

基于玉米叶片光谱特征的土壤无机氮含量 估算模型的建立与验证

张银杰¹, 王磊^{1*}, 白由路¹, 杨俐苹¹, 卢艳丽¹, 孙艳敏², 张静静¹, 李格¹

(1 中国农业科学院农业资源与农业区划研究所/农业农村部植物营养与肥料重点实验室, 北京 100081;

2 濮阳市农业科学院, 河南濮阳 457000)

摘要:【目的】作物叶片颜色反映土壤养分的供应状况。研究作物叶片氮素相关的特征光谱信息与土壤无机氮含量的关系, 以建立基于叶片光谱信息的土壤无机氮含量诊断模型, 实现利用高光谱技术对作物和土壤进行实时监测。【方法】在两年(2017—2018)的玉米(郑单 958)田间试验中, 设置 6 个施氮水平, 施氮量分别为 0、60、120、180、240、300 kg/hm²。在玉米的拔节期、大喇叭口期、开花吐丝期、灌浆期测定叶片高光谱反射率, 对植株和土壤样品进行采集, 分析土壤无机氮含量的变化, 明确叶片光谱反射率与土壤无机氮含量的关系, 利用光谱参数和偏最小二乘回归法 (partial least squares regression, PLSR) 建立诊断模型并进行模型精度的评价。【结果】施氮处理土壤无机氮含量显著高于不施氮处理, 随着生育期的推移, 土壤无机氮含量呈递减趋势, 追肥可显著提高土壤无机氮含量。拔节期和开花吐丝期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量在可见光波段呈负相关关系, 在近红外波段呈正相关关系; 大喇叭口期两者在可见光波段呈负相关关系, 灌浆期两者无明显相关关系。在光谱参数模型中, 4 个生育期土壤无机氮含量预测的最佳光谱指数分别为 RVI-2、RSI (534, 726)、RSI (567, 519) 和 RVI-2, 其回归模型验证集的 R^2 分别为 0.642、0.749、0.696、0.540。在 PLSR 预测模型中, 利用 PLSR 建立的诊断模型验证集的 R^2 分别为 0.876、0.838、0.765、0.595, RPD (ratio of percent deviation) 分别为 2.140、2.077、2.002、1.369。【结论】基于叶片光谱反射率建立的 PLSR 估算模型, 在玉米的拔节期、大喇叭口期、开花吐丝期均能很好地预测土壤无机氮含量。因此, 利用叶片光谱特征诊断土壤无机氮含量具有一定的可行性。

关键词: 玉米; 光谱反射率; 土壤无机氮含量; 光谱参数; 偏最小二乘回归

Establishment and variation of soil inorganic nitrogen content estimation model based on maize leaf spectral characteristics

ZHANG Yin-jie¹, WANG Lei^{1*}, BAI You-lu¹, YANG Li-ping¹, LU Yan-li¹, SUN Yan-min², ZHANG Jing-jing¹, LI Ge¹
(1 Institute of Agricultural Resources and Regional Planning, Chinese Academy of Agricultural Sciences/Key Laboratory for Plant Nutrition and Fertilizer of Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Beijing 100081, China;
2 Puyang Academy of Agricultural Sciences, Puyang, Henan 457000, China)

Abstract: 【Objectives】The color of crop leaves directly reflects the nutrient supply of soil. We studied the relationship between intensity of leaf chromospectrum related to N nutrition and the content of soil inorganic nitrogen, in order to establish a model to realize real-time monitoring of nitrogen contents in crops and soils by hyperspectral technology. 【Methods】A maize (*Zea mays* L. cv Zhengdan 958) experiment was conducted in 2017 and 2018. Six nitrogen application levels were setup, they were 0, 60, 120, 180, 240 and 300 kg/hm², respectively. At the jointing, booting, anthesis-silking and filling stages, leaves hyperspectral reflectance and soil inorganic N content were measured, and the relationship model between spectral reflectance of leaves and soil inorganic nitrogen contents was established, and the precision of the prediction by the spectral parameters model

收稿日期: 2019-11-18 接受日期: 2020-01-02

基金项目: 国家自然科学基金 (31572207, 31000937); 国家科技支撑计划课题 (2015BAD23B02)。

联系方式: 张银杰 E-mail: zhangyinjie@126.com; * 通信作者 王磊 E-mail: wanglei02@caas.cn

was evaluated. **【 Results 】** The soil inorganic N content decreased with the growth period, and topdressing of N fertilizer significantly improved the soil inorganic N content in the middle and late growing stage of maize. The intensity of spectral reflectance of leaves at the jointing and anthesis-silking stages was negatively correlated with the soil inorganic N content in the visible light range, and positively correlated in the near-infrared band. There was a negative correlation in the visible band at the booting stage and no obvious correlation at the filling stages. In the spectral parameter model, the optimal spectral index for the prediction of soil inorganic N content at the four growth stages was RVI-2, RSI (534, 726), RSI (567, 519) and RVI-2, respectively, and the R^2 values of verification sets of the regression model were 0.642, 0.749, 0.696 and 0.540, respectively. In the PLSR prediction model, the R^2 values of the verification of the diagnostic model were 0.876, 0.838, 0.765 and 0.595, and the RPD (ratio of percent deviation) were 2.140, 2.077, 2.002, 1.369, respectively. **【 Conclusions 】** Satisfactory prediction accuracy in soil inorganic nitrogen content is acquired by the PLSR prediction model based on leaf spectral reflectance at the jointing, booting and anthesis-silking stages of maize. The two-year field experiment has proved its feasibility to diagnose soil inorganic N content.

Key words: maize; spectral reflectance; soil inorganic nitrogen content; spectra parameter; partial least squares regression

氮素是作物生长的关键元素, 在农业生产中, 氮肥施用不足直接影响植物的生理生化过程, 进而影响农作物的产量和品质, 但过量施用氮肥会造成经济损失和环境污染, 如温室气体 (N_2O) 的排放和地表水、地下水的污染^[1-2]。实时监测作物氮素营养, 有助于管理者及时采取措施, 既保证作物产量, 又提高肥料效益、减少环境污染。高光谱技术具有信息量大、连续采样的特点, 能够快速无损地获取作物相关信息, 为作物的实时监测提供有效的方法和手段。

