

# 近红外光谱结合偏最小二乘法快速评估土壤质量\*

王 昶 黄驰超 余光辉<sup>†</sup> 冉 炜 沈其荣

(南京农业大学资源与环境科学学院, 农业部长江中下游植物营养与施肥重点实验室,  
江苏省固体有机废弃物资源化高技术研究重点实验室, 南京 210095)

**摘要** 以长江中下游粮食主产区水稻土为研究对象, 采集 17 种不同施肥处理下共 136 个土壤样品在 350 ~ 2 500 nm 范围的近红外光谱, 利用偏最小二乘回归分析结合交叉验证法建立了近红外漫反射光谱与传统化学分析方法测得的全碳、全氮、碳氮比、速效钾、速效磷、电导率、土壤 pH 等土壤指标之间的定量分析模型。模型的决定系数( $R^2$ )以及化学分析值标准差(SD)与模型的内部交叉验证均方差(RMSECV)的比值 RSC 用于判定建立的模型的好坏。结果表明: 全碳、全氮、碳氮比和 pH 模型的  $R^2$  和 RSC 分别为:  $R^2 = 0.94$ ,  $RSC = 4.31$ ;  $R^2 = 0.95$ ,  $RSC = 4.35$ ;  $R^2 = 0.97$ ,  $RSC = 5.60$ ;  $R^2 = 0.92$ ,  $RSC = 3.37$ , 说明上述土壤指标的预测结果很好。速效钾模型的  $R^2$  和 RSC 分别为:  $R^2 = 0.87$ ,  $RSC = 2.23$ , 表明预测结果尚好。而速效磷和电导率模型的  $R^2$  和 RSC 分别为:  $R^2 = 0.18$ ,  $RSC = 1.16$ ;  $R^2 = 0.37$ ,  $RSC = 1.31$ , 说明两者的预测结果均很不理想。综上所述, 水稻土的土壤质量相关指标(全碳、全氮、碳氮比、速效钾和土壤 pH)可以通过近红外光谱结合偏最小二乘法(NIR-PLS)快速评估。

**关键词** 近红外光谱; 偏最小二乘法; 土壤质量; 模型

**中图分类号** S123; S153.6; O433.1 **文献标识码** A

我国农田土壤大部分属于中低产田范畴, 由于超强度、不合理的开发利用, 农田土壤肥力和生产力退化的现象较严重, 直接影响农作物的产量, 使国家粮食安全和农业可持续发展受到威胁<sup>[1]</sup>。培肥可以提高土壤质量, 增加粮食产能, 是发展农业现代化和可持续利用土壤资源的重要措施。因此, 快速评估不同培肥措施下土壤质量指标的改善对于优化培肥措施具有重要意义。由于传统的土壤质量评估体系耗时、费力, 因此, 寻求省时、经济的土壤质量分析方法已成为时下研究的热点<sup>[2-4]</sup>。

近红外漫反射光谱技术(FT-NIR)经过近半个世纪的发展现已成为颇具应用前途的分析技术。该技术具有快速、无损、易操作、稳定性好及可实现多组分同时测定等多个优点, 已被大量国外研究者用于快速评估土壤质量指标<sup>[5-8]</sup>。研究表明, 近红外光谱对土壤生物量碳和生物量氮<sup>[8]</sup>、全碳和全氮<sup>[9]</sup>以及有机质<sup>[10]</sup>含量均有较好的评估效果。对

于只经过简单预处理的土壤样品, 近红外光谱便能对其有机质含量、pH 和电导率进行很好的评估<sup>[11]</sup>。然而, 研究也表明, 近红外光谱并不是对所有的土壤质量指标均有好的预测效果, 如 Confalonieri 等<sup>[12]</sup>用近红外反射光谱法测定了不同土壤中的总有机碳、全氮、可交换钾和速效磷, 发现近红外光谱法可以准确预测土壤总有机碳和全氮, 但是对可交换钾和速效磷的预测效果较不理想。

近年来, 国内研究者也在近红外光谱快速评估土壤质量指标方面进行了很多工作。张娟娟等<sup>[13]</sup>利用近红外光谱法对 5 种不同类型土壤样本的全氮、有机质和速效氮含量进行预测, 其预测决定系数分别为 0.83、0.79 和 0.72, 表明近红外光谱法在评价不同类型的土壤质量指标方面也是可行的。朱登胜等<sup>[14]</sup>利用近红外光谱对浙江大学试验农场的油菜田 90 个土壤的有机质和 pH 进行了预测, 相关系数在 0.81 ~ 0.85, 说明近红外光谱法预测土壤

\* 国家重点基础研究发展计划(973 计划)(2011CB100503)、高校“青蓝工程”、111 计划(B12009)和博士后科学基金(1102079C)资助

<sup>†</sup> 通讯作者, E-mail: yuguanghui@njau.edu.cn; henan223@163.com

作者简介: 王 昶(1989—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为固体有机废弃物资源化利用和土壤有机质累积。E-mail: 2011103149@njau.edu.cn; 15996265258@163.com

收稿日期: 2012-09-27; 收到修改稿日期: 2013-04-07

有机质和 pH 也是可行的。申艳等<sup>[15]</sup>采用近红外光谱法对我国东北不同深度的黑土的有机碳和全氮进行了评估,其预测相关系数分别为 0.93 和 0.94,证明该法具有精确预测黑土有机碳和全氮的潜力。

可见,利用近红外光谱法能够快速评估土壤相关质量指标,但对于长江中下游粮食主产区(江苏省)水稻土在不同施肥条件下的质量指标的评估尚未见报道。因此,本文利用近红外光谱(NIR)结合偏最小二乘方法(PLS)评估长江中下游粮食主产区(江苏省)水稻土在不同施肥条件下的全碳、全氮、碳氮比、速效磷、速效钾、电导率、土壤 pH 等多项土壤质量指标,建立水稻土的近红外光谱数据库。本

