

DOI: 10.13758/j.cnki.tr.2023.06.023

秦文虎, 董凯月, 邓志超. 基于 1D-CNN 的土壤全氮近红外光谱预测模型. 土壤, 2023, 55(6): 1347–1353.

## 基于 1D-CNN 的土壤全氮近红外光谱预测模型<sup>①</sup>

秦文虎, 董凯月, 邓志超

(东南大学仪器科学与工程学院, 南京 210096)

**摘要:** 于江苏无锡采集 410 个土壤样品测定土壤全氮含量, 并在室内进行土壤样品光谱检测, 用均值中心化、标准正态变换和趋势校正对光谱进行预处理, 再运用偏最小二乘回归(PLS)、反向传播(BP)神经网络和一维卷积神经网络(1D-CNN)方法建立土壤全氮含量的回归预测模型。同时, 每种模型在采用不同预处理方法的数据集上做十折交叉验证, 记录预测模型的决定系数( $R^2$ )和均方根误差(RMSE)的平均值, 对比 3 种预处理方法对模型精度的影响。结果表明: 本研究基于土壤近红外光谱数据构建的 1D-CNN 模型预测土壤全氮含量结果可靠。使用原始数据与经均值中心化、标准正态变换、趋势校正预处理的数据训练得到的 1D-CNN 模型的  $R^2$  分别为 0.907、0.931、0.922、0.964, 而 PLS 模型  $R^2$  分别为 0.856、0.863、0.861、0.880, BP 神经网络模型的  $R^2$  分别为 0.874、0.907、0.901、0.911。1D-CNN 模型在原始数据和经预处理的光谱数据上的表现均优于 PLS 和 BP 神经网络模型, 对光谱数据进行预处理能够有效提高 1D-CNN 模型的性能, 尤其是趋势校正对模型的提升效果最明显。因此, 1D-CNN 能更好地提取光谱特征并建立其与含氮量的映射关系, 有效地避免过拟合, 在未经过预处理的光谱数据上依然能够达到一定的精度。

**关键词:** 近红外光谱; 全氮含量; 光谱预处理; 1D-CNN

**中图分类号:** S153; S123 **文献标志码:** A

### Near-infrared Spectral Prediction Model of Soil Total Nitrogen Based on 1D-CNN

QIN Wenhua, DONG Kaiyue, DENG Zhichao

(School of Instrument Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China)

**Abstract:** A total of 410 soil samples were collected in Wuxi, Jiangsu, China, and total nitrogen contents and soil sample spectra were analyzed indoors. The spectral data underwent preprocessing, including mean centering, standard normal variate transformation, and trend correction. Regression prediction models for soil total nitrogen content were established using partial least squares (PLS), back propagation (BP) neural networks, and one-dimensional convolutional neural networks (1D-CNN). Each model underwent ten-fold cross-validation using datasets preprocessed with various methods, and the average values of the coefficient of determination ( $R^2$ ) and root mean square error (RMSE) were recorded to compare the impact of these three preprocessing methods on model accuracy. The results demonstrated the reliability of the 1D-CNN model constructed based on soil near-infrared spectral data. The  $R^2$  values for the 1D-CNN model trained with raw data and data preprocessed with mean centering, standard normal variate transformation, and trend correction were 0.907, 0.931, 0.922, and 0.964, respectively. In comparison, the  $R^2$  values for the PLS model were 0.856, 0.863, 0.861, and 0.880, while the BP neural network model's  $R^2$  values were 0.874, 0.907, 0.901, and 0.911. The 1D-CNN model consistently outperformed the PLS and BP neural network models on both raw and preprocessed spectral data. Preprocessing the spectral data effectively enhanced the 1D-CNN model's performance, with trend correction demonstrating the most substantial improvement. Hence, 1D-CNN is adept at extracting spectral features and establishing a robust mapping relationship with nitrogen content, effectively preventing overfitting. Even with unprocessed spectral data, it still achieves a commendable level of accuracy.

