

DOI: 10.11766/trxb202503280144

CSTR: 32215.14.trxb202503280144

唐运, 高维常, 潘文杰, 蔡凯, 曾隍涛, 杨静, 姜超英, 郑光辉, 李德成, 曾荣. 光谱技术测定土壤不同形态铁含量的精度与经济性分析[J]. 土壤学报, 2026, 63 (3): 742–754.

TANG Yun, GAO Weichang, PAN Wenjie, CAI Kai, ZENG Yuntao, YANG Jing, JIANG Chaoying, ZHENG Gaunghui, LI Decheng, ZENG Rong. Precision and Economic Analysis of Determining Different Forms of Soil Iron Contents Using Spectroscopic Techniques[J]. Acta Pedologica Sinica, 2026, 63 (3): 742–754.

## 光谱技术测定土壤不同形态铁含量的精度与经济性分析\*

唐 运<sup>1</sup>, 高维常<sup>2</sup>, 潘文杰<sup>2</sup>, 蔡 凯<sup>2</sup>, 曾隍涛<sup>3</sup>, 杨 静<sup>3</sup>, 姜超英<sup>3</sup>,  
郑光辉<sup>1</sup>, 李德成<sup>4</sup>, 曾 荣<sup>1†</sup>

(1. 南京信息工程大学地理科学学院, 南京 210044; 2. 贵州省烟草科学研究院, 贵阳 550081; 3. 中国烟草总公司贵州省公司, 贵阳 550004; 4. 土壤与农业可持续发展全国重点实验室(中国科学院南京土壤研究所), 南京 211135)

**摘 要:** 铁(Fe)是植物生长必需的微量营养元素, 不同形态铁(全铁 Total Fe、有效铁 Available Fe、游离铁 Free Fe)的精准监测对土壤健康管理和农业生产优化至关重要, 全铁和游离铁也是某些土壤类型鉴定的必需指标。与传统土壤测定方法相比, 光谱技术具有快速、经济、环保的优势, 近年来逐渐成为土壤 Fe 测定的替代方案。但光谱技术在系统反演不同形态铁方面报道甚少, 为此, 本研究基于贵州省 501 个典型农田耕作层(0~20 cm)土壤样品的颜色参数(CP)、可见-近红外光谱(VNIR)、中红外光谱(MIR)及融合光谱(SF)数据, 对光谱进行 Savitzky-Golay(SG)平滑去噪处理, 再用标准正态变量变换(SNV)方法进行基线校正, 分别应用偏最小二乘回归(PLSR)和支持向量机(SVM)两种方法进行建模, 系统比较了单一光谱与融合光谱对三种形态铁的预测性能, 通过成本效率比(CER)和效率指数(EI)两个指标量化不同预测策略精度与成本的关系。结果表明:(1)单一光谱模型中, VNIR 光谱在全铁预测中表现最优(决定系数  $R^2=0.85$ , 相对分析偏差 RPD=2.59, 均方根误差 RMSE=5.48  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), MIR 光谱在游离铁预测中精度最高( $R^2=0.80$ , RPD=2.23, RMSE=4.15  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ); 决策级融合(SF3)光谱进一步提高了 3 种形态铁的预测精度, 其中有效铁提升幅度最大, 但仍难做到有效预测(RPD=1.37), 因此不推荐使用光谱技术对土壤有效铁进行预测。(2)成本-精度分析显示, 光谱技术可显著降低成本(降幅达 40%~85%), 其中 VNIR 和 MIR 技术在全铁和游离铁预测中兼具高精度和高经济性, 适用于需综合考虑精度与成本的场景, 而融合光谱(SF)精度提升有限且成本增加较多, 适合精度要求更高场景。该研究表明光谱技术能在保证一定预测精度的基础上显著降低土壤铁含量测定成本, 可替代传统方法实现全铁与游离铁的高效监测, 从而为精准农业实施提供有效的技术支持。

**关键词:** 土壤铁; 光谱技术; 成本分析; 精准农业

中图分类号: S151.9 文献标志码: A

## Precision and Economic Analysis of Determining Different Forms of Soil Iron Contents Using Spectroscopic Techniques

TANG Yun<sup>1</sup>, GAO Weichang<sup>2</sup>, PAN Wenjie<sup>2</sup>, CAI Kai<sup>2</sup>, ZENG Yuntao<sup>3</sup>, YANG Jing<sup>3</sup>, JIANG Chaoying<sup>3</sup>, ZHENG

\* 国家自然科学基金项目(42577343)、中国烟草总公司贵州省公司项目(2023XM11)和中国烟草总公司项目(110202402016, 110202102038)共同资助 Supported by the National Natural Science Foundation of China(42577343), the Guizhou Company Project of China Tobacco Corporation(2023XM11), and the China Tobacco Corporation Project(110202402016, 110202102038)

† 通讯作者 Corresponding author, E-mail: rzeng@nuist.edu.cn

作者简介: 唐 运(2001—), 男, 安徽芜湖人, 主要从事土壤遥感方面的研究。E-mail: 17730325348@163.com

收稿日期: 2025-03-28; 收到修改稿日期: 2025-09-26; 网络首发日期(www.cnki.net): 2025-10-31

Gaunghui<sup>1</sup>, LI Decheng<sup>4</sup>, ZENG Rong<sup>1†</sup>

(1. School of Geographical Science, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China; 2. Guizhou Academy of Tobacco Science, Guiyang 550081, China; 3. China National Tobacco Corporation Guizhou Provincial Company, Guiyang 550004, China; 4. State Key Laboratory of Soil and Sustainable Agriculture, Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 211135, China)

**Abstract:** 【 Objective 】 Iron(Fe) is an essential micronutrient for plant growth. Accurate monitoring of different forms of iron (Total Fe, Available Fe, Free Fe) is essential for soil health management and agricultural production optimization. Total iron and free iron are also necessary indicators to identify certain soil types. Compared with traditional soil determination methods, spectral technology is rapid, cost-effective, and environmentally friendly, and is gradually becoming an alternative for soil Fe determination in recent years. However, there are few reports on the systematic inversion of different forms of iron by spectral technology. 【 Method 】 Based on the color parameter (CP), visible near infrared (VNIR), mid infrared (MIR), and fusion spectrum (SF) were used to obtain data of 501 typical farmland tillage layer(0~20 cm) soil samples in Guizhou Province. The spectrum was smoothed by Savitzky-Golay (SG) denoising, and then the baseline was corrected by the standard normalization (SNV) method. Partial least squares regression (PLSR) and support vector machine(SVM) were used for modeling, respectively. The system compared the predictive performance of single spectra and fused spectra for the three types of iron fractions. Moreover, the relationship between accuracy and cost of different prediction strategies was quantified using two indicators: Cost-Efficiency Ratio(CER) and Efficiency Index(EI). 【 Result 】 The results show that: (1) in the single spectral model, VNIR spectrum performed best in the prediction of total iron(determination coefficient  $R^2 = 0.85$ , relative analysis deviation RPD = 2.59, root mean square error RMSE = 5.48 g·kg<sup>-1</sup>), while MIR spectrum had the highest accuracy in the prediction of free iron ( $R^2 = 0.80$ , RPD = 2.23, RMSE = 4.15 g·kg<sup>-1</sup>). Also, the decision level fusion (SF3) spectrum further improved the prediction accuracy of the three forms of iron, among which the effective iron increased the most, but it was still difficult to achieve effective prediction (RPD = 1.37). Thus, using spectral technology to predict soil available iron is not recommended. (2) The cost accuracy analysis showed that the spectral technology can significantly reduce the cost(by 40%~85%)of soil iron characterization. VNIR and MIR technologies had high accuracy and were cost-effective in the prediction of total iron and free iron, and were suitable for scenarios requiring comprehensive consideration of accuracy and cost. However, the accuracy improvement of fused spectrum (SF) was limited, and the cost increased more, which is suitable for scenarios requiring higher accuracy. 【 Conclusion 】 This study shows that spectral technology can significantly reduce the cost of soil iron content measurement on the basis of ensuring a certain prediction accuracy, and can replace the traditional methods to achieve efficient monitoring of total iron and free iron, so as to provide effective technical support for the implementation of precision agriculture.