随着高光谱技术的发展, 植物的高光谱监测技术在农业生产中得到长足的发展, 尤其是在作物氮素营养诊断方面^[3-6]。当前, 利用光谱技术已在不同作物、生态区域建立作物氮素诊断模型, 作物的氮素水平可以通过光谱指数进行反演^[7-9]。Wang 等^[10]研究表明, RSI (822, 738) 光谱指数可以作为监测水稻和小麦叶片氮积累的指标。此外, 为明确能够稳定反映氮营养时空分布特异性的敏感或有效光谱波段, 基于多元统计分析技术已被广泛采用。有学者指出, 利用偏最小二乘回归算法反演作物氮含量, 其精度和稳定性明显提高^[11-13]。随着光谱技术应用的拓展, 基于土壤光谱特征来监测土壤水分、有机质、全氮等土壤养分状况也开展大量研究, 此技术需要对土壤进行采集, 标准化处理, 测定光谱, 但是由于土壤光谱的复杂性和不确定性, 当前研究还不能用于作物的营养诊断。众所周知, 作物的养分来源于土壤中养分的直接供应, 作物体内养分状况是土壤养分供应能力和作物对养分吸收能力的综

合反映^[14]。植株冠层光谱数据已经用于小麦^[15-16]、水稻^[17]和棉花^[18]等作物土壤氮素状况的诊断研究, 利用水稻冠层光谱可以实现对土壤速效氮的预测^[17]。利用两年 (2017—2018) 的大田试验探究土壤无机氮含量的变化, 分析叶片高光谱反射率与土壤无机氮含量的关系, 利用光谱参数和偏最小二乘回归, 明确利用叶片光谱数据预测土壤无机氮含量的能力。旨在建立高效的玉米氮素营养光谱诊断技术, 实现实时、准确地了解玉米对养分的需求和土壤对养分的供应状况, 为合理施肥、提高氮肥利用率提供理论和试验基础。

1 材料与方法

1.1 试验地概况

试验地位于中国农业科学院国际高新产业园 (河北省廊坊, $N39^{\circ}35'47.03''$ 、 $E116^{\circ}35'16.24''$), 属于温带大陆性季风气候, 四季分明, 年平均日照时数 2660 h, 年平均气温 $11.9^{\circ}C$, 无霜期年平均 183 天, 年平均降水量 554.9 mm。供试作物为夏玉米, 品种为郑单 958, 土壤类型为潮土, 供试肥料: 氮肥为尿素 (含 N 46%), 磷肥为磷酸二铵 (含 N 18%, 含 P_2O_5 46%), 不施氮处理磷肥为过磷酸钙 (含 P_2O_5 12%), 钾肥为硫酸钾 (含 K_2O 52%)。

1.2 试验设计

试验 1: 2017 年 6—10 月的大田小区试验, 供试土壤的常规推荐施肥量为 N 180 kg/hm^2 、 P_2O_5 90 kg/hm^2 、 K_2O 90 kg/hm^2 (ASI 法)^[19], 依据推荐施肥量

分别增施和减施氮肥, 设置 6 个施氮水平: N0、N1、N2、N3、N4、N5, 对应施氮量分别为: 0、60、120、180、240、300 kg/hm², 磷钾肥施用量均为 90 kg/hm², 3 次重复, 小区面积 32 m², 随机区组排列。基础土壤的有机质含量 11.38 g/kg, pH 为 8.30, 铵态氮含量 3.74 mg/kg, 硝态氮含量 15.61 mg/kg, 有效磷含量 14.3 mg/kg, 速效钾含量 62.5 mg/kg。氮肥按苗期和大喇叭口期 4:6 的比例施用 (8 月 1 日取样后追施尿素), 磷钾肥做基肥一次施入。2017 年 6 月 13 日播种, 分别于 7 月 17 日拔节期、8 月 1 日大喇叭口期、8 月 17 日开花吐丝期、9 月 3 日灌浆期取样, 10 月 11 日收获。

试验 2: 2018 年 6—10 月的小麦/玉米轮作定位试验 (2008 年开始), 选取 6 个施氮水平: 0、60、120、180、240、300 kg/hm², 小区面积为 100 m², 小区按施氮量递增顺序排列, 取样时将小区分为 3 个区域, 视为重复。2008 年开始种植前耕层土壤的有机质含量 13.05 g/kg, pH 为 8.26, 碱解氮含量 61.68 mg/kg, 有效磷含量 17.01 mg/kg, 速效钾含量 38.46 mg/kg。N1、N2、N3、N4 处理的氮肥按苗期和大喇叭口期 4:6 的比例施用, N5 处理先将 240 kg/hm² 的氮肥在苗期和大喇叭口期按 4:6 比例施用, 剩余氮肥在开花吐丝期取样后 (8 月 15 日) 施入, 磷钾肥施用量均为 90 kg/hm², 小麦季施入。2018 年 6 月 17 日播种, 分别于 7 月 20 日拔节期、7 月 29 日大喇叭口期、8 月 14 日开花吐丝期、9 月 2 日灌浆期取样, 10 月 11 日收获。

1.3 样品采集

光谱数据采集: 在玉米生长的关键生育期 (拔节

期、大喇叭口期、开花吐丝期和灌浆期) 进行测定, 光谱反射率采用 FieldSpec 高光谱仪 (美国 ASD 公司生产) 获得, 波谱范围 350~2500 nm, 光谱采样间隔和分辨率分别为 1.4 和 3 nm (300~1000 nm)、2 和 10 nm (1000~2500 nm)。各小区在测量前均进行标准白板校正 (标准白板反射率为 1)。利用叶片夹持器 (自带光源) 选取叶片中部较宽 (避免直接对着叶脉) 的部分夹紧进行光谱测定, 保证光谱数据的稳定性^[20]。在各生育时期, 测定每株玉米每一片完全展开叶的光谱反射率, 其平均值作为该植株的叶片光谱反射率。

土壤样品采集: 在测定光谱的玉米植株根区 30 cm 范围内采集耕层 (0~20 cm) 土壤样品, 每株取 3 钻, 混匀。土壤样品风干后过筛 (20 目), 用 2 mol/L KCl 溶液进行振荡提取, 过滤后用 AA3 (德国 SEAL) 流动分析仪进行硝态氮、铵态氮含量的比色测定。

1.4 数据处理

利用 ViewSpecPro 5.7 光谱处理软件处理光谱数据, Excel 2007 进行数据处理和作图, SPSS 22 软件进行统计分析, MATLAB R2014a 软件进行编程构建光谱指数, 绘制等值线图, 编程进行 PLSR 分析。模型的建模集来源于 2018 年定位试验的数据, 模型的验证集数据来源于 2017 年的大田试验数据。

1.5 模型构建

1.5.1 光谱参数的选择和构建 光谱参数分为两部分: 1) 在已有研究的基础上选出物理意义明确、认可度较高并且与本研究相关的 10 个光谱参数 (波长位置和光谱指数) (表 1)。2) 利用 500~1300 nm 任意

