

DOI: 10.11766/trxb201706040137

黄绵土钾含量高光谱估算模型研究*

刘秀英¹ 石兆勇¹ 常庆瑞^{2†} 刘晨洲¹ 黄明¹ 古星¹

(1 河南科技大学农学院, 河南洛阳 471023)

(2 西北农林科技大学资源环境学院, 陕西杨凌 712100)

摘要 为了研究可见/近红外光谱法估算渭北旱塬区黄绵土钾含量的可行性, 以陕西省乾县试验田采集的120个土壤样品为研究对象, 在室内进行土壤全钾、速效钾含量及反射光谱数据测量的基础上, 应用多元线性回归(MLR)和偏最小二乘回归(PLSR)方法建立土壤钾含量的估算模型, 并用独立样本进行验证。结果表明, 以土壤光谱反射率一阶微分(DSSR)为自变量建立的多元线性回归模型(MLR)能进行土壤全钾含量准确估算。以波段深度一阶微分(DBD)为自变量建立的PLSR模型, 验证集的决定系数(R^2_{pre})大于0.90, 预测均方根误差(RMSE_{pre})等于0.054, 预测相对分析误差(RPD_{pre})等于3.310, 是估算土壤全钾含量的最优模型; 而以DSSR为自变量建立的PLSR模型, RPD_{pre} 值为1.619和1.572, 是估算土壤速效钾含量的最优模型。本研究表明可见/近红外光谱结合多元线性回归和偏最小二乘回归方法能对渭北旱塬区黄绵土全钾含量进行快速、准确估算, 但对速效钾含量仅能进行粗略估算。

关键词 高光谱; 多元线性回归; 偏最小二乘回归; 黄绵土; 全钾; 速效钾

中图分类号 S153 **文献标识码** A

土壤是农业生产的重要载体, 而钾是土壤中含量最高的营养元素, 也是植物生长必需的营养元素之一^[1], 因此快速、准确地获取农田土壤钾含量, 可以及时了解土壤肥力变化, 进而为精准农业的变量施肥提供参考。传统土壤钾含量的测定采用实验室化学测定法, 化学测定法相对准确, 但是过程繁琐, 需要耗费大量的人力、物力和财力, 并且往往具有滞后性。而光谱分析技术是将光谱测量技术与化学计量学方法有机结合, 建立校正模型, 快速预测未知样品组成或性质的一种分析技术, 现已成为一种无损、快速检测土壤养分含量的新方法。由于野外测量的土壤光谱受多种复杂因素的影响, 往往难以表征土壤的真实光谱信息, 利用其直接预

测土壤养分含量, 往往存在精准度较低的问题。而室内控制条件下可获得稳定的土壤光谱信息, 进行土壤养分含量反演可得到可靠的结果。相对传统化学方法, 室内光谱分析技术具有省时、省力、无污染的优点, 当精度较高、稳定性较好时可替代某些化学方法, 并且可同时预测多种土壤养分含量。

已有研究表明, 原生矿物对土壤光谱具有一定的影响^[2], 而钾元素主要以矿物态形式存在于土壤中^[3], 因此利用光谱分析技术反演土壤钾含量, 理论上具有一定的可行性。近年来, 国内外已有学者尝试利用光谱分析技术对土壤钾含量进行定量分析。Confalonieri等^[4]利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

* 国家高技术研究发展计划项目(2013AA102401-2)、河南科技大学博士科研启动基金(13480074)和大学生研究训练计划项目(2017297)资助 Supported by the National 863 Plan Project of China (No.2013AA102401-2), the Doctoral Scientific Research Foundation of Henan University of Science and Technology of China (No.13480074), Student Research Training Program (No.2017297)

† 通讯作者 Corresponding author, E-mail: changqr@nwsuaf.edu.cn

作者简介: 刘秀英(1977—), 女, 湖南人, 博士, 讲师, 主要从事高光谱遥感及GIS应用研究。E-mail: csfulxy@126.com

收稿日期: 2017-06-04; 收到修改稿日期: 2017-08-03; 优先数字出版日期(www.cnki.net): 2017-11-10

有效磷含量,结果表明近红外光谱法可以准确地测定土壤中全氮和有机碳含量,而可交换钾和速效钾的预测效果很不理想。Malley等^[5]在对钾的预测时发现,校正样本的相关系数比较高,但是对于预测样本的预测精度却不是很高,使得模型的重复性比较差。Viscarra Rossel等^[6]利用不同波长光谱结合偏最小二乘回归法,同时估算多种土壤属性,结果表明近红外光谱对于交换性钾可以获得更高的精度,调整 R^2 为0.47,预测均方根误差(RMSE)为1.84,但是精度远低于有机碳、pH等土壤属性。Debaene等^[7]采用可见/近红外光谱方法对土壤速效钾、速效磷、Mg、SOC等多种属性进行预测,结果表明土壤速效钾和速效磷的预测效果不理想。徐永明等^[8]的研究表明土壤钾含量通过可见/近红外光谱估算精度较低,相对误差较大。胡芳等^[9]对土壤光谱进行倒数对数、一阶微分及提取波段深度的基础上,运用偏最小二乘回归(PLSR)方法建立了土壤钾含量的预测模型,结果表明波段深度是估算土壤钾含量最好的光谱指标。胡国田等^[10]利用直接正交信号校正(DOSC)方法进行土壤光谱预处理,结合PLSR方法建立了美国密苏里州8种类型土壤的钾含量监测模型,结果表明经过直接正交信号校正的模型预测精度显著提高,但是土壤钾的总体精度不高,只能进行粗略估算,模型需要改善。有的学者对土壤钾含量进行光谱预测时获得了较高的精度^[11-13]。上述研究表明光谱分析技术能够成功地预测土壤全氮、有机碳、pH等属性,而土壤钾含量的测定虽然具有一定的可行性和准确性,但是由于钾在近红外没有特定的吸收波段,其含量的光谱预测可能归因于钾与光谱活跃成分(例如:有机质、碳酸盐、黏土矿物、水分等)局部存在相关关系,而且不同类型土壤中钾的含量及组成差异较大,因而其预测效果随土壤类型、颗粒大小、测量条件、土壤性质等变化,很不稳定,有必要进行进一步的研究。

陕西渭北旱塬区位于陕北丘陵沟壑区的南部,关中平原的北部,黄土高原中部,海拔600~1 300 m,属于地势较平坦的部分。该区域是陕西省农业生产的主要基地,也是我国重要的农业生态区^[14],黄绵土是该区域的主要土壤类型之一^[15],快速、准确地估测该区域黄绵土钾含量十分重要。因此,本文以渭北旱

塬试验区黄绵土为研究对象,通过包络线消除法提取土壤光谱波段深度,在相关分析的基础上,结合多元线性回归(MLR)和偏最小二乘回归(PLSR)方法建立黄绵土全钾(Total potassium, TK)和速效钾(Readily available potassium, AK)含量的估算模型,并用独立样本进行验证,以期实现该区域黄绵土钾含量的快速、无损估算,为精准农业变量施肥提供参考。

