



中国植物营养与肥料学会
Chinese Society Of Plant Nutrition And Fertilizer Sciences



2019年学术年会

基于激光诱导击穿光谱与中红外衰减全反射 光谱的数据融合技术预测土壤有机质含量

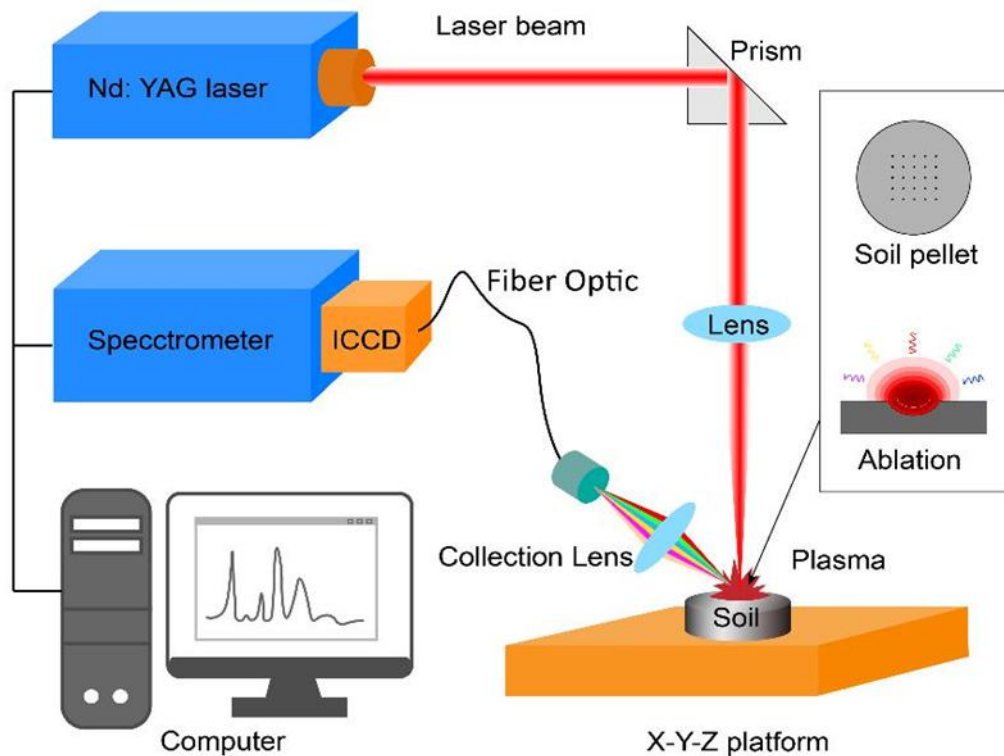
徐雪斌 杜昌文 马 菲

中国科学院南京土壤研究所

2019. 8. 8
重庆



激光诱导击穿光谱技术 (LIBS)



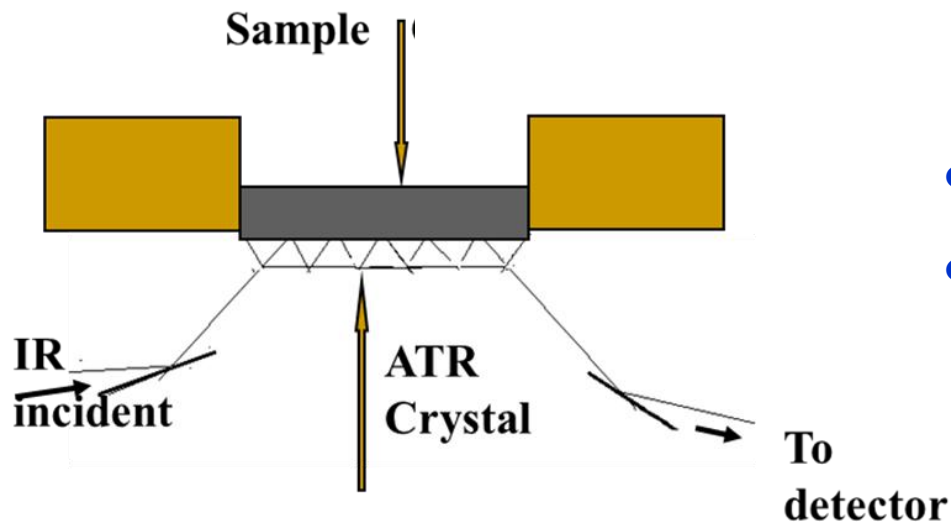
原理

- 激光聚焦
- 产生等离子体
- 原子和离子被激发
- 产生特征谱线

优点

- 快速、原位
- 破坏性小
- 实现多元素同时测定

中红外衰减全反射光谱技术 (FTIR-ATR)