**Key words:** Soil iron; Spectral technology; Cost analysis; Precision agriculture

铁是植物生长必需的微量营养元素，参与叶绿素合成、氧化还原反应等关键生理过程，直接影响作物的产量和品质<sup>[1]</sup>。土壤中的铁存在多种形态，主要包括全铁、有效铁和游离铁等。全铁表征土壤中铁的总储量，涵盖矿物结合态、氧化物及有机络合态铁；游离铁主要指以 Fe<sup>2+</sup>、Fe<sup>3+</sup>离子形式存在的活性组分；有效铁是指在特定条件下可被生物体或化学反应利用的铁，通常指植物可吸收的铁。全铁和游离铁在土壤系统分类中也是某些土壤类型鉴定的必需指标<sup>[2]</sup>。因此，研究不同形态铁有助于揭示土壤的成因、分类与演化，并为指导科学施肥、改善土壤健康与提高农业生产提供理论依据<sup>[3]</sup>。

传统实验法是土壤铁测定的常规方法，虽然精度较高，但过程复杂、耗时，且可能导致环境污染，难以满足大范围农田的快速普查与动态监测需求。相比之下，光谱技术以其快速、经济、环保的优势，在精准农业中发挥着重要作用，能实现田块尺度的高密度采样，通过田间快速获取土壤光谱信息筛查铁含量，可为土壤施肥管理提供实时数据支持，有效满足土壤铁监测需求，逐渐成为土壤铁测定的替代方案<sup>[4-5]</sup>。已有研究表明，土壤铁在可见-近红外光谱(VNIR)及中红外光谱(MIR)均有较为明确的光谱响应特征，氧化铁在可见光区自300~580 nm可形成很强的铁谱带，铁是过渡元素，其决定了

760~1300 nm 波段的光谱特性。铁离子的价态也是影响光谱特征的重要因子,  $\text{Fe}^{2+}$  的吸收带介于 1 000~1 100 nm 之间,  $\text{Fe}^{3+}$  的吸收带则在 900 nm 附近。这些铁离子的基本光学特性直接反映在由其构成的主要含铁矿物的光谱特征上。具体而言, 在可见光区, 赤铁矿和针铁矿的吸收带分别在 510 nm 和 420 nm、480 nm、660 nm 附近。同时, 在近红外区, Fe-OH 的组合振动在 2 290 nm 附近有弱吸收带, 可指示含 Fe 矿物。此外, 在 MIR 光谱约 580  $\text{cm}^{-1}$  处的吸收带是由 Fe-O 伸缩振动引起的, 这些特征为光谱技术定量反演土壤铁含量提供了坚实的理论基础<sup>[6-8]</sup>。目前, VNIR 和 MIR 在预测土壤不同形态铁方面取得了显著的进展, 阳洋<sup>[9]</sup>基于 VNIR 光谱成功建立了土壤全铁和游离铁的预测模型, 其预测精度决定系数  $R^2$  均超过 0.8, 表明 VNIR 光谱预测土壤全铁和游离铁有较大的潜力。熊俊峰等<sup>[10]</sup>利用 VNIR 数据建立了土壤全铁和游离铁的估算模型, 发现游离铁的估算精度 ( $R^2=0.77$ ) 高于全铁 ( $R^2=0.60$ )。Baumann 等<sup>[11]</sup>基于 MIR 光谱预测土壤中的有效铁, 也得到了较好的结果 (RMSE=0.5  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), 证明了 MIR 光谱在土壤有效铁预测中的可行性。然而, 单一光谱在土壤铁预测方面存在一定局限性, 而将来自不同传感器的光谱数据进行融合 (例如 VNIR 和 MIR 数据的联合使用), 通常可以获得更高的预测精度<sup>[12]</sup>。Khajehzadeh 等<sup>[13]</sup>采用融合策略, 将 VNIR 分别与激光诱导击穿光谱 (LIBS) 和 X 射线荧光光谱 (XRF) 结合, 实现对磁铁矿的快速预测, 相对预测精度为 VNIR-XRF>VNIR-LIBS>VNIR。此外, 作为土壤中重要的显色物质, 铁含量也可通过土壤颜色进行预测。许多研究者通过光谱仪或者颜色传感器获取颜色参数, 进而构建线性或非线性模型来预测土壤中不同形态铁的含量。Jha 等<sup>[14]</sup>基于不同的颜色空间 (如 CIELab、RGB 和 CMYK) 对土壤中的全铁进行研究, 得到了很好的结果。

综上所述, 多种不同的技术和预测模型均可实现土壤铁含量预测, 但每种方法的精度不同, 各有优劣。例如, 光谱技术具有快速、环保和较高精度的优势, 但设备昂贵。光谱融合相较于单一光谱能提供更高精度, 但需要整合多种光谱数据, 从而增加数据采集和处理的成本。颜色参数预测策略操作简便、成本低, 但易受环境因素干扰<sup>[15]</sup>。

因此, 系统比较不同单一光谱和融合光谱在估算土壤不同形态铁含量方面的预测精度和使用成本具有重要意义。此前, Li 等<sup>[16]</sup>通过与干烧法对比, 评估了不同光谱法在预测土壤有机碳 (SOC) 中的成本效益, 为不同粒径土壤样品选择了最具性价比的 SOC 预测策略。然而, 迄今针对不同形态铁预测策略的经济性分析仍缺乏研究。实际应用中, 应根据具体目标评估不同预测策略的精度与成本, 为不同形态的铁选择最合适的预测策略。

本研究选取贵州省 501 个典型农田耕作层 (0~20 cm) 土壤样品, 基于颜色参数、VNIR 和 MIR 光谱数据, 结合偏最小二乘回归 (PLSR) 和支持向量机 (SVM) 方法, 预测土壤中三种形态铁 (全铁、有效铁、游离铁) 含量, 通过比较单一光谱与不同级别融合光谱模型的预测精度, 并结合不同预测策略所需经济成本, 筛选出每种形态铁性价比最高的预测策略, 为区域精准施肥提供技术支持。

## 1 材料与方法

### 1.1 研究区概况与样品的采集和测定

贵州省 (24°37'-29°13'N, 103°36'-109°35'E) 位于我国云贵高原, 境内地势西高东低, 是典型的喀斯特地貌区, 主要土壤类型有红壤、黄壤、黄棕壤和紫色土等<sup>[17]</sup>。成土母质以石灰岩、白云岩和砂页岩为主, 铁氧化物 (如赤铁矿、针铁矿) 含量较高, 由于复杂的地形地貌、强烈的岩溶作用和水土流失, 土壤铁形态的空间异质性显著, 为研究光谱技术预测铁含量的适用性提供了理想区域。

采用分层随机抽样法, 在贵州省内选取 501 块典型旱地 (烟草-玉米轮作), 采样点分布如图 1 所示, 主要集中在省内西部的高海拔地区和北部, 每个采样点按“S”形布设 5 个子点, 采集耕作层 (0~20 cm) 土样, 并记录采样点的经纬度、海拔高度、成土因素、土地利用类型和土壤类型 (结合 1:5 万土壤类型图) 等关键信息, 将土样充分混合后, 采用四分法保留 1.5 kg 土样。将采集的土样在实验室自然风干、去杂、磨碎, 过 60 目 (0.25 mm) 网筛, 混匀后分为两份, 分别用于化学组分测定和光谱分析。

