOVA)、逐步回归法(stepwise regression, SR)、无信息变量消除法(no information variable elimination, UVE)、间隔偏最小二乘法(interval partial least-squares regression, iPLS)<sup>[47]</sup>、遗传算法(genetic algorithm, GA)<sup>[3]</sup>、竞争性自适应重加权算法(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)、连续投影算法(successive projections algorithm, SPA)<sup>[3]</sup>、随机森林特征选择算法(random forest feature selection, RFFS)等。Cecillon<sup>[51]</sup>等利用变量重要性映射(variable importance in the projection, VIP)法进行波段优选,效果显著。光谱变换能够增强光谱反射率与有机质含量相关关系,因此在不同光谱变换后可以更有效地对比和筛选出敏感波段。现阶段相关研究对特征波段的选择方法越来越复杂,常出现多种方法的联用<sup>[52]</sup>,马创<sup>[53]</sup>利用逐步缩小采样间隔的方法结合逐步回归分析所获取的敏感波段,从数目、波段的宽窄以及精确度上明显优于以往方法。章海亮等<sup>[3]</sup>利用遗传算法结合连续投影算法提取特征波段进行建模极大简化了模型,并且模型精度保持在较高水平。

### 3.3 建模方法的选择

高光谱估算土壤有机质含量关键步骤在于建立

光谱预测模型,即使是针对同一土壤样品,不同模型间的准确性和鲁棒性差别可能很大。一般建模主要包括线性建模和非线性建模两类。线性建模方法包括多元线性回归(multi-linear regression, MLR)、主成分回归(principal component regression, PCR)和偏最小二乘法(partial least squares regression, PLS)等<sup>[54]</sup>。MLR是较常规的分析方法,它是利用少数几个波长点的光谱信息与待测成分之间的线性关系建立相应模型,因此模型较为简单、直观、容易理解,而由于其只利用了一些特征波长的光谱信息,有可能导致其他波段信息丢失,容易产生模型过适应性问题。PCR和PLS利用了全部的光谱信息进行建模,它们的分析精度比MLR的高,但模型比较复杂,不易理解。侯艳军<sup>[55]</sup>在估算荒漠土壤有机质研究中发现运用PLS建立模型能较好反演有机质含量。非线性建模方法包括非线性偏最小二乘法(nonlinear partial least squares method, NLPLS)、局部权重回归(local weight regression, LWR)、支持向量机回归(support vector regression, SVR)、人工神经网络(artificial neuro network, ANN)、LASSO回归(least absolute shrinkage and selection operator)等<sup>[56]</sup>。ANN能够用优化的非线性关系来描述复杂的光谱信息与目标之间的相关性,建立的模型精度会更高<sup>[56]</sup>。郑立华等<sup>[57]</sup>利用ANN分析了近红外光谱土壤有机质和总氮,取得了很好的结果。在建立预测模型前通常要进行校正集和验证集样本的选择,目前样本选择方法有含量梯度法(rank)、Kennard-Stone(KS)法、随机法(RS)以及较新的Rank-KS法<sup>[58]</sup>和SPXY法<sup>[59]</sup>。

### 3.4 精度评价指标

模型精度评价是建立最终预测模型的关键问题。决定系数(determination coefficient,  $R^2$ )表示模型预测值与实测值的相关性。 $R^2 > 0.90$ 表示模型性能优异,  $0.81 < R^2 < 0.90$ 表示模型性能良好,  $0.66 < R^2 < 0.80$ 模型性能一般,可做近似定量分析,  $R^2 < 0.66$ 表示模型性能较差<sup>[60]</sup>。交叉验证均方根误差(root mean square error of cross validation, RMSECV)是在建模过程中进行交叉验证时得到的模型预测值与实测值间的标准偏差, RMSECV值越小说明预测效果越好。当缺少独立验证集样本时,一般参考RMSECV值来评估预测模型的精度;而存在独立验证样本集时,模型精度评价通常基于验证集样本的预测结果,以验证集样本模型预测值与实测值间的相关系数(correlation coefficient,  $R$ )提高、预测标准误差(standard error of prediction, SEP)降低为评判标准; $R$ 越大, SEP越小,

则模型预测能力越强。也有研究同时参考  $R^2$  和 RMSECV 2 个参数,通过建立目标函数  $f(x) = [R / (1 + \alpha \text{RMSECV})] \times 100\%$  来评价模型精度,目标函数  $f(x)$  值越大,则模型预测精度越高<sup>[61]</sup>。

