

Research Progress of Modeling Method in near Infrared Spectroscopy of Soil Organic Matter (SOM)

Danni Yu, Xiaoyan Zhang, Si Li*, Zhongyuan Jiang, Kehou Ao, Zhixi Gao

School of Chemistry and Chemical Engineering, Zunyi Normal College, Zunyi Guizhou
Email: *lisi80@126.com

Received: Sep. 28th, 2016; accepted: Oct. 17th, 2016; published: Oct. 20th, 2016

Copyright © 2016 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

Abstract

Near infrared spectroscopy (NIRS) is widely used in the study of Soil Organic Matter (SOM). However, most researchers in China in the application of NIRS in general use its own software to carry out the spectral preprocessing and data modeling to predict SOM, soil moisture, available N and available P content. So there are some limitations in the activity of spectral data processing. In this paper, the method of spectral pretreatment—wavelet analysis, wavelength selection method—genetic algorithm, and the modeling method of estimating soil nutrient—the method of neural network modeling in the analysis of soil organic matter are discussed. Also, the application prospect of these methods in the prediction of SOM in our country is discussed.

Keywords

Near Infrared Spectroscopy, Soil Organic Matter, Modeling, Progress

建模法在土壤有机质的近红外光谱分析中的研究进展

虞丹尼, 张小艳, 黎 司*, 江忠远, 敖克厚, 高智席

*通讯作者。

文章引用: 虞丹尼, 张小艳, 黎司, 江忠远, 敖克厚, 高智席. 建模法在土壤有机质的近红外光谱分析中的研究进展 [J]. 分析化学进展, 2016, 6(4): 91-95. <http://dx.doi.org/10.12677/aac.2016.64014>

遵义师范学院化学与化学工程学院, 贵州 遵义
Email: lisi80@126.com

收稿日期: 2016年9月28日; 录用日期: 2016年10月17日; 发布日期: 2016年10月20日

摘要

近红外光谱(NIRS)广泛应用于土壤有机质(SOM)研究中,但在我国,大多数研究人员在应用NIRS时一般采用仪器自带软件进行光谱预处理和数据建模来预测SOM、土壤水分、速效N和速效P的含量,这对光谱数据处理的能动性有一定的限制。本文初步论述了光谱预处理方法——小波分析、波长选择方法——遗传算法及估测土壤养分的建模方法——神经网络建模法在土壤有机质分析中的应用,并对这些方法在我国SOM的含量预测方面的应用前景进行了展望。

关键词

近红外光谱, 土壤有机质, 建模, 进展

1. 引言

近红外光谱技术(NIRS)具有简便快速、用样少、无损分析等优点。国内外学者在近红外区域进行土壤有机质定性、定量的分析已历经多年。应用 NIRS 预测土壤水分、SOM、速效 N、速效 P 磷含量的研究也取得了显著的成果[1]-[10]。近红外光谱建模参数包含光谱预处理、波长区间选择和模型建立[11]。由于原始光谱含有大量与测量目标无关的信息,所以在应用光谱数据分析之前需要把各种干扰尽可能减少或消除。在应用 NIRS 技术进行 SOM 含量预测研究中,光谱预处理和波长选择是目前较为提倡消除干扰提升模型稳定性的两种方式。要使所建的近红外光谱模型简单、稳定就必须改善光谱的分辨率和灵敏度,尽可能剔除与样品无关的光谱信号,所以光谱预处理是进行 NIRS 光谱分析关键的第一步[12] [13] [14] [15]。在 NIRS 技术的应用中光谱预处理方法有许多,然而小波变换常常与标准正态变量变换、去趋势法、一阶导数、二阶导数等配套使用,这样就减少了研究人员在分析光谱中花费的精力和时间。波长选择的目的在于选择与被测组分相关性较强的波数点来建立光谱数据模型,使所建的校正模型更简单、更稳健,常用的算法有:模拟退火算法和遗传算法[12]-[17]。其中,遗传算法是本文主要介绍的特征波长选择方法。在 NIRS 技术应用中常用的光谱数据建模方法分为两类——线性和非线性,其中 BP 神经网络是目前使用最多的处理非线性问题的重要方法之一[16]。

目前,国内大多数研究人员通常只能借助仪器自带的软件进行光谱预处理和数据建模来分析 SOM。本文主要论述光谱预处理方法——小波分析、波长选择方法——遗传算法及估测土壤养分的建模方法——神经网络建模法,旨在为 NIRS 在我国 SOM 分析中的应用提供参考。

2. 小波分析

在应用 NIRS 技术进行 SOM 含量预测研究中之所以要进行光谱预处理,是因为其光谱信息的来源广泛,原始光谱中有许多没有用的信息,这些使得光谱变得纷繁复杂,对光谱分析精度产生很大的影响导致预测结果达不到要求,所以在保证光谱基本特征不变的前提尽可能剔除无关的信息[12]。小波分析重要的工作内容是对近红外光谱相关的处理或变换,降低甚至消除各种噪音的干扰,使最终得到的光谱信噪比和精确度达到理想程度。