全铁采用硝酸-高氯酸-氢氟酸消煮-原子吸收

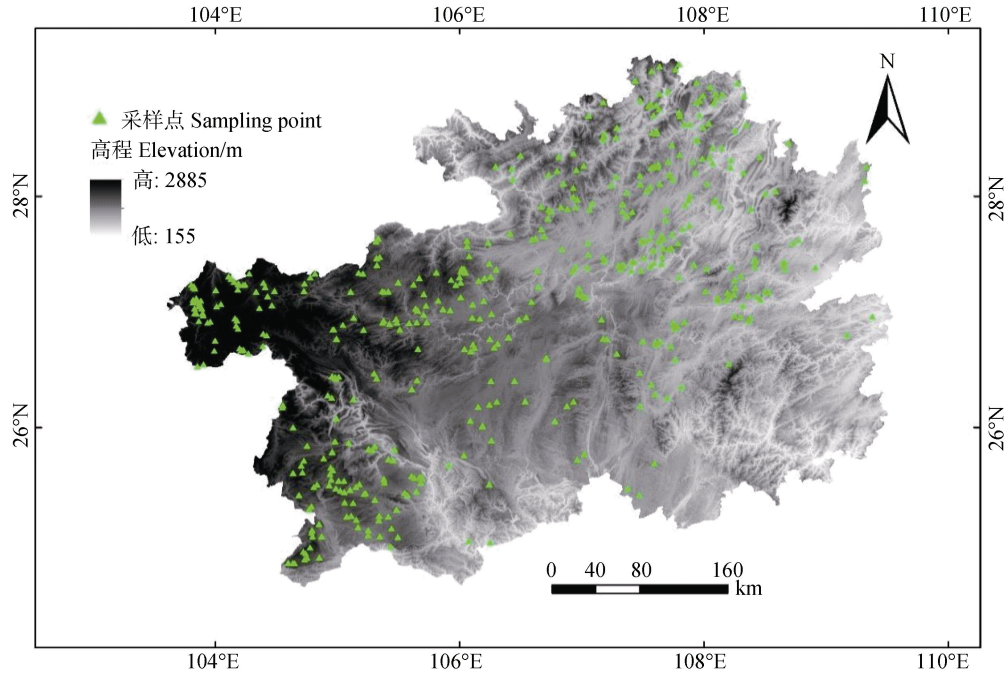


图 1 贵州省采样农田的空间分布图

Fig. 1 Spatial distribution of sampled farmland fields in Guizhou Province

光谱法（以下简称 NHF-AAS）测定<sup>[18]</sup>；有效铁采用 DTPA 浸提—原子吸收光谱法（DTPA-AAS）测定<sup>[19]</sup>；游离铁采用 DCB 提取—原子吸收光谱法（DCB-AAS）测定<sup>[20]</sup>。

## 1.2 光谱数据采集和预处理

测定光谱前，为了减少土壤水分的影响，首先将土样置于 45℃ 烘箱烘烤 24 h。颜色参数（CP）使用 NIXPro 颜色传感器测定，每个样品重复测量 5 次取均值；VNIR 的测定仪器为 Agilent Cary 5000，该仪器为实验室级别，波长范围为 350~2 500 nm；MIR 测定仪器为傅立叶变换红外光谱仪（FT-IR，Thermo Scientific Nicolet iS50），测定范围为 4000~650  $\text{cm}^{-1}$ ，同一样品重复压实测量三次取平均值。在比较了多种预处理方法的精度后，选择了如下的预处理流程：先将光谱反射率转换为吸收率，再对 VNIR 和 MIR 数据进行 Savitzky-Golay（SG）卷积平滑处理；最后应用标准正态变量变换（SNV）方法对平滑后的 VNIR 和 MIR 数据进行基线校正，以消除基线漂移<sup>[21]</sup>。

## 1.3 研究方案

### 1.3.1 预测模型的建立与验证

光谱预处理后，基于 RGB、Lab、HSV 等颜色参数，采用逐步多元线性回归模型（SMLR）来构建颜色参数与土壤不

同形态铁含量的关系，逐步回归自动选择最显著的自变量，通过引入或剔除变量来简化模型，同时基于 PLSR 和 SVM 预测模型，分别建立了三种形态铁的单—光谱（VNIR 和 MIR）模型和融合光谱（VNIR-MIR）模型。融合光谱模型依据数据整合层次分为三类，即数据级融合（Data-level Fusion, SF1）、特征级融合（Feature-level Fusion, SF2）、决策级融合（Decision-level Fusion, SF3）。（1）SF1：其原理是将预处理后的 VNIR 和 MIR 光谱数据直接合并，形成一个新数据矩阵，且融合后的光谱维度是两个单一光谱维度的总和。（2）SF2：其原理是提取 VNIR 和 MIR 中土壤铁的特征波段作为预测模型的输入，并将它们串联起来建立分类模型<sup>[22]</sup>。本研究选择并比较竞争性自适应重加权算法（CARS）和最小绝对收缩和选择算子（LASSO）算法用于预测建模<sup>[23-24]</sup>。（3）SF3：其原理是将 VNIR 和 MIR 光谱数据各自独立分析后的结果（如预测值、分类结果），通过加权平均、贝叶斯融合等方法整合，生成最终的全局决策。本研究选择了 Granger-Ramanathan 平均（GRA）算法和外积分析法（OPA）算法<sup>[25-26]</sup>。

为了充分利用数据、减小误差和避免随机划分建模集和验证集对精度的影响，本文采用了留一交叉验证（Leave-one-out cross validation, LOOCV）

方法。该方法假设有  $N$  个样本, 每次使用其中  $N-1$  个样本进行训练, 剩下的一个样本作为测试集进行预测<sup>[27]</sup>。模型的性能通过决定系数 ( $R^2$ )、均方根误差 (RMSE) 和相对分析偏差 (RPD) 来对预测模型进行评价, 筛选出最佳模型。 $R^2$  是回归平方和与总平方和之比, 其值在 0 至 1 之间。根据 Viscarra Rossel 和 Webster<sup>[28]</sup> 的分析,  $RPD \geq 2$  的模型预测效果相当好,  $1.5 \leq RPD < 2$  的模型预测效果良好,  $RPD < 1.5$  的模型预测效果较差。

传统实验方法 (NHF-AAS、DTPA-AAS、DCB-AAS) 的 RMSE 设定参考了文献中相对误差范围 (全铁和有效铁均值为 5%, 游离铁均值为 10%), 并结合实验室重复性验证数据。具体计算如下: 全铁  $RMSE = 43.37 \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1} \times 5\% \approx 2.17 \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 有效铁和游离铁同理, 此设定与传统方法的精度范围一致<sup>[18-20]</sup>。

在精度与成本的比较中, 选择 RMSE 作为精度考量指标, 其原因在于 RMSE 以实际测量单位 (如  $\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ 、 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) 直接量化预测值与实测值的平均偏差, 便于与农业管理标准 (如施肥阈值、污染限值) 直接对比<sup>[4]</sup>。相比之下,  $R^2$  仅反映模型解释变量变异的比例, 无法体现误差绝对值的大小; RPD 虽结合了数据变异系数, 但其分段评价 (如  $RPD \geq 2$  为优) 仍需依赖 RMSE 的实际值进行校准。RMSE 的绝对误差特性使其能够与成本 (元/样) 进行关联, 便于构建成本效率比 (CER) 等复合指标, 量化单位成本变化对应的精度损失或提升。

**1.3.2 成本计算** 本研究基于实际市场费用, 调查和估算了传统实验方法 (NHF-AAS、DTPA-AAS、DCB-AAS) 与不同预测策略 (CP、VNIR、MIR、SF) 的单一样品测量成本。其中传统实验方法取全铁 (NHF-AAS)、有效铁 (DTPA-AAS) 和游离铁 (DCB-AAS) 的单项化学分析费用, 光谱技术参考 Agilent Cary 5000 (VNIR)、FT-IR (MIR) 仪器单次送样检测的平均成本, NIXPro 颜色传感器则参考了市场购置价及样品人工测量费。成本数据来源于南京土壤所分析测试中心及多家土壤检测机构的公开报价, 取均值作为最终成本。由于光谱技术可同步测定全铁、有效铁、游离铁, 总成本按 3 种形态铁平摊后得出单项成本。

为系统评估不同策略精度与成本的权衡关系,

引入并改进 CER<sup>[29-31]</sup> 和效率指数 (EI)<sup>[32-33]</sup> 两个指标。成本效率比 (CER): 用于量化以传统方法为基准时, 光谱技术单位成本变化对应的预测精度变化, 其公式定义为:

$$CER = \frac{\Delta RMSE}{\Delta \text{成本}} = \frac{RMSE_{\text{光谱}} - RMSE_{\text{传统}}}{\text{成本}_{\text{传统}} - \text{成本}_{\text{光谱}}} \quad (1)$$

该指标反映了每降低 1 元成本所需承担的 RMSE 变化量。CER 可视为一种逆向的边际成本效益比 (MCBR), 其核心逻辑与经济学中的边际分析一致, 但方向相反: 传统边际分析关注增量投入的效益, 而 CER 将精度损失与成本节约直接关联。当 CER 值较低时, 表明在节省相同成本的情况下, 精度损失较小, 在一定阈值内策略的经济性更优; 反之, 则需谨慎采用低成本策略。

效率指数 (EI): 通过标准化的百分比形式量化光谱技术替代传统方法时成本节约与误差增加的动态效率关系的指标, 其公式定义为:

$$EI = \left( \frac{RMSE_{\text{光谱}} - RMSE_{\text{传统}}}{RMSE_{\text{传统}}} \right) \div \frac{\text{成本}_{\text{传统}} - \text{成本}_{\text{光谱}}}{\text{成本}_{\text{传统}}} \quad (2)$$