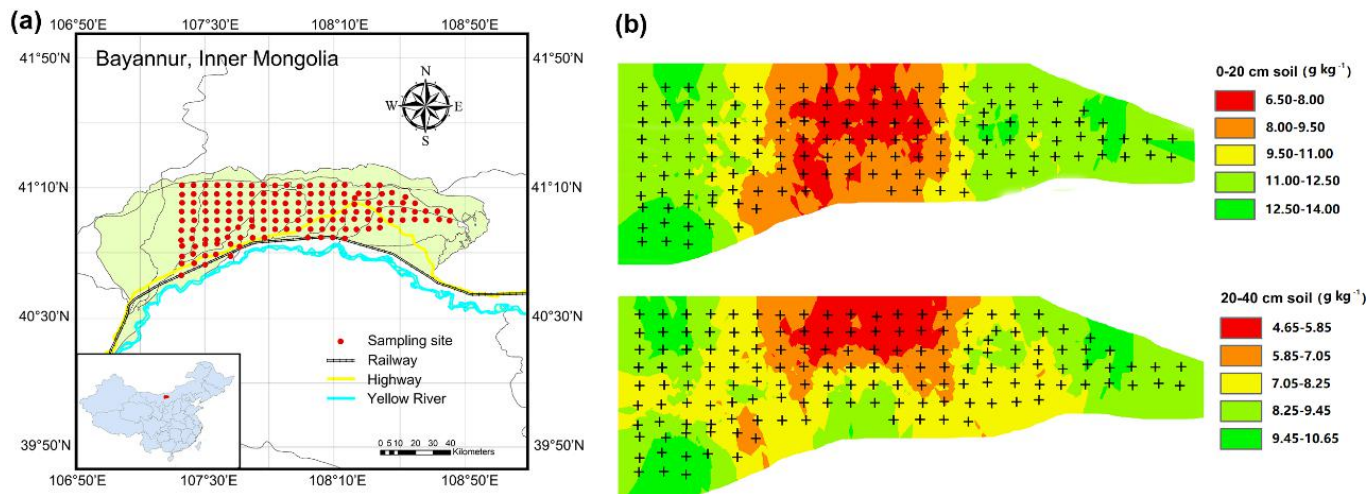
原理

- 红外光经过折射率大的晶体透射到折射率小的样品
- 穿透到样品表面一定深度
- 样品表层分子结构信息

优点

- 快速、原位
- 无损
- 实现多成分同时检测

土壤样本采集



- ◆ 采样地点:内蒙古河套灌区 (152 个样本)
- ◆ 0-20 cm (76 个), 20-40 cm (76 个), 过筛 < 2 mm, 风干
- ◆ FTIR-ATR : 4000 - 400 cm⁻¹
- ◆ LIBS: 200 - 1000 nm
- ◆ 有机质含量用理化方法测定

光谱基线校正

- ◆ Morphological weighted penalized least squares

形态重加权惩罚最小二乘法 MPLS

数据融合

- ◆ 低、中、高阶数据融合

预测模型

- ◆ 偏最小二乘法 (PLSR)
- ◆ 支持向量机 (SVR)
- ◆ 人工神经网络 (ANN)