1 材料与方 法

1.1 研究区概况

土壤样品均采自陕西省乾县(108°07'E, 34°38'N),该县地处陕北黄土高原南缘与关中平原过渡地带,属于典型的渭北旱塬农业区,是陕西省重要的粮食和水果生产基地。该地区土地利用方式比较单一,主要种植小麦和玉米,经济作物以苹果为主。该区域属于暖温带半干旱大陆性季风气候,年平均气温和降水分别为12.7 °C和525 mm,水资源极其缺乏,农业生产用水主要靠自然降雨,全年降雨分布不均,多集中在6—9月。黄绵土是该区域主要土壤类型之一,研究区位置及采样点分布详见图1。

1.2 土壤样品采集与分析

在小麦、玉米、棉花等作物种植前或收获后采集3块试验地的试验小区及大田耕层(0~20 cm)土壤作为分析样品,采样点之间的距离约为25~40 m,共采集120个土壤样品。剔除土壤中的侵入体后进行自然风干。研磨后过1 mm孔筛,采用四分法取样,一式两份,一份用于土壤光谱反射率的测定,另一份用于土壤全钾和速效钾含量的测定。土壤全钾及速效钾含量均采用火焰光度计测定。具体检测方法参见《土壤农化分析》^[16]。

1.3 土壤光谱的测定

土壤光谱采用美国Spectra Vista公司于2013年全新推出的高性能地物光谱仪(SVC HR-1024i便携式光谱仪)测定。光源为功率50W卤素灯,入射角为15°,与土样表面距离约30 cm;探头视场角为8°,垂直放置于目标物正上方,距离约15 cm^[17]。土样置于直径15 cm的容器中,装满后将土壤表面刮平。为降低土样各向异性的影响,测量

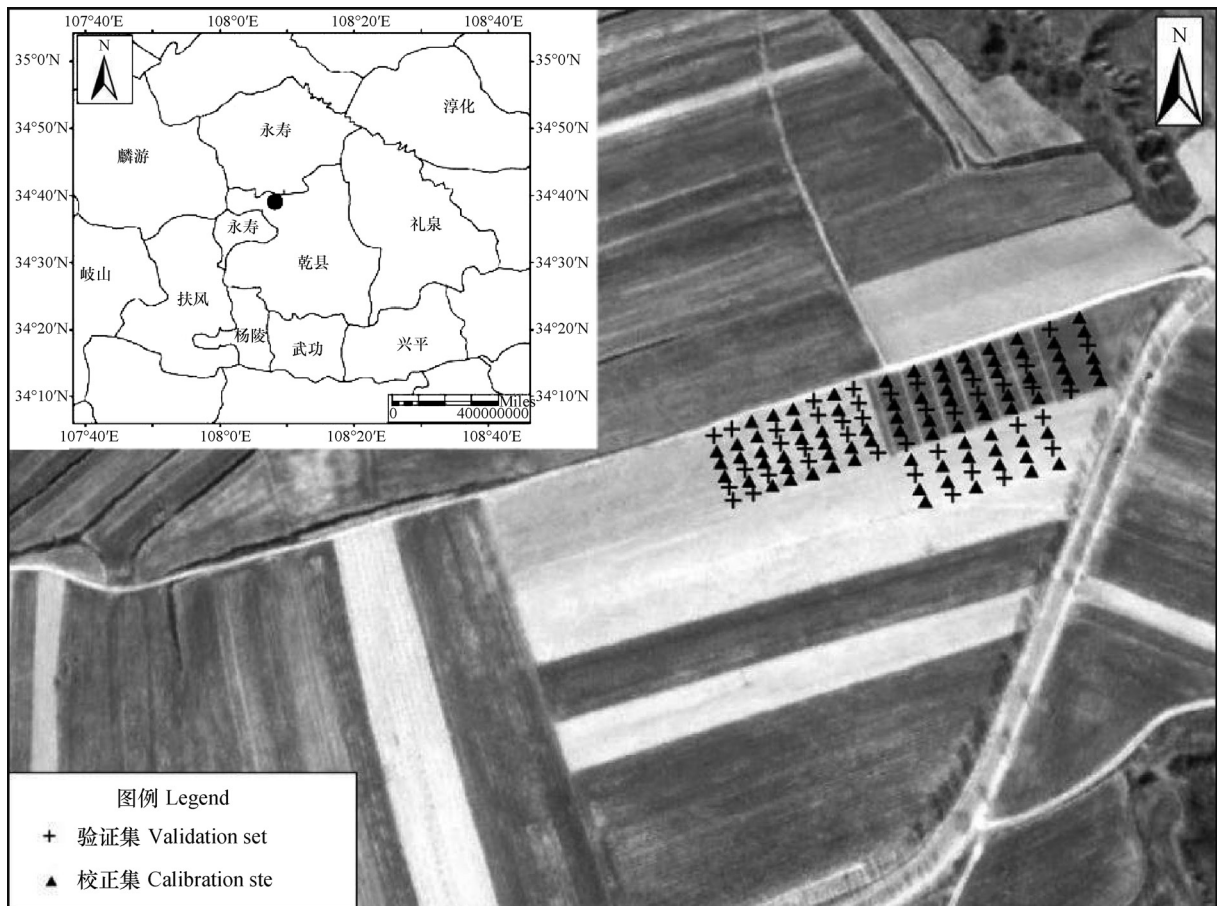


图1 研究区及采样点分布图

Fig. 1 Research field and distribution of sampling sites

时同一方向转动盛样皿3次，每次约90度，每个方向采集3条样本线，一个样本共采集12条，去除异常线后求算术平均，得到该土样的光谱反射率。测量过程中及时进行标准白板校正。

1.4 数据预处理及模型建立

为了消除不同探测元件造成的误差，使用SVC HR-1024i地物光谱仪自带的软件进行重叠数据剔除及不同探测器的匹配算法、文件合并；剔除两端信噪比较低的区域，保留400~2400 nm波段范围的光谱反射率数据进行研究；然后将高光谱数据以10 nm间隔重采样（已有研究表明10 nm间隔不会损失重要信息），以降低数据维数。在Unscrambler 9.7软件（Camo Inc., Oslo, Norway）中采用移动均值平滑（Segment size为9），进行光谱曲线低通滤波处理，去除包含在光谱数据中的噪声。由于土壤中的营养元素对光谱具有吸收作用，因此本研究选择常用的波段吸收特征参数波段深度（Band depth, BD）进行研究。已有研究表明，对

光谱曲线作一阶微分变换，可以对重叠混合光谱进行分解，便于识别，并扩大样本之间的光谱特征差异，去除与波长无关的漂移，本研究对土壤光谱反射率（Soil spectral reflectance, SSR）及波段深度进行了一阶微分处理（DSSR和DBD）。

120个样本数据根据全钾及速效钾含量按照升序进行排列，等间隔抽取2个组成建模集，余下的作为验证集，从而得到80个样本的建模集，40个样本的验证集。在相关分析的基础上（应用Excel软件进行相关分析），选取相关系数最大的10个波段对应的光谱变量作为自变量，采用多元线性回归建立土壤钾含量的估算模型；以全波段及极显著相关波段（ $p>0.01$ ）对应的光谱变量作为自变量，采用PLSR方法建立土壤钾含量的估算模型；并采用独立样本进行验证。