研究采用便携式近红外光谱仪可望实现对水稻土土壤样品现场的实时监测,为精细农业科学施肥提供理论依据和技术支持。

## 1 材料与方 法

### 1.1 土 样 采 集 与 制 备

水稻土样品采自江苏省金坛市和张家港市 2 个田间试验点。该 2 个试验点 2010 年建成,由 17 个不同施肥处理(表 1)的试验区组组成,每个施肥处理设 4 个重复。采集 2 试验点每个小块试验区组 0~20 cm 耕种层土壤,共得  $2 \times 17 \times 4 = 136$  个土壤样品。

表 1 田间试验点的 17 种不同施肥处理方式

Table 1 The 17 fertilization treatments in the field experiments

试验田编号 Serial No. of the fields	施肥处理方式 Fertilization treatment	试验田编号 Serial No. of the fields	施肥处理方式 Fertilization treatment
1	对照 CK	10	猪粪 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 还田 + 70% 化肥 Pig manure 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + Straw incorporated + 70% CF
2	纯化肥(常规施用量)Chemical fertilizer (CF)	11	牛粪 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 还田 + 70% 化肥 Cattle manure 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + Straw incorporated + 70% CF
3	猪粪 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 70% 化肥 Pig manure 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 70% CF	12	猪粪 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 还田 + 70% 化肥 Pig manure 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + Straw incorporated + 70% CF
4	牛粪 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 70% 化肥 Cattle manure 3 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 70% CF	13	牛粪 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 还田 + 70% 化肥 Cattle manure 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + Straw incorporated + 70% CF
5	猪粪 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 50% 化肥 Pig manure 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 50% CF	14	猪粪堆肥有机无机复合 1 800 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> Compound fertilizer (Pig manure compost + CF) 1 800 kg $\times$ hm <sup>-2</sup>
6	牛粪 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 50% 化肥 Cattle manure 6 000 kg $\times$ hm <sup>-2</sup> + 50% CF	15	牛粪堆肥有机无机复合 1 800 kg hm <sup>-2</sup> Compound fertilizer (Cattle manure compost + CF) 1 800 kg $\times$ hm <sup>-2</sup>
7	秸秆还田 + 100% 化肥 Straw incorporated + 100% CF	16	猪粪堆肥有机无机复合 3 600 kg hm <sup>-2</sup> Compound fertilizer (Pig manure compost + CF) 3 600 kg hm <sup>-2</sup>
8	还田 + 伴侣 10 + 100% 化肥 Straw incorporated + straw decomposing agent 10 + 100% CF	17	牛粪堆肥有机无机复合 3 600 kg hm <sup>-2</sup> Compound fertilizer (Cattle manure compost + CF) 3 600 kg hm <sup>-2</sup>
9	还田 + 伴侣 20 + 100% 化肥 Straw incorporated + straw decomposing agent 20 + 100% CF		

注:CF 表示化肥常规施用量 Note: CF represents the conventional application amount of chemical fertilizer

土壤样品经自然风干后,分成 2 份,分别用于常规化学分析和近红外光谱分析。用于化学分析的土壤样品,根据测定参数的不同经磨碎和过筛处理,四分法得到过 20 目筛(孔径 1 mm)和 100 目筛(孔径 0.15 mm)的土样各 100 g;而近红外光谱分析的土壤样品,则均磨碎和过 100 目筛(孔径 0.15 mm),四分法取样 100 g。

## 1.2 化学分析

土壤有机质、全氮含量及碳氮比的测定采用 Vario ELIII 元素分析仪(Elementar 公司,德国);速效钾含量的测定采用  $1 \text{ mol L}^{-1} \text{ NH}_4\text{OAc}$  浸提-火焰光度法(AP1200 型火焰光度计,上海傲谱分析仪器有限公司);速效磷含量的测定采用  $0.5 \text{ mol L}^{-1} \text{ NaHCO}_3$  浸提-钼锑抗比色法(722S-可见分光光度计,上海菁华科技仪器有限公司)。pH 采用 pH 计(SartoriusPT-10,德国)测定 2.5:1 水土质量比浸提液。电导率采用智能电导温度仪(FJA-6 型,北京信诺高科仪器仪表商贸有限公司)测定 5:1 水土质量比浸提液。

## 1.3 近红外光谱分析

土壤样品光谱数据的采集使用美国 ASD 仪器公司的 AgriSpec 便携式近红外光谱仪,仪器参数设置如下:波长范围:350 ~ 2 500 nm;最快采集速度:100 ms;光谱分辨率:3 350 ~ 1 000 nm 波长范围内为 3 nm,1 000 ~ 2 500 nm 波长范围内为 10 nm;采样间隔:350 ~ 1 000 nm 波长范围内为 1.4 nm,1 000 ~ 2 500 nm 波长范围内为 2 nm;数据间隔:1 nm。

光谱采集的具体操作:将过 100 目筛(孔径 0.15 mm)的土壤样品置于直径 6 cm 的培养皿中,用培养皿盖轻刮样品表面,使得样品表面平整并均匀分布于培养皿内。再将便携式近红外光谱仪的光纤探头伸入土样中,测量中通过仪器自带的 ViewSpecPro 软件设定参数,并对光谱数据进行获取和保存。测量时,对每个土壤样品扫描 5 次,取其平均值作为该样品的光谱值。