材料与方法

◆ MPLS

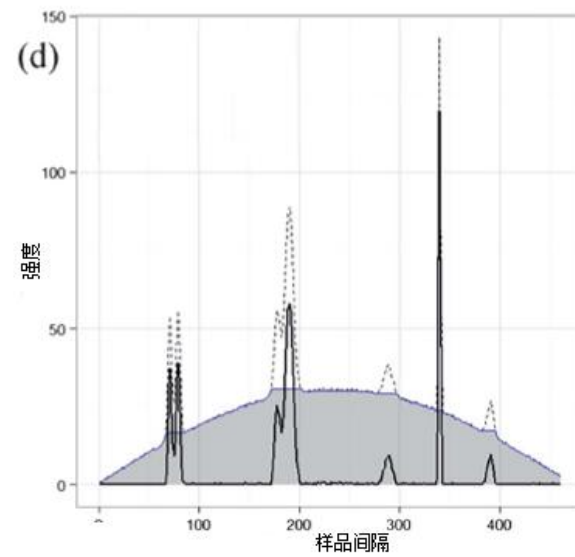
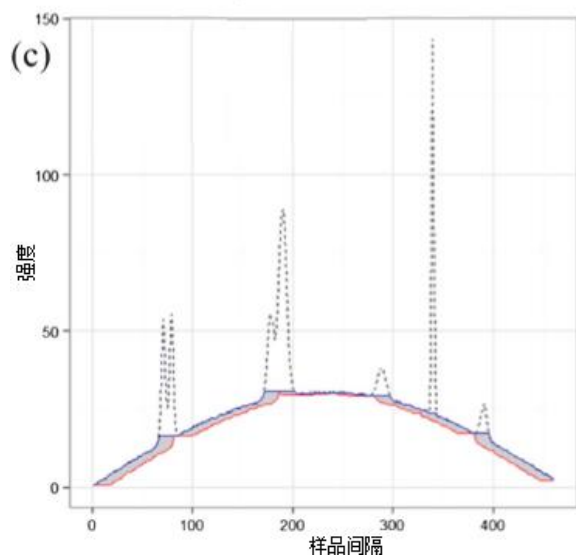
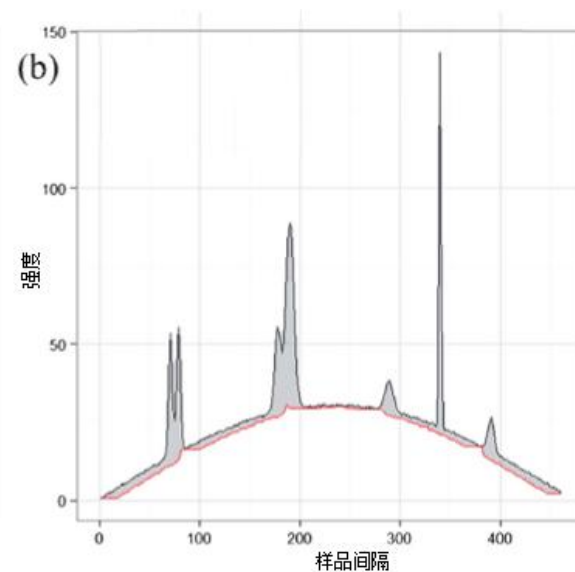
