

基于近红外光谱技术实时测定土壤总氮及磷含量

雷利宏

(榆林市现代农业培训中心 陕西 榆林 719000)

摘要: 土壤作为农作物生长种植的必备条件, 直接关系到农作物的生长态势。从土壤养分检测的角度, 利用近红外光谱技术来对土壤中的氮磷含量进行检测, 能够以保障土壤质量的方式, 推动农业生产种植的健康发展。本文以土壤中的氮磷含量检测为主要研究对象, 着重对基于近红外光谱技术来实时测定土壤中总氮及磷含量的实验过程和结果进行了分析。

关键词: 近红外光谱技术; 土壤检测; 农业生产

前言:

在现代社会的发展背景下, 将先进的现代农业生产种植理念和技术应用到土壤养分的检测当中, 能够充分发挥亲土种植的优势, 不断提高农作物种植的产量和质量, 有效促进农业整体的健康发展。近红外光谱技术本身是一种快速分析技术, 具有低成本、高效便捷的应用优势。应用近红外光谱技术对土壤中的氮磷含量进行检测, 能够为实现现代农业生产亲土种植和精准施肥决策提供更加科学的依据, 从而推动现代农业的有效发展, 为解决“三农”问题提供更有力的助力。

一、土壤养分检测对促进现代农业生产的重要性

在现代科学技术水平不断提高的背景下, 土壤检测已经成为现代农业生产的主要工作之一。对农作物种植生长的土壤条件进行检测, 能够得知种植区域范围内土壤的养分含量、酸碱度以及污染情况, 这些指标中呈现的数据与衡量土壤品质之间有着直接的关系。土壤中各种营养元素的含量多少, 是判断当地农作物生长态势的主要依据, 也能够成为后续农作物开展施肥工作的主要依据。在尝试和分析应用多种不同的农作物生产种植方式之后, 发现亲土种植更符合现代农业背景下的种植作业要求^[1]。亲土种植的方式以土壤品质为基础, 在种植作业中需要选择对土壤亲和、友好的方式来进行农业生产, 用以满足保障农业可持续发展、提升农业生产和服务品质的要求。在这个过程中, 对土壤养分的检测工作就显得尤为重要。在对土壤的养分含量进行检测之后, 可以依据检测结果来对种植作业中施加的化肥量和化肥种类进行有效控制, 减少以往在种植作业中的资源和成本不合理消耗以及环境污染的问题, 在提高农作物产量和质量的同时, 也能够促进现代农业的可持续发展。

二、应用近红外光谱技术测定土壤中总氮和磷含量的实验分析

氮、磷是农作物生长过程中所需较多的营养元素, 以往在对土壤中的养分进行检测的方法大多需要消耗较多的时间和精力, 也难以实时反应出土壤养分的真实情况^[2]。基于近红外光谱技术的应用优势, 将该技术用于测定土壤中总氮和磷含量, 对整个实验过程进行分析, 验证该技术是否能够满足快速、简便测量土壤养分的猜想。在对应用近红外光谱技术测定土壤中总氮和磷含量的实验进行分析时, 主要可以从以下几个方面入手:

(一) 实验准备

基于近红外光谱技术应用的一般要求, 本次实验中应用的近红外仪器为傅里叶变换型近红外光谱仪(NIRLab N-200), 该仪器的工作波数范围能够达到 $4\ 000\ \text{cm}^{-1} \sim 10\ 000\ \text{cm}^{-1}$, 扫描次数为64次, 分辨率为 $8\ \text{cm}^{-1}$ 。光源应用的卤素灯为14.5V, 实验分析得到的光谱数据以ASCLL码的形式从分析软件中导出并进行处理。

在选取用于实验的土壤样品时, 在确定某一地区的土壤种植范围之后, 依据耕地、果园、林地、菜地等土地利用方式的不同, 选定共120个采样点, 选取收集每个采样点的地表 $0\ \text{cm} \sim 20\ \text{cm}$ 土壤作为样品^[3]。在收集土壤样品之后, 对其进行静置风干处理和筛选, 将处理后的每一份样品以四分法划分为两份, 用以进行近红外光谱分析和常规分析方法的对比, 验证实验前的猜想。依据土壤样品中氮元素和磷元素的化学性质不同, 在应用常规分析方法对土壤中两种元素的含量进行分析时, 对于氮元素的测定应用凯氏定氮法, 对于磷元素的测定应用钼锑抗比色法。

(二) 实验过程与结果

在对土壤样品中的氮和磷元素含量进行测定时, 首先需要应用常规的分析方法来测定土壤中的氮和磷元素含量, 将其作为应用近红外光谱技术测定实验的对比分析依据。本次实验中应用两种常规分析方法得到的测量结果如表1所示。