**Key words:** Near infrared spectroscopy; Total nitrogen content; Spectral pre-processing; 1D-CNN

传统获取土壤养分信息的化学分析法操作复杂、经济成本高、实时性差, 且化学法所用到的试剂具有腐蚀性, 不仅对人体有害, 还污染环境<sup>[1]</sup>。而近红外光谱分析法根据物质在近红外波段的光谱特征来实

①基金项目: 江苏省重点研发计划项目(BE2019311)资助。

作者简介: 秦文虎(1969—), 男, 江苏靖江人, 博士, 教授, 研究方向为智能感知技术。E-mail: qinwenhu@seu.edu.cn

时快速测量土壤养分信息,能够快速测绘田间养分全息图<sup>[2]</sup>。近年来,近红外光谱分析技术发展迅速,在土壤氮含量检测方面取得了广泛关注<sup>[3]</sup>。利用近红外光谱分析技术获取土壤成分信息具有检测速度快、操作简单、可原位检测、无环境污染等优点<sup>[4-5]</sup>,已成为国内外学者研究的重点。

由于土壤是一种成分复杂的混合物,且光谱携带的信息量巨大,往往很难通过单个波长特征来预测土壤氮含量。国内外很多学者通过选用合适的特征提取算法来获取与土壤养分相关的特定光谱数据,以此建立敏感波长与土壤养分含量之间的映射关系,提高了土壤养分预测模型的精度。周鹏等<sup>[6]</sup>采用灰度关联法得到土壤全氮含量的敏感波长分别是 1 007、1 128、1 360、1 596、1 696、1 836、2 149、2 262 nm。Wang 等<sup>[7]</sup>研究表明,车载全氮含量预测系统在 945、1 045、1 200、1 300、1 450、1 535 和 1 615 nm 7 个敏感波长的近红外光谱反射率与土壤全氮含量高度相关。王昶等<sup>[8]</sup>使用偏最小二乘法(PLS)提取光谱数据中的特征波段及其线性组合来构建全氮含量预测模型,该模型对全碳、全氮和碳氮比的预测取得了非常好的效果。PLS 方法是一种被广泛使用的线性回归方法,但是在自然界中,光谱与测量的土壤养分之间的关系很少是线性的。PLS 模型不能充分反映光谱与相应土壤特性之间复杂的非线性关系。李燕等<sup>[9]</sup>采用神经网络构建多组分预测模型,成功地将人工神经网络应用在多组分定量测量领域。Xu 等<sup>[10]</sup>基于中国余江地区稻田土壤的可见和近红外(Vis-NIR)光谱数据,发现反向传播(BP)神经网络模型能更好地解决土壤成分与光谱数据的非线性相关问题。但 BP 神经网络模型存在训练参数多,容易出现过拟合等问题。

近年来,基于卷积神经网络(CNN)的深度学习算法在图像数据处理方面取得了巨大进展。许多学者也将其适用范围扩展到了二维(2D)光谱数据。Padarian 等<sup>[11]</sup>研究表明,CNN 模型通过将土壤光谱数据作为输入预测含氮量,结果比传统的 PLS 回归模型表现更好。Ng 等<sup>[12]</sup>基于凯洛格土壤调查实验室(KSSL)数据库构建了 1D-CNN 模型,并将其与 2D-CNN 模型进行比较,以估算土壤特性(全碳、有机碳、CEC、黏粒、砂粒和 pH),结果表明 1D-CNN 模型比 2D-CNN 模型更有效。基于此,本研究应用 1D-CNN 模型基于近红外光谱数据对土壤全氮含量进行了预测,并比较了其与传统 PLS 和 BP 神经网络模型的差异,以筛选预测土壤全氮含量的最优模型,为建立利用近红外光谱预测土壤全氮含量的模型提供科学

依据,为实现土壤养分快速测定提供有效指导。

## 1 材料与方法

### 1.1 供试土壤

供试土壤样本采自江苏省无锡市世外源果蔬种植基地内的玉米田。玉米田占地约 139 亩(1 亩=667 m<sup>2</sup>),位于 120°13'E, 31°24'N,地势平坦、土壤肥力中等,土壤类型为褐土。