模型的校正精度通过校正模型的决定系数（Coefficients of determination, R_c^2 ）、均方根误差（Root mean square error, $RMSE_c$ ）、交叉验

证模型的决定系数 (Determination coefficients of cross-validation model, R_{cv}^2) 来评价; 预测精度根据预测模型决定系数 (Determination coefficients of prediction model, R_{pre}^2)、均方根误差 (Root mean square error of prediction, $RMSE_{pre}$) 及剩余预测误差 (Residual predictive deviation, RPD_{pre}) 进行评价。 R_c^2 、 R_{cv}^2 、 R_{pre}^2 越大, $RMSE_c$ 、 $RMSE_{pre}$ 越小, 表明模型的校正及预测精度越高。 RPD 值可以解释模型的预测能力, 其评价标准沿用Chang和Laird^[18]提出的阈值划分方法, 即 $RPD \geq 2.0$, 说明模型是稳定和准确的, 具有较好的预测能力; $1.4 \leq RPD < 2.0$ 说明模型可进行粗略预测, 并可以改进; $RPD < 1.4$ 说明模型的预测能

力很差。本研究均应用Unscrambler 9.7软件建立MLR及PLSR模型。

2 结果

2.1 土壤钾含量的统计特征

土壤样品的全钾和速效钾的全集、校正集和验证集的统计参数见表1。从表1可知, 土壤全钾的变异较小, 校正集、验证集和全集的变异系数在13.44%~13.51%之间; 而土壤速效钾的变异则大于全钾, 在21.51%~21.78%之间。土壤全钾和速效钾的校正和验证集的标准差、均值和变异系数与全集均比较接近, 说明验证和校正集具有代表性。

表1 土壤钾含量的统计描述

Table 1 Descriptive statistics of soil potassium content

土壤属性 Soil property	数据集 Data set	样本数 Sample number	均值 Mean	标准差 Standard deviation	最小值 Minimum	最大值 Maximum	变异系数 CV (%)
全钾TK (g kg ⁻¹)	全集 ^①	120	13.52	1.82	10.88	16.50	13.44
	校正集 ^②	80	13.55	1.83	10.88	16.50	13.51
	验证集 ^③	40	13.46	1.81	10.97	16.31	13.45
速效钾AK (mg kg ⁻¹)	全集 ^①	120	176.58	38.14	117.2	304.87	21.60
	校正集 ^②	80	176.69	38.48	117.2	304.87	21.78
	验证集 ^③	40	176.36	37.94	118.9	279.00	21.51

①Total set, ②Calibration set, ③Validation set

2.2 土壤光谱波段深度特征

光谱波段吸收深度 (BD) 是应用非常普遍的吸收特征参数之一, 已经被广泛且成功地应用于植被及土壤属性的可见/近红外光谱估算^[9, 19-20]。采用ENVI软件进行包络线消除, 然后计算波段的吸收深度, 得到土壤光谱波段吸收深度曲线 (见图2)。由图2可知, 在420、1 420、1 920、2 210、2 350 nm处有几个明显的波段深度峰值, 不同样本间这些位置的波段深度差异明显。已有研究表明利用波段深度进行土壤钾含量估算时效果较好^[9], 因此本文在包络线去除的基础上, 提取波段深度, 并进行一阶微分变换, 结合多元线性回归 (MLR) 及偏最小二乘回归 (PLSR) 方法建立土壤钾含量估算模型。

2.3 基于MLR的土壤钾含量估算模型

应用可见/近红外光谱技术时, 可以通过相关分

析获取土壤属性的敏感波段, 建立敏感波段与土壤属性之间的线性关系, 从而实现土壤属性的快速检测^[21]。对土壤光谱反射率 (SSR)、光谱反射率一阶微分 (DSSR)、波段深度 (BD) 及其波段深

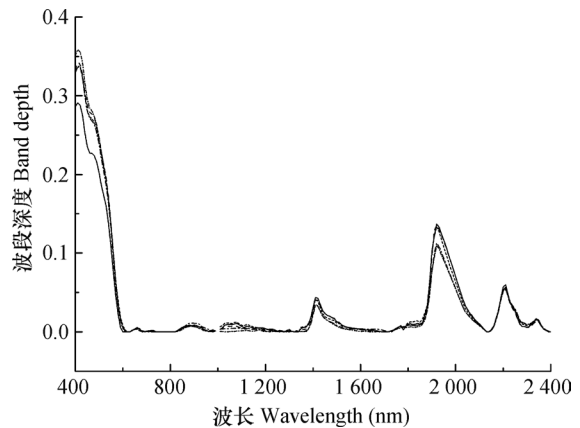


图2 土壤光谱波段吸收深度曲线

Fig. 2 Absorption depth curve of soil spectral bands

度一阶微分 (DBD) 与土壤全钾及速效钾含量进行相关分析。通过相关分析可知, 4 个光谱变量中一阶微分光谱与土壤全钾和速效钾的相关系数最大, 说明两者之间的相关性最强; 同一光谱变量与土壤全钾的相关系数高于速效钾, 说明土壤全钾含量与光谱变量之间的相关性高于速效钾。采用多元线性回归 (MLR) 方法建立土壤钾含量估算模型时, 自变量的选择依据建立的模型相对比较简单, 并且模型的预测精度相对较高为原则。经过多次试验, 本文选择相关性最高的前 10 个光谱变量作为自变量, 建立土壤全钾和速效钾的多元线性回归模型, 结果见表 2。从表 2 可知, 与土壤全钾和速效钾含量相关性较高的前 10 个波段主要位于近红外区; 估算土壤

全钾含量的前 10 个微分波段分布范围较广, 包括可见光和近红外区。分析校正模型各项参数可知, 以 DSSR 为自变量建立的多元线性土壤全钾含量估算模型效果优于其他模型, R_c^2 最大, 为 0.773, $RMSE_c$ 最小, 为 0.087; 而 DBD 建立的模型效果最差。而土壤速效钾同样以 DSSR 为自变量建立的多元线性回归模型拟合效果最好, R_c^2 为 0.646, $RMSE_c$ 为 22.77, 分别为最大和最小; 而拟合效果最差的为 BD 建立的模型, R_c^2 仅为 0.560。比较土壤全钾和速效钾建立的模型, 土壤全钾的多元线性回归模型的校正 R_c^2 介于 0.606 ~ 0.766 之间, 而速效钾的多元线性回归模型的校正 R_c^2 介于 0.560 ~ 0.646 之间, 说明土壤全钾模型校正效果整体优于速效钾模型。

表 2 基于特征光谱的土壤钾含量多元线性回归模型

Table 2 The multiple linear regression model for soil potassium content based on characteristic spectra