## 1.4 定量分析模型的建立

预测模型是基于以下公式建立的:

$$Y = b \times X \quad (1)$$

其中, $Y$  代表目标参数(即实验室分析测得的土壤性质指标), $b$  代表校正函数, $X$  代表近红外光谱。

在建立模型前,先构造 2 个矩阵:(1)近红外光谱矩阵,矩阵行数与用于建立校正模型的土壤样品数一致,列数为 2 151(350 ~ 2 500 nm 间的 2 151 个

吸收值)。这个矩阵是预测模型中  $X$  项的来源。(2)实验室分析测得的土壤性质指标值矩阵,矩阵行数与用于建立校正模型的土壤样品数一致,列数为 1(即分析得到的每个土壤样品的相关性质指标值)。这个矩阵是预测模型中  $Y$  项的来源。

采用偏最小二乘法(PLS)建立校正模型。经试验验证的典型的光谱数据预处理的方法有:一阶导数、二阶导数、标准正态变量变换、多元散射校正、向量归一化、傅里叶变换、小波变换以及几种方法的组合<sup>[16]</sup>。在每个土壤性质指标模型的建立中,选择光谱预处理方法的原则是使得偏最小二乘算法能够在光谱数据和化学指标数据间建立最佳的相关关系。采用交叉验证的方法来建立模型。在这种方法中, $n - 1$  个样本用于校正模型的建立,剩下的一个样本用于对该模型进行估算和验证。这个过程相继重复直到所有的样本都被验证一次而且仅被验证一次。以上程序使用 UnscramblerTrial9.7 软件(CAMO 公司,挪威)执行。

## 1.5 定量分析模型的评价标准

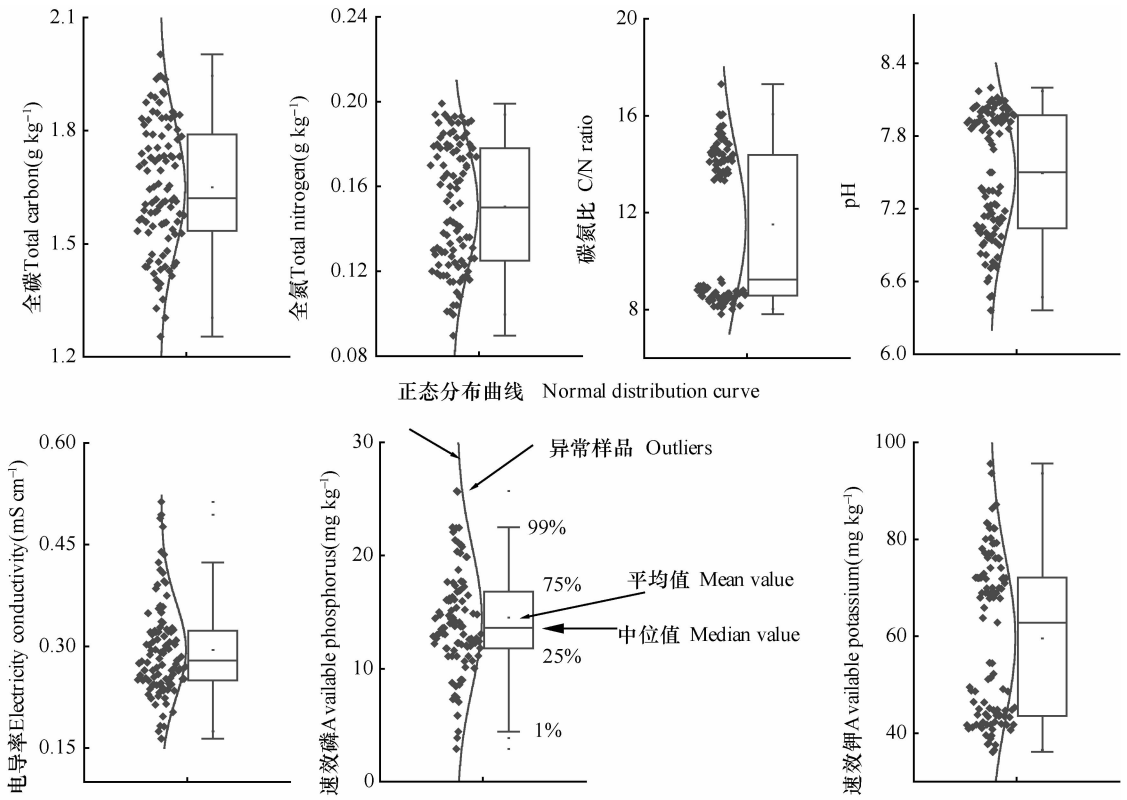
好的定量分析模型需要具有较低的内部交叉验证均方差(RMSECV)和较高的决定系数( $R^2$ )。此外,RSC 值,即标准差(SD)与内部交叉验证均方差(RMSECV)的比值也被用于评估模型的准确性。根据 Zornoza 等<sup>[8]</sup>和 Saey 等<sup>[17]</sup>研究中使用标准:  $0.66 \leq R^2 \leq 0.80$  表明模型只能起到近似定量预测的效果;  $0.81 \leq R^2 \leq 0.90$  表明模型的预测效果尚好;  $R^2 > 0.90$  表明模型的预测效果很好。至于 RSC 值,  $RSC < 2$  的模型不足以应用于定量分析;  $2 \leq RSC \leq 2.5$  的模型可用于粗略定量预测;  $2.5 \leq RSC \leq 3$  表明模型的预测效果不错;  $RSC > 3$  表明模型的预测效果很好。定量校正模型对验证集的预测,好的结果需要有较低的预测均方根误差(RMSEP)和较高的决定系数( $R^2$ )。此外,RPD 值,即标准差(SD)与预测均方根误差(RMSEP)的比值也被用于评估预测结果的准确性。  $1.4 \leq RPD \leq 2.0$ ,  $R^2 \geq 0.8$  表明预测结果尚好;  $RPD > 2$ ,  $R^2 \geq 0.9$  表明预测结果很好<sup>[18]</sup>。

