

DOI: 10.11766/trxb202404120152

CSTR: 32215.14.trxb202404120152

孔祥麒, 高维常, 潘文杰, 蔡 凯, 杨 静, 李德成, 郑光辉, 曾 荣. 土壤碳氮比的可见-近红外与中红外光谱预测[J]. 土壤学报, 2025, 62 ( 3 ): 653–664.

KONG Xiangqi, GAO Weichang, PAN Wenjie, CAI Kai, YANG Jing, LI Decheng, ZHENG Guanghui, ZENG Rong. Prediction of Soil Carbon-to-Nitrogen Ratio Based on Visible-Near Infrared and Mid-Infrared Spectroscopy[J]. Acta Pedologica Sinica, 2025, 62 ( 3 ): 653–664.

## 土壤碳氮比的可见-近红外与中红外光谱预测<sup>\*</sup>

孔祥麒<sup>1</sup>, 高维常<sup>2</sup>, 潘文杰<sup>3</sup>, 蔡 凯<sup>2</sup>, 杨 静<sup>3</sup>, 李德成<sup>4</sup>, 郑光辉<sup>5</sup>,  
曾 荣<sup>5†</sup>

(1. 南京信息工程大学长望学院, 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; 5. 南京信息工程大学地理科学学院, 南京 210044)

**摘 要:** 土壤碳氮比(C/N)不仅可以反映土壤质量,也可以衡量土壤碳氮元素的营养平衡状况,其数值和等级的快速准确测定对指导实时科学施肥和提升土壤质量具有重要意义。本研究利用贵州省 501 个烤烟-玉米轮作典型农田耕层(0~20 cm)土壤样品的可见-近红外光谱(VNIR)和中红外光谱(MIR)信息以及总有机碳(TOC)、全氮(TN)和C/N数据,对光谱进行 Savitzky-Golay(SG)平滑去噪和标准规一化处理后,分别应用偏最小二乘回归(PLSR)、随机森林(RF)和 Cubist 三种方法进行建模,通过直接预测C/N和间接预测(先分别预测TOC和TN再计算C/N)两种方式构建了土壤C/N预测模型,并对C/N数值和等级预测精度进行了解析。结果表明:(1)对于C/N数值预测,虽然最优预测策略为MIR-PLSR的直接预测,但预测精度(相对标准误差,RPD)仅为1.20;(2)C/N等级可以被准确预测,最优策略为MIR-PLSR模型的直接预测,等级判定精度为0.71;(3)C/N数值预测精度较低的原因主要有两方面,其一是烟田较为一致的严格施肥措施降低了耕层土壤碳氮含量的空间差异,从而也降低了C/N的空间变异(变异系数为17.15%,中度变异),二是C/N与VNIR、MIR光谱的相关性均较低。因此,基于MIR-PLSR可以对C/N等级进行直接预测。

**关键词:** 土壤有机碳; 碳氮比; 偏最小二乘回归; 高光谱预测

**中图分类号:** S151.9      **文献标志码:** A

## Prediction of Soil Carbon-to-Nitrogen Ratio Based on Visible-Near Infrared and Mid-Infrared Spectroscopy

KONG Xiangqi<sup>1</sup>, GAO Weichang<sup>2</sup>, PAN Wenjie<sup>3</sup>, CAI Kai<sup>2</sup>, YANG Jing<sup>3</sup>, LI Decheng<sup>4</sup>, ZHENG Guanghui<sup>5</sup>,  
ZENG Rong<sup>5†</sup>

(1. Changwang School of Honors, 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; 5.

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金项目(42107322)、中国烟草总公司项目(110202102038)、中国烟草总公司贵州省公司项目(2023XM11)共同资助 Supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 42107322), the Key Research and Development Project of China National Tobacco Corporation (No.110202102038), and the National Tobacco Corporation Project (No.2023XM11)

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

作者简介: 孔祥麒(2002—),男,湖北荆州人,主要从事土壤遥感方面的研究。E-mail: 15895861869@163.com

收稿日期: 2024-04-12; 收到修改稿日期: 2024-07-31; 网络首发日期(www.cnki.net): 2024-10-23

*School of Geographical Science, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China)*

**Abstract:** 【Objective】The soil carbon-to-nitrogen ratio (C/N) reflects not only soil quality but also the nutrient balance of soil carbon and nitrogen elements. Thus, rapid and accurate determination of this ratio and the grade is crucial for guiding real-time scientific fertilization and improvement of soil quality. 【Method】This study used visible-near infrared (VNIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopic data, along with total organic carbon (TOC), total nitrogen (TN), and C/N data from 501 typical tobacco-corn rotation farmland topsoil samples (0 ~ 20 cm) in Guizhou Province for characterization. After processing the spectra with Savitzky-Golay (SG) smoothing and standard normalization, three modeling methods were applied: partial least squares regression (PLSR), random forest (RF), and Cubist. Models for predicting soil C/N were constructed using both direct prediction of C/N and indirect prediction (first predicting TOC and TN, then calculating C/N), and the precision of C/N value and grade predictions was analyzed. 【Result】The results revealed that: (1) For C/N value prediction, the optimal prediction strategy was direct prediction using MIR-PLSR, which had a prediction precision (relative standard error, RPD) of 1.20; (2) C/N grade could be accurately predicted, with the optimal strategy being direct prediction using the MIR-PLSR model, achieving a grade determination accuracy of 0.71; (3) The main reasons for the low prediction accuracy of C/N values are twofold. First, the uniform stringent fertilization measures in the tobacco fields have reduced the spatial variation in the carbon and nitrogen content of the plow layer soil, thereby also reducing the spatial variation of C/N (the coefficient of variation is 17.15%, indicating moderate variation). Second, the correlation between C/N and both VNIR and MIR spectra was relatively low. 【Conclusion】Therefore, the MIR-PLSR model can be used for direct prediction of C/N grades.

**Key words:** Soil organic carbon; Carbon-to-nitrogen ratio; Partial least squares regression; Hyperspectral prediction

土壤有机碳和氮素是植物生长必需的重要养分,土壤碳氮比(总有机碳 TOC 与全氮 TN 的比值, C/N)不仅可以反映土壤的质量,也可以衡量土壤碳氮元素的营养平衡状况<sup>[1]</sup>,较低的 C/N 有助于促进有机质的分解和有效氮的增加,而较高的 C/N 则可能导致有机质分解时受到氮元素的限制<sup>[2]</sup>。C/N 传统获取方法需要化学测定土壤有机碳和全氮含量后计算出,存在实时性差、有污染且效率低等缺点<sup>[3]</sup>。而利用可见-近红外光谱(VNIR)和中红外光谱(MIR)预测土壤属性,具有快速、低成本、无污染等优势<sup>[4-5]</sup>。

对土壤 C/N 的直接预测研究相对较少,预测精度也高低不一。如 Cozzolino 和 Morón<sup>[6]</sup>对乌拉圭 160 个土壤样品构建了基于近红外光谱(NIR)的偏最小二乘回归(PLSR)模型,结果显示,对于不同的土壤质地,预测的 C/N 精度较低,其决定系数( $R^2$ )介于 0.10~0.41,相对标准误差(RPD)介于 1.0~1.3。任红艳等<sup>[7]</sup>基于江苏省扬州市江都区真武镇 146 个渥育型水稻土农田表层土壤(0~20 cm),研究了利用一阶微分等不同光谱预处理方式下 PLSR 模型预测 C/N 的效果,最优模型的 RPD 仅为 1.21,预测结果不太理想。张清文等<sup>[8]</sup>利用可见-近红外光谱(VNIR)预测了盐城市大丰区 33 个滨海湿地土