土壤属性 Soil property	光谱变换 Spectrum transform	波段 Waveband (nm)	校正 Calibration	
			R_c^2	$RMSE_c$
全钾 TK	SSR ^①	1 930 ~ 1 990、2 380 ~ 2 400	0.766	0.088
	DSSR ^②	710 ~ 720、750 ~ 780、810、960、1 050、2 370	0.773	0.087
	BD ^③	920、950、2 240 ~ 2 290、2 310、2 360	0.629	0.111
	DBD ^④	1 490、1 980 ~ 2 050、2 210	0.606	0.114
速效钾 AK	SSR ^①	1 960 ~ 1 980、2 340 ~ 2 400	0.602	24.12
	DSSR ^②	1 160、1 380 ~ 1 400、1 840、1 870 ~ 1 880、 1 930、2 330、2 370	0.646	22.77
	BD ^③	2 240 ~ 2 320、2 360	0.560	25.36
	DBD ^④	1 130、1 160 ~ 1 170、1 400 ~ 1 410、1 870 ~ 1 880、1 920 ~ 1 930、2 370	0.642	22.88

注: ①土壤光谱反射率, ②土壤光谱反射率一阶微分, ③波段深度, ④波段深度一阶微分, 全钾的 $RMSE_c$ 单位为 $g\ kg^{-1}$, 速效钾的 $RMSE_c$ 单位为 $mg\ kg^{-1}$ Note: ① Soil spectral reflectance, ② First-order differential of soil spectral reflectance, ③ Band depth, ④ First-order differential of band depth. The unit of $RMSE_c$ of TK is $g\ kg^{-1}$, the unit of $RMSE_c$ of AK is $mg\ kg^{-1}$

2.4 基于 PLSR 的土壤钾含量估算模型

偏最小二乘回归 (PLSR) 集主成分分析和多元回归分析于一体, 能够利用所有有效的数据构建模型, 提取出反映数据变异的极大信息, 具有良好的预测功能^[22], 已经被广泛应用于植被及土壤属性的光谱估算^[23-25]。为了充分利用所有有效波段光谱信息, 本文采用偏最小二乘回归方法建立全波段和极显著性相关波段的土壤全钾及速效钾含量的估算模型, 结果见图 3、图 4 和表 3。由图 3 可知, 全波段不同的光谱变换采用 PLSR 建立土壤全钾含量估算模型时存在一些回归系数较大的相同或相近的

波段, 包括 450、680、960、1 410、1 920、2 370 nm 及其附近波段。由图 4 可知, 全波段不同的光谱变换采用 PLSR 建立土壤速效钾含量估算模型时同样存在一些回归系数较大的相同或相近的波段, 包括 580、1 410、1 920、2 370 nm 及其附近波段。这些波段与 MLR 建模时选择的波段 (见表 2) 部分重叠。这些相同的回归系数较大的波段是进行土壤全钾和速效钾含量估算时被考虑到的通用性较好的光谱吸收波段。分析表 3 可知, 当以全波段和极显著相关波段作为输入变量时, 不同形式光谱建模选择的主成分数可能相同, 也可能不同; 但是建

立的估算模型的 R_c^2 及 $RMSE_c$ 差异均较小,说明建模效果比较相近。例如:以波段深度BD作为输入变量,全波段数目为200个,建模时选择的主成分为7个;而以达到0.01极显著相关波段为输入变量时,波段数目为139个,建模选择的主成分同样为7个,两者建立的模型的 R_c^2 仅相差0.003,而 $RMSE_c$ 仅相差0.001。进一步证明采用PLSR建立校正模型时,在精度许可的条件下,可以预先进行相关分析,选择达到显著或极显著相关的变量作为输入变量进行建模,以便简化建模过程,减小计算量。

通过分析表3可知,以SSR、DSSR、BD、DBD作为输入变量,采用PLSR方法建立的土壤全钾含量估算模型, R_c^2 为0.839~0.879,大于0.83; R_{cv}^2 介于0.746~0.822之间,小于校正 R_c^2 ; $RMSE_c$ 介于0.063~0.073之间,说明建模的精度均很高,拟合效果比较好。通过比较4类变量建立的PLSR模型的各项参数可知,以DBD作为自变量建立的土壤全钾含量校正模型效果最好,其校正和交叉验证 R^2 最大,而 $RMSE_c$ 最小。当以全波段(200个)和达到0.01极显著相关波段(139个)的DBD作为

输入变量时,建模选择的主成分均为6个, R_c^2 分别为0.877和0.879, $RMSE_c$ 分别为0.064和0.063, R_{cv}^2 分别为0.822和0.821,说明两个校正模型的结果非常接近,并且精度均较高,误差较小。其次,以BD为自变量建立的校正模型精度次之。说明BD及DBD在进行土壤全钾含量估算时校正效果较好,优于SSR及DSSR,其中DBD的效果最佳。而对于土壤速效钾,4类光谱变量建立的PLSR模型的校正效果相差较大, R_c^2 介于0.478~0.718之间, $RMSE_c$ 介于20.29~27.62之间。其中,建模效果最好的为SSR,全波段和极显著相关波段为输入变量时, R_c^2 分别为0.718和0.695, $RMSE_c$ 分别为20.29和21.12;其次为DSSR建立的模型,该模型的 R_{cv}^2 大于0.6,为最大的。总之,采用SSR、DSSR、BD、DBD建立全钾和速效钾的PLSR模型时,土壤全钾含量模型的校正结果明显优于速效钾含量模型;以DBD为自变量建立的土壤全钾含量模型的校正效果最好,其次为BD建立的模型;以SSR为自变量建立的土壤速效钾含量模型的校正效果最佳,其次为DSSR建立的模型。

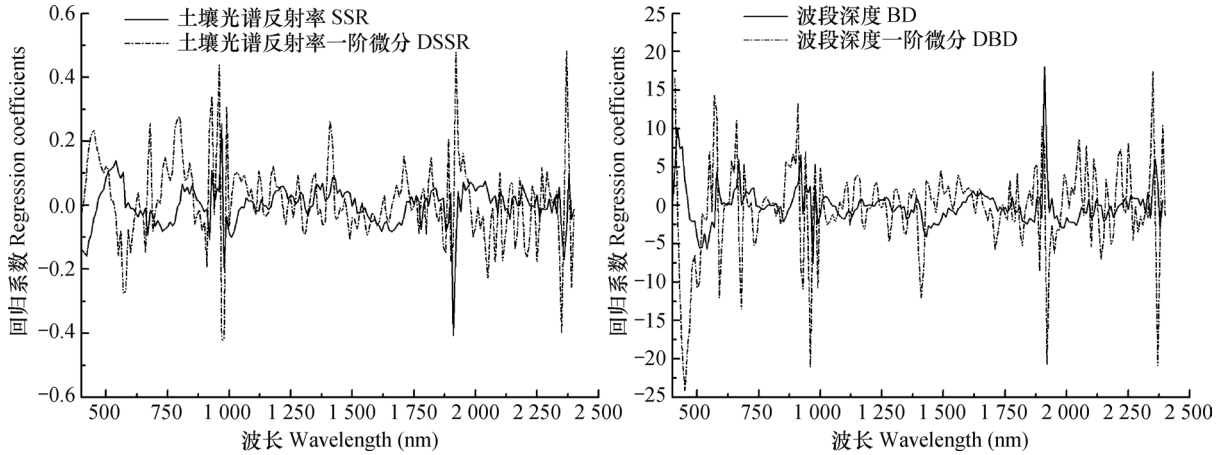


图3 全钾含量PLSR建模获得的整个波段范围内回归系数的分布

Fig. 3 Distribution of regression coefficients over the entire range of wavelengths obtained through partial least squares regression (PLSR) modeling for TK