表 1 选用的光谱参数计算方法及参考文献

Table 1 Algorithm and references of different spectral parameters

光谱参数 Spectral parameter	计算公式或定义 Algorithm formula or definition	参考文献 Reference
GNDVI	$(R_{780} - R_{550}) / (R_{780} + R_{550})$	[21]
GI	R_{554} / R_{676}	[22]
ND705	$(R_{750} - R_{705}) / (R_{750} + R_{705})$	[23]
Rg	510~560 nm 范围内最大反射率 Max reflectance in 510~560 nm	[24]
VOG	R_{740} / R_{720}	[25]
OSAVI	$(1 + 0.16) (R_{800} - R_{670}) / (R_{800} + R_{670} + 0.16)$	[26]
RVI-1	R_{810} / R_{660}	[27]
NDVI	$(R_{800} - R_{670}) / (R_{800} + R_{670})$	[28]
RVI-2	R_{822} / R_{738}	[29]
PPR	$(R_{550} - R_{450}) / (R_{550} + R_{450})$	[30]

波长两两组合构建比值光谱指数^[30]: $RSI(i, j) = R_i/R_j$, i 和 j 为 500~1300 nm 范围内的任意两个波长, R_i 和 R_j 为波长 i 和波长 j 对应的光谱反射率, $RSI(i, j)$ 与土壤无机氮含量线性拟合的决定系数结果用等值线图表示, 颜色的深浅代表决定系数的大小。利用已研究的光谱参数和构建的比值光谱指数分别与土壤无机氮含量建立单变量线性和非线性回归。

1.5.2 偏最小二乘回归 本研究采用偏最小二乘回归 (PLSR) 方法建立基于敏感波段 (500~1300 nm) 的土壤无机氮含量的估算模型。利用 MATLAB 先将数据进行预处理, 每间隔 10 nm 连续波长做一次平均提取光谱反射率以减少光谱维度, 有利于 PLSR 分析时确定潜在因子的个数^[31]。PLSR 模型的预测精度和有效性选取由决定系数 (R^2)、均方根误差 (RMSE) 和验证集的标准偏差与验证集的均方根误差的比值 (RPD) 等参数来衡量^[32]。 R^2 和 RPD 越大, RMSE 越小, 模型精度和预测效果越好, RPD 判断模型的预测能力, RPD < 1.4 时, 模型无法对样品进行预测; $1.4 \leq RPD < 2$ 时, 认为模型效果一般, 可以用来对样品进行粗略评估; RPD ≥ 2 时, 模型具有极好的预测能力^[33]。偏最小二乘法回归方程的表达式^[30]如下:

$$Y_i = \beta_0 + \sum_{k=1}^r \beta_k T_{ik} + e_i \quad (i = 1, \dots, n) \quad (1)$$

$$T_{ik} = \sum_{j=1}^m C_{kj} X_{ij} \quad (k = 1, \dots, r)$$

式 (1) 中, Y_i : 因变量, X_{ij} : 自变量, m : 因子数, n : 样本数, e_i : 残差, β_k : 回归系数, k : 潜在变量

2 结果与分析

2.1 土壤无机氮含量的变化

利用 2018 年的定位试验数据分析土壤无机氮含量的变化。由图 1 可知, 随着生育期的推移, 土壤无机氮含量整体上呈递减趋势, 在开花吐丝期, 高氮处理 (180、240、300 kg/hm²) 的土壤无机氮含量有所增加, 这是由于大喇叭口期取样后进行了追肥。无氮处理 (N0) 和低氮处理 (60、120 kg/hm²) 的土壤无机氮含量随着玉米生长而逐渐减少。施氮处理的土壤无机氮含量均显著高于不施氮处理, 随着氮肥增施, 土壤无机氮含量呈先增加后保持平稳的趋势。其中, 拔节期和大喇叭口期的 N2、N3、N4、N5 处理的无机氮含量相差较小, 开花吐丝期

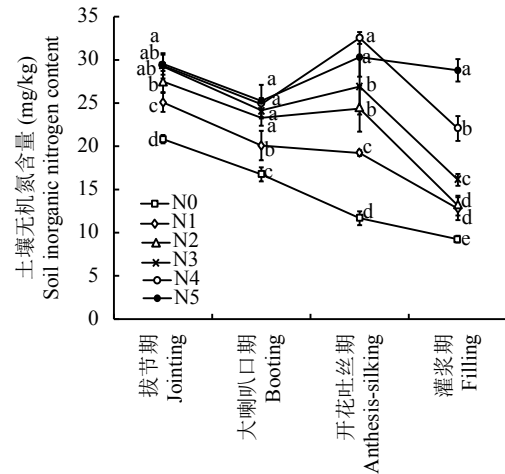


图 1 不同生育期土壤无机氮含量

Fig. 1 Soil inorganic N content at different growth stages

[注 (Note): The N application rates in treatments of N0, N1, N2, N3, N4 and N5 were 0, 60, 120, 180, 240 and 300 kg/hm², respectively; 折线上不同字母表示同一生育期处理间差异显著 Different letters on the broken lines mean significant difference among treatments in the same growth period ($P < 0.05$).]

的 N2、N3 处理间以及 N4、N5 处理间土壤无机氮含量差异不显著。灌浆期 N1、N2 处理间土壤无机氮含量差异不显著, N3、N4、N5 处理间差异显著。

2.2 叶片光谱反射率与土壤无机氮含量的相关性分析

利用 2018 年的定位试验数据分析叶片光谱反射率与土壤无机氮含量的相关性。由图 2 可知, 在不同生育时期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量的相关性曲线走势有一定差别。拔节期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量在 522~721 nm 波段处呈极显著负相关关系, 在近红外 763~1265 nm 波段处呈显著正相关关系。大喇叭口期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量在 504~750、2132~2493 nm 波段处呈极显著负相关关系。开花吐丝期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量在可见光 522~577、698~739 nm 波段处呈极显著负相关关系, 在近红外 1087~1109 nm 波段处呈极显著正相关关系。灌浆期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量无明显相关关系。

2.3 基于已研究光谱参数与土壤无机氮含量的回归分析

基于 2018 年定位试验数据, 用综合所选的 10 个光谱参数对土壤无机氮含量进行线性和非线性回归分析, 以 R^2 和 F 值来评估拟合效果, 从中优选出表现较好 ($P < 0.05$) 的回归模型 (表 2), 从表 2 中