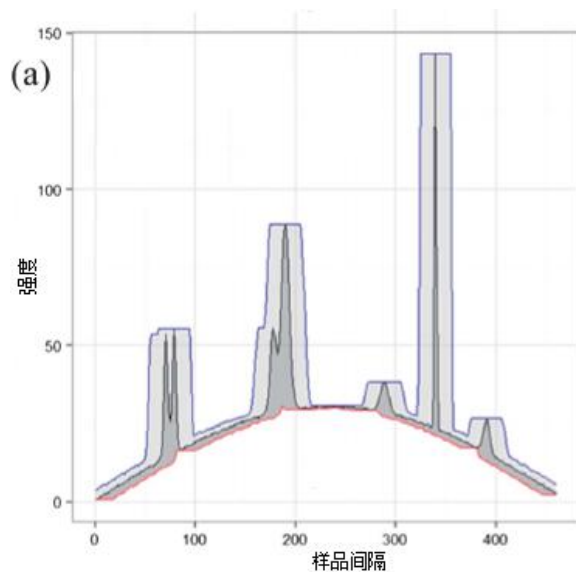
a. 获取光谱背景信息和特征峰信号

和特征峰信号

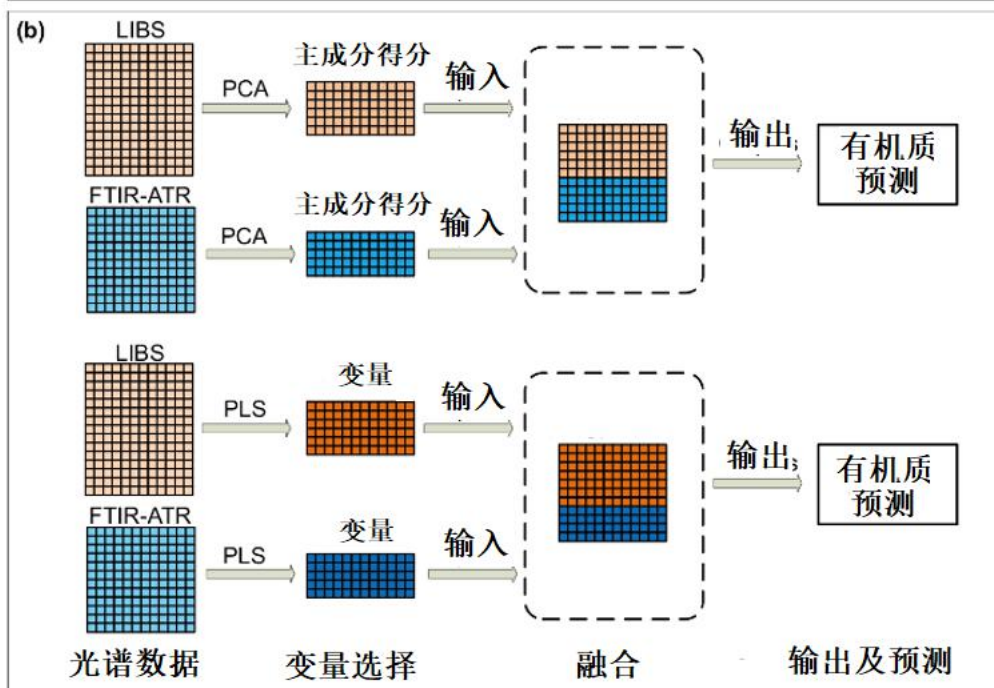
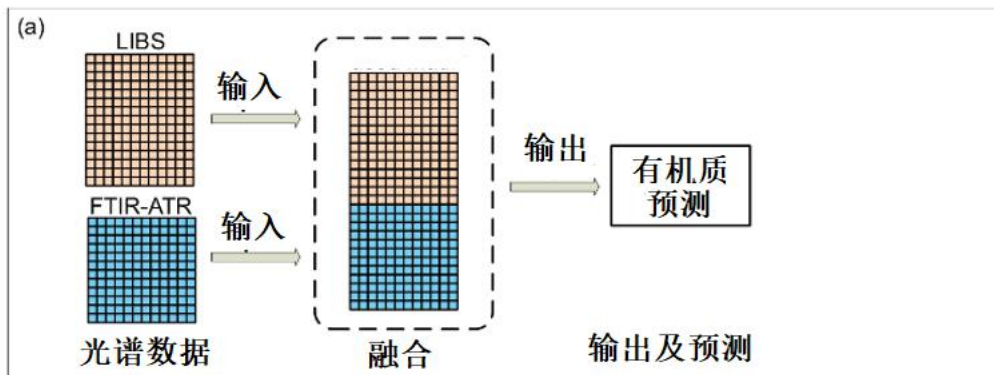
b. 精细化背景信号