该指标反映了每降低 1% 成本, 需承担的 RMSE 百分比变化量 (变化量为 EI 值的 1%)。EI 的实质是评估不同策略在逼近资源优化阈值 (ROT) 时的动态效率。资源优化阈值指成本与精度达到最优平衡的临界点 (边际成本=边际效益时的状态), 而 EI 通过百分比量化当前策略偏离 ROT 的程度。EI 值越低, 表明每降低 1% 成本导致的误差增幅越小, 策略越接近最优效率边界。

## 2 结果与讨论

### 2.1 土壤不同形态铁含量的统计特征

表 1 的结果显示, 土壤全铁平均值为  $43.37 \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 范围为  $8.78 \sim 92.9 \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 变异系数为 32.68%, 为不同形态铁中最低。有效铁平均值为  $39.49 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 范围为  $0.09 \sim 230.2 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 变异系数高达 97.84%, 表明其含量波动较大, 且大多数样品的含量低于平均值。游离铁的平均值为  $26.98 \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 范围为  $5.15 \sim 59.32 \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 变异系数为 34.21%。

表 1 土壤不同形态铁含量的描述性统计特征

Table 1 Descriptive statistical characteristics of soil iron contents in different forms

铁形态 Forms of iron	最大值 Max	最小值 Min	平均值 Mean	标准差 Std	变异系数 CV/%
全铁 Total Fe/ (g·kg <sup>-1</sup> )	92.9	8.78	43.37	14.17	32.68
有效铁 Available Fe/ (mg·kg <sup>-1</sup> )	230.2	0.09	39.49	38.64	97.84
游离铁 Free Fe/ (g·kg <sup>-1</sup> )	59.32	5.15	26.98	9.23	34.21

## 2.2 数据建模

本研究基于颜色参数 (CP)、可见-近红外光谱 (VNIR)、中红外光谱 (MIR) 及不同融合策略 (SF1、SF2、SF3) 构建了土壤全铁、有效铁和游离铁含量预测模型, 并通过  $R^2$ 、RMSE 和 RPD 指标评估了各

策略的预测性能 (表 2)。基于 VNIR、MIR 和融合光谱的预测采用了不同的预测模型 (PLSR 和 SVM) 以及不同的光谱融合策略。表 2 仅展示了最佳预测模型的结果。结果表明, 不同预测策略在 3 种形态铁预测中的表现差异显著。

表 2 不同形态铁的最佳预测模型精度

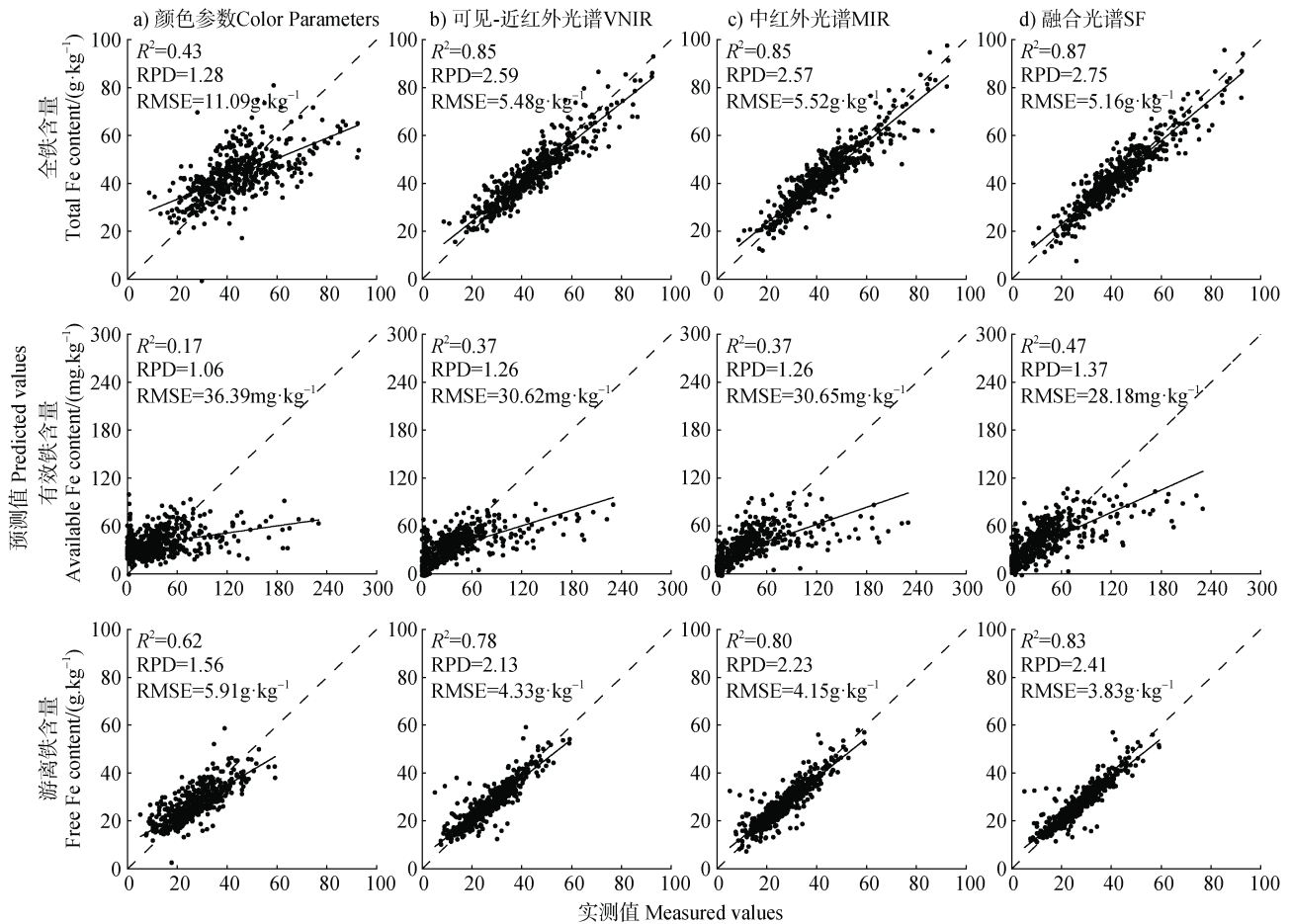
Table 2 Accuracy of optimal prediction model for different forms of iron

策略模型 Strategies and models	决定系数 $R^2$			均方根误差 RMSE			相对分析偏差 RPD		
	全铁 Total Fe	有效铁 Available Fe	游离铁 Free Fe	全铁 Total Fe/ (g·kg <sup>-1</sup> )	有效铁 Available Fe/ (mg·kg <sup>-1</sup> )	游离铁 Free Fe/ (g·kg <sup>-1</sup> )	全铁 Total Fe	有效铁 Available Fe	游离铁 Free Fe
颜色参数 CP-SMLR	0.43	0.17	0.62	11.09	36.39	5.91	1.28	1.06	1.56
可见-近红外光谱 VNIR -SVM	0.85	0.37	0.78	5.48	30.62	4.33	2.59	1.26	2.13
中红外光谱 MIR -SVM	0.85	0.37	0.80	5.52	30.65	4.15	2.57	1.26	2.23
融合策略 SF1-SVM	0.81	0.24	0.76	6.21	33.66	4.48	2.28	1.15	2.06
SF2-CARS-PLSR/ LASSO-SVM	0.86	0.47	0.82	5.36	28.23	3.91	2.65	1.37	2.36
SF3-GRA-PLSR	0.87	0.47	0.83	5.16	28.18	3.83	2.75	1.37	2.41

注: 对于融合策略, 只展示了三级融合中各级融合精度最高的模型精度结果; 加粗字体展示了针对不同形态铁的最优预测模型。在融合策略 SF2 最佳预测中, 对于全铁和有效铁的最佳预测模型为使用 CARS 算法后的 PLSR 模型, 对于游离铁为使用 LASSO 算法后的 SVM 模型, 在融合策略 SF3 最佳预测中, 3 种形态铁的最佳预测模型均为使用 GRA 算法后的 PLSR 模型。Note: For the fusion strategy, only the model accuracy results with the best fusion accuracy of each level in the three-level fusion are displayed; bold font shows the optimal prediction model for different forms of iron. In the best prediction of fusion strategy SF2, the best prediction model for total iron and available iron is the PLSR model after using the CARS algorithm, and for free iron is the SVM model after using the LASSO algorithm. In the best prediction of fusion strategy SF3, the best prediction models for three forms of iron are the PLSR model after using the GRA algorithm.