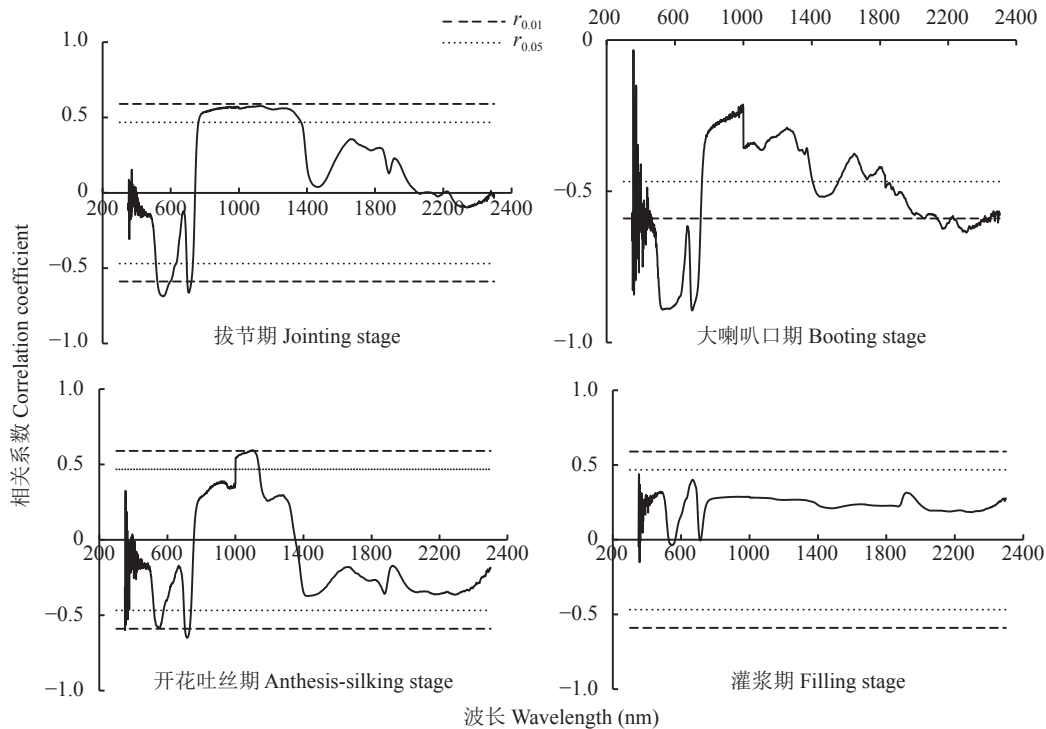


图 2 不同生育期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量的相关曲线

Fig. 2 Correlation curve between spectral reflectance and soil inorganic nitrogen content at different growth stages

[注 (Note) : $r_{0.05}$, $r_{0.01}$ 代表相关性达 0.05 和 0.01 水平的相关系数

$r_{0.05}$ and $r_{0.01}$ represent the correlation coefficients at the 0.05 and 0.01 levels, respectively.]

可以看出, 优选出的土壤无机氮含量与光谱参数的回归方程均为非线性。拔节期土壤无机氮含量与 6 个光谱参数建立的回归方程均达显著水平, 决定系数 R^2 的变化范围为 0.554~0.647, 基于 R^2 和 F 值最大的原则, 基于 RVI-2 建立的土壤无机氮含量回归方程表现较好。大喇叭口期选取的 8 个光谱参数与土壤无机氮含量的回归方程均达显著水平, 决定系数的范围为 0.579~0.892, 其中选出最佳的光谱指数为 RVI-2 ($R^2 = 0.892$, $F = 61.747$)。开花吐丝期土壤无机氮含量与光谱参数回归方程达显著水平的有 5 个, 决定系数 R^2 的范围为 0.552~0.794, 其中 GI 与土壤无机氮含量建立的回归方程较好 ($R^2 = 0.794$, $F = 61.594$)。灌浆期土壤无机氮含量与光谱参数回归方程达显著水平的为 GI 和 RVI-2, 其中基于 RVI-2 建立的指数函数较好 ($R^2 = 0.577$, $F = 21.841$), 回归方程达极显著水平。

2.4 基于波段组合的比值光谱指数与土壤无机氮含量的回归分析

基于 2018 年定位试验数据建立比值光谱指数与土壤无机氮含量的线性回归。由图 3 可知, 整个玉米生育期中大喇叭口期的土壤无机氮含量与比值光

谱指数线性拟合的敏感 (红色) 范围最大, 决定系数较大。拔节期对土壤无机氮含量估算敏感的波段位于 700~1300 nm, 其中最为敏感的波长为 767 和 788 nm, 所构建的组合比值光谱指数 RSI (767, 788) 与土壤无机氮含量线性拟合的效果较好, 回归方程为 $y = -1811.6x + 1833.3$ ($R^2 = 0.715$)。大喇叭口期土壤无机氮含量与比值光谱指数敏感的范围为 500~1300 nm, 其中以波长 534 和 726 nm 构建的比值光谱指数与土壤无机氮含量线性拟合的决定系数最大, 回归方程为 $y = -94.34x + 58.594$ ($R^2 = 0.804$)。开花吐丝期对土壤无机氮含量估算敏感的波段范围位于 500~700 nm, 其中以波长 567 和 519 nm 组合构建的光谱指数线性拟合效果最好, 方程式为 $y = -330.16x + 409.98$ ($R^2 = 0.826$)。灌浆期土壤无机氮含量与比值光谱指数的敏感范围为 500~1000 nm, 其中以波长 802 和 816 nm 组合构建的比值光谱指数与土壤无机氮含量的线性拟合效果最好, 方程式为 $y = -7207.6x + 7219.6$ ($R^2 = 0.742$) 回归达极显著水平。

2.5 基于光谱指数诊断模型的精度检验

最佳的诊断模型不仅要求回归方程的显著性水平高, 还要保证 RMSE 和相对误差小, 利用独立试

表 2 土壤无机氮与光谱参数的回归分析

Table 2 Regression analysis of root-zone soil inorganic nitrogen content and spectral parameters