### 1.2 土壤样品采集与制备

采样前,根据地形、土质等因素在田间均匀布点,每个采样点间隔 15 ~ 20 m。采用 LUCAS 采样法<sup>[13]</sup>(图 1)采集土样,每个采样点土样由 5 个子采样点土壤组成。采样时,首先去除土壤表面的枯枝败叶、垃圾和石子,再在每个子采样点处用铲子挖 20 cm 深的“V”字形缺口,取一侧约 3 cm 厚度的土壤去除其中的杂质后作为样本。每个子采样点采集 100 g 土壤,混合均匀后共计 500 g 土壤装入一个取样袋,作为该采样点的土样。在整个试验田共采集 410 个土样。土样采用避光包装,统一编号后装入塑封袋密封带回实验室。

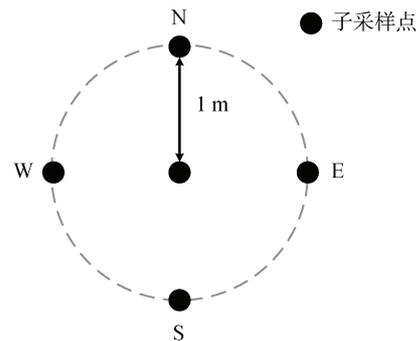


图 1 LUCAS 采样法

Fig. 1 LUCAS sampling method

### 1.3 土壤化学检测与光谱检测

将土壤风干、研磨、过筛后进行化学检测和光谱检测。其中,化学检测使用半微量凯氏法检测土壤全氮含量,供试土壤全氮特征参数如表 1 所示。光谱检测使用微型近红外光谱分析仪(NIR Quest 512 型,海洋光学公司,英国)检测土壤样品的反射率。在对每个样品进行光谱测量前,使用标准反射板对光谱仪进行定标校准,之后记录 3 次光谱反射率的均值作为样品的原始光谱数据。该光谱的测量范围为 900 ~ 2 500 nm,光谱采样间隔即波段宽为 3.25 nm,由此得到 534 维的光谱数据。为了去除边缘波长区域(2 401 ~ 2 500 nm)的噪声影响,本研究使用 900 ~ 2 040 nm 的光谱带,所以每个样品保留 350 维数据。

表 1 供试土壤全氮含量的特征参数( $n=410$ )

Table 1 Statistical parameters of soil total nitrogen

特征参数	参数值
样本总量	410
最小值 (g/kg)	0.870
最大值 (g/kg)	2.58
平均值 (g/kg)	1.67
标准差 (g/kg)	0.331

## 1.4 数据处理与建模

本研究对比了 1D-CNN 模型与 PLS、BP 神经网络模型的性能差别,并探究了不同光谱数据预处理方法对于模型性能的影响。所有模型均使用 Python 语言编写,选择 Tensorflow 作为后端的 Keras 深度学习框架,所有程序在配备 119 GB RAM 的 NVIDIA Geforce GTX1080Ti 显卡的 128 GB RAM 的 Linux 工作站(Ubuntu 20.04 LTS)上执行。

**1.4.1 光谱数据预处理** 将原始光谱分别经过趋势校正(DT)、标准正态变换(SNV)、均值中心化(CT)处理,以比较不同预处理方法对模型性能的影响。其中,DT 可以消除原光谱中的基线漂移<sup>[14]</sup>,减少由不同采样部位、不同批次等因素对近红外光谱曲线带来的影响而放大由目标成分引起的光谱差异<sup>[15]</sup>;SNV 用来减小颗粒大小不均匀和粒子表面非特异性散射的影响<sup>[16]</sup>;CT 用于消除光谱数据之间量纲的影响,