表1 土壤样品的总氮和总磷参数

成分	样品数量	质量分数平均值 %	质量分数最小值 %	质量分数最大值 %	标准差 %
N	120	0.1883	0.0163	0.3253	0.0973
P	120	0.0646	0.0094	0.0098	0.0285

从表1中的测量结果可以看出, 选取的土壤样品中氮和磷的营养成分变化幅度比较大, 要想以构建模型的方式来分析判断应用近红外光谱技术的实施效果, 构建的模型适应范围也需要扩大, 才能够符合大部分情况下土壤样品的测量范围要求。

在应用近红外光谱技术对土壤样品中的氮磷元素含量进行分析时, 只需要将制备好的样品装入旋转样品杯中, 然后将其以上机扫描的方式扫描三次。在应用光谱仪进行扫描的过程中, 需要将光谱仪的探头与土壤样品表面的距离控制在 $10\ \text{cm}$ 左右, 探头与水平面呈现 45° 的夹角, 光源与水平面呈现 70° 的夹角^[4]。将扫描得到的平均光谱存入到计算机系统软件当中, 就可以得到基于土壤样

品的近红外漫反射光谱(见图1)。

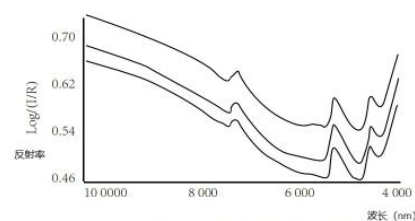


图1 土壤样品的近红外漫反射光谱图

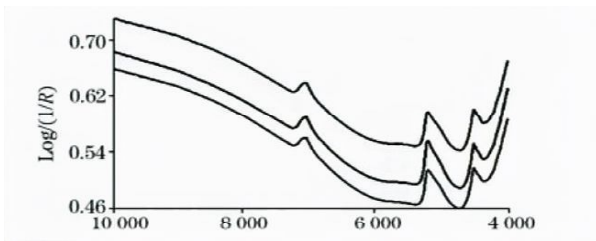


图1 土壤样品的近红外漫反射光谱图

(三) 实验结果分析

1. 实验误差校正

在实际的实验过程中, 考虑到近红外光谱技术会受到仪器本身、土壤样品背景或其他因素的影响而导致谱图出现偏移或漂移的现象。如果在实验中没有对这种现象进行及时处理, 就会严重影响实验结果的准确性。为了防止这种情况对最终的实验结果产生影响, 需要对样品光谱数据进行适当的处理, 以便能够提高实验模型的质量和准确性。具体而言, 对实验误差进行校正, 需要将土壤样品分为校正集合验证集两个部分, 先依据校正集的相关数据建立校正模型, 然后对光谱分析进行交叉检验, 依据光谱技术应用中的相关指标, 确定能够对光谱进行预处理方法和最佳的谱区范围, 对模型进行优化^[5]。在确定好优化的模型框架和结构之后, 用验证集的样品来对模型进行外部验证。整个模型的验证过程都需要应用

光谱定量分析软件来实现求导和分析。

2. 光谱图谱分析

从图1的光谱图谱分析结果可以发现, 尽管实验应用的土壤样品不同, 但样品呈现出的光谱形状能够体现出一定的相似性, 而吸收峰位置之间的差异也比较小, 能够呈现出明显的波峰或博古波谷情况。图1呈现的光谱数据是从实验样品中随意抽取的三组样品光谱数据情况, 纵坐标呈现的反射率大小能够直接呈现出土壤肥力情况。在反射率越低的情况下, 证明土壤中的氮和磷元素含量越高。基于这一结论带入到实验结果的图谱当中, 证明应用近红外光谱技术的方法能够满足对土壤肥力进行检测的要求。

3. 依据分析结果构建预测模型

为了保证实验结果的真实性和准确性, 在得到光谱图谱的结果之后, 还需要通过建立预测模型的方式, 对光谱数据与土壤中氮和磷元素含量的相关系数进行计算, 进一步验证近红外光谱技术应用的实际效果。具体而言, 构建预测模型, 首先需要从本次实验中应用的120个样本中选取16个样本作为建模依据, 其余的96个样本则被用来预测。在选取样本之后, 依次求出各波段光谱数据与土壤中总氮含量和总磷含量的相关系数变化情况, 依据系数的变化情况来选择具体能够用于建模的光谱波段。在实验之后发现, 相关系数变化情况主要会依据预处理方法的不同而发生变化, 进而导致实际的建模效果也存在一定的差异(见表2)。