c. 扣减背景信息

d. 基线校正完成



数据融合



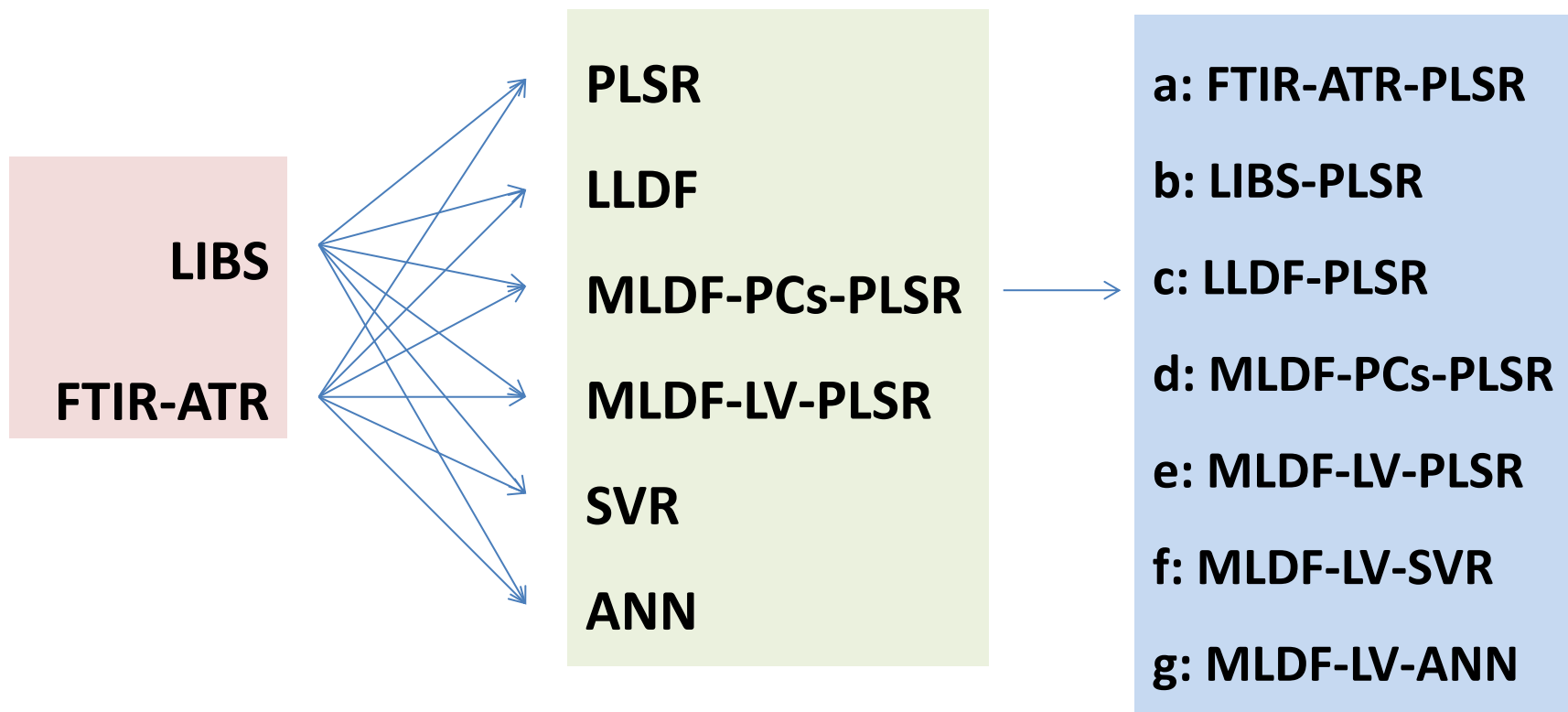
(a) 初阶数据融合

Low level data fusion: LLDF

(b) 中阶数据融合

- Mid level data fusion: MLDF
- 基于主成分方法: MLDF-PCA