2.5 土壤钾含量估算模型的验证

采用独立样本对MLR及PLSR模型进行验证,以便检验模型的预测效果,结果见表4。从表4可知,MLR模型相对比较简单,计算量相对较小,但是模型的预测效果较PLSR模型差很多。基于4类光谱变量建立的土壤全钾含量MLR模型经检验可知,以DSSR为自变量建立的模型预测效果最好, R_{pre}^2 为0.793,RPD_{pre}为2.206,均为最大的,而 $RMSE_{pre}$ 最

小,为0.081。与校正模型各项参数比较可知,3项参数相差均较小,说明模型比较稳定。从而说明以DSSR为自变量建立的MLR模型能够进行土壤全钾含量准确估算。其次为SSR建立的多元线性回归模型效果次之,能进行土壤全钾含量的粗略估算;其他光谱变量建立的模型验证效果较差,不能进行土壤全钾含量估算。而以4类光谱变量建立的土壤速效钾含量MLR模型的预测效果不是很好, R_{pre}^2 介于

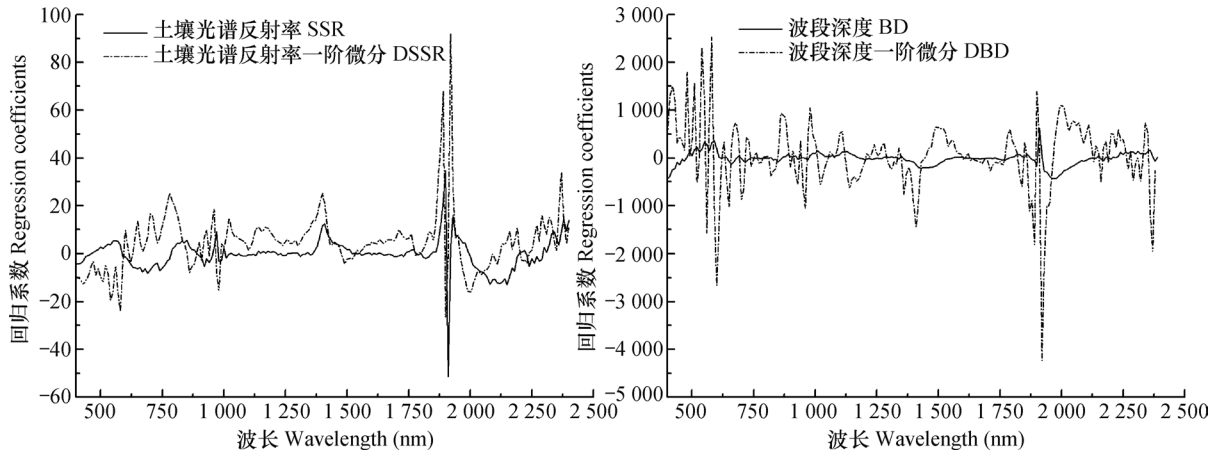


图4 速效钾含量PLSR建模获得的整个波段范围内回归系数的分布

Fig. 4 Distribution of regression coefficients over the entire range of wavelengths obtained through partial least squares regression (PLSR) modeling for AK

0.494 ~ 0.548之间, RPD_{pre} 介于1.405 ~ 1.488之间, 仅能进行速效钾含量粗略估算。

表3 基于光谱的土壤钾含量PLSR估算模型

Table 3 PLSR model for prediction of soil potassium contents based on soil spectra

土壤属性 Soil property	光谱变换 Spectrum transform	主成分数 Principal component number	校正 Calibration		交叉验证 Cross validation	
			R_c^2	RMSE _c	R_{cv}^2	RMSE _{cv}
全钾TK	SSR ₍₁₎	10	0.873	0.065	0.778	0.087
	SSR ₍₂₎	8	0.839	0.073	0.746	0.093
	DSSR ₍₁₎	6	0.856	0.069	0.783	0.086
	DSSR ₍₂₎	6	0.865	0.067	0.789	0.085
	BD ₍₁₎	7	0.865	0.067	0.786	0.085
	BD ₍₂₎	7	0.862	0.068	0.788	0.085
	DBD ₍₁₎	6	0.877	0.064	0.822	0.077
	DBD ₍₂₎	6	0.879	0.063	0.821	0.078
速效钾AK	SSR ₍₁₎	6	0.718	20.29	0.585	24.95
	SSR ₍₂₎	7	0.695	21.12	0.545	26.13
	DSSR ₍₁₎	3	0.681	21.58	0.611	24.14
	DSSR ₍₂₎	3	0.678	21.69	0.620	23.85
	BD ₍₁₎	3	0.537	26.02	0.481	27.89
	BD ₍₂₎	3	0.478	27.62	0.422	29.43
	DBD ₍₁₎	4	0.676	21.77	0.554	25.86
	DBD ₍₂₎	4	0.570	25.08	0.498	27.43

注：表中下标(1)表示全波段, (2)表示极显著相关波段, 全钾的RMSE_c及RMSE_{cv}单位为g kg⁻¹, 速效钾的RMSE_c及RMSE_{cv}单位为mg kg⁻¹ Note: Subscript (1) and (2) stands for the entire band and the significantly related bands, respectively. The unit of RMSE_c and RMSE_{cv} of TK is g kg⁻¹, the unit of RMSE_c and RMSE_{cv} of AK is mg kg⁻¹

对全波段光谱和极显著相关波段光谱建立的土壤全钾含量PLSR估算模型验证可知,极显著相关波段光谱建立的模型与全波段光谱建立的模型 R_{pre}^2 、 $RMSE_{pre}$ 、 RPD_{pre} 值非常接近,说明两者的预测效果类似。对于土壤全钾含量而言,4类光谱变量建立的PLSR模型的 R_{pre}^2 介于0.869~0.908之间,均大于0.85; $RMSE_{pre}$ 介于0.054~0.065之间,远小于均值; RPD_{pre} 介于2.750~3.310之间,远大于2.0,说明所有模型的预测效果均较好,能进行土壤全钾含量准确预测。与校正模型各项参数进行比较可知,两种模型各项参数比较接近,说明模型比较稳定。进一步分析比较可知建模及预测效果最佳的是以DBD为自变量建立的模型,其 R_{pre}^2 大于0.9, $RMSE_{pre}$ 等于0.054, RPD_{pre} 等于3.310,各项参数均为最优的,通过前文分析可知其校正模型各项参