表2 不同光谱预处理方法时的建模效果

预处理方法	成分	主成分数	自相关系数	建标标准误差	校正相关系数
移动平均平滑处理	N	13	0.9241	0.0830	0.9549
	P	10	0.9458	0.0667	0.9667
变量标准化处理	N	16	0.8551	0.0750	0.8963
	P	12	0.9217	0.0800	0.9536
移动平滑结合变量标准化处理	N	13	0.8677	0.1093	0.9271
	P	12	0.9217	0.0801	0.9536

由表2可知, 如果只对光谱分析结果进行平滑滤波处理, 得到的误差要明显小于其他预处理方式。因而在构建光谱分析模型的过程中, 结合实验分析的具体情况, 选择移动平均平滑的光谱预处理方法来构建模型。

为了能够保证光谱实验分析结果的可靠性, 在构建模型的过程中可以选择两种不同的原理和方法来构建模型。前文中提到的模型构建方法以PLS预测模型为主。除了这种构建模型的方法之外, 还可以应用LS-SVM预测模型的方法。具体而言, 建立LS-SVM模型主要应用的是最小二乘支持向量机。在向量机中选择模型输入值、核函数、模型参数之后, 由向量机来确定超参数和核函数参数的最佳组合, 让这两个待定参数的组合作为衡量模型和光谱实验结果的主要依据。超参数和核函数参数这两个待定参数与构建模型应用的最小二乘支持向量机的学习能力、预测能力以及泛化能力之间有着

密切的联系。对于这两个待定参数, 主要可以应用网格搜索法来分析参数的最佳组合。依据本文实验中获得的实验数据, 在确定精选格点数为 10×10 的基础上进行细化, 将定标集交叉验证均方根最小作为指标, 确定两个待定参数的最佳组合, 超参数为 2.7×10^4 , 核函数参数为5.1。

在构建模型的过程中, 考虑到各种因素对模型分析结果的影响, 还需要对模型进行校正处理。而在建立校正模型之后, 就可以结合模型的呈现结果来对土壤中的含氮和含磷量预测效果进行分析。

4. 验证模型的预测效果

在对模型的预测效果进行分析时, 需要将本次实验中未参与建模的所有样本在实验中呈现的光谱数据代入到模型当中, 将样品的实际含量与模型预测值进行对比分析, 得到两个不同模型下的实验预测结果。

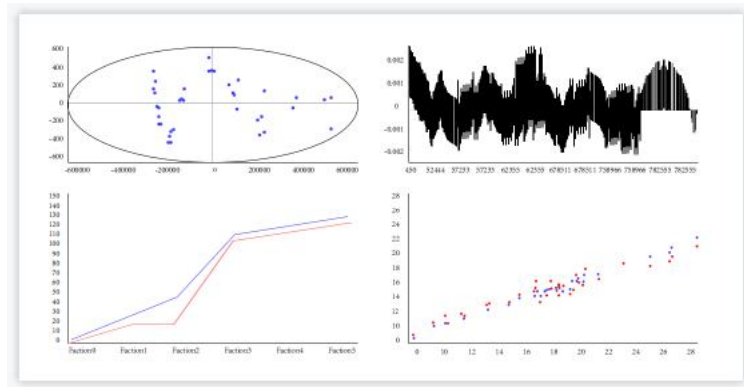


图2 PLS模型构建界面

$$y(x) = \text{sgn}\left[\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i K(x, x_i) + b\right] \quad y(x) = \text{sgn}\left[\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i K(x, x_i) + b\right]$$

图 3 LS-SVM 模型 ($\alpha_i \in R$ 为拉格朗日因子; $K(x, x_i)$ 为核函数, b 为偏置值)

具体而言,对 PLS 模型预测效果进行分析之后发现,该模型建立后得到的预测相关系数为氮 0.9454,磷为 0.9327,预测产生的标准误差为氮 0.0321,磷为 0.0089。而对 LS-SVM 模型预测效果进行分析之后可以发现,该模型建立后得到的预测相关系数为氮 0.9503,磷为 0.9547,预测产生的标准误差为氮 0.0378,磷为 0.0101。依据这一结果可以发现,两种模型构建方法在相关系数方面的差异并不明显,而在预测标准误差方面,在对土壤样品中的氮元素含量进行检测时,应用 PLS 模型的方法效果要明显好于 LS-SVM 模型的方法;在对土壤样品中的磷元素含量进行检测时,LS-SVM 模型方法的应用效果要比 PLS 模型效果好。