## 2 结 果

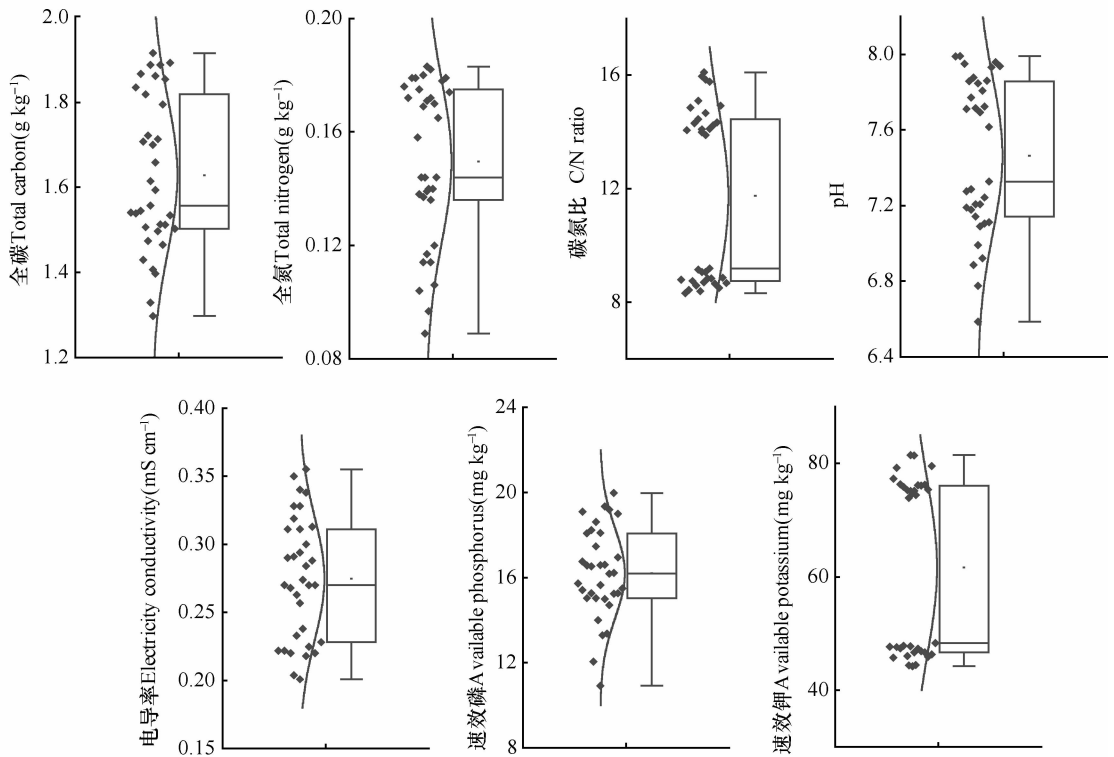
### 2.1 不同施肥处理的近红外漫反射光谱图

图 1 为以吸光度  $\log(1/R)$  为纵坐标,波长(nm)为横坐标的部分土壤样品的近红外漫反射光谱图。从图中可以看出,随着波长的增加,所有





a 校正样本土壤质量属性箱线图  
a Box-chart diagram of the calibration data set



b 预测样本土壤质量属性箱线图  
b Box-chart diagram of the prediction data set

图2 土壤质量指标校正样本与预测样本箱线图

Fig. 2 Box-chart diagrams of the calibration data set and prediction data set of soil quality indices

### 2.3 土壤质量指标定量模型的建立

图 3 为校正样本的全碳、全氮、碳氮比、pH、电导率、速效磷和速效钾的实测值与预测值间的相关关系图。从图 3 可知,全碳模型的决定系数为  $R^2 = 0.94$ , RSC = 4.31; 全氮模型的决定系数为  $R^2 = 0.95$ , RSC = 4.35; 碳氮比模型的决定系数为  $R^2 = 0.97$ , RSC = 5.60; pH 模型的决定系数为  $R^2 = 0.92$ , RSC = 3.37。以上结果表明,上述指标的预测结果非常好。

然而,速效钾模型的决定系数为  $R^2 = 0.87$ , RSC = 2.23, 说明速效钾的预测结果较好。速效磷模型的决定系数为  $R^2 = 0.18$ , RSC = 1.16, 而电导率模型的决定系数为  $R^2 = 0.37$ , RSC = 1.31。说明速效磷

和电导率的预测结果均不理想。

### 2.4 定量校正模型的检验

图 4 为定量校正模型对 34 个土壤样品组成的预测样本的检验。全碳、全氮和碳氮比预测样本实测值与预测值间的决定系数  $R^2$  和 RPD 分别为  $R^2 = 0.89$ , RPD = 2.83;  $R^2 = 0.90$ , RPD = 2.98;  $R^2 = 0.97$ , RPD = 5.68; 说明预测结果很好。同时, pH 与速效钾预测样本实测值与预测值间决定系数  $R^2$  和 RPD 分别为  $R^2 = 0.86$ , RPD = 1.92;  $R^2 = 0.82$ , RPD = 2.53; 表明 pH 与速效钾预测结果尚好。然而,电导率和速效磷验证集的预测效果均不理想,这与 2 项指标校正模型效果差有关。