图 2 展示了不同预测策略下 3 种形态铁的预测值与实测值散点图。融合光谱 (图 2d) 的拟合线最接近 1:1 线, 尤其在全铁预测中表现出最高的拟合度, 预测值集中分布于实测值附近; 颜色参数 (图 2a)

的预测值与实测值偏差最大, 数据点呈现显著分散趋势, 表明其模型稳定性不足。VNIR (图 2b) 和 MIR (图 2c) 模型在全铁和游离铁预测中表现相近, 但在有效铁预测中仍存在较大误差。综合各指



注：实线是散点图拟合线，虚线是实测值和预测值之间的相等线。对于融合策略，只展示了三级融合中精度最高的模型精度结果。Note: The solid line is the fitted line of the scatter plot, and the dashed line is the line of equality between the measured and predicted values; for the fusion strategies, only the model with the best accuracy in the three-level fusion is displayed.

图2 基于颜色参数 (a)、可见-近红外 (b)、中红外 (c)、融合 (d) 光谱的 3 种形态铁最佳预测结果比较

Fig. 2 Comparison of the best prediction results of three forms of soil iron based on CP (a), VNIR (b), MIR (c), and SF (d) spectra

标,不同策略的预测精度排序为:SF>MIR≈VNIR>CP。

**2.2.1 颜色参数建模** 基于颜色参数的多元线性回归模型,三种形态铁的预测精度排序为:游离铁 (RPD=1.56) > 全铁 (RPD=1.28) > 有效铁 (RPD=1.06)。其中,游离铁的预测效果最佳 ( $R^2=0.62$ ,  $\text{RMSE}=5.91\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ),但全铁和有效铁的预测精度显著偏低 ( $R^2$ 分别为 0.43 和 0.17)。这一排序表明,游离铁的光学响应特性更易通过颜色参数表征,可能与其对土壤显色矿物(如赤铁矿、针铁矿)的主导作用相关。然而,与余星兴等<sup>[34]</sup>基于 Munsell 颜色系统的研究精度相比 ( $R^2=0.94$ ,  $\text{RPD}=4.37$ ),本模型的预测精度存在显著差距。这种差异可能源于两方面:其一, Munsell 颜色系统通

过标准色卡量化土壤颜色,能更精确地表征铁氧化物的光学特性;其二,采用非线性支持向量回归 (SVR) 模型,相较于本研究的逐步多元线性回归 (SMLR),更能捕捉颜色参数与游离铁间的复杂关系。而本研究选择 SMLR 模型的主要原因是 SMLR 的低复杂度特性更符合田间快速检测的需求。此外,沈飞龙<sup>[35]</sup>基于颜色参数和高光谱数据预测土壤全铁和游离铁,也获得了游离铁精度高于全铁精度的结果。尽管光谱技术同样基于表面光学特性,但其光谱波段 (VNIR 和 MIR) 可捕获更多化学键振动信息 (如 Fe-O、Fe-OH),而颜色参数仅反映可见光波段的整体反射强度<sup>[36]</sup>。

**2.2.2 可见-近红外和中红外光谱建模** 单一光谱模型 (VNIR、MIR) 在全铁和游离铁预测中表现

优异,但对有效铁的预测精度较低。对于全铁, VNIR 和 MIR 模型的 RPD 分别为 2.59 和 2.57, RMSE 分别降至 5.48 和 5.52  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ , 较颜色参数模型误差减少 50%以上。结合 PLSR 和 SVM 算法可有效提取铁矿物信息,验证了阳洋等<sup>[9]</sup>的研究结论。对于有效铁, VNIR 和 MIR 模型的 RPD 为 1.26 (RMSE $\approx$  30.6  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), 虽较颜色参数模型有所提升 ( $R^2$  从 0.17 增至 0.37), 但其精度仍然难以满足生产实践。有效铁在土壤中通常吸附于黏土矿物、有机质或氧化物表面, 呈现高度分散的状态, 这种吸附形式显著削弱了 Fe-O 键在红外区域的特征振动强度<sup>[37]</sup>。尽管土壤中全铁含量较为丰富, 但大多数铁以难溶性化合物或矿物的形式存在, 能够被植物和微生物直接吸收利用的可溶性铁含量相对较低<sup>[38]</sup>。因此, 有效铁含量低, 光谱信号较弱, 容易被仪器噪声或背景干扰所掩盖, 虽然融合技术可以提高信噪比, 但有效铁微弱的光谱响应特征限制了其预测的准确性。值得注意的是, 本研究有效铁预测结果与 Baumann 等<sup>[11]</sup>研究 (RMSE=0.5  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ) 存在显著差异, 可能与样本特性有关, 贵州土壤有效铁含量变异系数高达 97.84%, 且呈极端值分布(范围 0.09~230.2  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ , 均值 39.49  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), 而非洲西部样本变异系数较低 (CV=38%), 含量分布集中(范围 1.0~6.7  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ , 均值 2.9  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ )。对于游离铁, VNIR 和 MIR 模型的 RPD 分别为 2.13 和 2.23 (RMSE=4.33 和 4.15  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), 较颜色参数模型误差降低 30%~40%, 进一步验证了 VNIR 和 MIR 光谱对游离态铁的高效监测能力。

**2.2.3 融合光谱建模** 融合光谱技术精度排序为 SF3 $\approx$  SF2>SF1, 其中 SF3 策略精度略高于 SF2, 且 SF3、SF2 策略均高于 SF1。相较于单独使用 VNIR 和 MIR 光谱建模, SF3 和 SF2 策略在 3 种形态铁的预测中均表现出精度提升的情况, 尽管提升幅度有限。而 SF1 策略精度在 3 种形态铁预测中均低于单一光谱模型, 显示出较差的预测结果。以 SF3 策略为例, 对于全铁, SF3 模型的 RPD 提升至 2.75 (RMSE=5.16  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), 较单一光谱误差减少 6%~7%, 主要得益于 VNIR 的光谱范围(能同时捕捉可见光区和近红外区的信息)与 MIR 的化学键振动信息互补(如 Fe-O 键基频振动)<sup>[39-40]</sup>。对于有效铁, SF3 模型的 RPD 从 1.26 提升至 1.37 (RMSE=28.18  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ),  $R^2$  提高至 0.47, 但仍未达到实际应用要

求 (RPD $\geq$  1.5)。数据融合虽增强了微弱信号提取能力, 但有效铁的低含量与高异质性仍是主要瓶颈。对于游离铁, SF3 模型的 RPD 达 2.41 (RMSE=3.83  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), 误差较单一光谱降低 7%~12%。单一光谱技术易受土壤中复杂成分(如有机质、碳酸盐等)的干扰, 可能掩盖关键信息。而光谱融合通过整合多种传感器和技术的优势, 减少冗余信息干扰, 提高了模型准确性。其中 SF3 策略中 OPA 和 GRA 算法的优势是兼容异构模型(如土壤光谱同时存在线性响应和非线性响应, 单一模型难以兼顾时), 增强了模型的鲁棒性, 适用于土壤分类鉴定、科研实验等对精度要求严苛的场景。SF2 策略中的 CARS 和 LASSO 算法优势是显著降低维度, 提升模型效率与泛化能力, 适用于数据噪声大或存在多重共线性(如土壤有机质干扰铁特征波段)的场景。这些技术在土壤铁含量的预测中展现出更高的精度。此结果与 Bao 等<sup>[41]</sup>发现融合光谱在铁氧化物预测中具有优势的结论一致。

总体而言, 针对不同形态铁, 游离铁在所有策略下均能被可靠预测; 全铁在颜色参数预测下精度较低, 其余策略均能有效预测。有效铁的预测精度较低, 且无论采用何种预测策略均难以准确预测。