壤 C/N,发现 PLSR 模型精度高于回归随机森林(RFR)模型,基于 PLSR- $R'$ (一阶微分光谱)构建的最优模型  $R^2$  为 0.995,均方根误差(RMSE)为 0.216,平均绝对误差(MAE)为 0.165。Geng 等<sup>[9]</sup>对比了单时相与多时相遥感影像在中国东北黑土区 C/N 预测性能,采用增长回归树模型(BRT)、随机森林(RF)和极致梯度提升决策树(XGBoost)三种机器学习算法,发现多时相 Sentinel-2 数据结合 XGBoost 模型在 C/N 预测中达到最优性能( $R^2 = 0.713$ , RMSE = 0.585, MAE = 0.484, RPD = 1.718)。Zhou 等<sup>[10]</sup>基于瑞士的 150 个土壤样本,比较了卫星传感器 Landsat-8、Sentinel-2 和 Sentinel-3 在 800 m、400 m、100 m 和 20 m 四种空间分辨率下预测 C/N 的潜力,发现 BRT 模型 100 m 分辨率下 C/N 预测精度最高( $R^2 = 0.404$ , RMSE = 0.223 和 MAE = 0.167)。

C/N 预测也可以通过先利用光谱预测 TOC 和 TN,再计算 C/N 的方法。基于 VNIR 构建 TOC 和 TN 的预测模型已较为成熟,通过 PLSR 构建的 TOC 预测模型精度较高, $R^2$  介于 0.44~0.81,RPD 介于 1.27~3.12<sup>[11-14]</sup>。对 TN 预测,VNIR-PLSR 模型表现出更高的预测精度, $R^2$  介于 0.69~0.82,RPD 介于 1.67~2.00<sup>[15-17]</sup>。此外,基于随机森林(RF)、

RFR 和 Cubist 等机器学习方法预测 TN 模型也取得了良好的预测效果,Morellos 等<sup>[16]</sup>利用 VNIR-Cubist 方法较为精准地预测了 TN,其 RPD 为 1.96。随着中红外光谱(MIR)技术的发展,其在土壤预测中的研究也备受关注,研究发现其预测 TOC 和 TN 的精度高于 VNIR,如 MIR-PLSR 预测 TOC 的  $R^2$  介于 0.64~0.96 之间,RPD 介于 1.30~4.70 之间<sup>[18-21]</sup>;预测 TN 的  $R^2$  介于 0.71~0.91 之间,RPD 介于 1.80~3.12 之间<sup>[22-24]</sup>。尽管针对 TOC 和 TN 的光谱预测已取得较多成果,且均取得了较高的精度,但 C/N 间接预测方法的精度分析尚未见报道。

本研究基于贵州省典型烤烟-玉米轮作农田耕作层(0~20 cm)土壤光谱和属性数据库,通过直接预测和间接预测两种策略,分别构建基于 VNIR 和 MIR 的 C/N 预测模型,并比较了不同策略、不同光谱、不同算法对 C/N 预测精度的影响,以期筛选 C/N 的最优建模方法。

## 1 材料与方法

### 1.1 研究区概况

贵州省位于中国云贵高原东部,地处 24°37'—29°13'N, 103°36'—109°35'E,总面积 17.62 万 km<sup>2</sup>,

属亚热带湿润季风气候区,气候温暖湿润,年均气温约 15℃,降雨量介于 1 000~1 400 mm 之间,无霜期介于 250~300 d 之间,相对湿度 70%以上。主要分布有黄壤、红壤、黄棕壤等地带性土壤,在独特的气候条件、地形地貌以及人类活动影响下,贵州省内还分布有石灰土、紫色土以及水稻土<sup>[25]</sup>。

### 1.2 土壤样品采集与测定

本研究综合考虑贵州省土壤的成土母质、地形、气候等成土因素信息,利用代表性采样法在贵州省全省范围内确定了 501 个烤烟-玉米轮作典型农田(图 1)。在每个典型农田采用梅花形或 S 形选取 5 个点采集耕作层(0~20 cm)土壤,并且记录经纬度、海拔高度、成土因素等信息,土样充分混匀后采用四分法留取 1.5 kg 带回实验室,经自然风干、去杂和磨碎,过 60 目(0.25 mm)筛,用于化学组分测定和光谱分析。TOC 采用重铬酸钾氧化-分光光度法测定,TN 采用凯氏法测定<sup>[26]</sup>。

### 1.3 土壤光谱测定

土样经 45℃烘干 24 h 后,利用 Agilent Cary 5000 分光光度计测定 VNIR 漫反射光谱,波长范围为 350~2 500 nm,其中 350~700 nm 的光谱分辨率小于等于 0.048 nm,700~2 500 nm 的分辨率小于等于 0.20 nm。MIR 采用傅里叶变换红外光谱(FT-IR,

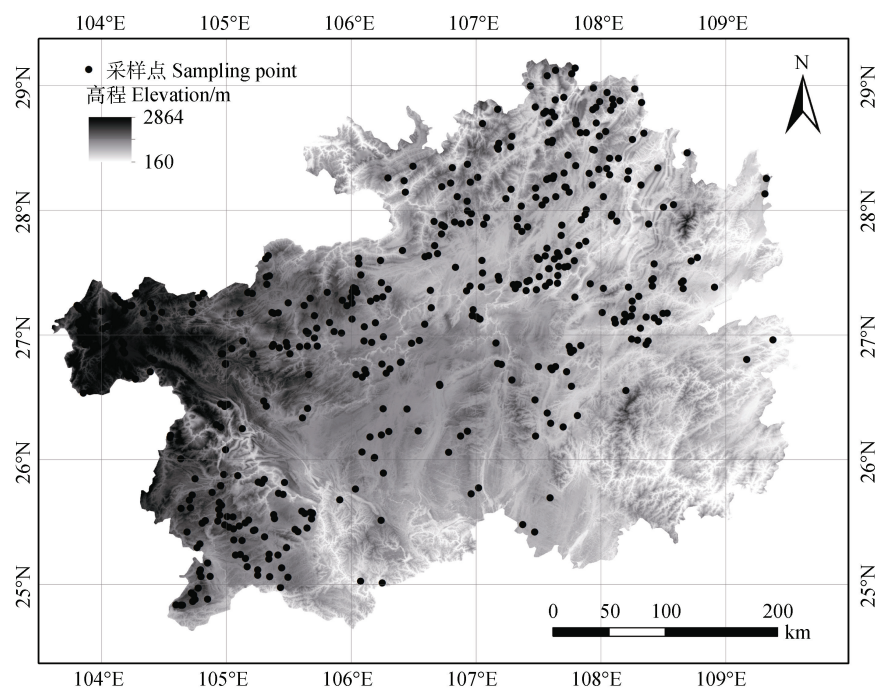


图 1 研究区样点分布图

Fig. 1 Distribution of sample points in the study area

Thermo Scientific Nicolet iS50 )测定其衰减全反射光谱,测定范围为 4 000~650 cm<sup>-1</sup>,光谱分辨率小于等于 0.09 cm<sup>-1</sup>。同一样品进行三次压实测量,取平均值以提高测量准确性。