使不同数据之间具有可比性<sup>[17]</sup>。

**1.4.2 PLS 与 BP 神经网络模型构建** 本研究对 PLS 和 BP 神经网络模型参数做出了优化调整,以尽可能地提高两种传统模型的性能。经十折交叉验证将 PLS 模型的最优潜在变量数量确定为 8;BP 神经网络的学习率设为 0.01,目标误差设为 0.01,最大学习轮次设为 100。

**1.4.3 1D-CNN 模型构建** 本研究提出了一个 1D-CNN 架构,如图 2 所示,包括 5 个隐藏层(表 2):3 个卷积层(convolutional layer)、1 个展平层(flatten layer)、1 个全连接层(fully-connected layer)。1D-CNN 网络超参数如表 2 所示。隐藏层第一层为卷积核大小为  $8 \times 1$  的一维卷积层,该层在将通道数扩充到 16 的情况下感知较大尺度上的光谱特征;第二层为卷积核大小为  $4 \times 1$  的一维卷积层,该层将通道数扩充到 32 并感知中等尺度上的光谱特征;第三层为卷积核大小为  $1 \times 1$  的一维卷积层,该层再将通道数扩充 2 倍达到 64 通道,并感知最小尺度上的光谱特征;第四层将上一层的输出展平为一个向量,实现多维数据的一维化;第五层为全连接层,将上一层展平出的结果压缩为  $100 \times 1$  的一维向量。整个网络除最后一层的激活函数为 Linear 外,其余层都使用 ReLU 作为激活函数。设置该网络模型训练时的学习率为 0.1,学习轮次为 100 次。

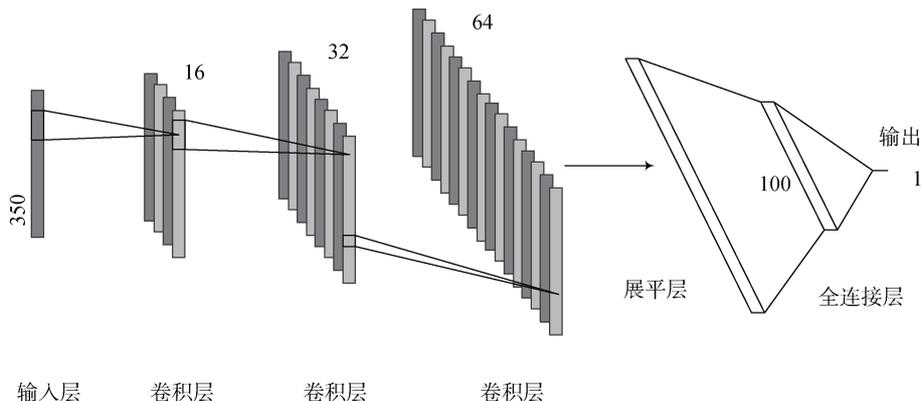


图 2 1D-CNN 网络结构图

Fig. 2 1D-CNN architecture

表 2 1D-CNN 网络超参数

Table 2 1D-CNN network hyperparameters

网络层	滤波器尺寸	滤波器个数	激活函数
全连接层	-	1	ReLU
卷积层	8	16	ReLU
卷积层	4	32	ReLU
卷积层	1	64	ReLU
展平层	-	-	-
全连接层	-	100	ReLU
全连接层	-	1	Linear

## 1.5 模型精度评价

本研究随机抽取 90% 的光谱数据作为训练集,剩余 10% 的光谱数据作为测试集。为了评估 PLS、BP 神经网络和 1D-CNN 模型的准确性,在训练数据集中进行了十折交叉验证。在这个过程中,训练数据被随机分成 10 份。每个模型建立在其中的 9 份数据上,然后将剩余的 1 份作为验证数据并计算误差;重复该过程,直到每一份数据都用作验证集。使用决定