除此之外,对所构建的模型预测效果进行分析,还可以应用外部验证的方法来达到实验的目的。外部验证的方法主要是指,在建立校正模型之后,选取依据校正模型得到的其中 10 个样本的氮和磷元素含量预测结果,判断被检验样品中对于氮元素和磷元素的近红外分析值与化学测定值二者之间是否能够构成数据双尾。如果分析后的数据没有达到显著标准下的平均水平,就证明应用近红外分析方法得到的预测值与常规含量分析方法得到的分析值之间相差不大。依据实验分析的结果来看,应用外部验证的方法来对校正模型的误差进行计算,发现选取的土壤样品在氮元素含量检测方面的误差为 0.0095%,在磷元素含量检测方面的误差为 0.0086%。而检验集样品中对土壤样品含氮量和含磷量的预测值和化学分析值之间的比值为 0.9698 和 0.8307。同时,对于校正模型中的 RPD、SD 等值也能够被作为衡量样本模型质量的主要指标。一般情况下,模型质量越高,模型呈现的 RPD 值也就越高。依据本次实验中的各项数据,发现模型在土壤样品含氮量的 RPD 值为 3.78,而在土壤样品含磷量方面的 RPD 值为 1.69。依据这一结果可以得知,在应用校正模型的情况下,对于土壤样品中的含氮量分析结果要比含磷量分析效果好。

从整体上来看,无论是哪种构建模型的方法,都能够达到较为理想的建模效果和结果预测效果,都能够被应用到对土壤样品的氮元素和磷元素含量的检测当中。

(四)应用近红外光谱技术测定土壤养分实验的启示

从农业生产的角度来看,在现代科学技术水平不断提高的背景下,能够应用于农业生产的技术不断优化更新,为促进农业产量和质量的提高提供了技术方面的有效支持。基于这些先进的科学技术,现代农业生产发展的土地利用方式也越来越多样化,要保证不同土地利用方式下的农作物种植产量和质量,需要遵循不同农作物类型的生长规律和不同土地利用方式的环境条件,选择合适的农业技术和农业生产方案。土壤环境是农作物赖以生长的重要条件,对土壤环境进行检测,能够通过农作物生长环境的判断,来制订更

合理的农业种植和生产计划。在推动我国农业朝着现代化发展的过程中,受到技术水平的限制,尽管农民想要提高农作物的种植产量,但很容易因为盲目应用各种肥料而造成较为严重的环境污染,也会对农民自身造成一定的经济损失。在这种情况下,可以充分发挥土壤检测技术的作用,对农业生产所依赖的土地环境进行检测分析,既可以在生产种植之前对土壤环境进行分析,也能够农作物的生长阶段,对土壤中的养分状况进行实时检测,能够为农业生产提供更加科学的优化调整参考数据。

对于土壤检测应用的技术,可以重点从现有的各个行业和领域中应用的检测技术入手,尤其注重选取医药、化工以及农产品品质监测等领域应用的检测技术。将这些检测技术与农业生产种植的实际情况结合起来,不仅能够对土壤进行检测,还能够依据检测技术的应用实践来不断弥补现有检测技术在精准度方面的缺陷和不足,从而促进检测技术水平的提高。农业、农村和农民问题仍是我国现阶段社会发展中面临的重要问题,从促进农业生产的角度,以土壤检测技术来推动精细农业技术在农业生产中的应用,对提高农作物的产量和质量、提高现代农业生产技术整体水平具有重要的作用,需要引起重视。

结论:综上所述,应用近红外光谱技术,能够有效满足对土壤中的氮和磷元素含量的检测要求。氮和磷是农作物健康生长依赖的主要营养元素,直接关系到农作物生长的产量和质量。现代农业的生产方式与传统的农业生产方式有着较大的区别,在农业生产之前对土壤中的养分和营养元素含量进行检测,能够依据土壤养分的实际情况,对农业生产的计划方案进行调整,减少农业生产中的经济损失和对环境造成的破坏。

参考文献:

- [1] 李海燕. 基于近红外光谱技术的食品安全检测及其风险评估[J]. 中国食品, 2022,(14):103-105.
 - [2] 沈欢超, 耿莹蕊等. 近红外光谱技术结合教与学算法优化极限学习机实现烤烟等级判定[J]. 分析测试学报, 2022,41(07):1052-1057.
 - [3] 马雪亭, 罗华平等. 近红外光谱技术在苹果检测方面的研究与应用[J]. 食品安全质量检测学报, 2022,13(13):4219-4227.
 - [4] 黄小军. 可见近红外光谱技术在液态食品检测中的应用研究进展[J]. 中国食品, 2022,(13):77-79.
 - [5] 廖晓恬, 区晓阳等. 红外光谱技术在食品流通环节安全检测的应用概述[J]. 食品工业, 2022,43(05):259-263.
- 榆林市自然科学研究项目(项目编号: YF-2021-29)
- 作者简介: 姓名: 雷利宏, 出生: 1968.04.29, 性别: 女, 民族: 汉, 籍贯: 绥德, 学历: 本科, 职称: 高级讲师, 单位: 榆林市现代农业培训中心, 研究方向: 化学工程与工艺。