### 2.3 不同形态铁预测策略的成本对比

据表 3 可知, 传统实验方法 (NHF-AAS、DTPA-AAS、DCB-AAS) 作为测定全铁、有效铁、游离铁的标准方法, 其测定成本与精度分别为 (150 元 $\cdot$ 样 $^{-1}$ 、RMSE=2.17  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ )、(100 元 $\cdot$ 样 $^{-1}$ 、RMSE=1.97  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ )、(100 元 $\cdot$ 样 $^{-1}$ 、RMSE=2.70  $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), 展示出很高的精度, 但其高昂的成本及复杂的操作流程限制了其在大规模土壤铁监测中的应用<sup>[42]</sup>。因此, 在实际应用中需兼顾精度与成本, 进而寻求最佳策略。与传统实验方法(单样品测定成本: 全铁 150 元、有效铁 100 元、游离铁 100 元)相比, 光谱技术通过一次测量同步获取多形态铁信息, 显著降低了单形态测定成本 (CP、VNIR、MIR、SF 平摊后分别为 15、25、35、60 元 $\cdot$ 形态 $^{-1}$ ), 成本降幅达 40%~85%, 这种经济性在大规模应用中尤为突出。以 VNIR 技术为例, 若对 1 000 个样本进行全形态铁测定, 传统方法需 35 万元, 而 VNIR 技术仅需 7.5 万元, 成本节约 78.6%, 同时避免化学试剂的重复消耗与废液处理问题, 进一步减少环境管理成本。

表 3 传统方法与光谱技术预测不同形态铁含量的最优模型精度

Table 3 Optimal model accuracy of traditional methods and spectral technology for predicting different forms of iron content

方法 Method	均方根误差 RMSE			市场价 Market price/Yuan
	全铁 Total Fe/ (g·kg <sup>-1</sup> )	有效铁 Available Fe/ (mg·kg <sup>-1</sup> )	游离铁 Free Fe/ (g·kg <sup>-1</sup> )	
NHF-AAS(1)	2.17	-	-	150
DTPA-AAS	-	1.97	-	100
DCB-AAS	-	-	2.70	100
CP	11.09	36.39	5.91	15
VNIR	5.48	30.62	4.33	25
MIR	5.52	30.65	4.15	35
SF	5.16	28.18	3.83	60

注: NHF-AAS (硝酸-高氯酸-氢氟酸消煮—原子吸收光谱法)、DTPA-AAS (DTPA 浸提—原子吸收光谱法)、DCB-AAS (DCB 提取—原子吸收光谱法) 分别为测定全铁、有效铁、游离铁的标准方法。SF 策略为三级融合策略中精度最高的策略。下同。Note: NHF-AAS (Nitric acid-perchloric acid-hydrofluoric acid digestion-atomic absorption spectrometry), DTPA-AAS (DTPA leaching-atomic absorption spectrometry), and DCB-AAS (DCB extraction-atomic absorption spectrometry) are the standard methods for determination of total iron, available iron, and free iron, respectively. The SF strategy delivers the highest precision among the three-tier fusion strategies. The same below.

**2.3.1 全铁的成本与精度对比** 为系统评估光谱替代方法的可行性, 本研究以传统方法为基准, 构建成本-精度双维度评价体系(包括成本效率比 CER 和效率指数 EI), 对 4 种光谱技术开展定量对比分析, 系统评估各光谱技术在全铁、有效铁、游离铁预测中的表现。

与传统实验方法 (NHF-AAS) 相比, CP 法成本降低 90% (15 元·样品<sup>-1</sup>), 但 RMSE 增加了 8.92 g·kg<sup>-1</sup> (+411%, 较传统方法增加了 411%) (表 4), 其成本效率比 (CER=0.066) 与效率指数 (EI=4.57)

表明, 成本虽低但精度损失过大。相比之下, VNIR 光谱成本降低 83% (25 元·样品<sup>-1</sup>), RMSE 为 5.48 g·kg<sup>-1</sup> (+152%)。CER=0.026, EI=1.83, 表明每降低 1 元或 1% 成本, 误差增加 0.026 g·kg<sup>-1</sup> 或 1.83%, 在成本与精度间实现较优平衡, MIR 光谱成本降低 77% (35 元·样品<sup>-1</sup>), RMSE 为 5.52 g·kg<sup>-1</sup> (+154%), 其 EI=2 与 VNIR 接近但成本略高。SF 光谱成本降低 60% (60 元·样品<sup>-1</sup>), RMSE 为 5.16 g·kg<sup>-1</sup> (+2.99 g·kg<sup>-1</sup>, +138%)。虽精度最高, 但其 CER=0.033, EI=2.3 显示其适用于精度要求更高的场景。

表 4 不同土壤全铁预测策略的成本效率比与效率指数

Table 4 Cost efficiency ratio and efficiency index of different soil total iron prediction strategies

策略 Strategies	市场价 Market price/Yuan	均方根误差 RMSE/ (g·kg <sup>-1</sup> )	成本降低率 Cost reduction rate/%	RMSE 增加率 Rate of increase/%	成本效率比 CER	效率指数 EI
NHF-AAS	150	2.17	-	-	-	-
CP	15	11.09	90	411	0.066	4.57
VNIR	25	5.48	83	152	0.026	1.83
MIR	35	5.52	77	154	0.029	2
SF	60	5.16	60	138	0.033	2.3

注: 此处的成本降低率和 RMSE 增加率, 是以传统方法成本和 RMSE 为基准, 通过与不同光谱方法成本与 RMSE 进行比较计算得到, 下同。Based on the traditional method's RMSE and cost, the cost of the traditional method, different spectral method and RMSE were compared, and the cost reduction rate and RMSE increase rate of the traditional method were obtained. The same below.

综合来看,在全铁的预测中,VNIR (CER=0.026, EI=1.83) 在成本节约和精度损失间取得最佳平衡,优于 CP (CER=0.066, EI=4.57) 和 SF (CER=0.033, EI=2.3)。在土壤全铁预测中,选择何种策略需根据具体应用需求决定。(1) 追求最低成本且接受低精度: CP 法(精度过低,不推荐)。(2) 兼顾精度与成本的常规应用: VNIR 策略(精度良好,成本、CER 和 EI 最低)为最佳策略, MIR 为次优策略。(3) 追求最高精度且成本非首要限制: SF 策略(精度最高、成本最高)。

**2.3.2 有效铁的成本与精度对比** 与传统实验方法(DTPA-AAS)相比, CP 法成本降低 85%, RMSE 增至 36.39 mg·kg<sup>-1</sup> (+34.42 mg·kg<sup>-1</sup>, +1747%)(表 5)。CER=0.405, EI=20.6, 表明其每降低 1 元或 1% 成本, 误差增加 0.405 mg·kg<sup>-1</sup> 或 20.6%, 凸显其精度缺陷。对于 VNIR 光谱, 成本降低 75%, RMSE 为 30.62 mg·kg<sup>-1</sup> (+28.65 mg·kg<sup>-1</sup>, +1454%), CER=0.382, EI=19.4, 经济性优于 CP, 但误差增幅较高。MIR 光谱成本降低 65%, RMSE 为 30.65 mg·kg<sup>-1</sup> (+28.68 mg·kg<sup>-1</sup>, +1456%), 其

CER=0.441, EI=22.4 表明其经济性劣于 VNIR 光谱。SF 光谱成本降低 40%, RMSE 为 28.18 mg·kg<sup>-1</sup> (+26.21 mg·kg<sup>-1</sup>, +1330%)。虽精度略有提升, 但 CER=0.655, EI=33.3, 表明其在高成本下精度提升有限, 经济性仍进一步下降。

根据 2.2.2 节分析, VNIR 和 MIR 光谱对有效铁预测精度较差, Khajehzadeh 等<sup>[13]</sup>指出有效态金属的光谱预测需结合 LIBS 或 XRF 等元素特异性技术。因此, 本研究使用的光谱技术尚无法替代传统方法用于有效铁测定。对于有效铁这种含量极低(本研究中平均含量仅占全铁的 0.1%)且预测精度差的情况, CER 和 EI 指标表明光谱技术较传统技术存在很高的精度损失(如 VNIR 的 CER=0.382、EI=19.4, 表明每降低 10 元或 10% 成本, RMSE 增加 3.82 mg·kg<sup>-1</sup> 或 194%)。尽管光谱技术成本低(较传统方法降低 40%~85%), 但其精度损失巨大(RMSE 增加率为 1 330%~1 747%, RPD<1.5), 无法满足实际需求, 此时借助 CER 和 EI 指标讨论“最优策略”已无意义, 传统方法仍是必要选择。

表 5 不同土壤有效铁预测策略的成本效率比与效率指数

Table 5 Cost efficiency ratio and efficiency index of different soil available iron prediction strategies

