

田间行走式测定的红外光谱数据与土壤质地之间的相关性研究

沈掌泉¹, Qi Jiagu², Huang Xuwen³, 单英杰⁴, 王珂¹

1. 浙江大学环境与资源学院, 浙江 杭州 310029
2. 密歇根州立大学地理系, 美国 密歇根 东兰辛 48824
3. 密歇根州立大学作物与土壤科学系, 美国 密歇根 东兰辛 48824
(现工作地址: 美国孟山都公司, 美国 密苏里 圣路易斯 63141)
4. 浙江省土肥站, 浙江 杭州 310020

摘要 近红外光谱是利用漫反射来分析物质的某些化学性质, 已在农业及其他许多领域得到广泛应用。尽管在实验室条件下, 研究证明可以应用近红外光谱分析技术来快速、方便地测定土壤参数, 但在田间大范围内应用红外光谱快速测定来分析土壤性质, 仍然缺乏研究; 该研究以田间行走式设备获取的红外光谱数据为基础, 分析和比较了不同数据处理技术下红外光谱信息与土壤质地之间的相关性, 发现应用基于算术运算的波段组合技术可以明显地提高红外光谱信息与土壤质地之间的相关性, 为田间光谱数据的分析处理与应用提供了依据。

关键词 近红外光谱; 土壤质地; 行走式测定

中图分类号: S123, TH744.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)06-1526-05

引言

精确农业是现代信息技术与传统农业紧密结合的产物, 也是近年来国际农业科学研究上的热点领域。随着精确农业的发展, 迫切需要能够提供快速、准确地表达表层土壤信息如水分、有机质含量、质地特性等的技术手段。目前对田间土壤信息的获取, 基本上仍依靠实验室化验分析的方法, 由于费时、费力、费钱, 只有采用较稀疏布点方式进行采样分析, 难于建立较为精细的土壤参数空间分布图^[1, 2]。

近红外反射光谱分析(near infrared reflectance spectroscopy, NIRS)技术具有快速、简便的特点, 已在农业及其他许多领域得到广泛应用, 如在饲料成分、农产品品质分析方面已成为一种快速的例行分析方法^[3, 4]。随着NIRS技术应用领域的不断拓展, 用于土壤成分分析和参数测定方面的研究日趋增多, 已出现了较多的报道^[5-10]; 但目前的研究, 主要是在实验室条件下进行的, 即使在田间测定的光谱数据, 也无法进行快速获取; 而且, 由于在田间条件下影响因素更多, 比室内更为复杂, 因此如何有效地处理和分析光谱数据, 需要更多的研究。

本研究以新近研制的田间行走式红外光谱测定设备获取

的田间红外光谱数据和采样分析的土壤质地数据为基础, 研究分析目前常用的和新提出的光谱信息处理方法的有效性和可行性, 为符合精确农业要求的土壤参数获取手段的研究提供依据。

1 材料和方法

1.1 研究区简介

研究区位于美国密歇根州 Kalamazoo 县的 Carr 农场, 西经 86°35'48", 北纬 42°22'21", 东西宽约 590 m, 南北长约 1 040 m, 面积为 52 hm²。土壤类型基本上为 Kalamazoo 壤土, 是美国北部玉米带代表性的冰渍土, 由于土壤发育于冰渍物, 田块内的土壤质地变化很大, 根据采样分析, 表层土壤的粘粒含量在 2%~21%之间、粉粒的含量在 13%~68%之间、砂粒的含量在 19%~77%之间。该地块实行玉米/大豆轮作, 并采用非灌溉的田间管理方式^[11]。

1.2 光谱测定

在 2004 年 4 月 19 日, 由 Veris Technologies 公司进行田间近红外光谱的测定^[12]。测定以南北条带的方式进行, 共测定了 22 个条带, 条带之间的距离约为 25 m, 条带内点之间的距离约为 5 m, 共获取数据测定点约 3 700 个(见图 1)。测

收稿日期: 2008-03-03, 修订日期: 2008-06-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(40201021)和国家科技支撑计划项目(2006BAD10A07)资助