小波理论是一个应用数学分支,起源于二十世纪七十年代,后经比利时女科学家 L. Daubechies 推广蓬勃发展。其思想来源于伸缩与平移,能对函数或信号进行多尺度细化分析,既保持了傅氏变换的优点又满足局部性要求,被誉为数学上的显微镜[18]。

刘炜等[19]应用小波分析处理样品原始光谱及原始光谱 A 值,同时将处理后的光谱与未处理前的光谱进行对比。发现经过小波分析处理后光谱的信噪比和清晰度明显提高并且光谱的一阶导数在一定的波长范围内与有机质含量有良好的相关性。杨苗等[20]在预测 SOM 含量时认为在可见光-近红外波段内将小波变换联合偏最小二乘回归方法预测关帝山森林土壤的有机质含量是可行的,但其预测的精度尚未达到理想。毕卫红等[18]认为在应用小波分析处理土壤有机质微分光谱时,影响光谱信噪比和精确度的关键之处在于阈值的选取和量化。如果阈值选得不恰当,则会起到相反的效果,而得不到目标结果。

在将 NIRS 技术应用于土壤养分分析时,我国研究人员在分析近红外光谱数据时多数采用小波分析并且取得了较好的结果,但也发现小波分析的不足之处。例如应用小波分析与其他方法结合是可行的但预测结果的精度还需进一步提高,其次在应用小波分析时还要注意阈值的选择等。

3. 遗传算法

遗传算法是一种源于生物界的进化规律(适者生存)演化而来的随机搜索方法[21]。其运作流程为选择、交叉、变异。主要内容是在初代中(父代)选取对建模有利的波长点作为子代,子代中波长点经过交叉,变异产生后代,如此循环操作将后代中对模型有利的波长点代替父代,最后将最优秀的波长点组合起来即最终的波长选择。

刘辉军等[22]用此法与偏最小二乘法(PLS)算法进行对比发现使用遗传算法使波长变量大大减少,简化了分析模型。解宏图等[21]使用遗传算法对黑土光谱进行特征波长选择,发现光谱数据模型的稳健性具有一定的提高。说明了遗传算法特征波长选能够滤过光谱中大量多余信息,最终达到改善目标变量模型的性能的目的,但遗传算法的各个参数需要针对不同目标变量进行调整。遗传算法应用于 SOM 含量预测时间短,但是也有一些研究人员将其与近红外光谱分析波长区间选择的其它方法进行比较,得出应用遗传算法来进行光谱的特征波长选择是可行的并且能达到改善光谱数据模型稳健性的目的。

4. BP 神经网络

BP 神经网络算法亦称误差反向传播算法,该算法的运作原理模仿人脑神经元工作原理。同时因其具有对大量信息处理并行分布式储存及卓越的自主组织、自主学习等特点被广泛应用于系统数据建模、智能控制等多个领域。因为应用 BP 神经网络算法建立的光谱模型的过程中体现了该算法具有良好的非线性映照能力,所以此算法倍受化学计量学家的青睐。目前使用最多的非线性建模方法是 BP 神经网络算法[23]。运用 BP 神经网络算法建立的模型结构分为输入层、隐含层、输出层 3 层。

郑立华等[7]将 BP 神经网络建模方法应用于预测土壤有机质和氮含量中,得到理想的预测结果并且此举措是一种较好的尝试。李伟等[24]在应用 NIRS 技术对土壤碱解氮、速效 P 和速效 K 含量预测的研究中,发现与其它方法建立的光谱数据模型对比,BP 建模方法对于碱解氮含量的预测结果更为理想。但是李伟发现对于应用 NIRS 技术预测速效 P、速效 K 的含量还需继续研究。张淑娟等[23]应用 BP 神经网络方法联合主成分分析(PCA)针对 SOM、N、P、K 近红外光谱建立预测模型,发现该方法针对 SOM 含量所建立预测模型是可行的并且其预测结果也达到理想。经研究分析 BP 神经网络算法,这种非线性建模方法不仅应用于计算机领域,也可应用于 NIRS 技术光谱分析中,同时相对于其它近红外光谱建模方法,BP 神经网络建模方法更为先进。

5. 展望

近年来, 在各界研究人员将 NIRS 技术应用于各自的领域的同时也研究了近红外光谱建模参数中的各种方法并进行一些比较。在将小波分析应用于 NIRS 分析 SOM 含量预测中, 也可尝试将小波分析应用于荧光三维 SOM 含量预测中; 遗传算法不仅可以应用于计算机领域, 还可以在土壤养分分析中大放光彩; BP 神经网络算法同样也可尝试着应用于荧光分析法中。应用 NIRS 技术分析 SOM 含量的建模方法的创新之处还有很多, 例如将小波分析, 遗传算法以及 BP 神经网络算法组合应用于 SOM 分析中。另外, 对于近红外光谱数据校正模型的传递, 也可寻找一些新的突破。例如使在一台仪器上建立的定性或定量校正模型可以移植到其他相同或类似的仪器上使用, 或将按照某一条件建立的模型应用于同一台仪器却按照另一条件采集样品的近红外光谱, 以便减少建模所需要的时间和精力等等[11]。