策略 Strategies	市场价 Market price/Yuan	均方根误差 RMSE/ (mg·kg <sup>-1</sup> )	成本降低率 Cost reduction rate/%	RMSE 增加率 Rate of increase/%	成本效率 比 CER	效率指数 EI
DTPA-AAS	100	1.97	-	-	-	-
CP	15	36.39	85	1747	0.405	20.6
VNIR	25	30.62	75	1454	0.382	19.4
MIR	35	30.65	65	1456	0.441	22.4
SF	60	28.18	40	1330	0.655	33.3

**2.3.3 游离铁的成本与精度对比** 与传统实验方法(DCB-AAS)相比, 众多光谱技术中, VNIR 光谱以最低 CER (0.022)(表 6)和最优 EI (0.8) 成为游离铁测定的最经济策略(RMSE=4.33 g·kg<sup>-1</sup>), 每降低 1 元或 1% 成本, 增加 0.022 g·kg<sup>-1</sup> 或 0.8% 误差, 显示出很高的经济性。对于 MIR 光谱, 成本降低 65%, RMSE 为 4.15 g·kg<sup>-1</sup> (+1.45 g·kg<sup>-1</sup>, +54%), 其 CER=0.022, EI=0.83 与 VNIR 光谱经济性相近, 但成本略高。而 SF 光谱虽精度较高, RMSE=3.83 g·kg<sup>-1</sup> (+1.13 g·kg<sup>-1</sup>, +42%), 但经济性

(CER=0.028, EI=1.05) 低于 VNIR 和 MIR。值得注意的是, CP 法(RMSE=5.91 g·kg<sup>-1</sup>, CER=0.038) 在精度损失不大(RMSE=5.91 g·kg<sup>-1</sup>)且经济性尚可的情况下(CER=0.038、EI=1.39), 其极低成本(15 元·样<sup>-1</sup>)适用于快速筛查场景, 能够在较短时间内提供初步结果, 与 Vodyanitskii 和 Shoba<sup>[43]</sup>提出的“颜色参数在氧化铁定性分析中的实用性”观点相符。

在游离铁预测中, VNIR 和 MIR 策略的 CER 和 EI 值非常接近且较 CP 和 SF 策略低, 表明它们在节

省单位成本或成本百分比时造成的精度损失最小。CP 策略的 CER 和 EI 虽然高于 VNIR 和 MIR, 但其极低成本 (15 元) 和可接受的精度损失 (RPD=1.56, 预测效果尚可) 非常适用于对精度要求适中、需要极低成本的快速筛查场景。在土壤游离铁预测中, 光谱技术提供了从低成本快速筛查到高精度测定的

多种可行选择。

(1) 极低成本快速筛查: CP 法 (精度尚可, 成本最低)。(2) 兼顾精度与成本的常规应用: VNIR (CER、EI 最低, 精度良好) 为最佳策略, MIR 为次优策略。(3) 最高精度需求: SF 策略 (精度最高、成本最高)。

表 6 不同土壤游离铁预测策略的成本效率比与效率指数

Table 6 Cost efficiency ratio and efficiency index of different soil free iron prediction strategies

策略 Strategies	市场价 Market price/Yuan	均方根误差 RMSE/ (g·kg <sup>-1</sup> )	成本降低率 Cost reduction rate/%	RMSE 增加率 Rate of increase/%	成本效率比 CER	效率 指数 EI
DCB-AAS	100	2.70	-	-	-	-
CP	15	5.91	85	118	0.038	1.39
VNIR	25	4.33	75	60	0.022	0.80
MIR	35	4.15	65	54	0.022	0.83
SF	60	3.83	40	42	0.028	1.05

### 3 结 论

本文基于贵州省 501 个典型农田耕作层 (0~20 cm) 土壤样品, 系统评估了光谱技术 (CP、VNIR、MIR、融合光谱) 在土壤全铁、有效铁和游离铁预测中的精度以及每种策略所需成本, 并通过引入成本效率比 (CER) 和效率指数 (EI) 量化精度与成本之间的权衡关系。结果发现, 光谱技术相较于传统化学分析方法显著降低了成本 (降幅达 40%~85%), 且在全铁和游离铁预测中表现优异, 但无法可靠预测有效铁。对于全铁, VNIR 光谱为最优策略, 其以低成本实现有效预测, 适用于大范围农田监测, MIR 光谱为次优策略; 对于有效铁, 光谱技术的预测可靠性不足, 因此不推荐使用光谱技术; 对于游离铁, VNIR 光谱为首选、MIR 光谱为次选, 二者兼具高精度与经济性。同时, 本文存在以下不足: 一是研究局限于贵州省 501 个典型农田样品数据, 结论在其他区域的普适性仍需验证; 二是尚未考虑对样品类型如土壤类型、成土母质等进行细分建模; 三是 CER 和 EI 不存在普适的绝对阈值, “最优”策略的选择需结合具体的应用场景。

### 参考文献 (References)

- [1] Dong Z Q, Zhang L H, Pei C J, et al. Study on technique of relieving lack iron nutrition for soybean plants in calcareous soil[J]. *Acta Agriculturae Boreali-Sinica*, 2011, 26 (S2): 122—124.[董志强, 张丽华, 裴翠娟, 等. 石灰性土壤大豆植株铁营养障碍解除技术研究[J]. *华北农学报*, 2011, 26 (S2): 122—124.]
- [2] Chinese Soil Taxonomy Research Group, Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, & Cooperative Research Group on Chinese Soil Taxonomy. Keys to Chinese Soil Taxonomy[M]. 3rd ed. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2001. [中国科学院南京土壤研究所土壤系统分类课题组, 中国土壤系统分类课题研究协作组. 中国土壤系统分类检索 (第三版) [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2001.]
- [3] Tan J. Characterization and hyperspectral quantitative model of iron oxide in red and yellow soils of mountainous areas[D]. Changsha: Hunan Agricultural University, 2020. [谭洁. 山地红黄壤氧化铁特性及高光谱定量模型——以湖南省大围山为例[D]. 长沙: 湖南农业大学, 2020.]
- [4] Tang Y J, Jones E, Minasny B. Evaluating low-cost portable near infrared sensors for rapid analysis of soils from South Eastern Australia[J]. *Geoderma Regional*, 2020, 20: e00240.
- [5] Cheng Y S, Zhou Y. Research progress and trend of quantitative monitoring of hyperspectral remote sensing for heavy metals in soil[J]. *The Chinese Journal of*