作者简介: 沈掌泉, 1969 年生, 浙江大学环境与资源学院副教授 e-mail: zhqshen@zju.edu.cn; zhqshen@eyou.com

定时,由拖拉机驱动的钢管插入土壤 10 cm 深,由固定于钢管内的钨丝灯照亮土壤,利用光纤把反射的光传输到光谱仪中进行测定和存储,测定深度保持在 7.5 cm 左右,测定的光谱波长范围为 920~1718 nm,光谱分辨率为 6.3 nm,共 128 个波段,测定所获得的反射率通过倒数对数的方式转换为吸光率。在测定的同时利用 GPS 获取测定点的位置信息并保存在计算机中。测定时田间土壤处于裸露和干燥状态。

1.3 土样采集与分析

在红外光谱数据测定后,以半随机的方式沿测定条带采集了土壤样本 85 个(见图 1),采样点位置用 GPS 进行精确定位,采样深度为 10 厘米;在实验室内,土样经室温下风干过筛后,在密歇根州立大学作物与土壤科学系的实验室内应用比重记法进行土壤质地的测定工作^[11]。

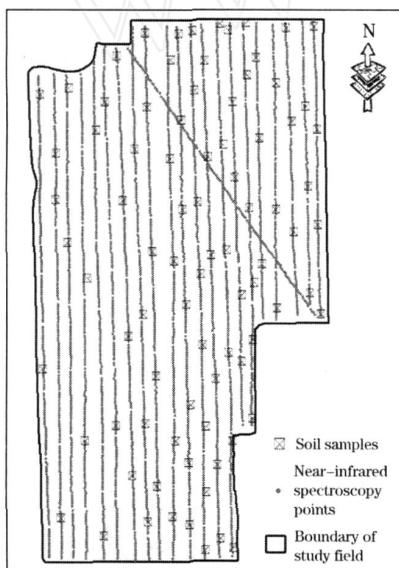


Fig 1 Layout of soil samples and near-infrared spectroscopy measurement points in study field

1.4 数据处理

以土壤采样点位置为中心,搜索 5 m 范围内的 NIRS 测定点,如果测定点超过 1 个,则取其各波段测定值的平均值作为该土壤样点红外光谱的值。

在 SPSS 中,对 85 个土壤样点的红外光谱数据进行主成分分析,取累积贡献率达到 100% 的前 12 个主成分来进行其与土壤质地之间的相关性分析。

将红外光谱数据导入到 Matlab 中,分别计算波段差(波段 1 - 波段 2)、归一化差((波段 1 - 波段 2)/(波段 1 + 波段 2))和波段比(波段 1 / 波段 2)后的值,然后分别分析其与土壤质地之间的相关性。