1.4 数据预处理

本文比较了不同预处理方法对模型预测精度和运行效率的影响后,对光谱进行以下预处理:(1)光谱反射率转换为吸收率;(2)SG 平滑( Savitzky-Golay Filtering );(3)变量的标准归一化( Standard normalized variate );(4)光谱降维重采样:考虑到 VNIR 和 MIR 波段数目的差异,VNIR 按每 5 nm 降维,MIR 按每 10 nm 降维。在降维过程中,VNIR 数据从原先 2 151 个波段减少至 431 个波段;MIR 数据从原先的 6 950 个波段减少至 1 289 个波段。相关光谱变换以及数据处理操作均在 R 4.2.3 中完成。

1.5 模型建立及评价

本研究采用 PLSR、RF 和 Cubist 三种方法来构建光谱预测模型。PLSR 在多个自变量高度相关的情况下可解决回归中的多重共线性问题,其作为定量光谱分析中的方法在红外光谱与土壤组分预测研究中应用最为广泛<sup>[27]</sup>。RF 是一种分类器,可以利用多个决策树对土壤样本进行训练以及预测,RF 的两个关键参数设置如下:每次分割时测试的变量数量( mtry )为训练集变量总数减一后的平方根,森林中的树木数量( ntree )为 1 000。Cubist 是机器学习中的一种非参数回归树算法,在处理因变量和预测变量之间的非线性关系上较为适合<sup>[28]</sup>。Cubist 的两个关键参数设置如下:委员会数目( Committees )用于指定要创建的回归树数量,设置为 1。邻居数( Neighbors )用于指定在生成分段线性模型时要考虑的最近邻数目,设置为 0。

本文采用前文提到的直接和间接两种策略预测 C/N,采用留一交叉验证法( leave-one-out cross

validation, LOOCV )进行精度评价,每次只留下 501 个样本中的一个作为验证集,其余 500 个样本作为建模集。通过  $R^2$ 、RPD 和 RMSE<sup>[29]</sup>进行模型评价。 $R^2$ 可以用来反映模型的精度, $R^2$ 与 1 越接近,模型的拟合程度就越高。RMSE 可以用来衡量观测值与预测值之间的偏离程度,RMSE 越小,模型预测值与真实值之间偏差越小,准确度越高。RPD 则是样本标准差与均方根误差 RMSE 的比值,它可以反映该模型的预测能力,一般分为 3 类,在  $RPD \leq 1.4$  的情况下,模型不可用于样本的预测;当  $1.4 < RPD < 2.0$  时,模型的预测能力较好;当  $RPD \geq 2.0$  时,模型的预测能力非常好<sup>[30]</sup>。

C/N 在实际应用中通常会根据其等级来选择合适的有机肥和化学氮肥施用措施,因此除评估模型对 C/N 数值的预测精度外,本研究还评估了模型对 C/N 等级的预测精度,即根据 C/N 分级标准,对 C/N 的观测值和预测值进行等级划分,将预测值和观测值等级相同的样本数与总样本数的比值作为 C/N 等级判定精度。

2 结果与讨论

2.1 土壤目标属性含量的统计特征

本文根据全国第二次土壤普查土壤组分分级标准以及 Biswas 和 Micallef<sup>[31]</sup>的研究,将土壤 TOC、TN 和 C/N 划分为 5 个等级。结合表 1 的统计情况,计算各属性在每个等级下所占比重(表 2)。统计结果表明,TOC 含量适中,变异系数为 32.66%;TN 大多数含量低于 1.73 g·kg<sup>-1</sup>,变异系数较低,仅为 26.85%。C/N 平均值为 10.32,变异系数为 17.15%,在三个目标属性中变异最小。C/N<5、介于 15~20 以及  $\geq 20$  的样本合计不到总样本数量的 2%,但有 60%的样本 C/N 集中在 10~15 之间,导致其变异性较低。

表 1 土壤目标属性含量描述性统计特征

Table 1 Descriptive statistical characteristics of soil target attribute contents

土壤属性 Soil properties	最小值 Min	最大值 Max	平均值 Mean	标准差 Std	变异系数 CV /%
总有机碳 TOC/ ( g·kg <sup>-1</sup> )	3.46	51.72	17.94	5.86	32.66
全氮 TN/ ( g·kg <sup>-1</sup> )	0.55	3.51	1.73	0.46	26.85
碳氮比 C/N	4.41	20.2	10.32	1.77	17.15

表 2 土壤总有机碳、全氮和碳氮比分级标准及各等级所占比重

Table 2 Grading standards of soil TOC, TN contents and C/N ratios

分级指标 Grading index	总有机碳 TOC		全氮 TN		碳氮比 C/N	
	分级 Grading /	所占比重	分级 Grading /	所占比重	分级	所占比重
	( g·kg <sup>-1</sup> )	Proportion /%	( g·kg <sup>-1</sup> )	Proportion /%	Grading	Proportion /%
极低 Very low	<5.8	0.80	<0.5	0	<5	0.60
低 Low	5.8~8.7	3.19	0.5~1.0	2.73	5~10	39.92
中 Middle	8.7~17.4	46.70	1.0~2.0	61.22	10~15	58.48
高 High	17.4~23.2	33.53	2.0~2.5	27.92	15~20	0.80
极高 Very high	≥23.2	15.70	≥2.5	8.13	≥20	0.20

2.2 土壤光谱曲线特征

图 2 展示了各等级土壤 TOC、TN 和 C/N 的平均光谱反射率曲线。在 VNIR 区间内,随着 TOC 和 TN 含量的增加,光谱反射率总体下降,这种趋势相似性源于二者的高相关性<sup>[32]</sup>,相关系数为 0.86。C/N 与 TOC 同样显示出较高相关性(相关系数为 0.52),土壤反射率整体也随 C/N 增加而降低。光谱反射率在可见光范围内随着波长的增加迅速上升,在近红外范围内趋于平缓,并于 1 400 nm、1 900 nm 和 2 200 nm 附近有三个吸收谷,1 400 nm 处的吸收谷主要由土壤表面吸附水及黏土矿物 O-H 晶格结构水的吸收所致,1 900 nm 和 2 200 nm 附近则分别存在蒙脱石类矿物和 Al-OH 黏土矿物的吸收带<sup>[33]</sup>。

MIR 区间内,不同等级 TOC、TN 和 C/N 的光谱反射率均没有明显规律,并且均表现出较小的变异。针对 C/N,仅在 3 900~2 600 cm<sup>-1</sup> 和 1 700~1 300 cm<sup>-1</sup> 范围内不同等级 C/N 光谱反射率有较大变异,并且这种变异较 VNIR 光谱中的变异程度更小。中红外光谱的测量采用衰减全反射傅里叶变换红外光谱(ATR-FTIR)。ATR-FTIR 的测量结果主要受样品化学成分和分子结构的影响<sup>[34]</sup>,即使 C/N 数值变化,光谱反射率变化也不明显。MIR 范围内的光谱反射率变化相对平缓,在 3 300 cm<sup>-1</sup> 和 1 600 cm<sup>-1</sup> 附近出现小幅度的吸收谷,在 1 000 cm<sup>-1</sup> 附近出现一个大的吸收谷,光谱反射率在 1 000 cm<sup>-1</sup> 前快速下降后又经历快速上升,且在 1 000 cm<sup>-1</sup> 后形成多个吸收谷(790 cm<sup>-1</sup>、700 cm<sup>-1</sup>)和反射峰(850 cm<sup>-1</sup>、730 cm<sup>-1</sup>)。从已有研究可知,790、730 cm<sup>-1</sup> 和 3 300 cm<sup>-1</sup> 附近波段变化可能与 C-H 的伸缩振动和 N-H 的弯曲振动有关;1 000 cm<sup>-1</sup> 和