- 基于潜在变量: MLDF-LV

采用不同模型预测土壤有机质含量



模型评估参数

R^2 、RMSE、RPD、残差值、系统误差

1. 土壤样品的LIBS光谱与FTIR-ATR 光谱特征

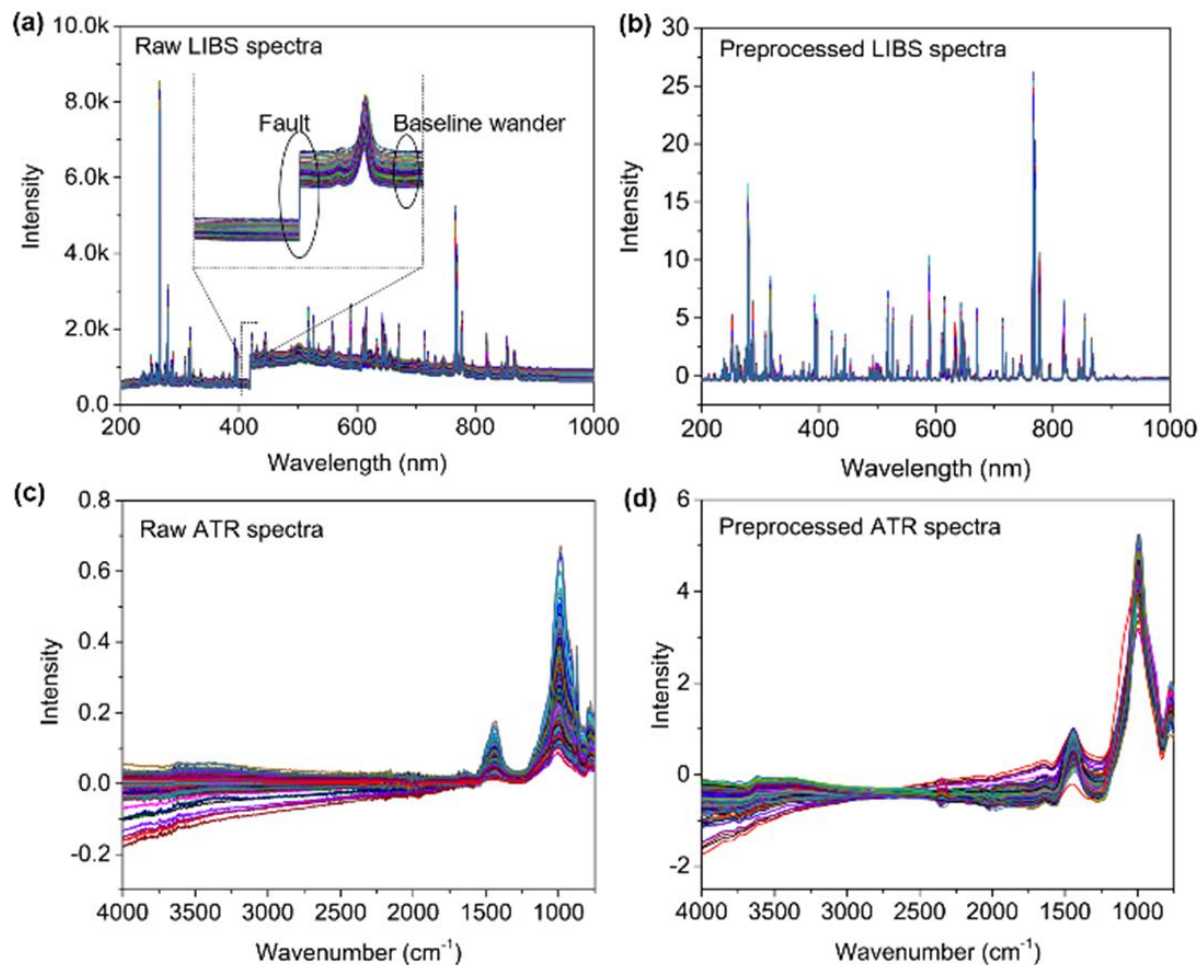


Fig. 1 土壤样品的LIBS光谱与FTIR-ATR 光谱特征