生育期 Growth stage	光谱参数 Spectral parameter	回归方程 Regression equation	R^2	F
拔节期 Jointing stage	GNDVI	$y = -495.45x^2 + 588x - 146.07$	0.639**	13.260
	GI	$y = 64.897e^{-0.418x}$	0.558**	20.192
	ND705	$y = -422.55x^2 + 457.87x - 95.6$	0.587*	10.645
	Rg	$y = -5129.5x^2 + 1127.5x - 33.57$	0.564*	9.684
	VOG	$y = -94.444x^2 + 302.56x - 213.62$	0.554*	9.332
	RVI-2	$y = -1042x^2 + 2419.1x - 1375.1$	0.647**	13.725
大喇叭口期 Booting stage	GNDVI	$y = -299.52x^2 + 376.21x - 93.034$	0.854**	43.754
	GI	$y = 61.914e^{-0.546x}$	0.670**	29.203
	ND705	$y = -294.57x^2 + 340.46x - 73.212$	0.840**	39.425
	Rg	$y = -1877x^2 + 344.17x + 9.462$	0.848**	41.889
	VOG	$y = -83.248x^2 + 277.17x - 205.58$	0.836**	38.152
	RVI-1	$y = -3.1014x^2 + 47.588x - 157.46$	0.579*	10.319
	RVI-2	$y = -975.63x^2 + 2275.1x - 1301.1$	0.892**	61.747
	PPR	$y = -274.88x^2 + 139.45x + 7.1026$	0.685**	16.337
开花吐丝期 Anthesis-silking stage	GI	$y = 5006.2e^{-3.487x}$	0.794**	61.594
	ND705	$y = -2546.6x^2 + 2953.8x - 828.53$	0.552*	9.236
	VOG	$y = -311.92x^2 + 1106.2x - 952.27$	0.623*	12.368
	RVI-2	$y = -2040.9x^2 + 4938.9x - 2959.2$	0.659**	14.478
	PPR	$y = -1578.8x^2 + 588.79x - 22.946$	0.789**	27.961
灌浆期 Filling stage	GI	$y = 44.164x^{-2.043}$	0.544*	17.888
	RVI-2	$y = 0.0092e^{6.3811x}$	0.577**	21.841

注 (Note): *— $P < 0.05$, **— $P < 0.01$.

验 2017 年的大田试验数据, 对表 2 和 2.4 中优选的光谱指数建立的回归模型进行测试和检验, 以 R^2 、均方根误差 (RMSE) 和相对误差 (MRE) 3 个指标来综合考察模型的表现, 验证集的预测值与实测值线性回归的 R^2 较高、RMSE 和 MRE 均较低的模型为最佳模型, 此模型具有较好的稳定性和可重复性。结果 (表 3) 表明, 对于土壤无机氮含量的估测, 4 个生育时期最佳模型的光谱指数分别为 RVI-2、RSI (534, 726)、RSI (567, 519) 和 RVI-2。

2.6 偏最小二乘法回归模型的构建与验证

利用 2018 年定位试验数据建立偏最小二乘回归模型, 采用 2017 年的大田试验数据进行模型的验证。PLSR 模型的构建采用留一交叉验证法来确定最佳因子数 (主成分个数)^[34], 即交叉验证均方根误差最小时对应的因子数。4 个生育时期选取的最佳因子数分别为 5、3、13 和 9 (表 4)。由表 4 可知, 前 3 个生

育期建立的 PLSR 模型 RPD 均大于 2, 说明模型有很好的稳定性, 且能较好地预测土壤无机氮含量。灌浆期的 PLSR 模型验证集的 RPD < 1.4, 该模型不能预测土壤无机氮含量。

3 讨论

3.1 土壤无机氮含量的变化

土壤无机氮含量能够反映土壤的氮供应水平, 植物能够吸收利用的氮素主要是无机氮 (铵态氮和硝态氮), 其与植物体内的氮素状况密切相关, 本试验条件下, 施用氮肥能够显著提高土壤无机氮的含量, 这与吴科生等^[35]的研究结果一致。在本试验 0~300 kg/hm² 施氮量条件下, 不同生育时期 (除灌浆期) 的土壤无机氮含量随着氮肥增施呈现先增加后保持平稳的趋势。本试验条件下, 前 3 个生育期 N4、N5 处理之间差异不显著是施肥的原因, N5 处理比

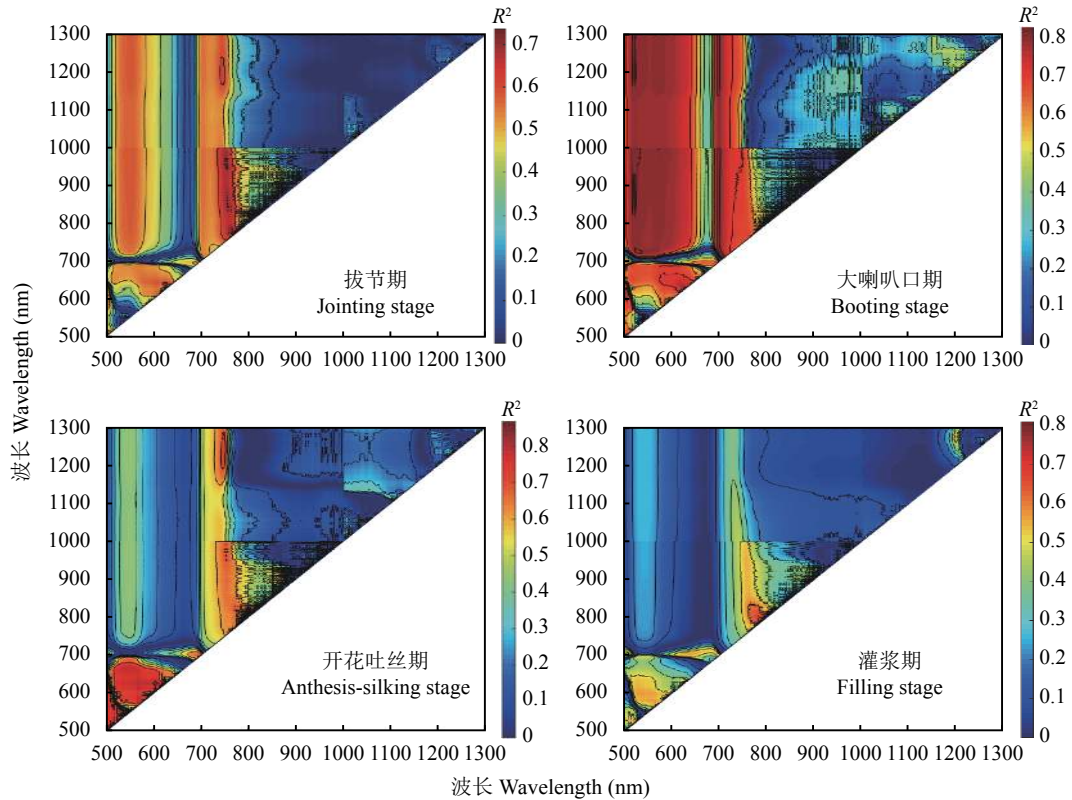


图3 土壤无机氮含量与RSI线性拟合的决定系数(R^2)的等值线图

Fig. 3 A contour map of the coefficient of determination (R^2) between soil inorganic nitrogen content and RSI