系数( $R^2$ )、均方根误差(RMSE)评估模型的准确性。RMSE 用于衡量观测值与真实值之间的偏差,表示模型的稳定性,数值越小表示模型越稳定; $R^2$  用于评估预测值和真实值的符合程度,其值越接近 1,说明模型和真实值符合程度越高。 $R^2 > 0.90$  表明模型具有比较优秀的预测能力;  $0.82 < R^2 < 0.90$  表明模型预测能力一般;  $0.65 < R^2 < 0.82$  表明模型只能进行近似的粗略估计;  $R^2 < 0.65$  则说明模型不能成功预测。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (1)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (2)$$

式中:  $\hat{y}_i$  为预测值;  $y_i$  为观测值;  $\bar{y}$  为平均值。

## 2 结果与分析

表 3 从  $R^2$  和 RMSE 两个方面描述了在不同预处理方法下不同预测模型的性能表现。表中  $R^2$  和 RMSE 为各模型在训练集上做十折交叉验证的结果。从表 3 数据可以看出,本研究构建的 1D-CNN 模型在原始数据和经预处理的数据上表现出的性能均优于 PLS 和 BP 神经网络模型。在原始数据上,1D-CNN 模型

的  $R^2$  值为 0.907,明显高于 PLS 与 BP 神经网络模型的  $R^2$  值(0.856 和 0.874); 而 1D-CNN 模型的 RMSE 值为 0.117, 小于 PLSR 和 BP 神经网络模型的 0.148 和 0.135,体现了 1D-CNN 模型在原始数据上拥有较强的泛化能力。

基于 3 种预处理方法所构建的模型都有较高的精度。对于 1D-CNN 模型,数据预处理也为模型性能带来了显著提升,且比基于同样预处理方法的 PLS 和 BP 神经网络模型的表现更为优秀。此外,经过均值中心化、标准正态变换、趋势校正预处理后的数据构建的 PLS 模型的  $R^2$  值分别为 0.863、0.861、0.880, RMSE 值也明显降低,说明数据预处理也给 PLS 带来了明显的性能提升。而对于 BP 神经网络模型,经过不同的预处理方法得到的  $R^2$  都在 0.900 左右,说明数据预处理对 BP 神经网络模型性能的提升不如 PLS 模型。

图 3 是将测试集的光谱数据作为输入变量的 3 种预测模型经不同预处理方法得到的真实值与预测值的对比效果图。由图 3 可以看出,1D-CNN 模型预测土壤全氮含量的能力最好,被测点分布于 1:1 线附近。此外,相对于 PLS 和 BP 神经网络模型,1D-CNN 模型能够更好地拟合非常小的观察值(值接近于零),在全氮含量较低值处表现出了更好的预测能力。

表 3 不同数据处理方式下的模型参数  
Table 3 Model parameters under different processing methods

模型	原始数据		均值中心化		标准正态变换		趋势校正	
	RMSE	$R^2$	RMSE	$R^2$	RMSE	$R^2$	RMSE	$R^2$
PLS	0.148	0.856	0.144	0.863	0.130	0.861	0.113	0.880
BP	0.135	0.874	0.119	0.907	0.126	0.901	0.117	0.911
1D-CNN	0.117	0.907	0.0891	0.931	0.0910	0.922	0.0785	0.964

## 3 讨论

为了衡量 1D-CNN 模型准确性的增强能力,可以根据 RMSE 计算模型对土壤全氮含量预测的相对改进。在给定相同的光谱数据作为输入变量的情况下,与 PLS 模型相比,1D-CNN 模型实现的相对精度提高范围为 25.4%~42.2%;与 BP 神经网络模型相比,1D-CNN 模型实现的相对精度提高范围为 14.5%~39.2%。可见,本研究构建的 1D-CNN 模型网络结构相比于 PLS 和 BP 神经网络模型有明显的优势。Ng 等<sup>[12]</sup>所构建的 1D-CNN 模型对 KSSL 土壤数据库中的土壤养分含量预测相较于 PLS 模型提高了 41.8%,与本研究所建模型的估算结果一致。