评价不同样本集建立的预测模型精度时,通常参考相对分析误差(residual prediction deviation,RPD)和变异系数(variance coefficient,CV) 2 个指标。RPD 是指验证集样本待测成分标准差(standard deviation,SD)与 SEP 的比值,韩鲁佳等<sup>[62]</sup>认为  $\text{RPD} > 3$  表示预测精度高,所建立的近红外预测模型可用于实际检测; $2.5 < \text{RPD} < 3$  说明用近红外模型可做近似定量分析; $\text{RPD} < 2.5$  则说明该成分不能用近红外进行定量分析。也有研究使用其他标准,如 Fearn<sup>[63]</sup>认为只有  $\text{RPD} > 3$  时建立的模型才能被接受,而 Chang 等<sup>[21]</sup>以及 Terhoeven 等<sup>[64]</sup>则认为  $\text{RPD} > 2$  时即可说明模型预测性能很好。变异系数是指 SEP 和验证集样本待测成分均值的比值,CV 小于 10% 时表明预测效果良好。

## 4 结论与展望

土壤有机质高光谱特征研究是实现无损、快速、动态进行区域土壤肥力和土壤特性有效监测的重要内容,是开发可实时获取土壤信息传感器、应用物联网结合 3S 技术发展精准农业的必要途径<sup>[65]</sup>。一般认为,土壤有机质敏感波段在 600~800 nm 之间,但不同的研究用于建模的波段又各不相同,具有普适性的模型有待进一步的挖掘和分析。由于土壤有机质结构及组成的复杂性,完全从机理上对土壤有机质含量及其光谱特征的分析还较为困难,目前室内光谱测量没有统一标准也增加了光谱数据的不确定性,即使是在同一研究中不同时期的光谱数据也难以共享。现有研究大多集中于对土壤样品研磨过筛后室内光谱特征的测量和分析,应用于野外或农田土壤的光谱监测等还有待结合传感器和高光谱仪等技术进行深入的分析研究。

土壤有机质高光谱特征研究未来可从以下几个方面进行深入探讨和研究:第一,建立室内土壤光谱测量标准,构建全球土壤有机质光谱数据库,以实现光谱数据的共享;第二,研究土壤各种理化性质光谱表现的个体差异性,深入探讨土壤有机质高光谱机理,以建立高普适性的土壤有机质含量高光谱预测模型;第三,进行不同因子之间的相关分析,建立多因子综合估算模型,提高模型的准确性和稳定性;第

四,室外实测光谱研究与星载遥感光谱研究是未来趋势,期望通过结合室内光谱数据分析经验,真正做到实时、动态、无损的监测土壤有机质。

### 参考文献:

- [1] 张勇,庞学勇,包维楷,等. 土壤有机质及其研究方法综述[J]. 世界科技研究与发展,2005,27(5):72-78.
- [2] 张新乐,窦欣,谢雅慧,等. 引入时相信息的耕地土壤有机质遥感反演模型[J]. 农业工程学报,2018,34(4):143-150.
- [3] 章海亮,罗微,刘雪梅,等. 应用遗传算法结合连续投影算法近红外光谱检测土壤有机质研究[J]. 光谱学与光谱分析,2017,37(2):584-587.
- [4] 薛利红,周鼎浩,李颖,等. 不同利用方式下土壤有机质和全磷的可见近红外高光谱反演[J]. 土壤学报,2014,51(5):993-1002.
- [5] Bowers S A, Hanks R J. Reflection of radiant energy from soil[J]. *Soil Science*, 1965,100(3):130-138.
- [6] Kirshnan 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):1282-1285.
- [7] Clark R N, Roush T L. Reflectance spectroscopy: Quantitative analysis techniques for remote sensing applications [J]. *Journal of Geophysical Research*, 1984,89(B7):6329-6340.
- [8] 徐彬彬,戴昌达. 新疆土壤光谱反射特性与有机质含量的相关分析[J]. 科学通报,1980,25(6):282-284.
- [9] 周清,周斌,张杨珠,等. 成土母质对水稻土高光谱特性及其有机质含量光谱参数模型影响的初步研究[J]. 土壤学报,2004,41(6):905-911.
- [10] Blasch G, Spengler D, Hohmann C, et al. Multitemporal soil pattern analysis with multispectral remote sensing data at the field-scale[J]. *Computers & Electronics in Agriculture*, 2015,113:1-13.
- [11] 刘焕军,宁东浩,康苒,等. 考虑含水量变化信息的土壤有机质光谱预测模型[J]. 光谱学与光谱分析,2017,37(2):566-570.
- [12] 陈颂超,彭杰,纪文君,等. 水稻土可见-近红外-中红外光谱特性与有机质预测研究[J]. 光谱学与光谱分析,2016,36(6):1712-1716.
- [13] Nawar S, Buddenbaum H, Hill J, et al. Estimating the soil clay content and organic matter by means of different calibration methods of vis-NIR diffuse reflectance spectroscopy[J]. *Soil & Tillage Research*, 2016,155:510-522.
- [14] 卢艳丽,白由路,王贺,等. 利用光谱技术监测土壤主