2 结果与讨论

2.1 土壤质地与红外光谱之间的关系

将土壤粘粒、粉粒和砂粒含量分别与红外光谱的 128 个波段进行相关性分析,并计算其相关系数(图 2)。从图中可以发现,尽管各波段的相关系数存在差别,但差别并不很

大,而且均未达到显著水平,尤其是粘粒含量与红外光谱各波段之间的相关性非常低,其原因可能与田间条件下水分等变化大、干扰因素多有关。

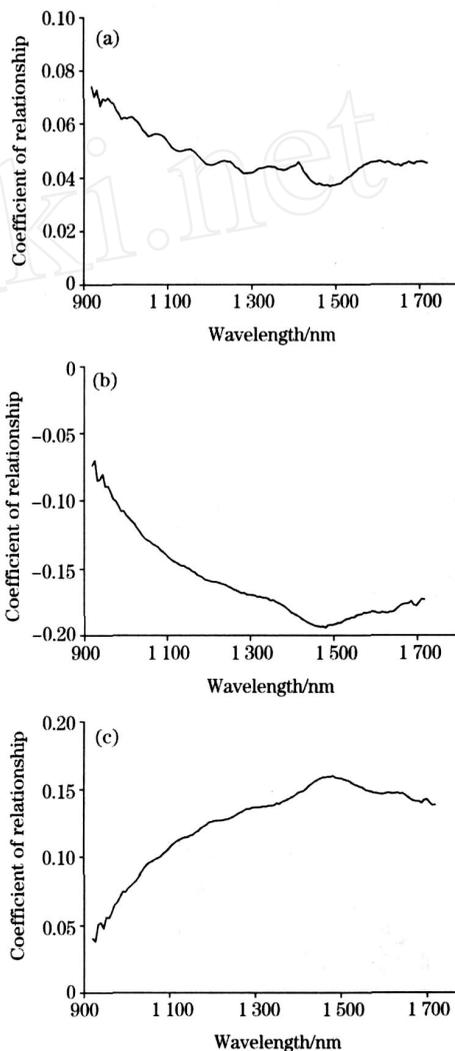


Fig 2 Correlation between soil texture and NIRS measurements

(a) : Clay; (b) : Silt; (c) : Sand

2.2 土壤质地与红外光谱的主成分之间的关系

图 3 是土壤质地与红外光谱的前 12 个主成分之间的相关关系,和图 2 中与原始光谱数据之间的相关性相比,经主成分分析后各主成分与质地之间的相关性得到明显提高,与粘粒含量的相关性中有 2 个主成分达到显著水平,其中 1 个达到极显著;与粉粒含量的相关性有 3 个达到极显著水平;与砂粒含量的相关性中有 4 个达到显著水平,其中有 3 个达到极显著;说明主成分分析对红外光谱数据的处理是有效的,而这一点与以前的研究结果相吻合。

2.3 土壤质地与经波段组合后红外光谱数据之间的关系

在遥感数据处理中,经常将不同波段的数据通过一定的方式组合起来,称为植被指数,其本质是在综合考虑各有关的光谱信号的基础上,把多波段反射率作一定的数学变换,增强所需信息,减弱其他的干扰信息;其中应用最早、最广