1 630 cm<sup>-1</sup> 附近的吸收谷可能受黏土矿物和土壤束缚水影响;700 cm<sup>-1</sup> 和 850 cm<sup>-1</sup> 附近的波段变化可能受到黏土矿物和石英的影响<sup>[35]</sup>。

对比 C/N 与 TOC 和 TN 光谱反射率在不同等级上的变异,VNIR 和 MIR 波段上 C/N 的变异明显大于 TOC 和 TN 的变异,不同 C/N 等级的光谱反射率区分度更高。

2.3 光谱反射率与 TOC、TN、C/N 的相关性

图 3 展示了 TOC、TN 和 C/N 与 VNIR 及 MIR 光谱反射率的相关性。TOC 和 TN 与光谱反射率的相关性曲线高度一致,呈现出较强协同性。C/N 与光谱反射率的相关性曲线形状与前两者相似,但整体相关性较前两者低。

在 VNIR 区域,C/N 和光谱反射率呈负相关,负相关性在 600~800 nm 达到最高,在 770 nm 处相关系数达到-0.23。在 1 400 nm、1 900 nm 和 2 200 nm 形成了三个小峰值,这三个峰值与光谱反射率曲线的三个吸收谷相匹配,实际上代表了相关系数较低,可能是由于水分或羟基官能团的强烈吸收,导致了目标属性与光谱反射率之间的相关性降低<sup>[33]</sup>。

在 MIR 区域,TOC 和 TN 与光谱反射率整体呈负相关。C/N 与部分波段(4 000~3 698 cm<sup>-1</sup>、2 940~1 700 cm<sup>-1</sup>、1 625~1 060 cm<sup>-1</sup>)光谱反射率呈负相关,而与其他波段光谱反射率呈正相关,总体上这种相关性在接近 0 的水平上。C/N 与 4 000~3 765 cm<sup>-1</sup> 和 2 670~1 965 cm<sup>-1</sup> 波段呈现最高负相关性,相关系数约为-0.1;在 1 100~810 cm<sup>-1</sup> 范围内与光谱反射率呈现最高正相关性,相关系数最高达到 0.28。其余波段上,C/N 与光谱反射率相关系数大致在 0 上下浮动。

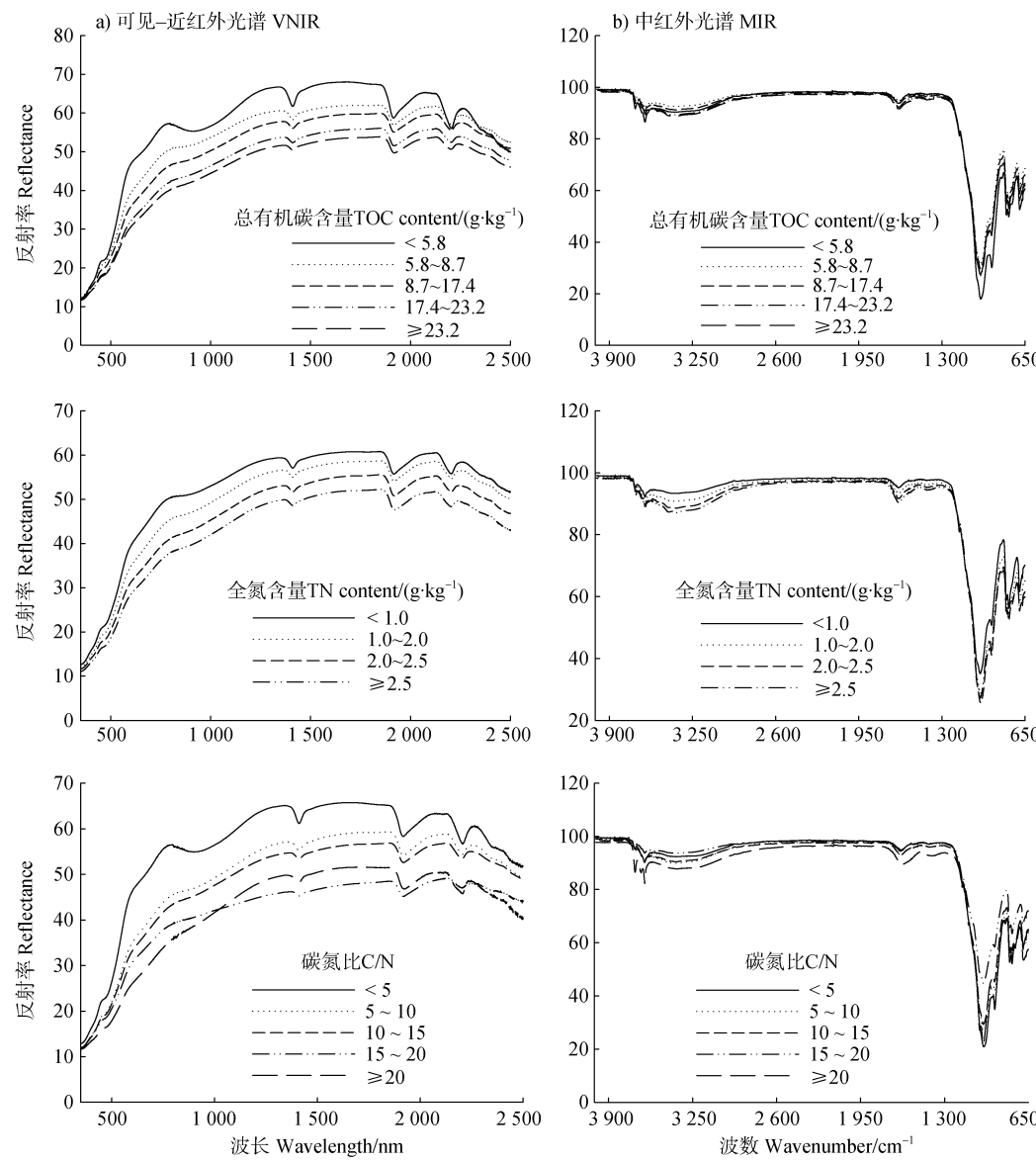


图 2 不同总有机碳、全氮含量和碳氮比反射光谱曲线  
Fig. 2 Reflection spectral curves of different TOC, TN contents and C/N ratios