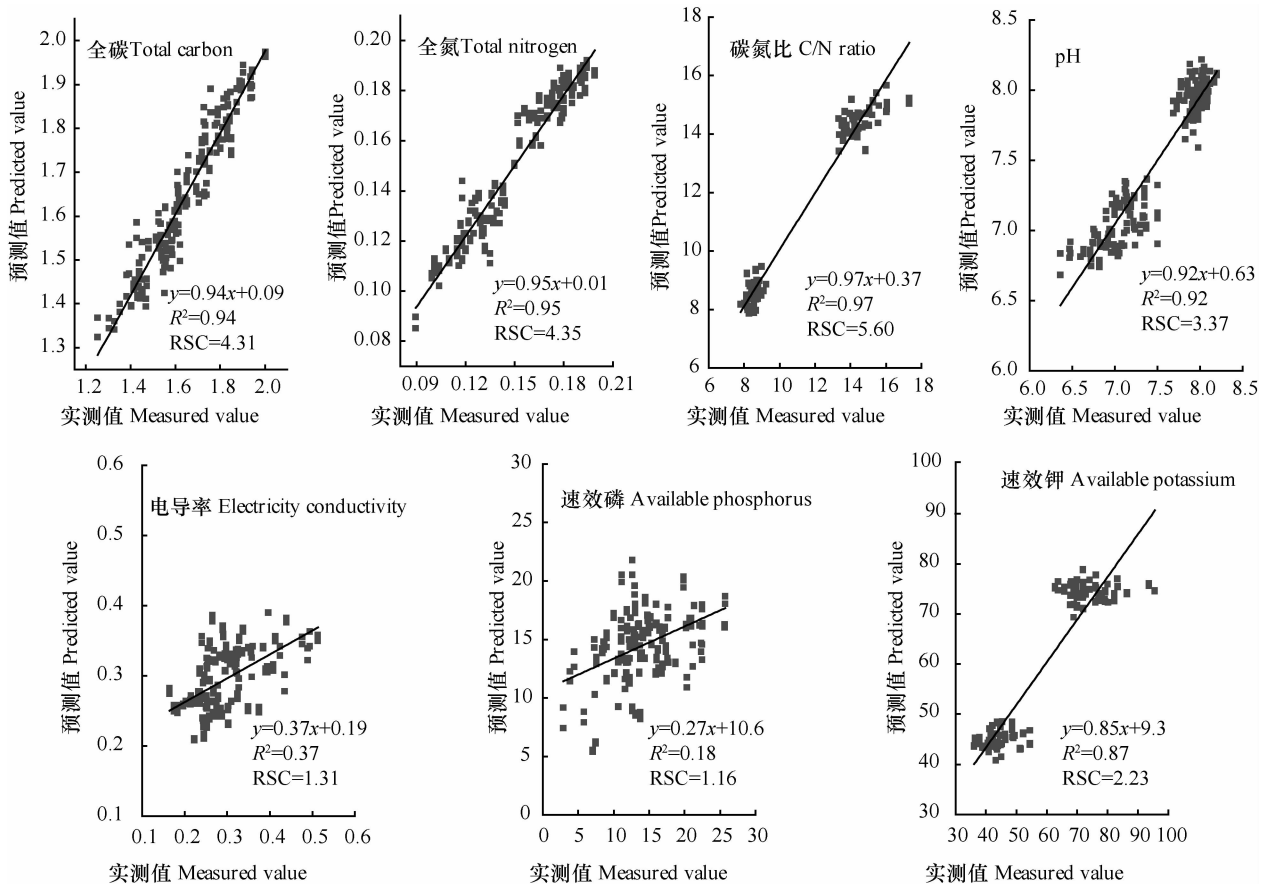


图 3 土壤质量指标校正样本实测值与预测值间相关关系图

Fig. 3 Relationship between measured and predicted values of soil quality indices for the calibration data set