表3 优选光谱指数预测模型精度检验

Table 3 Accuracy of the models for predicting soil inorganic nitrogen content

生育期 Growth stage	光谱指数 Spectral index	预测模型 Prediction model	R^2	RMSE	MRE (%)
拔节期 Jointing stage	RVI-2	$y = -1042x^2 + 2419.1x - 1375.1$	0.642	2.654	14.612
	RSI (767, 788)	$y = -1811.6x + 1833.3$	0.519	3.076	15.151
大喇叭口期 Booting stage	RVI-2	$y = -975.63x^2 + 2275.1x - 1301.1$	0.656	1.933	8.978
	RSI (534, 726)	$y = -94.34x + 58.594$	0.749	1.651	6.453
开花吐丝期 Anthesis-silking stage	GI	$y = 5006.2e^{-3.487x}$	0.625	4.33	24.783
	RSI (567, 519)	$y = -330.16x + 409.98$	0.696	3.896	19.711
灌浆期 Filling stage	RVI-2	$y = 0.0092e^{6.3811x}$	0.540	4.754	27.276
	RSI (802, 816)	$y = -7207.6x + 7219.6$	0.369	5.568	30.258

注 (Note) : RMSE—均方根误差 Root mean square error; MRE—平均相对误差 Mean relative error

N4 处理超出的 60 kg/hm^2 氮素是在开花吐丝期取样后施入土壤中, 所以, 灌浆期 N5 处理的土壤无机氮含量显著高于 N4 处理。在整个生育期中, 土壤无机氮含量随玉米生长呈现递减的趋势, 而在开花吐丝期施氮处理的土壤无机氮含量相比之前有所增加, 这是由于大喇叭口期取样后进行了追肥。施氮显著提高土壤无机氮含量, 而过量施用氮素作物不能全部吸收, 而会流失到环境中造成污染。

3.2 叶片光谱反射率与土壤无机氮含量的关系

叶片作为植物生长发育主要的营养器官, 含氮量是玉米各器官中最高的。养分供应变化在叶片上的反映比较明显, 叶片分析是营养诊断中最易做到标准化的定量手段^[36]。叶片氮含量的变化最能反映出作物氮素营养状况, 所以本研究的光谱测定对象是叶片。薛利红等^[17]的研究结果表明, 土壤速效氮含量在整个水稻生育期内均与可见光波段反射率呈负相

表 4 不同生育期土壤无机氮含量的 PLSR 模型
Table 4 PLSR model for soil inorganic nitrogen content in four growth stages

生育期 Growth stage	最佳因子数 Optimum factor	建模集 Calibration dataset ($n = 18$)		验证集 Validation dataset ($n = 18$)		
		R^2	RMSE	R^2	RMSE	RPD
拔节期 Jointing stage	5	0.729	1.738	0.876	1.561	2.140
大喇叭口期 Booting stage	3	0.805	1.455	0.838	1.592	2.077
开花吐丝期 Anthesis-silking stage	13	0.768	3.303	0.765	3.427	2.002
灌浆期 Filling stage	9	0.529	4.678	0.595	4.460	1.369

注 (Note): RMSE—均方根误差 Root mean square error; RPD—标准差与均方根误差的比值 Ratio of performance to deviation.

关, 与近红外波段反射率呈正相关。本试验结果与其相似, 在拔节期和开花吐丝期土壤无机氮含量与叶片光谱反射率在可见光波段呈负相关, 在近红外波段呈正相关关系。谢福来等^[15]研究表明, 土壤全氮含量与小麦冠层光谱反射率在可见光波段呈正相关关系, 在近红外波段呈负相关关系, 本研究结果与其正好相反。这可能是由于作物种类不同、考察的土壤养分指标也不同, 本试验的研究对象是玉米, 光谱测定部位是叶片, 分析的土壤指标是土壤无机氮含量, 而谢福来等^[15]研究的对象是小麦, 光谱测定部位是冠层, 分析的土壤指标是土壤全氮含量。

玉米的生理代谢过程在各生育期存在差异, 导致不同生育期叶片对光谱的敏感程度和敏感波段也是不断变化的。由图 2 可知, 不同生育时期玉米叶片光谱反射率与土壤无机氮含量的相关关系存在差异, 比较不同生育时期两者的相关系数, 在可见光波段, 大喇叭口期两者的相关性较强。整体分析图 3 也发现, 大喇叭口期的土壤无机氮含量与比值光谱指数敏感范围较大。这说明土壤无机氮含量在玉米大喇叭口期的光谱敏感性强于其他生育期。王磊等^[2]研究表明, 大喇叭口期是玉米叶片氮素营养光谱响应的敏感期。本试验条件下, 在大喇叭口期, 土壤无机氮含量对叶片光谱响应较为敏感, 这是由于大喇叭口期是玉米吸收养分的关键时期, 对养分的需求量较大, 当土壤氮素供应不足时, 叶片内生化物质变化使其光谱响应较为敏感。

3.3 预测模型的建立

绿色健康叶片的光谱反射率在短波红外区 (1300~2500 nm) 有 2 个吸收谷, 即 1450、1950 nm 附近的水分吸收带, 会影响氮素的吸收特征。由 2.2 的分析结果可知, 叶片光谱反射率与土壤无机氮含量在 500~1300 nm 波段的相关性较强, 所以本研

究主要考察 500~1300 nm 波段高光谱对土壤无机氮含量的估算效果。Inoue 等^[30]分析比较多种建模方法反演水稻氮素水平的能力, 包括利用构建的归一化光谱指数 (NDSI)、比值光谱指数 (RSI) 和多元回归 (PLSR) 统计方法建立回归, 发现构建的比值光谱指数 RSI (D740, D522) 对氮素的估算是最准确和稳健的。本研究通过已研究的光谱参数和构建的比值光谱指数与土壤无机氮含量建立线性和非线性回归, 选取的最佳光谱指数均为比值光谱指数。Wang 等^[10]研究的 RVI-2 (R_{822}/R_{738}) 可以作为小麦和水稻氮素诊断共同的光谱指数。而本试验条件下, 拔节期和灌浆期的最佳光谱指数也是 RVI-2, 由这两个生育时期的比值光谱指数等值线图 (图 3) 也可以看出 R_{822}/R_{738} 线性回归的 R^2 较大 (红)。