数也是最优的,从而表明以DBD为自变量建立的PLSR模型(PLSR-DBD)是估算黄绵土全钾含量的最佳模型,而以BD为自变量建立的模型估算效果次之。分析比较4类光谱变量建立的土壤速效钾PLSR模型的验证结果可知,总体预测效果不是很好, R_{pre}^2 为0.450~0.619, RPD_{pre} 为1.383~1.619,相对较小,而 $RMSE_{pre}$ 处于23.14~27.79之间,误差较大。比较可知,经过微分变换之后,模型的预测精度有所提高,说明微分变换有利于土壤速效钾预测。以DSSR为自变量建立的PLSR模型的 R_{pre}^2 为0.619和0.595, RPD_{pre} 为1.619和1.572,最大,而 $RMSE_{pre}$ 为23.14和23.83,最小。综合校正模型各项参数可知,以DSSR为自变量建立的PLSR模型是估算土壤速效钾含量的最佳模型,但是模型仅能进行土壤速效钾含量粗略估算,精度有待进一步提高。

表4 土壤钾含量估算模型的验证结果

Table 4 Validation of the models for prediction of soil potassium contents

土壤属性 Soil property	模型 Model	光谱变换 Spectrum transform	验证Validation			
			R_{pre}^2	$RMSE_{pre}$	RPD_{pre}	
全钾TK	MLR	SSR	0.685	0.100	1.787	
		DSSR	0.793	0.081	2.206	
		BD	0.490	0.128	1.396	
		DBD	0.389	0.140	1.277	
	PLSR	SSR ₍₁₎	0.879	0.062	2.883	
		SSR ₍₂₎	0.870	0.065	2.750	
		DSSR ₍₁₎	0.869	0.065	2.750	
		DSSR ₍₂₎	0.877	0.063	2.837	
		BD ₍₁₎	0.884	0.061	2.930	
		BD ₍₂₎	0.882	0.062	2.883	
	速效钾AK	MLR	DBD ₍₁₎	0.908	0.054	3.310
			DBD ₍₂₎	0.907	0.054	3.310
			SSR	0.494	26.660	1.405
			DSSR	0.548	25.183	1.488
PLSR		BD	0.502	26.429	1.418	
		DBD	0.506	26.343	1.422	
		SSR ₍₁₎	0.480	27.003	1.387	
		SSR ₍₂₎	0.583	24.197	1.548	
PLSR	DSSR ₍₁₎	0.619	23.137	1.619		
	DSSR ₍₂₎	0.595	23.833	1.572		
	BD ₍₁₎	0.480	27.022	1.423		
	BD ₍₂₎	0.450	27.790	1.383		
PLSR	DBD ₍₁₎	0.616	23.214	1.614		
	DBD ₍₂₎	0.517	26.041	1.439		

注:表中下标(1)表示全波段,(2)表示极显著相关波段,全钾的 $RMSE_{pre}$ 单位为 $g\ kg^{-1}$,速效钾的 $RMSE_{pre}$ 单位为 $mg\ kg^{-1}$ Note: Subscript (1) and (2) stands for the entire bands and significantly related bands, respectively. The unit of $RMSE_{pre}$ of TK is $g\ kg^{-1}$, the unit of $RMSE_{pre}$ of AK is $mg\ kg^{-1}$

3 讨 论

包络线消除法具有压抑背景光谱, 扩大弱吸收特征信息的优势^[20]。通过包络线消除法得到土壤光谱波段吸收深度曲线图, 从图2可知, 在420、1 420、1 920、2 210、2 350 nm处有明显的特征吸收峰。而PLSR方法建立土壤全钾和速效钾含量估算模型时全波段范围内存在一些通用性较强的光谱吸收波段, 分别为450、680、960、1 410、1 920、2 370 nm及其附近波段和580、1 410、1 920、2 370 nm及其附近波段(见图3、图4)。这些波段与MLR建模时选择的波段(见表2)部分重叠。查阅相关文献可知, 420 nm及其附近波段的吸收特征可能是由单个的或成对的铁离子电子跃迁到一种更高的能量状态引起的^[26]。近红外区的960 nm及其附近波段的吸收峰可能与第三泛音区的水分吸收波段有关, 1 420和1 920 nm及其附近波段的吸收特征可能是由自由水的O-H键的弯曲和拉伸引起的, 2 210 nm及其附近波段的吸收特征可能是由黏土矿物中的Al-OH 晶格结构引起的^[6, 27]。2 350 nm及其附近的吸收特征可能归因于有机质组成的差异^[28]。以上土壤光谱吸收特征表明黄绵土中存在光谱活跃成分(例如: 有机质、碳酸盐、黏土矿物、水分等)。由于土壤钾在可见/近红外光谱没有直接光谱响应, 所以本研究黄绵土钾含量的光谱预测可能归因于土壤中钾与这些光谱活跃成分之间局部存在共同变化。通过相关分析可知, 土壤全钾和速效钾与光谱变量之间的相关性不同, 且与土壤全钾的相关性普遍大于速效钾, 这与其他研究者的结论类似^[29]。分析其原因可能是土壤全钾的组成和含量与速效钾不同, 从而造成两者与光谱反射率之间的相关性差异较大。依据相关分析及PLSR建模的回归系数可知, 580、1 410、1 920、2 240、2 370 nm是进行土壤速效钾含量估算时通用性较好的波段。这与叶英聪等^[29]和陈红艳^[30]的研究结论“速效钾的敏感波段为602、1 058、1 638、2 214 nm或者1 323、1 730、2 258、2 375 nm”比较一致。以土壤全钾和速效钾含量的前10个高相关性波段光谱为自变量, 采用多元线性回归建立估算模型, 仅DSSR为自变量建立的土壤全钾含量模型估算效果较好, 能进行土壤全钾含量准确估算, 其余模型估算效果相对较差。

PLSR是一种全波段建模的标准方法, 被广泛用于土壤和植被的参数反演。本文以PLSR方法建立的土壤钾含量估算模型预测效果优于多元线性回归模型。当以极显著相关波段作为输入变量时, 建立的土壤钾含量PLSR模型的精度较高, 模型较稳定, 预测效果与全波段光谱建立的模型接近, 因此在建立土壤或植被属性的PLSR估算模型时, 可先进行相关分析, 然后选择相关性较高的波段光谱结合PLSR构建估算模型, 这与前期的研究结论一致^[31]。以4类光谱为自变量, 土壤全钾含量为因变量建立的PLSR估算模型, 精度均较高, 均能对土壤全钾含量进行精确估算, 这与胡芳等^[9]的研究结论“全波段光谱结合PLSR能够快速、有效估算土壤钾含量”一致。尤其以BD为自变量建立的土壤全钾含量PLSR模型预测精度高于SSR及其DSSR, 说明BD在进行土壤全钾含量估算时有其独特的优势。本研究通过比较分析可知, DBD结合PLSR方法建立的土壤全钾含量估算模型预测精度更高, 优于BD建立的PLSR全钾含量估算模型, 这一结论有待进一步验证。而利用相同指标建立土壤速效钾含量的PLSR估算模型, 精度远低于全钾含量。虽然以DSSR为自变量建立的PLSR模型, 是进行土壤速效钾含量估算的最好模型, 但是其验证RPD仅为1.619和1.572, 仅能对土壤速效钾含量进行粗略估算, 这与Viscarra Rossel等^[6]和Debaene等^[7]的研究结论类似。由于土壤钾与光谱活跃成分之间的局部共同变化会随土壤样品的不同而不断变化^[32-33], 因而黄绵土中钾含量的预测具体取决于哪些光谱活跃成分、全钾与速效钾的高光谱预测结果存在较大差异的原因均有待进一步深入研究。偏最小二乘回归方法虽然是一种较好的线性建模方法, 但是土壤光谱与钾含量之间可能存在非线性关系, 因而还需进一步采用非线性建模方法探讨它们之间的关系。