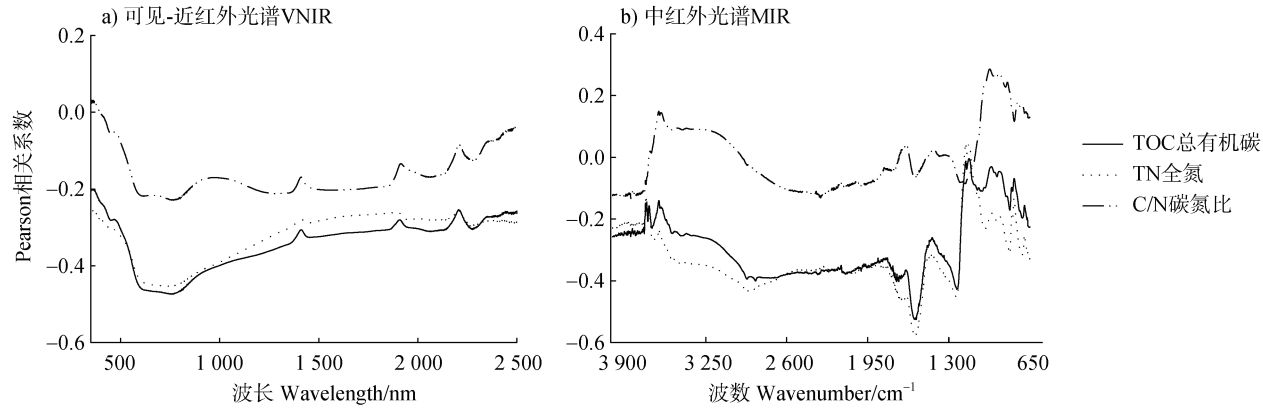


图 3 总有机碳、全氮以及碳氮比和各个波段的 Pearson 相关系数  
Fig. 3 TOC, TN, C/N ratio and Pearson correlation coefficient of each band

TOC 和 TN 整体上呈现较强的协同性,但在部分波段上也存在差异,而 C/N 在这部分波段与光谱反射率的相关性明显增强。VNIR 光谱中 600~773 nm、930~1 330 nm、1 475~1 834 nm、1 923~4 174 nm 处 TOC 和 TN 与光谱反射率相关性差异增大,对应波段下 C/N 与光谱数据相关性增强,而在 862~1 000 nm、1 365~1 401 nm、1 892~1 945 nm、2 191~2 263 nm 处 TOC 和 TN 与光谱数据的差异性减小,对应波段下 C/N 与光谱数据的负相关性减弱,在 MIR 光谱中同样存在类似现象。

2.4 目标属性预测结果

表 3 展示了不同光谱和模型预测的 TOC、TN 和 C/N 的预测精度。基于 VNIR 和 MIR 两种光谱,

TOC 和 TN 的预测结果表现出相似趋势。针对 VNIR, TOC 的 RPD 介于 1.14~1.40, TN 的 RPD 介于 1.14~1.49, 整体预测精度较低;而基于 MIR, TOC (RPD 介于 1.33~2.07) 和 TN (RPD 介于 1.37~2.17) 的预测精度均有大幅提升,其中 MIR 结合 PLSR 模型的预测最优,这与已有研究的结果高度一致。马宏瑞等<sup>[36]</sup>比较了 VNIR 和 MIR 预测土壤 TOC 的精度,结果表明 MIR 较 VNIR 更具优势;此外, Yin 等<sup>[22]</sup>利用中国东北黑土区的样品及其 MIR 和 VNIR 光谱预测土壤 TN,发现基于实验室中红外光谱的 PLSR 模型具有最高的预测准确性。

针对 C/N 的预测,基于 VNIR 构建的模型中, C/N 预测精度 RPD 介于 0.65~1.14。无论采用直接

表 3 基于可见-近红外和中红外光谱的 PLSR、RF 和 Cubist 模型的验证结果

Table 3 Validation results of PLSR, RF and Cubist models based on VNIR and MIR spectra

光谱 Spectra	模型 Model	精度指标	总有机碳	全氮 TN/	碳氮比 (直接预测)	碳氮比 (间接预测)
		Precision index	TOC/ ( g·kg <sup>-1</sup> )	( g·kg <sup>-1</sup> )	C/N_D	C/N_I
VNIR	PLSR	<i>R</i> <sup>2</sup>	0.50	0.58	0.25	0.07
		RMSE	4.20	0.31	1.55	2.70
		RPD	1.40	1.49	1.14	0.65
	RF	<i>R</i> <sup>2</sup>	0.22	0.23	0.16	0.12
		RMSE	5.16	0.41	1.62	1.66
		RPD	1.14	1.14	1.09	1.07
	Cubist	<i>R</i> <sup>2</sup>	0.48	0.55	0.25	0.10
		RMSE	4.36	0.33	1.55	2.22
		RPD	1.34	1.43	1.14	0.80
MIR	PLSR	<i>R</i> <sup>2</sup>	0.77	0.79	0.34	0.27
		RMSE	2.84	0.21	1.47	1.75
		RPD	2.07	2.17	1.20	1.01
	RF	<i>R</i> <sup>2</sup>	0.48	0.50	0.17	0.16
		RMSE	4.39	0.34	1.61	1.62
		RPD	1.33	1.37	1.10	1.09
	Cubist	<i>R</i> <sup>2</sup>	0.70	0.76	0.09	0.16
		RMSE	3.23	0.23	1.89	2.05
		RPD	1.82	2.01	0.93	0.86

注: VNIR: 可见-近红外光谱; MIR: 中红外光谱; PLSR: 偏最小二乘回归; RF: 随机森林; *R*<sup>2</sup>: 决定系数; RMSE: 均方根误差; RPD: 相对分析误差。该表中的预测精度均为验证精度。Note: PLSR: partial least squares regression; RF: random forest; *R*<sup>2</sup>: coefficient of determination; RMSE: root mean square error; RPD: relative percent deviation. The prediction accuracy in this table is verification accuracy.



预测或间接预测亦或是不同的机器学习算法，整体预测能力均不理想。在三类算法模型中，基于直接预测的 PLSR 和 Cubist 模型精度最高( $RPD = 1.14$ )，但采用间接预测策略时，这两类模型精度均大幅度降低。而采用间接预测时，RF 模型的精度最优( $RPD = 1.07$ )，但基于直接预测的 RF 模型精度低于 PLSR 和 Cubist。

相较于 VNIR，基于 MIR 预测 C/N 的精度有所提升( $RPD$  介于  $0.86 \sim 1.20$ )，但精度依然较低，无法实现对 C/N 的合理估算。其中最优模型为 PLSR 结合直接预测( $RPD = 1.20$ )，同时所有光谱模型中 VNIR 和 MIR 预测效果最佳。C/N 的这一最优预测模型正好对应了 TOC ( $RPD = 2.07$ ) 和 TN ( $RPD = 2.17$ ) 的最优预测模型。采用间接预测时，RF 模型的  $RPD$  最高 ( $1.09$ )。而针对 Cubist 模型，无论是直接还是间接预测，其估算 C/N 的精度均为最低。

总体而言，基于 MIR 构建的 C/N 预测模型精度优于 VNIR。其中，最优模型是 MIR 结合 PLSR 模型直接预测 C/N，其预测精度  $RPD$  达到  $1.20$ 。然而，与 TOC 和 TN 的预测结果相比，仍存在显著差距。这一结果与任红艳等<sup>[7]</sup>利用 VNIR 对 TN 和 C/N 进行反演的研究结果相似，在其研究中，全波段 PLSR 模型预测 TN 含量最为准确 ( $RPD = 3.49$ )，而 C/N 的预测精度并不理想 (最优模型  $RPD = 1.21$ )，其以为这可能是与样本中 C/N 较小的变异范围有关。