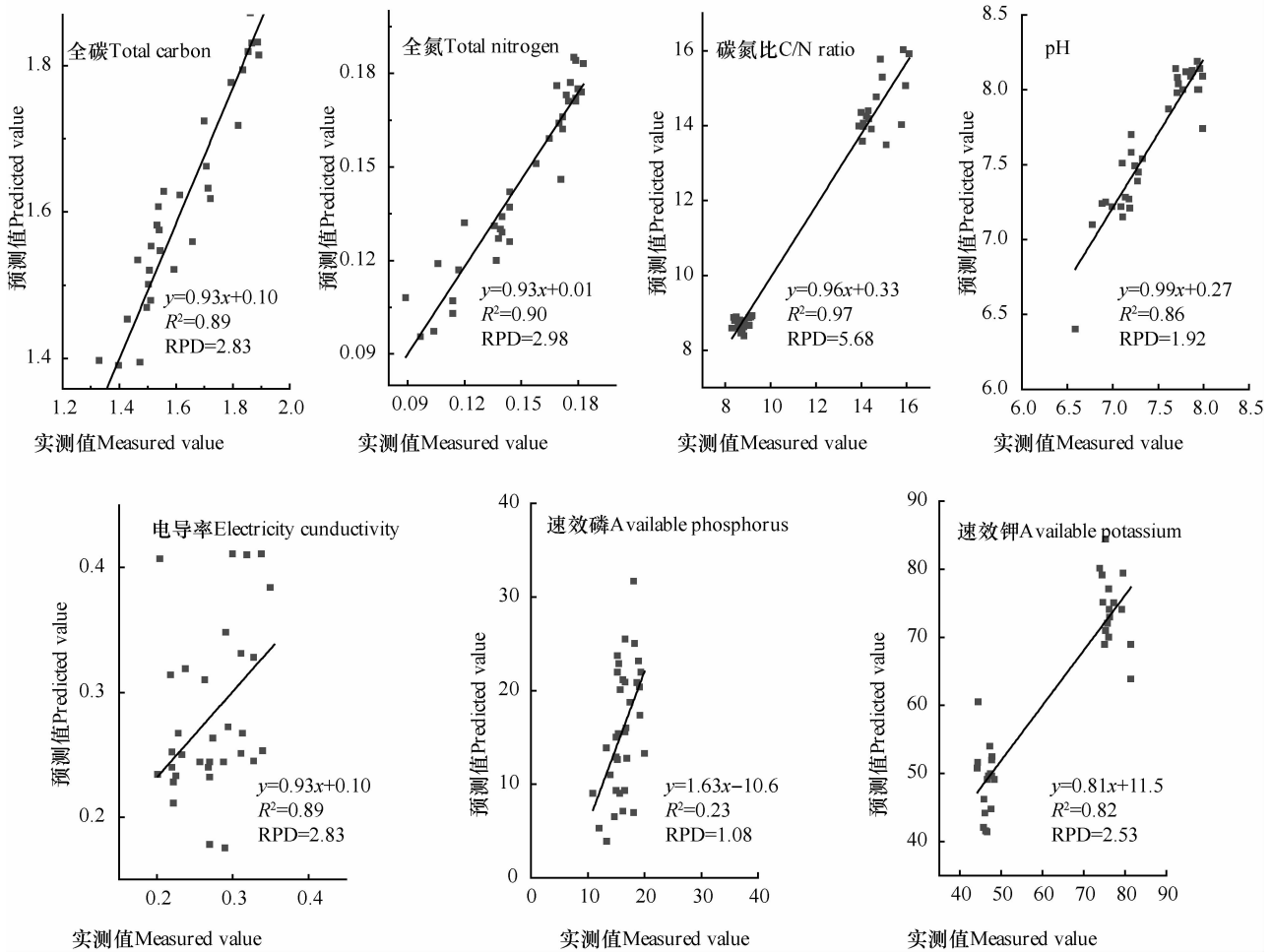


图4 土壤质量指标预测样本实测值与预测值间相关关系图

Fig. 4 Relationships between measured and predicted values of soil quality indices of the soil samples for prediction

### 3 讨论

水稻土全碳和全氮与近红外光谱吸光度之间的 PLS 定量模型的决定系数  $R^2$  和 RSC 分别为  $R^2 = 0.94$ ,  $RSC = 4.31$ ;  $R^2 = 0.95$ ,  $RSC = 4.35$ 。利用模型对 34 个样品进行预测,得到的样品预测值与实测值之间的决定系数  $R^2$  和 RPD 分别为  $R^2 = 0.89$ ,  $RPD = 2.83$ ;  $R^2 = 0.90$ ,  $RPD = 2.98$ ,本研究结果与 Ludwig 等<sup>[26]</sup>以及 Bernard 和 Barthes<sup>[27]</sup>的研究结果相近。但 Bernard 和 Barthes<sup>[27]</sup>对于粒径大于 0.2 mm 的土壤样品所建立的全碳模型的决定系数只有 0.80。高洪智和卢启鹏<sup>[28]</sup>利用建立的土壤全氮模型对样品进行预测,得到的样品预测值与实测值之间的决定系数仅为 0.85。虽然近红外光谱分析结果的准确性与诸多因素有关,如仪器的精度、样品的类型、样品数量的多少、样品颗粒度大小、光谱的

预处理方式和模型建立的方法等,但建模所采用的土壤类型也是一个极为重要的影响因素。本研究中,由于用于建模的土壤样品为同一类型的土壤,因此,建模参数优于上述文献中报道的参数。

水稻土的碳氮比与近红外光谱之间的相关性也很高,定量校正模型的决定系数  $R^2$  和 RSC 分别为  $R^2 = 0.97$ ,  $RSC = 5.60$ ;定量校正模型的检验结果也很好,样品预测值与实测值之间的决定系数  $R^2$  达到 0.97,RPD 值也达到 5.68;均好于 Ludwig 等<sup>[26]</sup>( $R^2 = 0.61$ ), Bernard 和 Barthes<sup>[27]</sup>( $R^2 = 0.87$ )和申艳等<sup>[15]</sup>( $R^2 = 0.61$ )的结果。水稻土的 pH 定量校正模型的决定系数  $R^2$  和 RSC 分别为  $R^2 = 0.92$ ,  $RSC = 3.37$ ,分别达到了  $R^2 > 0.90$ ,  $RSC > 3$  的标准,预测样本实测值与预测值间决定系数  $R^2 = 0.86$ ,  $RPD = 1.92$ ,表明该模型预测精度高,可用于实际检测。本研究结果好于 Zornoza 等<sup>[18]</sup>( $R^2 = 0.72$ )和朱

登胜等<sup>[14]</sup> ( $R^2 = 0.83$ ) 的研究结果,而 Volkan 等<sup>[6]</sup> 对于 pH 的预测效果很不理想 ( $R^2 = 0.35$ )。这可能与化学测定值的范围较窄,未拉开梯度,或与黏土和有机质含量这些更易于被近红外光谱直接表征的变量之间的相关性较差有关。水稻土的速效钾模型的决定系数  $R^2$  和 RSC 分别为  $R^2 = 0.87$ ,  $RSC = 2.23$ , 预测样本实测值与预测值间决定系数  $R^2 = 0.82$ ,  $RPD = 2.53$ , 表明预测的效果尚好,优于李伟等<sup>[29]</sup> 的预测结果 ( $R^2 = 0.73$ )。此外, Zornoza 等<sup>[8]</sup> 对于土壤可交换性钾的预测研究也取得了一定的效果 ( $R^2 = 0.79$ ,  $RSC = 2.19$ )。因此,对于不同形态钾含量的预测研究均有良好的发展前景。