偏最小二乘回归 (PLSR) 融合主成分分析、多元线性回归分析和典型相关分析的特点, 是一种功能强大的多元数据分析方法。与普通最小二乘回归的主要区别在于, 它在回归建模过程中采用了数据降维、信息综合与筛选技术、提取对系统最佳解释能力的新综合成分^[24]。由于光谱仪输出时对光谱数据进行以 1 nm 为间隔重采样, 这使得原始光谱曲线中相邻波段之间存在信息重合, 光谱数据冗余。为减小数据量, 尤其是去除冗余信息, 本研究在保留尽量多的光谱信息并维持光谱原有基本特征前提下, 利用 MATLAB 先将数据进行预处理, 每间隔 10 nm 连续波长做一次平均提取光谱反射率以减少光谱维度^[2]。通过光谱参数和偏最小二乘回归建立土壤无机氮含量的预测模型并进行精度检验, 结果表明, 利用叶片光谱反射率来诊断土壤氮素含量具有一定的可行性, PLSR 预测模型精度大于光谱参数 (RMSE 较小), 前 3 个生育时期利用 PLSR 建立的回归模型对土壤无机氮含量均具有很好的预测能力 ($RPD > 2$), 模型还有待于进一步在其他生产区域验证和改善。

4 结论

以夏玉米为研究对象, 通过两年的田间试验, 较为系统地探究叶片光谱数据与土壤无机氮含量的关系。随着生育期的推移, 土壤无机氮含量呈递减趋势, 追肥增加土壤无机氮含量, 随着氮肥增施, 土壤无机氮含量呈先增加后保持平稳的变化趋势。拔节期和开花吐丝期叶片光谱反射率与土壤无机氮含量在可见光波段呈负相关关系, 在近红外波段呈正相关关系, 大喇叭口期两者在可见光波段呈负相关关系, 灌浆期两者在整个波段无明显相关关系。在光谱参数估算模型中, 在 4 个生育期对土壤无机氮含量预测最佳的光谱指数分别为 RVI-2、RSI (534, 726)、RSI (567, 519) 和 RVI-2。相比较而言, 利用 PLSR 建立的估算模型较好, 在玉米拔节期、大喇叭口期和开花吐丝期均能很好地估测土壤无机氮含量。

参考文献:

- [1] 胡春胜, 秦树平, 张玉铭, 等. 华北平原农田生态系统氮素过程及其环境效应研究[J]. 中国生态农业学报, 2018, 26(10): 1501–1514.
Hu C S, Qin S P, Zhang Y M, *et al.* Nitrogen processes and related environmental effects on agro-ecosystem in the North China Plain[J]. Chinese Journal of Eco-Agriculture, 2018, 26(10): 1501–1514.
- [2] 王磊, 白由路, 卢艳丽, 等. 基于光谱分析的玉米氮素营养诊断[J]. 植物营养与肥料学报, 2011, 17(2): 333–340.
Wang L, Bai Y L, Lu Y L, *et al.* Nitrogen nutrition diagnosis for corn based on spectral analysis[J]. Journal of Plant Nutrition and Fertilizers, 2011, 17(2): 333–340.
- [3] Xu X G, Zhao C J, Wang J H, *et al.* Using optimal combination method and in situ hyperspectral measurements to estimate leaf nitrogen concentration in barley[J]. Precision Agriculture, 2014, 15(2): 227–240.
- [4] 李岚涛, 马驿, 魏全全, 等. 基于高光谱的冬油菜植株氮素积累量监测模型[J]. 农业工程学报, 2015, 31(20): 147–156.
Li L T, Ma Y, Wei Q Q, *et al.* Monitoring models of plant N accumulation of winter oilseed rape based on hyperspectral technology[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2015, 31(20): 147–156.
- [5] 郭超凡, 段福洲, 郭道宇, 等. 基于最佳波段判别的湿地植物叶片全氮反演研究[J]. 生态学报, 2014, 34(17): 4839–4849.
Guo C F, Duan F Z, Guo X Y, *et al.* Estimating wetland plant leaf total nitrogen content based on optimal bands of reflectance from wetland vegetation[J]. Acta Ecologica Sinica, 2014, 34(17): 4839–4849.
- [6] 张潇元, 张立福, 张霞, 等. 不同光谱植被指数反演冬小麦叶氮含量的敏感性研究[J]. 中国农业科学, 2017, 50(3): 474–485.
Zhang X Y, Zhang L F, Zhang X, *et al.* Sensitivity of different spectral vegetation index for estimating winter wheat leaf nitrogen[J]. Scientia Agricultura Sinica, 2017, 50(3): 474–485.
- [7] Rajeev R, Usha K C, Rabi N S, *et al.* Assessment of plant nitrogen stress in wheat (*Triticum aestivum* L.) through hyperspectral indices[J]. International Journal of Remote Sensing, 2012, 33(20): 6342–6360.
- [8] Inoue Y, Guérif M, Baret F, *et al.* Simple and robust methods for remote sensing of canopy chlorophyll content: a comparative analysis of hyperspectral data for different types of vegetation[J]. Plant, Cell & Environment, 2016, 39(12): 2609–2623.
- [9] 王仁红, 宋晓宇, 李振海, 等. 基于高光谱的冬小麦氮素营养指数估测[J]. 农业工程学报, 2014, 30(19): 191–198.
Wang R H, Song X Y, Li Z H, *et al.* Estimation of winter wheat nitrogen nutrition index using hyperspectral remote sensing[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2014, 30(19): 191–198.
- [10] Wang W, Yao X, Tian Y C, *et al.* Common spectral bands and optimum vegetation indices for monitoring leaf nitrogen accumulation in rice and wheat[J]. Journal of Integrative Agriculture, 2012, 11(12): 2001–2012.
- [11] 王纪华, 黄文江, 劳彩莲, 等. 运用 PLS 算法由小麦冠层反射光谱反演氮素垂直分布[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(7): 1319–1322.
Wang J H, Huang W J, Lao C L, *et al.* Inversion of winter wheat foliage vertical distribution based on canopy reflected spectrum by partial least squares regression method[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(7): 1319–1322.
- [12] Kira O, Linker R, Gitelson A. Non-destructive estimation of foliar chlorophyll and carotenoid contents: Focus on informative spectral bands[J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2015, 38: 251–260.
- [13] Liang L, Di L, Zhang L, *et al.* Estimation of crop LAI using hyperspectral vegetation indices and a hybrid inversion method[J]. Remote Sensing of Environment, 2015, 165: 123–134.
- [14] 刘颖, 李志洪. 利用数字图像技术进行玉米氮素营养诊断的研究[J]. 玉米科学, 2010, 18(4): 147–149.
Liu Y, Li Z H. Study on the N status diagnosis through digital image analysis method[J]. Journal of Maize Sciences, 2010, 18(4): 147–149.
- [15] 谢福来, 史晓芳, 史忠良. 利用高光谱技术估测小麦叶片氮量和土壤供氮水平[J]. 农学学报, 2016, 6(4): 7–15.
Xie F L, Shi X F, Shi Z L. Estimation of nitrogen content in wheat leaf and nitrogen supply capacity of soil by hyperspectral reflectance[J]. Journal of Agriculture, 2016, 6(4): 7–15.
- [16] 李广信, 王超, 冯美臣, 等. 冬小麦冠层光谱与土壤供氮状况相关性研究[J]. 农业机械学报, 2017, 48(5): 275–281.
Li G X, Wang C, Feng M C, *et al.* Correlation between soil nitrogen situation and canopy spectra of winter wheat[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017, 48(5): 275–281.
- [17] 薛利红, 卢萍, 杨林章, 等. 利用水稻冠层光谱特征诊断土壤氮素营养状况[J]. 植物生态学报, 2006, 30(4): 675–681.
Xue L H, Lu P, Yang L Z, *et al.* Estimation of soil nitrogen status with canopy reflectance spectra in rice[J]. Journal of Plant Ecology, 2006, 30(4): 675–681.
- [18] 潘文超, 李少昆, 王克如, 等. 基于棉花冠层光谱的土壤氮素监测研究[J]. 棉花学报, 2010, 22(1): 70–76.
Pan W C, Li S K, Wang K R, *et al.* Monitoring soil nitrogen and