- 要养分含量潜力分析[J]. *土壤通报*, 2012, 43(3): 756-760.
- [15] Bo S, Raphaela V R, Abdulmounem M, *et al.* Visible and near infrared spectroscopy in soil science[J]. *Advances in Agronomy*, 2010, 107(107): 163-215.
- [16] 刘建学. 实用近红外光谱分析技术[M]. 北京: 科学出版社, 2000.
- [17] Reeves J B. Near-versus mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy for determination of minerals in dried poultry manure [J]. *Poultry Science*, 2001, 80(10): 1437-1443.
- [18] Pirie A, Singh B, Islam K. Ultra-violet, visible, near-infrared, and mid-infrared diffuse reflectance spectroscopic techniques to predict several soil properties[J]. *Soil Research*, 2005, 43(6): 713-721.
- [19] Rossel R A V, Behrens T. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra[J]. *Geoderma*, 2010, 158(1): 46-54.
- [20] 彭杰, 张杨珠, 周清, 等. 去除有机质对土壤光谱特性的影响[J]. *土壤*, 2006, 38(4): 453-458.
- [21] Chang C W, Laird D A. Near-infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N[J]. *Soil Science*, 2002, 167: 110-116.
- [22] 付馨, 赵艳玲, 李建华, 等. 高光谱遥感土壤重金属污染研究综述[J]. *中国矿业*, 2013, 22(1): 65-68.
- [23] Baumgardner M F, Kristof S, Johannsen C J, *et al.* Effects of organic matter on the multispectral properties of soils[J]. *Proceedings of the Indiana Academy of Science*, 1969, 79: 413-422.
- [24] 方少文, 杨梅花, 赵小敏, 等. 红壤区土壤有机质光谱特征与定量估算——以江西省吉安县为例[J]. *土壤学报*, 2014, 51(5): 1003-1010.
- [25] Ben-Dor E, Banin A. Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 1995, 59(2): 364-372.
- [26] Véronique Bellon-Maurel, Alex McBratney. Near-infrared (NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopic techniques for assessing the amount of carbon stock in soils—Critical review and research perspectives[J]. *Soil Biology & Biochemistry*, 2011, 43(7): 1398-1410.
- [27] 王淼, 潘贤章, 解宪丽, 等. 土壤含水量对反射光谱法预测红壤土壤有机质的影响研究[J]. *土壤*, 2012, 44(4): 645-651.
- [28] Brown D J, Shepherd K D, Walsh M G, *et al.* Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy[J]. *Geoderma*, 2006, 132(3): 273-290.
- [29] Fyströ G. The prediction of C and N content and their potential mineralisation in heterogeneous soil samples using Vis-NIR spectroscopy and comparative methods [J]. *Plant and Soil*, 2002, 246(2): 139-149.
- [30] Couillard A, Turgeon A J, Shenk J S, *et al.* Near infrared reflectance spectroscopy for analysis of turf soil profiles[J]. *Crop Science*, 1997, 37(5): 1554-1559.
- [31] 周清, 张杨珠, 周斌, 等. 室内几何条件对土壤高光谱数据波动性的影响[J]. *湖南农业大学学报(自然科学版)*, 2004, 30(1): 29-32.
- [32] 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.
- [33] 鲍一丹, 何勇, 方慧, 等. 土壤的光谱特征及氮含量的预测研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2007, 27(1): 62-65.
- [34] 刘燕德, 熊松盛, 刘德力. 近红外光谱技术在土壤成分检测中的研究进展[J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, 34(10): 2639-2644.
- [35] 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.
- [36] 卢艳丽, 白由路, 杨俐苹, 等. 基于高光谱的土壤有机质含量预测模型的建立与评价[J]. *中国农业科学*, 2007, 40(9): 1989-1995.
- [37] 贺军亮, 蒋建军, 周生路, 等. 土壤有机质含量的高光谱特性及其反演[J]. *中国农业科学*, 2007, 40(3): 638-643.
- [38] 周萍, 王润生, 阎柏琨, 等. 高光谱遥感土壤有机质信息提取研究[J]. *地理科学进展*, 2008, 27(5): 27-34.
- [39] Bao N, Wu L, Ye B, *et al.* Assessing soil organic matter of reclaimed soil from a large surface coal mine using a field spectroradiometer in laboratory[J]. *Geoderma*, 2017, 288: 47-55.
- [40] 韩春兰, 刘金宝, 付小梅, 等. 粗面岩质火山碎屑物发育土壤有机质含量的高光谱特征与建模[J]. *土壤通报*, 2017(1): 39-44.
- [41] Nocita M, Stevens A, Toth G, *et al.* Prediction of soil organic carbon content by diffuse reflectance spectroscopy using a local partial least square regression approach[J]. *Soil Biology & Biochemistry*, 2014, 68(1): 337-347.
- [42] Wang J, He T, Lv C, *et al.* Mapping soil organic matter based on land degradation spectral response units using Hyperion images[J]. *International Journal of Applied Earth Observations & Geoinformation*, 2010, 12(S2): 171-180.
- [43] 郭燕, 程永政, 王来刚, 等. 利用高光谱和GF-1模拟多光谱进行土壤有机质预测和制图研究[J]. *土壤通报*, 2016, 47(3): 537-542.
- [44] 彭杰, 张杨珠, 庞新安, 等. 新疆南部土壤有机质含量