本研究所构建的 1D-CNN 模型作为一种端对端的深度学习方法,无需预处理即可从原始光谱中自动提取线性和非线性特征,比传统方法具有更好的泛化性能<sup>[18]</sup>。在输入没有经过预处理的测试集中的原始光谱的情况下,得到的 1D-CNN 模型的  $R^2$  值为 0.917,表现出了较为优秀的预测能力,而传统的 PLS 模型和 BP 神经网络模型  $R^2$  均未超过 0.900。此外,高维和复杂的光谱数据不仅包含预期的目标信息,还包含大量冗余信息和无关噪声,会对模型的预测结果造成干扰,降低模型的准确性。通过对光谱数据进行预处理,可降低光谱中的噪声水平并消除斜率变化和基线偏移,从而提高光谱信号的分辨率和提高模型的准确性。在本研究中,经过均值中心化、标准正态变换和

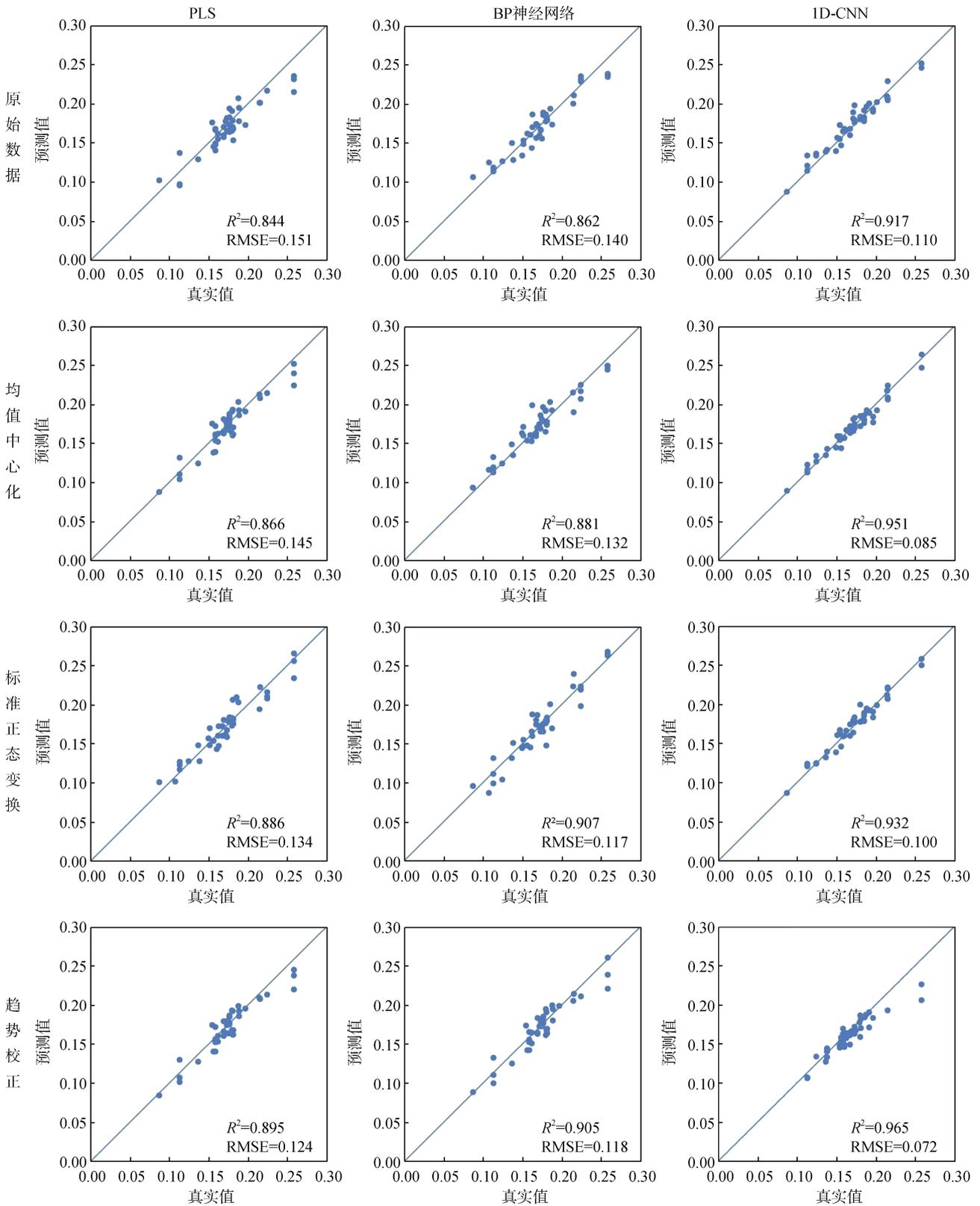


图 3 不同数据处理方式下的模型回归效果图

Fig. 3 Model regression effects under different processing methods

趋势校正 3 种预处理之后，PLS、BP 神经网络和 1D-CNN 模型测试得到  $R^2$  值均得到了提升，其中，趋势校正预处理方法对模型的改善效果最为明显，经

趋势校正方法处理过的模型  $R^2$  分别为 0.880、0.911 和 0.964。

研究表明，通过稀疏连接和权重共享策略使得

1D-CNN 模型学习原始光谱局部抽象特征的能力出色。而与 1D-CNN 模型相比, PLS 算法是提取光谱数据的潜在变量并构建具有最佳潜在变量数量的模型, 潜在变量减少了原始光谱的维度, 并捕获了土壤全氮含量和光谱之间的最大协方差<sup>[14]</sup>。但是提取最佳潜在变量而忽略其他次要特征变量会对模型的精度造成损失, 而 1D-CNN 模型则可以将整个光谱数据全部纳入考虑, 根据选用不同大小的卷积核来提取光谱不同尺度上的特征, 其不仅能处理光谱特征与土壤全氮含量的线性映射关系, 还能建立两者的非线性关系, 从而达到比 PLS 模型更高的精度。