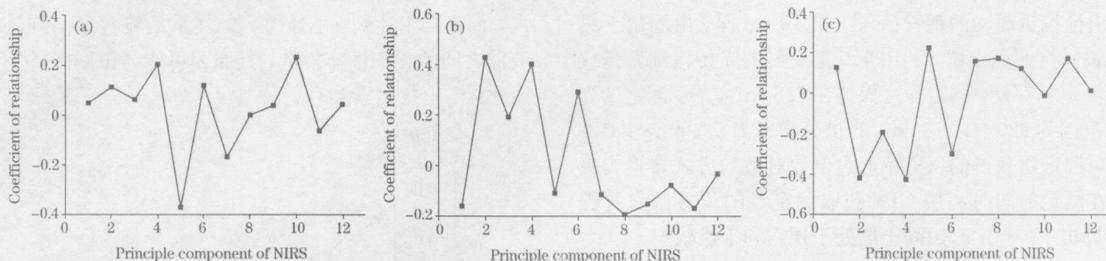


Fig. 3 Correlation between soil texture and principal components of NIRS data

(a): Clay; (b): Silt; (c): Sand

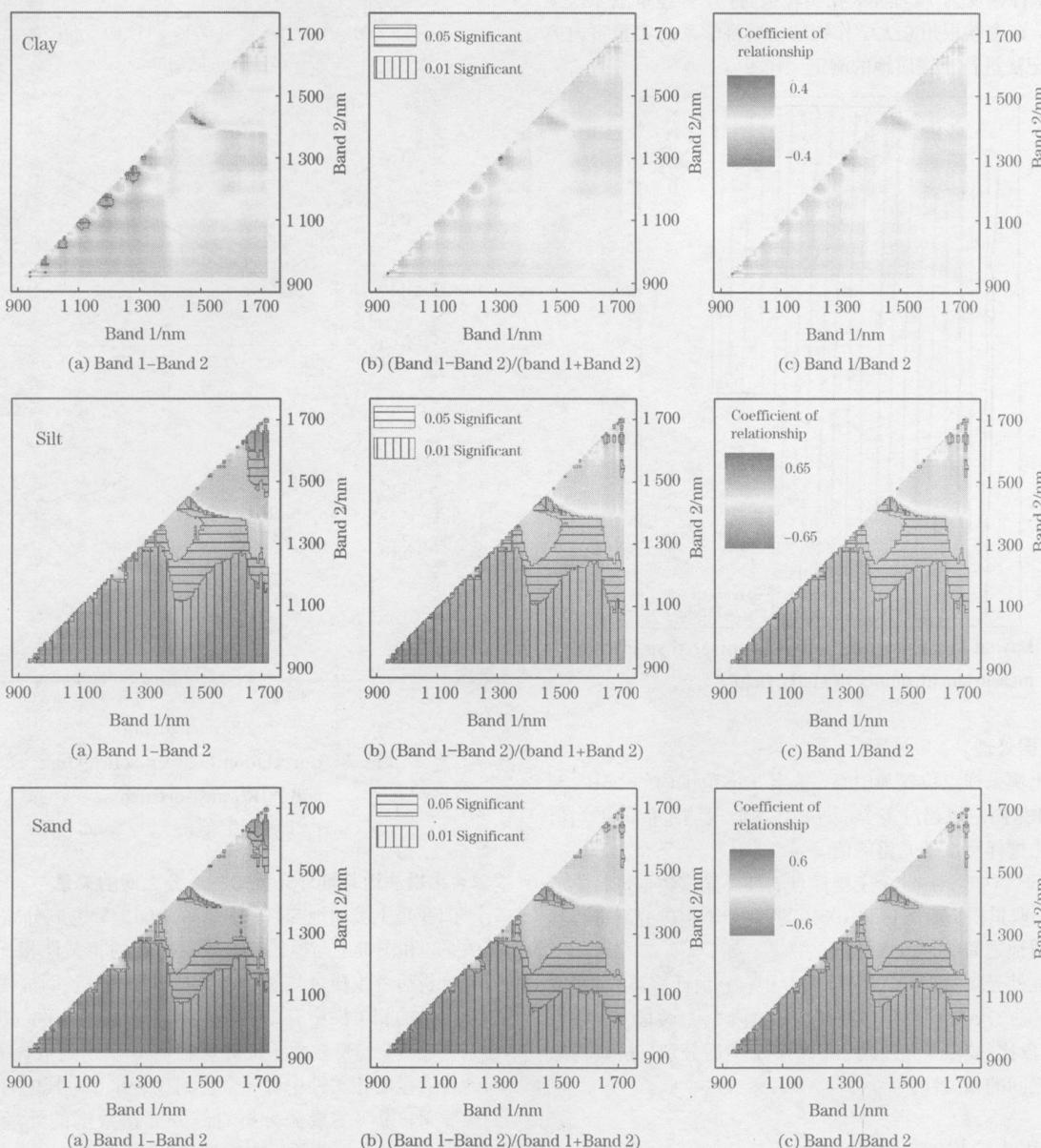


Fig. 4 Correlation between soil texture and band combination of NIRS

(a): Difference combination; (b): Normalized difference combination; (c): Ratio combination

泛的是通过算术运算将不同波段进行组合的方式, 主要包括差值植被指数(波段 1 - 波段 2)、归一化差值植被指数((波

段 1 - 波段 2)/(波段 1 + 波段 2)和比值植被指数(波段 1 / 波段 2)。在本研究中, 基于上述思想, 应用算术运算的方式

将红外光谱的 128 个波段组合起来,形成新的数据,然后分别计算它们与土壤粘粒、粉粒和砂粒含量之间的相关性(见图 4)。从图 4 中可以发现,经过波段组合后,相关性得到明显的提高,尤其是与粉粒和砂粒含量的相关性,有约 2/3 变量达到了显著水平,其中约 1/2 达到了极显著水平;尽管与粘粒含量的相关性只有个别能达到显著或极显著,但仍然有明显的提高。其原因可能是通过波段之间的算术运算,与土壤质地有关的信息得到了增强,而干扰信息在一定程度上被抑制。而其最明显的缺点是在经过波段组合后,所形成的参数的数量大大地增加,给进一步的分析增加了难度。