- 的高光谱特征分析[J]. 干旱区地理(汉文版), 2010, 33(5):740-746.
- [45] 周清,周斌,张杨珠,等. 水稻土 SOM 含量高光谱模型的母质差异性研究[J]. 科技通报, 2004, 20(6):471-475.
- [46] 卢艳丽, 白由路, 杨俐苹, 等. 基于高光谱的土壤有机质含量预测模型的建立与评价[J]. 中国农业科学, 2007, 40(9):1989-1995.
- [47] 朱赞, 申广荣, 项巧巧, 等. 基于不同光谱变换的土壤盐含量光谱特征分析[J]. 土壤通报, 2017, 48(3):560-568.
- [48] Keith D. Shepherd, Markus G. Walsh. Development of reflectance spectral Libraries for characterization of soil properties [J]. *Soil Science Society of America Journal*, 2002, 66(3):988-998.
- [49] Brunet D, Barthès B G, Chotte J L, *et al.* Determination of carbon and nitrogen contents in Alfisols, Oxisols and Ultisols from Africa and Brazil using NIRS analysis: Effects of sample grinding and set heterogeneity[J]. *Geoderma*, 2007, 139(1-2):106-117.
- [50] 朱赞, 申广荣, 王紫君, 等. 土壤修复过程中盐含量及其光谱特征分析研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(5):1507-1513.
- [51] CéCillon L, Cassagne N, Czarnes S, *et al.* Variable selection in near infrared spectra for the biological characterization of soil and earthworm casts[J]. *Soil Biology & Biochemistry*, 2008, 40(7):1975-1979.
- [52] 宋相中, 唐果, 张录达, 等. 近红外光谱分析中的变量选择算法研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(4):1048-1052.
- [53] 马创, 申广荣, 支月娥, 等. 修复过程中盐渍化土壤的光谱特征分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2015(9):2602-2608.
- [54] 汤修映, 牛力钊, 徐杨, 等. 基于可见/近红外光谱技术的牛肉含水率无损检测[J]. 农业工程学报, 2013(11):248-254.
- [55] 侯艳军, 张飞. 荒漠土壤有机质含量高光谱估算模型[J]. 农业工程学报, 2014, 30(16):113-120.
- [56] 石雪. 近红外光谱非线性建模方法研究[D]. 南京: 南京大学, 2008.
- [57] 郑立华, 李民赞, 潘雯, 等. 基于近红外光谱技术的土壤参数 BP 神经网络预测[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(5):1160-1164.
- [58] 刘伟, 赵众, 袁洪福, 等. 光谱多元分析校正集和验证集样本分布优选方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(4):964-968.
- [59] 展晓日, 朱向荣, 史新元, 等. SPXY 样本划分法及蒙特卡罗交叉验证结合近红外光谱用于橘叶中橙皮苷的含量测定[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(4): .
- [60] 申艳, 张晓平, 杨学明, 等. 光谱预处理及不同光谱区对黑土有机碳近红外光谱模型的影响[J]. 土壤学报, 2010, 47(5):1005-1012.
- [61] 李君霞, 闵顺耕, 张洪亮, 等. 水稻糙米粗蛋白近红外光谱定量分析模型的优化研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2006, 26(5):833-837.
- [62] 韩鲁佳, 牛智有. 反刍动物饲料中总磷的近红外反射光谱分析研究[J]. 饲料工业, 2008, 29(3):42-44.
- [63] Fearn T. Assessing calibrations; SEP, RPD, RER and R2[J]. *NIR News*, 2002, 13(6):12-13.
- [64] Terhoeven-Urselmans T, Schmidt H, Joergensen R G, *et al.* Usefulness of near-infrared spectroscopy to determine biological and chemical soil properties: Importance of sample pre-treatment[J]. *Soil Biology & Biochemistry*, 2008, 40(5):1178-1188.
- [65] 谢伯承, 薛绪掌, 王纪华, 等. 褐潮土的光谱特性及用土壤反射率估算有机质含量的研究[J]. 土壤通报, 2004, 35(4):391-395.