4 结 论

黄绵土全钾含量与速效钾含量估算时通用性较好的波段存在一定的差异。除以土壤光谱反射率一阶微分(DSSR)为自变量建立的多元线性回归模型能进行土壤全钾含量准确估算外, 其余多元线性回归模型均不能进行土壤全钾和速效钾含量准确

估算。通过比较可知,土壤全钾及速效钾含量的PLSR估算模型的预测精度普遍高于MLR模型。4类光谱变量结合PLSR方法建立的模型均能进行土壤全钾含量准确估算;其中,DBD结合PLSR方法建立的模型校正及验证精度均最高,是进行土壤全钾含量估算的最优模型,而BD结合PLSR方法建立的模型,估算效果次之。然而4类光谱变量建立的MLR及PLSR模型的校正及验证精度均较低,仅部分模型能对土壤速效钾含量进行粗略估算;其中,DSSR结合PLSR方法建立的模型预测精度最高,是估算土壤速效钾含量的最优模型。

参考文献

- [1] 丛日环,李小坤,鲁剑巍.土壤钾素转化的影响因素及其研究进展.华中农业大学学报,2007,26(6):907—913
Cong R H, Li X K, Lu J W. Advances in research on influence factors of soil potassium transformation (In Chinese). Journal of Huazhong Agricultural University, 2007, 26(6): 907—913
- [2] Lagacherie P, Baret F, Feret J, et al. Estimation of soil clay and calcium carbonate using laboratory, field and airborne hyper—spectral measurements. Remote Sensing of Environment, 2008, 112(3): 825—835
- [3] 王璐, 蔺启忠, 贾东, 等. 基于反射光谱预测土壤重金属元素含量的研究. 遥感学报, 2007, 11(6): 906—913
Wang L, Lin Q Z, Jia D, et al. Study on the prediction of soil heavy metal elements content based on reflectance spectra (In Chinese). Journal of Remote Sensing, 2007, 11(6): 906—913
- [4] 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): 1385—1388
- [5] Malley D F, Yesmin L, Eilers R G. Rapid analysis of hog manure and manure—amended soils using near—irradiated spectroscopy. Soil Science Society of America Journal, 2002, 66(5): 1677—1686
- [6] Viscarra Rossel R A, Walvoort D J J, McBratney A B, et al. Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. Geoderma, 2006, 131(1/2): 59—75
- [7] Debaene G, Niedźwiecki J, Pecio A, et al. Effect of the number of calibration samples on the prediction of several soil properties at the farm—scale. Geoderma, 2014, 214/215(2): 114—125
- [8] 徐永明, 蔺启忠, 王璐, 等. 基于高分辨率反射光谱的土壤营养元素估算模型. 土壤学报, 2006, 43(5): 709—716
Xu Y M, Lin Q Z, Wang L, et al. Model for estimating soil nutrient elements based on high resolution reflectance spectra (In Chinese). Acta Pedologica Sinica, 2006, 43(5): 709—716
- [9] 胡芳, 蔺启忠, 王钦军, 等. 土壤钾含量高光谱定量反演研究. 国土资源遥感, 2012, 24(4): 160—165
Hu F, Lin Q Z, Wang Q J, et al. Quantitative inversion of soil potassium content by using hyperspectral reflectance (In Chinese). Remote Sensing for Land & Resources, 2012, 24(4): 160—165
- [10] 胡国田, 何东健, Kenneth A S. 基于直接正交信号拟合的土壤磷和钾VNIR测定研究. 农业机械学报, 2015, 46(7): 139—145
Hu G T, He D J, Kenneth A S. Soil phosphorus and potassium estimation using visible—near infrared reflectance spectroscopy with direct orthogonal signal correction (In Chinese). Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2015, 46(7): 139—145
- [11] 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—irradiated reflectance spectroscopy (In Chinese). Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2007, 23(1): 55—59
- [12] 陈红艳, 赵庚星, 李希灿, 等. 小波分析用于土壤速效钾含量高光谱估测研究. 中国农业科学, 2012, 45(7): 1425—1431
Chen H Y, Zhao G X, Li X C, et al. Application of wavelet analysis for estimation of soil available potassium content with hyperspectral reflectance (In Chinese). Scientia Agricultura Sinica, 2012, 45(7): 1425—1431
- [13] 吴茜, 杨宇虹, 徐照丽, 等. 应用局部神经网络和可见/近红外光谱法估测土壤有效氮磷钾. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(8): 2102—2105
Wu Q, Yang Y H, Xu Z L, et al. Applying local neural network and visible/near—irradiated spectroscopy to estimating available nitrogen, phosphorus and potassium in soil (In Chinese). Spectroscopy and Spectral Analysis, 2014, 34(8): 2102—2105