整体来看，无论采用何种光谱，何种建模算法，C/N 的直接预测均优于间接预测。其中，PLSR 模型直接预测和间接预测的精度差异最大。在 VNIR 的建模结果中，直接预测的  $RPD$  为  $1.14$ ，而间接预测的  $RPD$  仅为  $0.65$ 。RF 模型两种预测方式的精度非

常接近，可能是因为在直接预测和间接预测中，RF 会选择相似的特征子集进行建模，从而导致预测结果的相似性较高。Cubist 模型同样存在直接预测大幅优于间接预测的情况，但其差异相比于 PLSR 模型略小一些。因此，在构建 C/N 预测模型时，选择直接预测策略可能更为可靠和准确，其可能的原因是在采用间接策略时，分别预测 TOC 和 TN 时均存在误差，在计算比值时可能造成了误差的累积。

2.5 C/N 等级预测

依据表 2 C/N 分级标准，表 4 列举了不同模型下 C/N 等级的预测结果。整体上 C/N 等级判定精度较高，介于  $0.60 \sim 0.71$ ，可能是因为不同 C/N 等级的光谱反射率区分度较高。在 VNIR 范围内，C/N 等级判定精度在  $0.6 \sim 0.7$  之间，其中最优模型为 PLSR 结合直接预测(等级判定精度为  $0.70$ )；在 MIR 范围，三种模型预测性能均有提升 (等级判定精度介于  $0.65 \sim 0.71$ )，最优模型为 PLSR 结合直接预测，等级判定精度为  $0.71$ ，意味着  $71\%$  的土壤能够被准确分级，这对农业土壤 C/N 等级的快速划分以及相应固碳和增产措施的采取和决策具有重要意义。结合 C/N 数值预测结果进一步分析表明：(1) C/N 等级预测最优模型为 MIR 结合 PLSR 的直接预测 (等级判定精度为  $0.71$ )，与 C/N 数值的最优模型一致；(2) MIR 的预测效果优于 VNIR，且直接预测普遍优于间接预测，与数值预测结果相似；(3) 基于 MIR 结合 Cubist 模型的间接预测 C/N 数值的  $RPD$  仅为  $0.86$ ，但其 C/N 等级的判定精度能达到  $0.68$ 。这表明本文研究的多种模型对 C/N 数值预测精度很低，但对 C/N 等级可以进行较为准确的估算。

表 4 碳氮比等级预测结果

Table 4 Prediction results of grade of C/N ratio

等级判定精度 Classification accuracy	可见-近红外光谱 VNIR			中红外光谱 MIR		
	PLSR	RF	Cubist	PLSR	RF	Cubist
碳氮比 (直接预测) C/N_D	0.70	0.60	0.66	0.71	0.66	0.65
碳氮比 (间接预测) C/N_I	0.60	0.59	0.60	0.69	0.65	0.68

2.6 C/N 值对预测精度影响

针对 C/N 数值的最优预测模型 (MIR-PLSR) 统计不同 C/N 范围内 C/N 的预测情况 (表 5)。C/N

预测值与观测值之间的差异以百分比表示，超过  $5\%$  为偏高，小于  $-5\%$  为偏低，介于两者之间则视为无明显差异。在  $C/N < 5$  的样本中，直接和间接预测



方式结果均为高估；C/N 值介于 5~10 间的样本中，直接预测结果中有 56%高估，11%低估，间接预测结果与之相似；然而 C/N 介于 10~15 间的样本中，直接预测的高估率为 21.84%，低估率为 44.71%，与 C/N 值介于 5~10 的结果相反。C/N 值介于 15~

20 的 4 个样本中，直接预测结果全部低估，间接预测 1/2 被低估；而 C/N≥20 的这个样点两种方式预测结果均低估。总体趋势是，C/N 观测值较低时，预测值倾向于高估；而 C/N 观测值较高时，则更容易低估。

表 5 不同碳氮比含量下的碳氮比预测情况  
Table 5 Prediction of C/N ratio under different C/N ratios

碳氮比实测 值 C/N	直接预测 Direct prediction			间接预测 Indirect prediction		
	预测值	样本个数	所占比重	预测值	样本个数	所占比重
	C/N_D status	Number of samples	Proportion /%	C/N_I status	Number of samples	Proportion /%
<5	偏高 Overestimated	3	100	偏高 Overestimated	3	100
	无明显偏移 No deviation	0	0	无明显偏移 No deviation	0	0
	偏低 Underestimated	0	0	偏低 Underestimated	0	0
5~10	偏高 Overestimated	112	56	偏高 Overestimated	113	56.50
	无明显偏移 No deviation	66	33	无明显偏移 No deviation	58	29
	偏低 Underestimated	22	11	偏低 Underestimated	29	14.50
10~15	偏高 Overestimated	64	21.84	偏高 Overestimated	70	23.89
	无明显偏移 No deviation	98	33.45	无明显偏移 No deviation	90	30.72
	偏低 Underestimated	131	44.71	偏低 Underestimated	133	45.39
15~20	偏高 Overestimated	0	0	偏高 Overestimated	1	25
	无明显偏移 No deviation	0	0	无明显偏移 No deviation	1	25
	偏低 Underestimated	4	100	偏低 Underestimated	2	50
>20	偏高 Overestimated	0	0	偏高 Overestimated	0	0
	无明显偏移 No deviation	0	0	无明显偏移 No deviation	0	0
	偏低 Underestimated	1	100	偏低 Underestimated	1	100

2.7 C/N 间接预测结果

针对 TOC 和 TN 数值预测的最佳模型（MIR-PLSR）列举了 C/N 间接预测结果与 TOC 和 TN 预测情况之间的关系（表 6），以此推断造成 C/N 高估或低估的可能影响因素。TOC 和 TN 预测值与观测值之间的差异同样以百分比表示，超过 5%为偏高，小于-5%为偏低，介于两者之间视为无明显差异。501 个样本中，有 187 个样本 C/N 预测值偏高，149 个样本预测值无明显偏移，165 个样本预测值偏低，所占比重分别为 37.33%、29.74%和 32.93%。C/N 预测值偏高的样本中，约 70%的样本 TOC 预测值被高估，其中 22.99%样本的 TN 值被高估，但高估程度低于 TOC 预测值，导致了 C/N 预测值的高估；

此外，约 30%样本 TOC 预测值无明显偏移或者偏低，但相应的 TN 预测值也被低估，且程度应大于 TOC，导致 C/N 预测值的高估。C/N 预测值无明显偏移的样本中，有 30.87%的样本 TOC 和 TN 预测值同样无明显偏移，而超过 50%的样本 TOC 和 TN 预测值均偏高或偏低，但比值处理后未影响 C/N 的预测效果。C/N 预测值偏低的样本中，TOC 高估率为 10.91%，其中 TN 全部高估且程度大于 TOC，造成 C/N 预测值偏低；对于 TOC 无明显偏移的样本，TN 预测值高估率也较高（25.46%）；60%的 TOC 预测值偏低，其中，TN 预测值大多为偏高（12.12%）或者无明显偏移（29.09%），造成 C/N 预测值偏低。