2.4 基于逐步回归的近红外光谱信息提取与土壤质地之间关系的比较分析

在红外光谱信息提取中,基于多元线性回归的逐步回归分析技术,是目前较为常用和有效的方法。利用逐步回归技术,关键在于回归变量的选取。而变量选取的一般原则是在回归模型中保留对应变量影响最显著的变量,同时使变量的个数尽量地少^[13]。考虑到原始光谱值与土壤质地之间的相关性均比较低,因此在逐步回归时采用逆向筛选的方法,也就是在开始时使全部的光谱波段都参与回归,然后逐步剔除对土壤质地不显著的光谱波段,直到没有变量能被剔除为止。

在对波段分别进行差值、归一化差值和比值组合后,为了考察不同波段组合方法的效果,分别将经上述三种波段组合方法后形成的新变量集与土壤质地进行回归分析,由于波段组合后生成的变量数非常多,因此在进行回归前,根据其土壤质地相关系数的大小进行排序,然后选择相关系数最大的前 20% 的变量参与回归分析。

为了进一步分析经三种不同波段组合方式组合后的变量的混合后的效果,将上述三种组合后形成的变量混合在一起后,来参与回归分析,考虑到不同的混合方式可能会对分析结果产生影响,因此将混合方式分为两种:先将三种组合方式形成的所有变量混合成一个合,按照相关系数的大小进行排序,然后选择集中中相关系数最大的前 10% 的变量进行回归分析;先分别对三种组合方式形成的变量集按照相关系数的大小进行排序,然后分别选出各集中中相关系数最大的前 10% 进行混合,将混合后新形成的变量集与土壤质地进行回归分析。

表 1 是经过不同方式处理后红外光谱数据与土壤质地之间进行逐步回归分析的情况,从表中可以发现,决定系数(R^2)以原始光谱数据为最低,经主成分分析后略有改善,而经过波段组合后得到明显的提高,特别是粘粒含量,这种改善显得非常突出,决定系数从 0.285 提高到了 0.867,但是主成分分析却不能改善其回归的效果。从波段组合及混合效果来分析,波段组合后的决定系数均得到了明显提高,除砂粒含量外,三种组合方式的决定系数比较接近;而对波段组合变量进行混合的两种方式而言,“先混合后选择”要明显地好于“先选择后混合”这种方式,而且对于粘粒和粉粒含量而言,混合后的决定系数也明显高于各波段组合,这为红外光谱数据的处理提供了新的方式与手段。从被选择的变量数来看,经波段组合后,最后被保留下来的变量数也大大增加,而且存在决定系数越高,模型中所包含的变量数也越多的趋势,说明在模型中包含的信息越丰富、全面,越有利于提取有关土壤质地的信息。

Table 1 Comparison with coefficient of determination between soil texture and NIRS data by different data processing procedure

NIRS data	Coefficient of determination (R^2)			Number of selected variables		
	Clay	Silt	Sand	Clay	Silt	Sand
Original NIRS	0.285	0.552	0.620	6	5	5
Principal components of NIRS	0.259	0.579	0.649	4	8	10
Difference between NIRS bands	0.840	0.707	0.660	28	19	17
Normalized difference between NIRS bands	0.832	0.708	0.731	31	22	25
Ratio between NIRS bands	0.831	0.710	0.657	31	22	18
Hybrid of NIRS band combination	0.867	0.783	0.722	32	27	21
Hybrid of selected NIRS band combination	0.806	0.698	0.652	31	24	18

3 结 论

尽管基于实验室条件下的研究已经表明,应用红外光谱分析技术可以测定土壤参数,但由于应用行走式设备在田间进行红外光谱测定时,会出现比实验室光谱测定时更多的影响因素,因此在通过红外光谱信息来提取土壤信息时会出现更多的困难,需要更复杂的数据处理手段。本研究通过对田间行走式测定的红外光谱数据进行处理并分析其与土壤质地之间关系的研究表明,直接应用原始光谱数据或进行主成分