- plant nitrogen based on hyperspectral of cotton canopy[J]. *Cotton Science*, 2010, 22(1): 70–76.
- [19] 金继运, 自由路, 杨俐苹. 高效土壤养分测试技术与设备[M]. 北京: 中国农业出版社, 2006.
- Jin J Y, Bai Y L, Yang L P. High efficiency soil nutrient testing technology and equipment[M]. Beijing: China Agricultural Press, 2006.
- [20] 刘小军, 田永超, 姚霞, 等. 基于高光谱的水稻叶片含水量监测研究[J]. *中国农业科学*, 2012, 45(3): 435–442.
- Liu X Q, Tian Y C, Yao X, *et al.* Monitoring leaf water content based on hyperspectra in rice[J]. *Scientia Agricultura Sinica*, 2012, 45(3): 435–442.
- [21] Gutierrezrodriguez M, Escalanteestrada J A, Rodriguezgonzalez M T, *et al.* Canopy reflectance and yield in common bean plants (*Phaseolus vulgaris* L.). II. Effect of phosphorus[J]. *Annual Report*, 2003, 46: 103–104.
- [22] Smith R, Adams J, Stephens D J, *et al.* Forecasting wheat yield in a mediterranean-type environment from the NOAA satellite[J]. *Australian Journal of Agricultural Research*, 1995, 46(1): 113–125.
- [23] Sims D A, Gamon J A. Relationships between leaf pigment content and spectral reflectance across a wide range of species, leaf structures and developmental stages[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2002, 81(2): 337–354.
- [24] 浦瑞良, 宫鹏. 高光谱遥感及其应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 2000.
- Pu R L, Gong P. Hyperspectral remote sensing and its applications[M]. Beijing: Higher Education Press, 2000.
- [25] Kim Y, Glenn D M, Park J, *et al.* Hyperspectral image analysis for water stress detection of apple trees[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2011, 77(2): 155–160.
- [26] Rondeaux G, Steven M, Baret F. Optimization of soil-adjusted vegetation indices[J]. *Remote Sensing of Environment*, 1996, 55(2): 95–107.
- [27] Zhu Y, Yao X, Tian Y C, *et al.* Analysis of common canopy vegetation indices for indicating leaf nitrogen accumulations in wheat and rice[J]. *International Journal of Applied Earth Observation & Geoinformation*, 2008, 10(1): 1–10.
- [28] Rouse J W, Haas R H, Schell J A, *et al.* Monitoring the vernal advancement and retrogradation (green wave effect) of natural vegetation[R]. NASA Special Publication, 1974: 351–309.
- [29] Metternicht G. Vegetation indices derived from high-resolution airborne video graphy for precision crop management[J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2003, 24(14): 2855–2877.
- [30] Inoue Y, Sakaiya E, Zhu Y, *et al.* Diagnostic mapping of canopy nitrogen content in rice based on hyperspectral measurements[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2012, 126: 210–221.
- [31] 刘雪梅, 柳建设. 基于 LS-SVM 建模方法近红外光谱检测土壤速效 N 和速效 K 的研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(11): 3019–3023.
- Liu X M, Liu J S. Based on the LS-SVM modeling method determination of soil available N and available K by using near-infrared spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(11): 3019–3023.
- [32] Li L T, Jákli B, Lu P P, *et al.* Assessing leaf nitrogen concentration of winter oilseed rape with canopy hyperspectral technique considering a non-uniform vertical nitrogen distribution[J]. *Industrial Crops and Products*, 2018, 116: 1–14.
- [33] 于雷, 洪永胜, 周勇, 等. 高光谱估算土壤有机质含量的波长变量筛选方法[J]. *农业工程学报*, 2016, 32(13): 95–102.
- Yu L, Hong Y S, Zhou Y, *et al.* Wavelength variable selection methods for estimation of soil organic matter content using hyperspectral technique[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2016, 32(13): 95–102.
- [34] 李岚涛, 任涛, 汪善勤, 等. 基于角果期高光谱的冬油菜产量预测模型研究[J]. *农业机械学报*, 2017, 48(3): 221–229.
- Li L T, Ren T, Wang S Q, *et al.* Prediction models of winter oilseed rape yield based on hyperspectral data at pod-filling stage[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2017, 48(3): 221–229.
- [35] 吴科生, 宋尚有, 李隆, 等. 施氮和豌豆/玉米间作对土壤无机氮时空分布的影响[J]. *中国生态农业学报*, 2014, 22(12): 1397–1404.
- Wu K S, Song S Y, Li L, *et al.* Effects of nitrogen application and intercropping on spatial-temporal distribution of soil inorganic nitrogen in pea/maize intercropping field[J]. *Chinese Journal of Eco-Agriculture*, 2014, 22(12): 1397–1404.
- [36] 唐菁, 杨承栋, 康红梅. 植物营养诊断方法研究进展[J]. *世界林业研究*, 2005, (6): 45–48.
- Tang J, Yang C D, Kang H M. Advances in methods of nutrition diagnosis for plants[J]. *World Forestry Research*, 2005, (6): 45–48.