- [14] 杜威, 王紫泉, 和文祥, 等. 豆科绿肥对渭北旱塬土壤养分及生态化学计量学特征影响. 土壤学报, 2017, 54 (4): 999—1008
Du W, Wang Z Q, He W X, et al. Effects of leguminous green manure on soil nutrients and their ecological stoichiometry characteristics in Weibei Rainfed Highland (In Chinese). *Acta Pedologica Sinica*, 2017, 54 (4): 999—1008
- [15] 安凯春, 石俊玲. 渭北旱塬区农业可持续发展的途径. 现代种业, 2005 (6): 12—13, 8
An K C, Shi J L. Way of the sustainable development of agriculture in Weibei Highland area (In Chinese). *Modern Seed Industry*, 2005 (6): 12—13, 8
- [16] 鲍士旦. 土壤农化分析. 第3版. 北京: 中国农业出版社, 1999
Bao S D. Soil agrochemistry analysis (In Chinese). 3rd ed. Beijing: China Agriculture Press, 1999
- [17] 彭小婷, 高文秀, 王俊杰. 基于包络线去除和偏最小二乘的土壤参数光谱反演. 武汉大学学报 (信息科学版), 2014, 39 (7): 862—866
Peng X T, Gao W X, Wang J J. Inversion of soil parameters from hyperspectra based on continuum removal and partial least squares regression (In Chinese). *Geomatics and Information Science of Wuhan University*, 2014, 39 (7): 862—866
- [18] Chang C W, Laird D A. Near—Infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N. *Soil Science*, 2002, 167 (2): 110—116
- [19] 刘秀英, 王力, 宋荣杰, 等. 黄绵土风干过程中土壤含水率的光谱预测. 农业机械学报, 2015, 46 (4): 266—272
Liu X Y, Wang L, Song R J, et al. Prediction of soil moisture content in air—drying loess using spectral data (In Chinese). *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2015, 46 (4): 266—272
- [20] 张雪红, 刘绍民, 何蓓蓓. 基于包络线消除法的油菜氮素营养高光谱评价. 农业工程学报, 2008, 24 (10): 151—155
Zhang X H, Liu S M, He B B. Hyperspectral evaluation of rape nitrogen nutrition using continuum—removed method (In Chinese). *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2008, 24 (10): 151—155
- [21] 宋韬, 鲍一丹, 何勇. 利用光谱数据快速检测土壤含水量的方法研究. 光谱学与光谱分析, 2009, 29 (3): 675—677
Song T, Bao Y D, He Y. Research on the method for rapid detection of soil moisture content using spectral data (In Chinese). *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2009, 29 (3): 675—677
- [22] 唐启义, 冯明光. DPS数据处理系统. 北京: 科学出版社, 2007
Tang Q Y, Feng M G. DPS data processing system (In Chinese). Beijing: Science Press, 2007
- [23] Hu X Y. Application of visible/near—Infrared spectra in modeling of soil total phosphorus. *Pedosphere*, 2013, 23 (4): 417—421
- [24] Yang H, Kuang B, Mouazen A M. Quantitative analysis of soil nitrogen and carbon at a farm scale using visible and near infrared spectroscopy coupled with wavelength reduction. *European Journal of Soil Science*, 2011, 63 (3): 410—420
- [25] Fu Y Y, Yang G J, Wang J H, et al. Winter wheat biomass estimation based on spectral indices, band depth analysis and partial least squares regression using hyperspectral measurements. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2014, 100 (2): 51—59
- [26] Sherman D M, Waite T D. Electronic spectra of Fe³⁺ oxides and oxyhydroxides in the near infrared to ultraviolet. *American Mineralogist*, 1985, 70 (11/12): 1262—1269
- [27] Ben—Dor E. Quantitative remote sensing of soil properties. *Advances in Agronomy*, 2002, 75: 173—243
- [28] Ben—Dor E, Inbar Y, Chen Y. The reflectance spectra of organic matter in the visible near—Infrared and short wave infrared region (400—2500 nm) during a controlled decomposition process. *Remote Sensing of Environment*, 1997, 61 (1): 1—15
- [29] 叶英聪, 张丽君, 谢文, 等. 南方丘陵稻田土壤全钾和速效钾高光谱特征与反演模型研究. 广东农业科学, 2015, 42 (7): 37—42
Ye Y C, Zhang L J, Xie W, et al. Prediction on total potassium and available potassium content of hilly paddy soil in Southern China based on hyper—spectral characteristics (In Chinese). *Guangdong Agricultural Sciences*, 2015, 42 (7): 37—42
- [30] 陈红艳. 土壤主要养分含量的高光谱估测研究. 山东泰安: 山东农业大学, 2012
Chen H Y. Hyperspectral estimation of major soil nutrient content (In Chinese). Taian, Shandong: Shandong Agricultural University, 2012
- [31] 刘秀英, 王力, 常庆瑞, 等. 基于相关分析和偏最小二乘回归的黄绵土土壤全氮和碱解氮含量的高光谱预测. 应用生态学报, 2015, 26 (7): 2107—2114
Liu X Y, Wang L, Chang Q R, et al. Prediction of total nitrogen and alkali hydrolysable nitrogen content

- in loess using hyperspectral data based on correlation analysis and partial least squares regression (In Chinese). *Chinese Journal of Applied Ecology*, 2015, 26 (7): 2107—2114
- [32] Mouazen A M, Kuang B, Baerdemaeker J De, et al. Comparison among principal component, partial least squares and back propagation neural network analyses for accuracy of measurement of selected soil properties with visible and near infrared spectroscopy. *Geoderma*, 2010, 158 (1/2): 23—31
- [33] 贾生尧, 杨祥龙, 李光, 等. 近红外光谱技术结合递归偏最小二乘算法对土壤速效磷与速效钾含量测定研究. *光谱学与光谱分析*, 2015, 35 (9): 2516—2520
- Jia S Y, Yang X L, Li G, et al. Quantitatively determination of available phosphorus and available potassium in soil by near infrared spectroscopy combining with recursive partial least squares (In Chinese). *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2015, 35 (9): 2516—2520

Hyperspectral Model for Estimation of Soil Potassium Content in Loessal Soil

LIU Xiuying¹ SHI Zhaoyong¹ CHANG Qingrui^{2†} LIU Chenzhou¹ HUANG Ming¹ GU xing¹

(1 College of Agronomy, Henan University of Science and Technology, Luoyang, Henan 471023, China)

(2 College of Resources and Environment, Northwest A&F University, Yangling, Shaanxi 712100, China)

Abstract 【Objective】 Soil is the important carrier of agricultural production, while the potassium in soil is one of the nutrient elements essential for plant growth, so it is very important to quickly and accurately assess soil potassium content in farmland. Conventional soil potassium content determination methods are expensive and time-consuming. The visible and near infrared reflectance spectroscopy (VIS-NIR), which possess the advantages of non-destructive and rapid detection, has been a useful tool for quantitative analysis of soils of numerous attributes. The object of this study is to investigate feasibility to use the visible and near infrared reflectance spectroscopy in estimating soil potassium contents in the Weibei Rainfed Highland. 【Method】 A total of 120 loessal soil samples were collected from the farmfields in Qian County of Shaanxi Province for analysis of total potassium (TK) and readily available potassium (AK) contents in lab with conventional chemical methods. Reflectance spectroscopic data of the soil samples were acquired with the SVC HR-1024i spectroradiometer. Three types of pretreatments, including First-order differential of soil spectral reflectance (DSSR), band depth (BD) and First-order differential of band depth (DBD), were adopted to amplify the weak absorption characteristics, eliminate noises in the system and external disturbances. The continuum-removal method was used to extracted band-depths (BD) of the soil reflectance spectra and based on correlation analysis a model was built up for prediction of TK and AK contents in the loessal soil, using the multiple linear regression (MLR) and partial least square regression (PLSR) methods and validated with independent samples. 【Result】 Results show that the multiple linear regression model based on DSSR as independent variable could accurately estimate TK contents while the other multivariate linear regression models could not do TK and AK contents so accurately. Comparison shows that the PLSR models were generally higher than the MLR models in prediction accuracy. The models built up with the PLSR method incorporating the 4 spectral variables, could estimate TK content accurately, specially the PLSR model based on DBD as independent variable, of which coefficient of determination (R_{pre}^2) of the validation set was > 0.90 , root mean square error of the prediction ($RMSE_{pre}$) was 0.054, and residual predictive deviation (RPD_{pre}) was 3.310. The PLSR model based on BD followed. However, the PLSR models based on the 4 spectral variables were relatively low in calibration and validation accuracy and only some models could roughly predict AK contents. The PLSR model based on DSSR as independent variable,

with RPD_{pre} being 1.619 and 1.572 was the best for accurate prediction of soil AK contents. 【 Conclusion 】 All the finding in this study demonstrate that the visible and near infrared spectroscopy coupled with MLR and PLSR can be used to predict rapidly and accurately TK content in the loessal soil of the Weibei Rainfed Highland, but only roughly AK contents therein.

Key words Hyperspectrum; Multiple linear regression; Partial least square regression; Loess; Total potassium; Readily available potassium

(责任编辑：檀满枝)