本研究对于水稻土的速效磷的预测结果不理想 ( $R^2 = 0.18$ ,  $RSC = 1.16$ ), 而李伟等<sup>[29]</sup> 对东北黑土速效磷的研究结果则比较理想 ( $R^2 = 0.87$ ), 这可能与水稻土中速效磷变化较大有关。水稻土的电导率模型的决定系数  $R^2$  和 RSC 分别为  $R^2 = 0.37$ ,  $RSC = 1.31$ , 结果不理想; 而 Zornoza 等<sup>[8]</sup> ( $R^2 = 0.57$ ,  $RSC = 1.73$ ) 和 Volkan 等<sup>[6]</sup> ( $R^2 = 0.30$ ) 的预测结果也均不理想, 这可能与电导率化学实测值不符合正态分布规律, 或与有机质含量等这些更易于被近红外光谱直接表征的变量之间的相关性较差有关。

## 4 结 论

本文利用近红外漫反射光谱法测量了长江中下游粮食主产区(江苏省)水稻土的吸收光谱, 分析了水稻土全碳、全氮、碳氮比、速效钾、速效磷、电导率、土壤 pH 与土壤近红外光谱之间的相关性, 运用偏最小二乘法建立了近红外光谱预测水稻土质量指标的定量模型。近红外光谱法结合偏最小二乘法(NIR-PLS)对水稻土全碳、全氮、碳氮比、pH 和速效钾的预测效果较好, 其定量校正模型的决定系数  $R^2$  和 RSC 分别为:  $R^2 = 0.94$ ,  $RSC = 4.31$ ;  $R^2 = 0.95$ ,  $RSC = 4.35$ ;  $R^2 = 0.97$ ,  $RSC = 5.60$ ;  $R^2 = 0.92$ ,  $RSC = 3.37$ ;  $R^2 = 0.87$ ,  $RSC = 2.23$ 。说明长江中下游粮食主产区(江苏省)水稻土的土壤质量相关指标(全碳、全氮、碳氮比、速效钾和土壤 pH)可以通过 NIR-PLS 快速评估。本文对水稻土的速效磷和电导率的预测效果并不理想, 有待进一步研究。

## 参 考 文 献

[1] 徐明岗, 卢昌艾, 李菊梅, 等. 农田土壤培肥. 北京: 科学出版

社, 2009. Xu M G, Lu C A, Li J M, et al. Fertilization of agricultural soils (In Chinese). Beijing: Science Press, 2009

- [2] Xie X L, Pan X Z, Sun B. Visible and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for prediction of soil properties near a copper smelter. *Pedosphere*, 2012, 22(3): 351—366
- [3] Cohen M J, Prenger J P, DeBusk W F. Visible-near infrared reflectance spectroscopy for rapid, non-destructive assessment of wetland soil quality. *Journal of Environmental Quality*, 2005, 34(4): 1422—1434
- [4] 邓晶, 杜昌文, 周健民, 等. 红外光谱在土壤学中的应用. *土壤*, 2008, 40(6): 872—877. Deng J, Du C W, Zhou J M, et al. Application of infrared spectroscopy in soil science (In Chinese). *Soils*, 2008, 40(6): 872—877
- [5] Chang C W, Laird D A, Mausbach M J, et al. Near-infrared reflectance spectroscopy-principal components regression analyses of soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 2001, 65(2): 480—490
- [6] Volkan B 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. *Journal of Arid Environments*, 2010, 74(2): 229—238
- [7] Summers D, Lewis M, Ostendorf B, et al. Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. *Ecological Indicators*, 2011, 11(1): 123—131
- [8] Zornoza R, Guerrero C, Mataix-Solera J, et al. Near infrared spectroscopy for determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. *Soil Biology & Biochemistry*, 2008, 40(7): 1923—1930
- [9] Vergnoux A, Dupuy N, Guiliano M, et al. Fire impact on forest soils evaluated using near-infrared spectroscopy and multivariate calibration. *Talanta*, 2009, 80(1): 39—47
- [10] Lauric C, Nathalie C, Sonia C, et al. Predicting soil quality indices with near infrared analysis in a wildfire chronosequence. *Science of the Total Environment*, 2009, 407(3): 1200—1205
- [11] Javier M, Maria J M, Carmen P, et al. Testing of the region of murcia soils by near infrared diffuse reflectance spectroscopy and chemometrics. *Talanta*, 2009, 78(2): 388—398
- [12] Confalonieri M, Fornasier F, Ursino A, et al. The potential of near infrared reflectance spectroscopy as a tool for the chemical characterization of agricultural soils. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2001, 9(1): 123—131
- [13] 张娟娟, 田永超, 姚霞, 等. 同时估测土壤全氮、有机质和速效氮含量的光谱指数研究. *土壤学报*, 2012, 49(1): 50—59. Zhang J J, Tian Y C, Yao X, et al. The spectral index for estimating soil OM, TN and AN content simultaneously using near-infrared spectroscopy (In Chinese). *Acta Pedologica Sinica*, 2012, 49(1): 50—59
- [14] 朱登胜, 吴迪, 宋海燕, 等. 应用近红外光谱法测定土壤的有机质和 pH 值. *农业工程学报*, 2008, 24(6): 196—199. Zhu D S, Wu D, Song H Y, et al. Determination of organic matter contents and pH values of soil using near infrared spectroscopy (In Chinese). *Transactions of the CSAE*, 2008, 24(6): 196—199