分析,难于建立可靠的预测模型,特别是与土壤粘粒含量之间的关系;而本研究提出的基于算术运算的波段组合方法,能有效地提高光谱信息与土壤质地之间的相关关系,以波段组合后所形成的新变量集为基础,通过逐步回归,得到了更好的预测模型,尤其是混合了差值、归一化差值和比值三种波段组合后的变量,在与粘粒、粉粒含量的逐步回归中,获得了最高的决定系数。因此,本文的研究结果,为符合精确农业需求的、大范围应用红外光谱技术来快速测定土壤参数提供了数据处理和分析的新思路、新方法及可行性。

参 考 文 献

- [1] XIE Bo-cheng, XUE Xu-zhang, WANG Ji-hua, et al(谢伯承, 薛绪掌, 王纪华, 等). Agricultural Research in the Arid Areas(干旱地区农业研究), 2005, 23(3): 54.
- [2] LI Wei, ZHANG Shu-hui, ZHANG Qian, et al(李 伟, 张书慧, 张 倩, 等). Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(CSAE)(农业工程学报), 2007, 23(1): 5.
- [3] BAO Yi-dan, HE Yong, FANG Hui, et al(鲍一丹, 何 勇, 方 慧, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2007, 27(1): 62.
- [4] WANG Duo-jia, ZHOU Xiang-yang, JIN Tong-ming, et al(王多加, 周向阳, 金同铭, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2004, 24(4): 447.
- [5] HE Xu-sheng(何绪生). Review of China Agricultural Science and Technology(中国农业科技导报), 2004, 6(4): 71.
- [6] Waiser Travis H, Morgan Cristine L S, Brown David J, et al. Soil Sci. Soc. Am. J., 2007, 71: 389.
- [7] Sorensen L K, Dalsgaard S. Soil Sci. Soc. Am. J., 2005, 69: 159.
- [8] Chang Cheng-Wen, Laird David A, Mausbach Maurice J, et al. Soil Sci. Soc. Am. J., 2001, 65: 480.
- [9] Cozzolino D, Morón A. Journal of Agricultural Science, 2003, 140: 65.
- [10] Demattê José A M, Campos Rogério C, Alves Marcelo C, et al. Geoderma, 2004, 121: 95.
- [11] Huang Xuewen, Senthilkumar Subramanian, Kravchenko Alexandra, et al. Geoderma, 2007, 141: 34.
- [12] Christy Colin D, Drummond Paul, Laird David A. American Society of Agricultural Engineers Meeting, 2003, Paper Number: 031044.
- [13] ZHENG Yong-mei, ZHANG Jun, CHEN Xing-dan, et al(郑咏梅, 张 军, 陈星旦, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2004, 24(6): 675.

Study on Relationship between On-the-Go Near-Infrared Spectroscopy and Soil Texture

SHEN Zhang-quan¹, Qi Jiaguo², Huang Xuewen³, SHAN Ying-jie⁴, WANG Ke¹

1. College of Environmental and Resource Sciences, Zhejiang University, Hangzhou 310029, China

2. Department of Geography, Michigan State University, East Lansing, MI 48824, USA

3. Department of Crop and Soil Sciences, Michigan State University, East Lansing, MI 48824, USA (Currently at: Monsanto Company, St. Louis, MO 63141, USA)

4. Zhejiang Soil and Fertilizer Station, Hangzhou 310020, China

Abstract Near infrared spectroscopy (NIRS) is a rapid, proximal-sensed method that has proven useful in quantifying soil constituents mainly in laboratory. However, very little is known about how NIRS performs in a field setting by newly developed on-the-go NIRS measurements. The objective of the present study was to evaluate the relationship between on-the-go field NIRS measurements and soil texture in a glacial till soil. It was found that NIRS band combination based on difference, normalized difference and ratio could apparently improve the coefficient of relationship between NIRS and soil texture, and this might be a new and effective analytical procedure for field NIRS measurements.

Keywords Near-infrared spectroscopy(NIRS); Soil texture; On-the-go measurement

(Received Mar. 3, 2008; accepted Jun. 6, 2008)