- Nonferrous Metals, 2021, 31 ( 11 ): 3450—3467.[成永生,周瑶. 土壤重金属高光谱遥感定量监测研究进展与趋势[J]. 中国有色金属学报, 2021, 31 ( 11 ): 3450—3467.]
- [ 6 ] Shi Z. Principle and method of hyperspectral remote sensing of soil surface[M]. Beijing: Science Press, 2014. [史舟. 土壤地面高光谱遥感原理与方法[M]. 北京: 科学出版社, 2014.]
- [ 7 ] Stenberg B, Viscarra Rossel R A, Mouazen A M, et al. Visible and near infrared spectroscopy in soil science[M]//Advances in Agronomy. Amsterdam : Elsevier, 2010: 163—215.
- [ 8 ] Cornell R M, Schwertmann U. The iron oxides : Structure, properties, reactions, occurrences, and uses[M]. Weinheim: Wiley-VCH, 2003.
- [ 9 ] Yang Y. Prediction of total iron and free iron contents in soil based on visible-near infrared spectral features in Guangxi[D]. Guangzhou : South China Agricultural University, 2019. [阳洋. 基于可见-近红外光谱特征的广西土壤全铁和游离铁含量预测[D]. 广州: 华南农业大学, 2019.]
- [ 10 ] Xiong J F, Zheng G H, Lin C. Estimating soil iron content based on reflectance spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36 ( 11 ): 3615—3619.[熊俊峰, 郑光辉, 林晨. 基于反射光谱的土壤铁元素含量估算[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36( 11 ): 3615—3619.]
- [ 11 ] Baumann P, Lee J, Frossard E, et al. Estimation of soil properties with mid-infrared soil spectroscopy across yam production landscapes in West Africa[J]. Soil, 2021, 7 ( 2 ): 717—731.
- [ 12 ] O'rourke S M, Stockmann U, Holden N M, et al. An assessment of model averaging to improve predictive power of portable vis-NIR and XRF for the determination of agronomic soil properties[J]. Geoderma, 2016, 279: 31—44.
- [ 13 ] Khajehzadeh N, Haavisto O, Koresaar L. On-stream mineral identification of tailing slurries of an iron ore concentrator using data fusion of LIBS, reflectance spectroscopy and XRF measurement techniques[J]. Minerals Engineering, 2017, 113: 83—94.
- [ 14 ] Jha G, Sihi D, Dari B, et al. Rapid and inexpensive assessment of soil total iron using Nix Pro color sensor[J]. Agricultural & Environmental Letters, 2021, 6 ( 3 ): e20050.
- [ 15 ] Poppiel R R, Lacerda M P C, Rizzo R, et al. Soil color and mineralogy mapping using proximal and remote sensing in Midwest Brazil[J]. Remote Sensing, 2020, 12 ( 7 ): 1197.
- [ 16 ] Li S, Viscarra Rossel R A, Webster R. The cost - effectiveness of reflectance spectroscopy for estimating soil organic carbon[J]. European Journal of Soil Science, 2022, 73 ( 1 ): e13202.
- [ 17 ] Chen Q X, Lu X H, Zhao W X, et al. Spatial differentiation of main soil types in Guizhou Province under different topographical conditions[J]. Jiangsu Agricultural Sciences, 2022, 50 ( 7 ): 205—213.[陈清霞, 陆晓辉, 赵文轩, 等. 不同地形条件下贵州省主要土壤类型的空间分异[J]. 江苏农业科学, 2022, 50( 7 ): 205—213.]
- [ 18 ] Liu G S. Soil physical and chemical analysis and profile description[M]. Beijing: China Standards Press, 1996. [刘光崧. 土壤理化分析与剖面描述[M]. 北京: 中国标准出版社, 1996.]
- [ 19 ] Fu S Q, Ji X Q, Song Y. Analysis error of DTPA-atomic absorption spectrophotometry in determining available copper, zinc, manganese and iron in soil[J]. Soils and Fertilizers, 1987 ( 3 ): 43—45. [傅绍清, 纪晓琦, 宋怡. DTPA——原子吸收分光光度法测定土壤有效铜、锌、锰、铁的分析误差[J]. 土壤肥料, 1987( 3 ): 43—45.]
- [ 20 ] Quan guo nong ye ji shu tui guang fu wu zhong xin. Tu rang fen xi ji shu gui fan[M]. Di er ban. Beijing: Zhong guo nong ye chu ban she, 2006. [全国农业技术推广服务中心. 土壤分析技术规范[M]. 第二版. 北京: 中国农业出版社, 2006.]
- [ 21 ] Tiecher T, Moura-Bueno J M, Caner L, et al. Improving the quantification of sediment source contributions using different mathematical models and spectral preprocessing techniques for individual or combined spectra of ultraviolet-visible, near- and middle-infrared spectroscopy[J]. Geoderma, 2021, 384: 114815.
- [ 22 ] Zhang J, Wang Y Z, Yang W Z, et al. Data fusion of ATR-FTIR and UV-vis spectra to identify the origin of *Polygonatum kingianum*[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41 ( 5 ): 1410—1416.[张娇, 王元忠, 杨维泽, 等. ATR-FTIR 和 UV-Vis 结合数据融合策略鉴别滇黄精产地[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41 ( 5 ): 1410—1416.]
- [ 23 ] Li H D, Liang Y Z, Xu Q S, et al. Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration[J]. Analytica Chimica Acta, 2009, 648 ( 1 ): 77—84.
- [ 24 ] Tibshirani R. Regression shrinkage and selection via the lasso: A retrospective[J]. Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology, 2011, 73 ( 3 ): 273—282.
- [ 25 ] Malone B P, Minasny B, Odgers N P, et al. Using model averaging to combine soil property rasters from legacy soil maps and from point data[J]. Geoderma, 2014, 232/233/234: 34—44.
- [ 26 ] Jaillais B, Pinto R, Barros A S, et al. Outer-product analysis ( OPA ) using PCA to study the influence of temperature on NIR spectra of water[J]. Vibrational Spectroscopy, 2005, 39 ( 1 ): 50—58.
- [ 27 ] Qi J. A study on the comparison of goodness-of-fit based

- on leave-one-out cross-validation[D]. Jinan: Shandong University, 2022. [齐霁. 基于留一交叉验证的拟合优度比较研究[D]. 济南: 山东大学, 2022.]
- [ 28 ] Viscarra Rossel R A , Webster R. Predicting soil properties from the Australian soil visible–near infrared spectroscopic database[J]. *European Journal of Soil Science*, 2012, 63 ( 6 ): 848—860.
- [ 29 ] Smith O M, Cohen A L, Reganold J P, et al. Landscape context affects the sustainability of organic farming systems[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2020, 117( 6 ): 2870—2878.
- [ 30 ] OECD. Cost-Benefit Analysis and the Environment: Further Developments and Policy Use , OECD Publishing, Paris. <http://dx.doi.org/10.1787/9789264085169-en>.
- [ 31 ] Drummond M F, Sculpher M J, Claxton K, et al. Methods for the economic evaluation of health care programmes[M]. New York: Oxford University Press, 2015.
- [ 32 ] Farrell M J. The measurement of productive efficiency[J]. *Journal of the Royal Statistical Society Series A: General*, 1957, 120 ( 3 ): 253—290.
- [ 33 ] Peuscher D W. The resource orchestration theory as contributor to supply chain management: An assessment on its applicability[D]. Enschede ( Netherlands ): University of Twente, 2016.
- [ 34 ] Yu X X, Yuan D G, Chen J K, et al. Prediction of soil free iron oxide content based on soils munsell color[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2021, 58 ( 5 ): 1322—1329. [余星兴, 袁大刚, 陈剑科, 等. 基于 Munsell 颜色的土壤游离铁预测研究[J]. *土壤学报*, 2021, 58 ( 5 ): 1322—1329.]
- [ 35 ] Shen F L. Research on soil iron oxide estimation model based on machine learning and spectral information [D]. Wuhan: Huazhong Agricultural University, 2022. [沈飞龙. 基于机器学习与光谱信息的土壤铁氧化物估算模型研究[D]. 武汉: 华中农业大学, 2022.]
- [ 36 ] Wu Z C, Ye F W, Guo F S, et al. A review on application of techniques of principle component analysis on extracting alteration information of remote sensing[J]. *Journal of Geo-Information Science*, 2018, 20 ( 11 ): 1644—1656. [吴志春, 叶发旺, 郭福生, 等. 主成分分析技术在遥感蚀变信息提取中的应用研究综述[J]. *地球信息科学学报*, 2018, 20 ( 11 ): 1644—1656.]
- [ 37 ] Hu H Q. Study on the characteristic and mechanism of Fe-oxides cemented with clays[D]. Wuhan: Huazhong Agricultural University, 2008. [胡汉青. 铁氧化物与粘土矿物的交互作用特点及其机理[D]. 武汉: 华中农业大学, 2008.]
- [ 38 ] Wang F. Involvement of *Trichoderma asperellum* strain T6 in regulating iron acquisition in plants[D]. Jinan: Shandong Normal University, 2014. [王飞. 棘孢木霉对植物铁营养的影响及其机制的研究[D]. 济南: 山东师范大学, 2014.]
- [ 39 ] Mao Y C, Wen J, Cao W, et al. A study on the fusion algorithm based on Anshan-style iron ore imaging spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2024, 44 ( 9 ): 2620—2625. [毛亚纯, 文杰, 曹旺, 等. 基于鞍山式铁矿成像光谱的融合算法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2024, 44 ( 9 ): 2620—2625.]
- [ 40 ] Gates J R. A comparison of VNIR and MIR spectroscopy for predicting various soil properties[D]. Lincoln ( Nebraska ): University of Nebraska-Lincoln, 2018.
- [ 41 ] Bao N S, Lei H M, Cao Y, et al. Iron ore tailing composition estimation using fused visible–near infrared and thermal infrared spectra by outer product analysis[J]. *Minerals*, 2022, 12 ( 3 ): 382.
- [ 42 ] 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[J]. *Geoderma*, 2006, 131 ( 1/2 ): 59—75.
- [ 43 ] Vodyanitskii Y N, Shoba S A. Ferrihydrite in soils[J]. *Eurasian Soil Science*, 2016, 49 ( 7 ): 796—806.

(责任编辑: 檀满枝)