结果与讨论

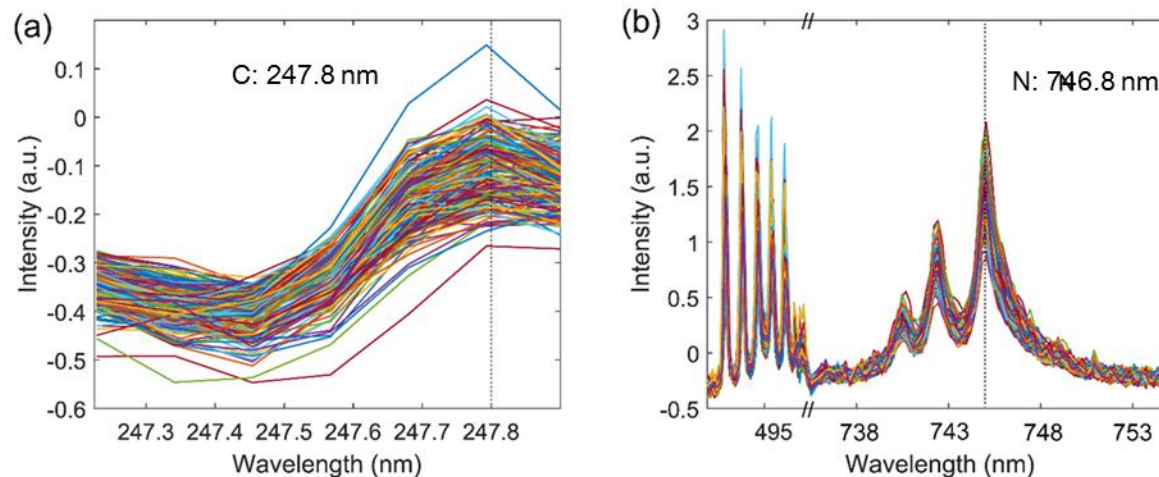


Fig. 2 土壤LIBS光谱中的C, N 特征谱线

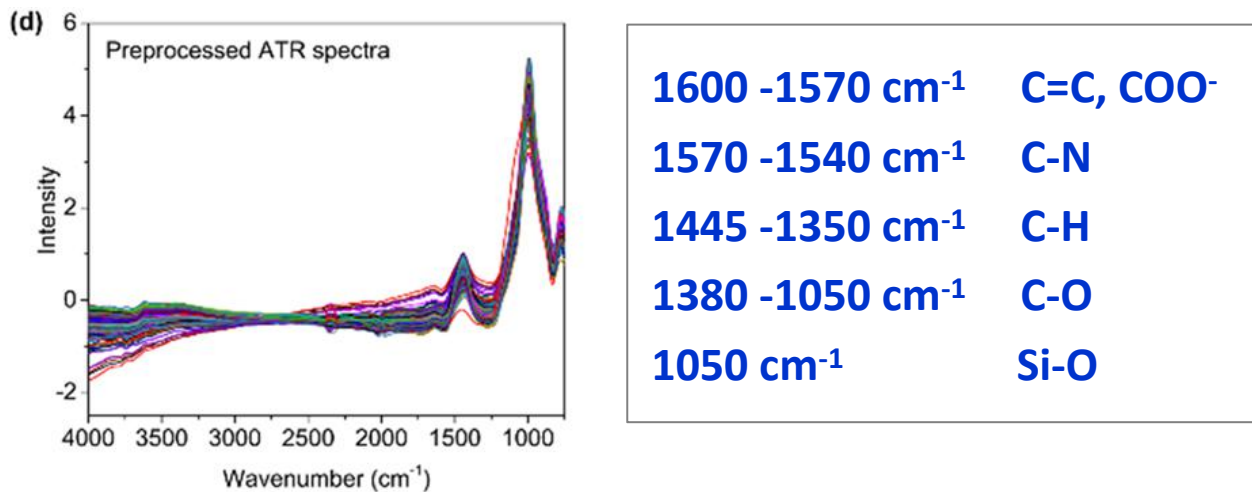
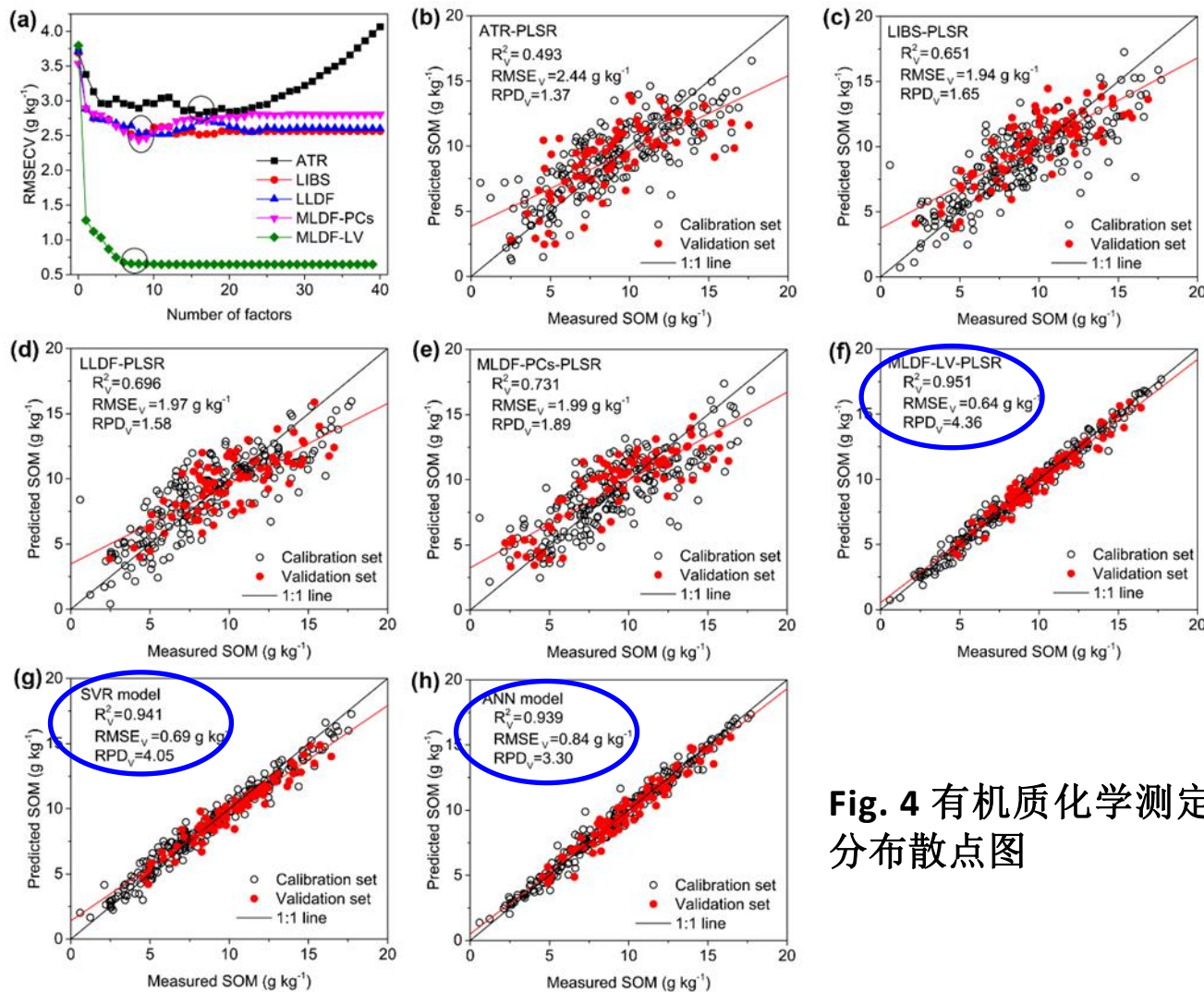