在 Kuang 等<sup>[19]</sup>的研究中, 使用 BP 神经网络模型预测土壤有机碳、pH 和黏土含量的效果都优于 PLS 模型; 同样地, 在本研究中 BP 神经网络模型在交叉验证和独立验证过程中的表现都优于 PLS 模型, 预测误差均小于 PLS 模型, BP 神经网络模型相比于 PLS 模型实现的相对精度提高范围为 4.84% ~ 12.7%。相比于 PLS 模型, BP 神经网络模型作为一种前馈神经网络, 可以建立光谱特征与土壤全氮含量间的非线性映射关系, 每个隐藏节点的信息可以使用激活函数将非线性变量传输到下一层, 并通过对权重和偏差进行校正以减少测量值和真实值之间的误差。但是由于其各层以全连接的形式相连, 所以易出现过拟合的问题, 而 1D-CNN 模型可以通过添加池化层降低每个通道的特征维度来避免过拟合情况的出现, 也因此可以将网络设计得比 BP 神经网络更深, 从而提取出更多特征, 达到比 BP 神经网络更好的效果。

## 4 结论

本研究构建的 1D-CNN 模型在原始光谱数据上所训练的模型  $R^2$  值为 0.907, 在原始光谱数据经均值中心化、标准正态变换、趋势校正处理后所训练得到的模型  $R^2$  值分别为 0.931、0.922 和 0.964。1D-CNN 模型整体优于 PLS 和 BP 神经网络模型, 并且在近红外光谱数据分辨率为 3.25 nm 的低分辨率情况下依然能够优于 PLS 与 BP 神经网络模型的性能。总之, 1D-CNN 模型能更好地提取光谱特征并建立其与含氮量的映射关系, 在未经过预处理的光谱数据上依然能够达到一定的精度, 可为实现对土壤养分的快速测定提供指导。

## 参考文献:

[1] 张娟娟, 熊淑萍, 时雷, 等. 基于近红外光谱分析的土壤全氮含量估测研究[J]. 土壤, 2015, 47(4): 653-657.