表 6 不同碳氮比预测情况下的总有机碳、全氮预测情况

Table 6 Prediction of TOC and TN under different C/N ratios

碳氮比 预测情况 C/N_I status	全氮预测 情况 TN prediction status	总有机碳预测值偏高		总有机碳预测值无明显偏		总有机碳预测值偏低	
		TOC overestimated		移 TOC shows no deviation		TOC underestimated	
		样本个数	所占比例	样本个数	所占比例	样本个数	所占比例
		Number of samples	Proportion / %	Number of samples	Proportion / %	Number of samples	Proportion / %
偏高 Overestimated	偏高 Overestimated	43	22.99	0	0	0	0
	无明显偏移 No deviation	54	28.88	9	4.81	0	0
	偏低 Underestimated	30	16.04	30	16.04	21	11.23
	总和 Sum	127	67.91	39	20.86	21	11.23
无明显偏移 No deviation	偏高 Overestimated	44	29.53	4	2.68	0	0
	无明显偏移 No deviation	10	6.71	46	30.87	4	2.68
	偏低 Underestimated	0	0	6	4.03	35	23.49
	总和 Sum	54	36.24	56	37.58	39	26.17
偏低 Underestimated	偏高 Overestimated	18	10.91	42	25.46	20	12.12
	无明显偏移 No deviation	0	0	6	3.64	48	29.09
	偏低 Underestimated	0	0	0	0	31	18.79
	总和 Sum	18	10.91	48	29.09	99	60

总体上，C/N 预测值的偏差是由 TOC 与 TN 预测值的多种情况共同影响的结果，具体包括 TOC 与 TN 预测值的高估、低估或无显著偏差。在 C/N 预测值无明显偏移的情况下，也存在 TOC 和 TN 预测值均偏高或者偏低的情况，但比值处理后减小了 C/N 的偏离程度，从而并未导致 C/N 预测值的明显偏移。

2.8 C/N 预测精度偏低的原因

综合上述研究结果，推测造成 C/N 预测精度较低的可能原因如下：（1）C/N 变异范围较小，58.48%的样本 C/N 集中在 10~15 之间，变异系数仅为 17.15%，数据区分度不高。造成 C/N 变异小的原因是烤烟-玉米轮作的农田，主要是烟季施肥，玉米季则是依据玉米长势情况酌情追肥，为了保证烟叶质量，烟季管理措施（耕作、施肥、灌溉等）较为一致，尤其是有机和化学氮肥施用，长此以往就降低了耕层土壤碳和氮含量的空间差异。（2）C/N 与 TOC 和 TN 的相关性：C/N 作为比值，本身不具备直接的光谱响应特性，其预测依赖于与 TOC 和 TN 的相关系数（分别为 0.52

和 0.07）。由于 C/N 是 TOC 和 TN 的比值，这种处理降低了其与 TOC 和 TN 的相关性，进而影响预测精度。（3）C/N 与光谱的相关性：C/N 与 VNIR（最高相关性为-0.23）和 MIR（最高相关性为 0.28）的相关性均较低。TOC 与 TN 的光谱及相关性曲线表现出较强的协同性，这种协同性会造成 C/N 与光谱数据的相关性减弱。TOC 和 TN 与光谱反射率相关性差异性较大的波段，与 C/N 相关性会更强，而在差异性较小的波段，C/N 与光谱反射率相关性更弱。因此，TOC 和 TN 的协同性在一定程度上减弱了 C/N 与光谱数据的相关性，从而影响了预测结果精度。

3 结 论

本文通过对比不同策略的土壤 C/N 预测精度，发现对于 C/N 的数值预测，无论采用何种模型，何种光谱，均无法可靠预测（RPD < 1.20），可能是因为 C/N 的变异较小，并且与 VNIR 和 MIR 光谱的相关性均较低；而对于 C/N 的等级则可进行较为准确

的预测, 最优策略为 MIR 结合 PLSR 模型的直接预测 (预测精度为 0.71)。C/N 的预测值与其观测值相关, 当观测值较低时, 预测值更容易高估; 而当观测值较高时, 则更容易低估。需要指出的是, 本文仅使用了贵州省 501 个典型农田样本数据, 研究结论有一定的局限性, 下一步研究可尝试采用更多类型种植制度的农田土壤样本, 确保训练样本具有更大的变异范围, 也可以考虑选用更多波段的光谱数据进行拼接或融合, 以增加可用信息, 进而提升预测精度。

### 参考文献 (References)

- [1] Lin L, Zhang F W, Li Y K, et al. The soil carbon and nitrogen storage and C/N metrological characteristics of chemistry in *Kobresia humilis* meadow in degradation succession stages[J]. Chinese Journal of Grassland, 2012, 34 (3): 42—47. [林丽, 张法伟, 李以康, 等. 高寒矮蒿草草甸退化过程土壤碳氮储量及 C/N 化学计量学特征[J]. 中国草地学报, 2012, 34 (3): 42—47.]
- [2] Wang J L, Zhong Z M, Wang Z H, et al. Soil C/N distribution characteristics of alpine steppe ecosystem in Qinhai-Tibetan Plateau[J]. Acta Ecologica Sinica, 2014, 34 (22): 6678—6691. [王建林, 钟志明, 王忠红, 等. 青藏高原高寒草原生态系统土壤碳氮比的分布特征[J]. 生态学报, 2014, 34 (22): 6678—6691.]
- [3] Yu F J, Min S G, Ju X T, et al. Determination the content of nitrogen and organic substance in dry soil by using near infrared diffusion reflectance spectroscopy[J]. Chinese Journal of Analysis Laboratory, 2002, 21 (3): 49—51. [于飞健, 闵顺耕, 巨晓棠, 等. 近红外光谱法分析土壤中的有机质和氮素[J]. 分析试验室, 2002, 21 (3): 49—51.]
- [4] dos Santos U J, de Melo Demattê J A, Menezes R S C, et al. Predicting carbon and nitrogen by visible near-infrared (Vis-NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopy in soils of Northeast Brazil[J]. Geoderma Regional, 2020, 23: e00333.
- [5] 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.
- [6] Cozzolino D, Morón A. Potential of near-infrared reflectance spectroscopy and chemometrics to predict soil organic carbon fractions[J]. Soil and Tillage Research, 2006, 85 (1/2): 78—85.
- [7] Ren H Y, Shi X Z, Zhuang D F, et al. Effects on estimating soil nitrogen content and ratio of carbon to nitrogen using hyperspectral reflectance[J]. Remote Sensing Technology and Application, 2012, 27 (3): 372—379. [任红艳, 史学正, 庄大方, 等. 土壤全氮含量与碳氮比的高光谱反射估测影响因素研究[J]. 遥感技术与应用, 2012, 27 (3): 372—379.]
- [8] Zhang Q W, Yang X W, Yang R, et al. Modeling and analysis of soil carbon and nitrogen ratio prediction in coastal wetlands based on VIS-NIR spectroscopy[J]. Journal of Chifeng University (Natural Science Edition), 2023, 39 (10): 57—61. [张清文, 杨晓芜, 杨睿, 等. 基于 VIS-NIR 光谱的滨海湿地土壤碳氮比预测建模分析[J]. 赤峰学院学报 (自然科学版), 2023, 39 (10): 57—61.]
- [9] Geng J, Tan Q Y, Lü J W, et al. Assessing spatial variations in soil organic carbon and C: N ratio in Northeast China's black soil region: Insights from Landsat-9 satellite and crop growth information[J]. Soil and Tillage Research, 2024, 235: 105897.
- [10] Zhou T, Geng Y J, Ji C, et al. Prediction of soil organic carbon and the C: N ratio on a national scale using machine learning and satellite data: A comparison between Sentinel-2, Sentinel-3 and Landsat-8 images[J]. Science of the Total Environment, 2021, 755: 142661.
- [11] Coûteaux M M, Berg B, Rovira P. Near infrared reflectance spectroscopy for determination of organic matter fractions including microbial biomass in coniferous forest soils[J]. Soil Biology and Biochemistry, 2003, 35 (12): 1587—1600.
- [12] Ribeiro S G, dos Santos Teixeira A, de Oliveira M R R, et al. Soil organic carbon content prediction using soil-reflected spectra: A comparison of two regression methods[J]. Remote Sensing, 2021, 13 (23): 4752.
- [13] Gomez C, Viscarra Rossel R A, McBratney A B. Soil organic carbon prediction by hyperspectral remote sensing and field vis-NIR spectroscopy: An Australian case study[J]. Geoderma, 2008, 146 (3/4): 403—411.
- [14] Dotto A C, Dalmolin R S D, ten Caten A, et al. A systematic study on the application of scatter-corrective and spectral-derivative preprocessing for multivariate prediction of soil organic carbon by Vis-NIR spectra[J]. Geoderma, 2018, 314: 262—274.
- [15] Sisouane M, Cascant M M, Tahiri S, et al. Prediction of organic carbon and total nitrogen contents in organic wastes and their composts by Infrared spectroscopy and partial least square regression[J]. Talanta, 2017, 167: 352—358.
- [16] Morellos A, Pantazi X E, Moshou D, et al. Machine learning based prediction of soil total nitrogen, organic carbon and moisture content by using VIS-NIR spectroscopy[J]. Biosystems Engineering, 2016, 152: 104—116.
- [17] Yao X Q, Yang W, Li M Z, et al. Prediction of total nitrogen content in different soil types based on spectroscopy[J]. IFAC-PapersOnLine, 2019, 52 (30): 270—276.
- [18] Gomez C, Chevallier T, Moulin P, et al. Prediction of soil