Fig. 3 土壤FTIR-ATR光谱中的有机质成分相关特征谱线

结果与讨论

2. 土壤有机质预测结果



a: latent variables

b: FTIR-ATR PLSR

c: LIBS-PLSR

d: LLDF-PLSR

e: MLDF-PCs-PLSR

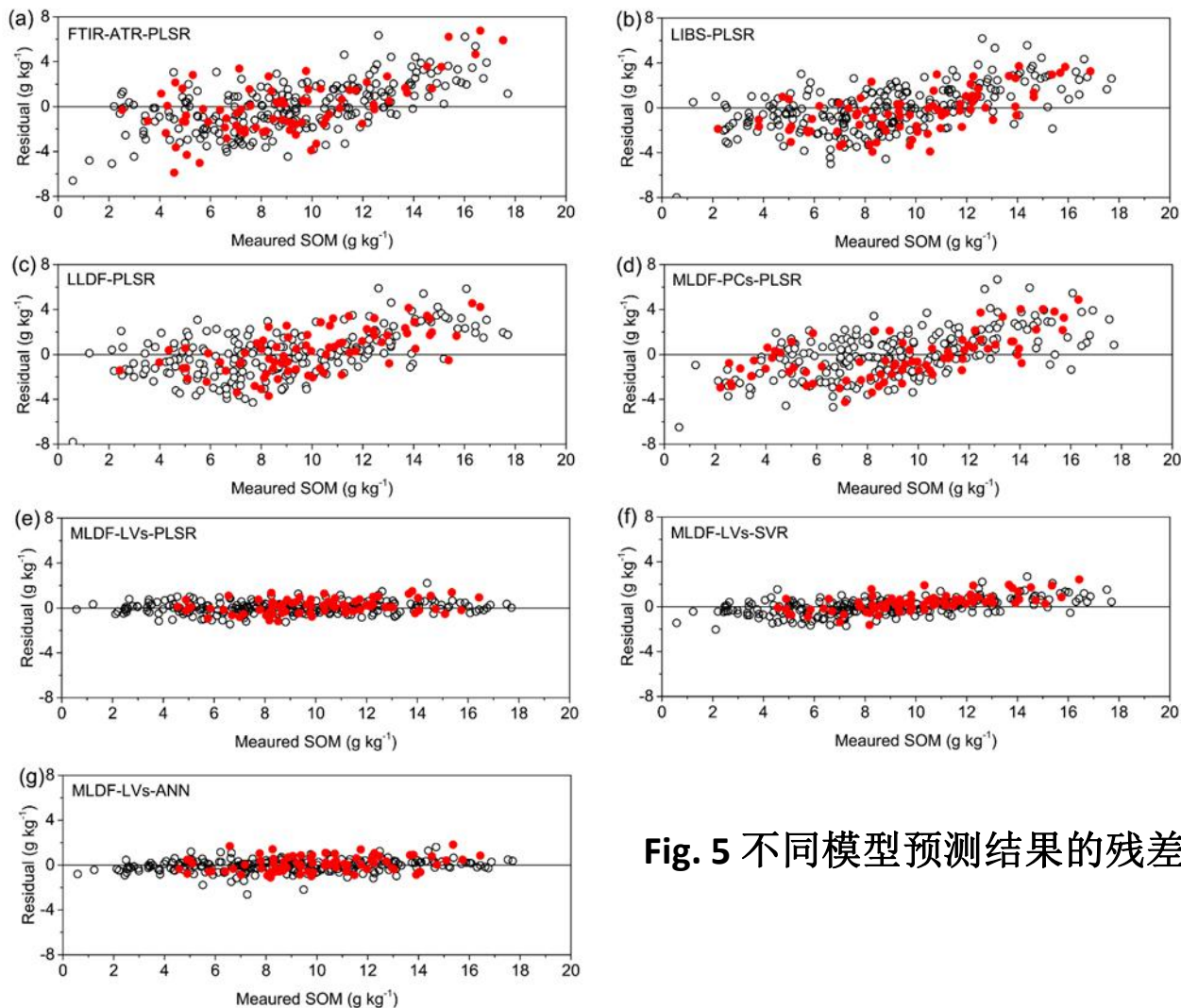
f: MLDF-LV-PLSR

g: MLDF-LV-SVR

h: MLDF-LV-ANN

Fig. 4 有机质化学测定方法与预测结果分布散点图

3. 残差分析



a: FTIR-ATR PLSR

b: LIBS-PLSR

c: LLDF-PLSR

d: MLDF-PCs-PLSR

e: MLDF-LV-PLSR

f: MLDF-LV-SVR

g: MLDF-LV-ANN

Fig. 5 不同模型预测结果的残差分析

结果与讨论

Table 1 不同模型有机质预测结果比较

预测模型	校正集(228 个样本)			验证集 (76个样本)			Bias
	R ²	RMSE	RPD	R ²	RMSE	RPD	
FTIR-ATR PLSR	0.65	2.19	1.68	0.49	2.44	1.37	-0.09
LIBS PLSR	0.68	2.10	1.75	0.65	1.94	1.65	-0.38
LLDF-PLSR	0.70	2.02	1.83	0.70	1.97	1.58	0.36
MLDF-PCs-PLSR	0.75	2.08	1.70	0.73	1.99	1.89	-0.25
✓ MLDF-LV-PLSR	0.98	0.53	7.13	0.95	0.64	4.36	0.14
MLDF-LV-SVR	0.97	0.75	5.04	0.94	0.84	3.30	0.35
✓ MLDF-LV-ANN	0.98	0.55	6.85	0.94	0.69	4.05	0.10



结论

- ◆ LIBS 光谱技术提供样本的原子信息
- ◆ FTIR-ATR 反映样本的分子结构信息
- ◆ 将LIBS技术与FTIR-ATR技术结合，采用恰当的预测模型，
可提高土壤有机质的预测精度

谢谢