- [2] Zhang Z P, Ding J L, Zhu C M, et al. Strategies for the efficient estimation of soil organic matter in salt-affected soils through Vis-NIR spectroscopy: Optimal band combination algorithm and spectral degradation[J]. *Geoderma*, 2021, 382: 114729.
- [3] 陈颂超, 冯来磊, 李硕, 等. 基于局部加权回归的土壤全氮含量可见-近红外光谱反演[J]. 土壤学报, 2015, 52(2): 312-320.
- [4] Viscarra Rossel R A, Cattle S R, Ortega A, et al. *In situ* measurements of soil colour, mineral composition and clay content by vis-NIR spectroscopy[J]. *Geoderma*, 2009, 150(3/4): 253-266.
- [5] 马赵扬, 杜昌文, 周健民, 等. 黄土的红外反射光谱与红外光声光谱特征及其差异研究[J]. 土壤, 2012, 44(5): 862-867.
- [6] 周鹏, 杨玮, 李民赞, 等. 基于灰度关联-极限学习机的土壤全氮预测[J]. 农业机械学报, 2017, 48(S1): 271-276.
- [7] Wang W C, Yang W, Zhou P, et al. Development and performance test of a vehicle-mounted total nitrogen content prediction system based on the fusion of near-infrared spectroscopy and image information[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2022, 192: 106613.
- [8] 王昶, 黄驰超, 余光辉, 等. 近红外光谱结合偏最小二乘法快速评估土壤质量[J]. 土壤学报, 2013, 50(5): 881-890.
- [9] 李燕, 孙秀云, 王俊德. 人工神经网络法测定五组分红外光谱体系[J]. 光谱学与光谱分析, 2000, 20(6): 773-776.
- [10] Xu S X, Zhao Y C, Wang M Y, et al. Comparison of multivariate methods for estimating selected soil properties from intact soil cores of paddy fields by Vis-NIR spectroscopy[J]. *Geoderma*, 2018, 310: 29-43.
- [11] Padarian J, Minasny B, McBratney A B. Using deep learning to predict soil properties from regional spectral data[J]. *Geoderma Regional*, 2019, 16: e00198.
- [12] Ng W, Minasny B, Montazerolghaem M, et al. Convolutional neural network for simultaneous prediction of several soil properties using visible/near-infrared, mid-infrared, and their combined spectra[J]. *Geoderma*, 2019, 352: 251-267.
- [13] Jones A, Fernandez-Ugalde O, Scarpa S. LUCAS 2015 Topsoil Survey. Presentation of dataset and results. JRC Technical Reports [R], EUR 30332 EN, 2020.
- [14] Luypaert J, Heurding S, Vander Heyden Y, et al. The effect of preprocessing methods in reducing interfering variability from near-infrared measurements of creams[J]. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2004, 36(3): 495-503.
- [15] 张进, 胡芸, 周罗雄, 等. 近红外光谱分析中的化学计量学算法研究新进展[J]. 分析测试学报, 2020, 39(10): 1196-1203.
- [16] 尼珍, 胡昌勤, 冯芳. 近红外光谱分析中光谱预处理方法的作用及其发展[J]. 药物分析杂志, 2008, 28(5): 824-829.

- [17] Buddenbaum H, Steffens M. The effects of spectral pretreatments on chemometric analyses of soil profiles using laboratory imaging spectroscopy[J]. *Applied and Environmental Soil Science*, 2012: 274903.
- [18] Haghri R K, Pérez-Fernández E, Robertson A H J. Prediction of various soil properties for a national spatial dataset of Scottish soils based on four different chemometric approaches: A comparison of near infrared and mid-infrared spectroscopy[J]. *Geoderma*, 2021, 396: 115071.
- [19] Kuang B Y, Tekin Y, Mouazen A M. Comparison between artificial neural network and partial least squares for on-line visible and near infrared spectroscopy measurement of soil organic carbon, pH and clay content[J]. *Soil and Tillage Research*, 2015, 146: 243–252.