- organic and inorganic carbon concentrations in Tunisian samples by mid-infrared reflectance spectroscopy using a French national library[J]. *Geoderma*, 2020, 375: 114469.
- [ 19 ] Knox N M, Grunwald S, McDowell M L, et al. Modelling soil carbon fractions with visible near-infrared ( VNIR ) and mid-infrared ( MIR ) spectroscopy[J]. *Geoderma*, 2015, 239: 229—239.
- [ 20 ] Sabetizade M, Gorji M, Roudier P, et al. Combination of MIR spectroscopy and environmental covariates to predict soil organic carbon in a semi-arid region[J]. *Catena*, 2021, 196: 104844.
- [ 21 ] Jia X L, Chen S C, Yang Y Y, et al. Organic carbon prediction in soil cores using VNIR and MIR techniques in an alpine landscape[J]. *Scientific Reports*, 2017, 7 ( 1 ): 2144.
- [ 22 ] Yin J X, Shi Z, Li B G, et al. Prediction of Soil Properties in a Field in Typical Black Soil Areas Using *in situ* MIR Spectra and Its Comparison with vis-NIR Spectra[J]. *Remote Sensing*, 2023, 15 ( 8 ): 2053.
- [ 23 ] Wijewardane N K, Ge Y F, Wills S, et al. Predicting physical and chemical properties of US soils with a mid-infrared reflectance spectral library[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 2018, 82 ( 3 ): 722—731.
- [ 24 ] Li H, Wang J W, Zhang J X, et al. Combining variable selection and multiple linear regression for soil organic matter and total nitrogen estimation by DRIFT-MIR spectroscopy[J]. *Agronomy*, 2022, 12 ( 3 ): 638.
- [ 25 ] 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.]
- [ 26 ] Zhang G L, Gong Z T. Soil survey laboratory methods[M]. Beijing: Science Press, 2012. [张甘霖, 龚子同. 土壤调查实验室分析方法[M]. 北京: 科学出版社, 2012.]
- [ 27 ] Blanco M, Villarroja I. NIR spectroscopy: A rapid-response analytical tool[J]. *Trends in Analytical Chemistry*, 2002, 21 ( 4 ): 240—250.
- [ 28 ] Wei Y C, Lu X L, Zhu C D, et al. High-resolution digital mapping of soil organic carbon at small watershed scale using landform element classification and assisted remote sensing information[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2023, 60 ( 1 ): 63—76. [魏宇宸, 卢晓丽, 朱昌达, 等. 基于地形与遥感辅助信息的小流域尺度高分辨率有机碳空间分布预测研究[J]. *土壤学报*, 2023, 60 ( 1 ): 63—76.]
- [ 29 ] 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[J]. *Chinese Journal of Applied Ecology*, 2010, 21 ( 1 ): 109—114. [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[J]. *应用生态学报*, 2010, 21 ( 1 ): 109—114.]
- [ 30 ] Guo P, Li T, Zhang S R, et al. Hyperspectral estimation of soil available potassium at different altitudes of the Xihe watershed[J]. *Chinese Journal of Soil Science*, 2019, 50 ( 2 ): 274—281. [郭鹏, 李婷, 张世熔, 等. 西河流域不同海拔区土壤有效钾的高光谱反演[J]. *土壤通报*, 2019, 50 ( 2 ): 274—281.]
- [ 31 ] Biswas D, Micallef S A. Safety and practice for organic food[M]. New York, USA: Academic Press, 2019: 196—197.
- [ 32 ] Chen S C, Feng L L, Li S, et al. VIS-NIR spectral inversion for prediction of soil total nitrogen content in laboratory based on locally weighted regression[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2015, 52 ( 2 ): 312—320. [陈颂超, 冯来磊, 李硕, 等. 基于局部加权回归的土壤全氮含量可见-近红外光谱反演[J]. *土壤学报*, 2015, 52 ( 2 ): 312—320.]
- [ 33 ] Zhao M S, Xie Y, Lu L M, et al. Modeling for soil organic matter content based on hyperspectral feature indices[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2021, 58 ( 1 ): 42—54. [赵明松, 谢毅, 陆龙妹, 等. 基于高光谱特征指数的土壤有机质含量建模[J]. *土壤学报*, 2021, 58 ( 1 ): 42—54.]
- [ 34 ] Koçak A, Wyatt W, Comanescu M A. Comparative study of ATR and DRIFT infrared spectroscopy techniques in the analysis of soil samples[J]. *Forensic Science International*, 2021, 328: 111002.
- [ 35 ] He J X. Prediction of fertility factors in paddy soil using VNIR and MIR spectroscopy[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2015. [何积秀. 基于 VNIR 和 MIR 光谱的水稻田土壤肥力因子预测[D]. 杭州: 浙江大学, 2015.]
- [ 36 ] Ma H R, Dang N, Fan C H. Application of IR in correlation analysis on heavy metals and organic matters in soil[J]. *Journal of Anhui Agricultural Sciences*, 2011, 39 ( 33 ): 20451—20454. [马宏瑞, 党楠, 范春辉. 红外光谱法在土壤重金属·有机质关系预测分析中的应用[J]. *安徽农业科学*, 2011, 39 ( 33 ): 20451—20454.]

( 责任编辑: 檀满枝 )