基金项目

贵州省教育厅自然科学基金项目: 黔教合 KY 字([2013]172 号)资助; 贵州省科学技术基金: 黔科合 J 字 LKZS[2014]02 号、15 号, 黔科合 LH 字[2015]7037 资助; 遵义师范学院博士基金: 2013BJ03, 2013BJ02 资助。

参考文献 (References)

- [1] 于飞健, 闵顺耕, 巨晓棠, 等. 近红外光谱分析土壤的有机质和氮素[J]. 分析实验室, 2002, 21(3): 49-51.
- [2] 成飙, 陈德钊, 吴晓华. 基于移动窗口-迭代遗传算法的近红外光谱波长选择方法[J]. 分析化学, 2006, 34(S1): 123-126.
- [3] 陈鹏飞, 刘良云, 王纪华, 等. 近红外光谱技术实时测定土壤中总氮及磷含量的初步研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(2): 295-298.
- [4] 王延仓, 李贵军, 朱金山, 等. 基于小波变换与偏最小二乘耦合模型估测北方潮土有机质含量[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(7): 1922-1926.
- [5] 宋海燕, 何勇. 基于 OSC 和 PLS 的土壤有机质近红外光谱测定[J]. 农业机械学报, 2007, 38(12): 113-115.
- [6] 孙建英, 李民赞, 郑立华, 等. 基于近红外光谱的北方潮土土壤参数实时分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2006, 26(5): 426-429.
- [7] 郑立华, 李民赞, 潘奕, 等. 基于近红外光谱技术的土壤参数的 BP 神经网络预测[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(5): 1160-1164.
- [8] 郑立华, 李民赞, 潘奕, 等. 近红外光谱小波分析在土壤参数预测中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(6): 1549-1552.
- [9] 袁石林, 马天云, 宋韬, 等. 土壤中总氮与总磷含量的近红外光谱实时检测方法[J]. 农业机械学报, 2009, 9(1): 150-153.
- [10] 刘雪梅, 章海亮. 基于近红外光谱的不同建模方法检测土壤有机质和速效 P 含量的研究[J]. 西北农林科技大学学报(自然科学版), 2013, 41(4): 52-68.
- [11] 申艳, 张晓平. 近红外光谱法在土壤有机质研究中的应用[J]. 核农学报, 2010, 24(1): 199-207.
- [12] 杨海清, 祝昱. 基于可见近红外光谱特征波长选择的土壤有机质快速检测研究[J]. 红外, 2015, 36(2): 42-48.
- [13] 汤富彬, 刘光明, 罗逢健, 陈宗懋. 茶叶中吡虫啉残留量的 HPLC 测定方法[J]. 农药, 2004, 43(12): 561-562.
- [14] 郑咏梅, 张军, 李荣福, 等. 小麦近红外特征波长提取及蛋白质含量测定[J]. 激光与红外, 2003, 33(2): 125-127.
- [15] 屠振华, 籍保平, 朱大洲, 等. 基于遗传算法和间隔偏最小二乘的苹果硬度特征波长分析研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(10): 2760-2764.
- [16] 何勇, 李晓丽. 近红外光谱杨梅品种鉴别方法的研究[J]. 红外与毫米波学报, 2006, 25(3): 192-194.
- [17] 孙仲康, 沈振康. 数字图像处理及其应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 1985: 10-17.
- [18] 毕卫红, 陈俊刚, 李林. 小波分析及其在土壤成分的近红外分析中的应用[J]. 红外, 2006, 27(8): 16-19.

- [19] 刘炜, 常庆瑞. 小波变换在土壤有机质含量可见/近红外光谱分析中的应用[J]. 干旱地区农业研究, 2010, 28(5): 241-246.
- [20] 杨苗, 左月明, 杨萍果. 基于小波变换的近红外光谱预测土壤有机质[J]. 山西农业大学学报(自然科学版), 2010, 30(2): 154-158.
- [21] 解宏图, 宣然然, 彭义, 等. 基于遗传算法的波长选择方法对土壤有机碳预测模型影响[J]. 土壤通报, 2014, 45(4): 795-800.
- [22] 刘辉军, 吕进, 林敏, 余良子. 基于遗传算法的波长选择方法在绿茶近红外光谱分析模型中的应用[J]. 分析测试学报, 2007, 26(5): 679-681.
- [23] 张淑娟, 王凤花, 张海红, 赵华民. 基于主成分分析和 BP 神经网络的土壤养分近红外光谱检测[J]. 山西农业大学学报(自然科学版), 2009, 29(6): 483-487.
- [24] 李伟, 张书慧, 张倩, 董朝闻, 张守勤. 近红外光谱法快速测定土壤碱解氮, 速效磷和速效钾含量[J]. 农业工程学报, 2007, 23(1): 55-59.

期刊投稿者将享受如下服务:

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: aac@hanspub.org