- [15] 申艳, 张晓平, 梁爱珍, 等. 近红外光谱分析法测定东北黑土有机碳和全氮含量. 应用生态学报, 2010, 21(1): 109—114. Shen Y, Zhang X P, Liang A Z, et al. Near infrared spectroscopy in determining organic carbon and total nitrogen in black soil of Northeast China (In Chinese). Chinese Journal of Applied Ecology, 2010, 21(1): 109—114
- [16] Conzen J P. Multivariate calibration. A practical guide for developing methods in the quantitative analytical chemistry. Germany: Bruker Optik, 2003
- [17] Saews W, Mouazen A M, Ramon H. Potential for onsite and on-line analysis of pig manure using visible and near infrared reflectance spectroscopy. Biosystems Engineering, 2005, 91(4): 393—402
- [18] Thomas T, Harald S, Rainer G J, et al. Usefulness of near-infrared spectroscopy to determine biological and chemical soil properties: Importance of sample pre-treatment. Soil Biology & Biochemistry, 2008, 40(5): 1178—1188
- [19] Fidencio P H, Poppi R J, Andrade J C, et al. Determination of organic matter in soil using near-infrared spectroscopy and partial least squares regression. Communications in Soil Science and Plant Analysis, 2002, 33(9): 1607—1615
- [20] Cozzolino D, Moro'n A. The potential of near-infrared reflectance spectroscopy to analyse soil chemical and physical characteristics. Journal of Agricultural Science, 2003, 140(1): 65—71
- [21] Morra M J, Hall M H, Freeborn L L. Carbon and nitrogen analysis of soil fractions using near infrared reflectance spectroscopy. Soil Science Society of America Journal, 1991, 55(1): 288—291
- [22] Salgo A, Nagy J, Tarno Y J, et al. Characterisation of soil by near infrared technique. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 1998, 6: 199—203
- [23] 孙建英, 李民赞, 唐宁, 等. 东北黑土的光谱特性及其与土壤参数的相关性分析. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(8): 1502—1505. Sun J Y, Li M Z, Tang N, et al. Spectral characteristics and their correlation with soil parameters of black soil in Northeast China (In Chinese). Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(8): 1502—1505
- [24] 陆婉珍, 袁洪福, 徐广通. 现代近红外光谱分析技术. 北京: 中国石化出版社, 2000. Lu W Z, Yuan H F, Xu G T. Modern near infrared spectroscopy analytical technology (In Chinese). Beijing: China Petrochemical Press, 2000
- [25] Meissl K, Smidt E, Schwanninger M, et al. Determination of humic acids content in composts by means of near-and mid-infrared spectroscopy and partial least squares regression models. Applied Spectroscopy, 2008, 62(8): 873—880
- [26] Ludwig B, Khana P K, Bauhus J, et al. Near infrared spectroscopy of forest soils to determine chemical and biological properties related to soil sustainability. Forest Ecology and Management, 2002, 171(1): 121—132
- [27] Bernard G, Barthes D B. Determining the distributions of soil carbon and nitrogen in particle size fractions using near-infrared reflectance spectrum of bulk soil samples. Soil Biology & Biochemistry, 2008, 40(6): 1533—1537
- [28] 高洪智, 卢启鹏. 土壤主要养分近红外光谱分析及其测量系统. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(5): 1245—1249. Gao H Z, Lu Q P. Near infrared spectral analysis and measuring system for primary nutrient of soil (In Chinese). Spectroscopy and Spectral Analysis, 2011, 31(5): 1245—1249
- [29] 李伟, 张书慧, 张倩, 等. 近红外光谱法快速测定土壤碱解氮、速效磷和速效钾含量. 农业工程学报, 2007, 23(1): 55—59. Li W, Zhang S H, Zhang Q, et al. Rapid prediction of available N, P and K content in soil using near-infrared reflectance spectroscopy (In Chinese). Transactions of the CSAE, 2007, 23(1): 55—59

## RAPID EVALUATION OF SOIL QUALITY THROUGH A NEAR INFRARED-PARTIAL LEAST SQUARES (NIR-PLS) METHOD

Wang Chang Huang Chichao Yu Guanghui<sup>†</sup> Ran Wei Shen Qirong

(Agricultural Ministry Key Lab of Plant Nutrition and Fertilization in Low-Middle Reaches of the Yangtze River, Jiangsu Key Lab for Organic Solid Waste Utilization, College of Resources and Environmental Sciences, Nanjing Agricultural University, Nanjing 210095, China)

**Abstract** In this study, a total of 136 paddy soil samples were collected from 17 different fertilization treatments of two short-term field experiments in Jintan and Zhangjiagang, the main grain production region in the middle and lower reaches of the Yangtze River for near infrared (350 ~ 2 500 nm) -partial least squares (NIR-PLS) regression analysis. Based on the analysis coupled with the cross validation method, a model was established for quantitative analysis of the total carbon, total nitrogen, C/N ratio, available potassium, available phosphorus, electro-conductivity and soil pH obtained by near infrared diffuse reflectance spectroscopy and traditional chemical analysis.  $R^2$ , determination coefficient value, and RSC, ratio of SD (standard deviation of chemical analysis)/RMSECV (root mean square error of cross validation) are two criteria for evaluation of the model. Results show that for the total carbon, total nitrogen, C/N ratio and pH,  $R^2$  was 0.

94, 0.95, 0.97 and 0.92 and RSC was 4.31, 4.35, 5.60 and 3.37, respectively, suggesting that the model is good in prediction. For available potassium,  $R^2$  was 0.81 and RSC was 2.23, indicating that the model is good, however, for available phosphorus and electro-conductivity,  $R^2$  was 0.22 and 0.37 and RSC was 0.16 and 1.31, respectively, demonstrating that the model is not so ideal. To sum up, for paddy soil, relevant quality indices can be rapidly predicted through NIR-PLS regression analysis.

**Key words** Near infrared spectroscopy; Partial least squares regression; Soil quality; Model

(责任编辑:汪枫生)