

## 南京市土壤光谱信息系统的构建及应用<sup>①</sup>

邱聪智<sup>1,3</sup>, 马菲<sup>1</sup>, 陈文超<sup>2</sup>, 程月琴<sup>2</sup>, 徐生<sup>2</sup>, 周健民<sup>1</sup>, 杜昌文<sup>1,3\*</sup>

(1 土壤与农业可持续发展全国重点实验室(中国科学院南京土壤研究所), 南京 211135; 2 南京市耕地质量保护站, 南京 210000; 3 中国科学院大学现代农业科学学院, 北京 100049)

**摘要:** 现代农业生产中, 养分高效利用与耕地资源保护需要海量的土壤信息, 而传统的土壤检测方法效率低且成本高, 难以满足现代农业生产的需求。因此, 亟须快速高效获取土壤信息的技术与方法, 而现代光谱技术则为满足这一需求提供了新的方法手段。光谱技术能够快速获取土壤信息, 结合应用化学计量学方法和多元数据融合算法研发的自适应智能预测模型, 可实现土壤属性的快速评估。本研究采集了南京市典型农田土壤样本, 应用土壤中红外光谱(分子光谱)和激光诱导击穿光谱(原子光谱), 结合自适应模型, 构建了南京市土壤光谱信息系统, 在土壤数字化管理中表现出了广阔的应用潜力, 为现代农业可持续发展提供了新的技术支撑。

**关键词:** 土壤光谱; 衰减全反射; 激光诱导击穿; 土壤养分; 自适应模型; 信息系统

中图分类号: S151.9 文献标志码: A

### Construction and Application of Nanjing Soil Spectroscopic Information System

QIU Congzhi<sup>1,3</sup>, MA Fei<sup>1</sup>, CHEN Wenchao<sup>2</sup>, CHENG Yueqin<sup>2</sup>, XU Sheng<sup>2</sup>, ZHOU Jianmin<sup>1</sup>, DU Changwen<sup>1,3\*</sup>

(1 State Key Laboratory of Soil and Sustainable Agriculture, Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 211135, China; 2 Nanjing Cultivated Land Quality Protection Station, Nanjing 210000, China; 3 College of Modern Agricultural Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

**Abstract:** In modern agricultural production, the efficient utilization of nutrients and the protection of arable land resources require massive soil information, while traditional soil testing methods are inefficient and costly, failing to meet the demands of modern agricultural production. There is an urgent need for rapid and efficient acquisition of soil information technology and methods, and modern spectroscopy provides a new option to meet this demand. Spectroscopic sensing techniques can rapidly obtain soil information, adaptive intelligent prediction models were developed applying chemometric methods and multivariate data fusion algorithms, which enabled rapid assessment of soil properties. Typical farmland soil samples were collected in this study, and a soil spectral information system of Nanjing has been constructed through utilizing soil mid-infrared and laser induced breakdown spectral data and self-adaptive functional models, which demonstrated broad application potential in digital soil management, providing new technological support for the development of modern sustainable agriculture.

**Key words:** Soil spectra; Attenuated total reflection; Laser induced breakdown; Soil nutrients; Self-adaptive model; Information system

快速获取土壤信息对现代农业发展具有重要意义, 而传统的化学分析方法主要依靠实验室分析, 需要投入大量的人力与物力, 难以满足现代农业发展的需求。随着智慧农业和绿色农业的发展, 对土壤信息的时空需求日益增强, 我国也在土壤信息获取方面投入了大量的财力和物力, 如测土配方工程, 但依然难以满足海量土壤信息获取的需求, 迫切需要快速高效

的土壤信息传感新方法。

现代光谱技术的发展为土壤信息的快速传感提供了技术手段, 常见光谱主要有分子光谱和原子光谱。其中, 红外光谱为分子光谱, 土壤红外光分析可通过表征土壤中有有机官能团的振动特征来解析土壤的结构信息<sup>[1]</sup>; 激光诱导击穿光谱属于原子光谱, 土壤激光诱导击穿光谱分析可通过表征土壤中元素的

①基金项目: 国家重大农业科技项目 (20221805)资助。

\* 通信作者(chwdu@issas.ac.cn)

作者简介: 邱聪智 (1999—), 男, 广东云浮人, 硕士研究生, 主要研究方向为土壤光谱分析技术及应用。E-mail: qiucongzhi@issas.ac.cn

原子信息来解析土壤的组成信息<sup>[2]</sup>。利用土壤的特征光谱,结合化学计量学方法,能够快速、准确地进行土壤信息传感如土壤养分的获取。将光谱信息、模型算法和现代信息技术进行集成,构建土壤光谱信息系统,能够实现土壤信息的定量与定性分析,应用于宏观数字化土壤制图以及微观土壤组成与结构分析。与传统的测定手段相比,光谱传感基于物理学的分析技术,土壤光谱信息系统是光谱传感技术的应用工具,具有高效、无损、低成本等优势,能够实现大面积、实时快速监测,为数字化农业生产提供支撑。

鉴于土壤光谱的独特功能,联合国粮农组织(FAO)于 2021 年启动了全球土壤光谱行动计划,旨在推动光谱传感在土壤分析和环境保护中的应用,将极大地促进土壤光谱技术的研发、推广和应用,而土壤光谱信息系统的研发则将为该技术的推广和应用提供平台支撑。土壤光谱信息系统可对土壤光谱数据进行采集、存储、管理和分析等操作,进而提供相应的土壤属性信息以及施肥指导建议等,可应用于科研、农业生产及技术推广和环境监测等领域。由于南京市相关部门提供了代表性土壤样本及其背景数据,本研究以南京市农田土壤为案例,在阐述土壤光谱信息系统基本原理和技术框架(包括光谱方法和预测模型算法)的基础上,开展了土壤光谱信息系统在土壤养分评估中的应用,探讨了土壤光谱信息系统在实际应用中的机遇与挑战。

## 1 材料与方 法

### 1.1 土壤样本采集和理化性质测定

研究区域为江苏省南京市,地理坐标 31°14'N~32°37'N, 118°22'E~119°14'E(图 1),共采集农田表层(0~20 cm)土壤样本 1 456 个<sup>[3]</sup>。土壤样品在室温下自然风干,去除动植物残体,研磨过 2 mm 和 0.15 mm 筛备测。土壤 pH 以土水质量比为 1 : 2.5,使用 pH 计(pH-21, Sartorius, 德国)测定<sup>[4]</sup>。土壤有机质(SOM)采用重铬酸钾氧化滴定法测定<sup>[5]</sup>。土壤全氮(TN)采用凯氏法测定<sup>[6]</sup>。土壤有效磷(AP)采用碳酸氢钠溶液浸提<sup>[7]</sup>,取上清液调节 pH,加入钼锑抗显色剂,使用分光光度计(BioTek, 美国)在 700 nm 处比色<sup>[8]</sup>。土壤速效钾(AK)用乙酸铵浸提,使用 ICP-AES(Optima 8000, PerkinElmer, 美国)测定<sup>[9]</sup>。

### 1.2 土壤光谱采集与预处理

采用红外光谱仪 Nicolet 6700(Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, 美国)获取土壤中红外漫反射光谱和光声光谱,采用便携式衰减全反射红外光

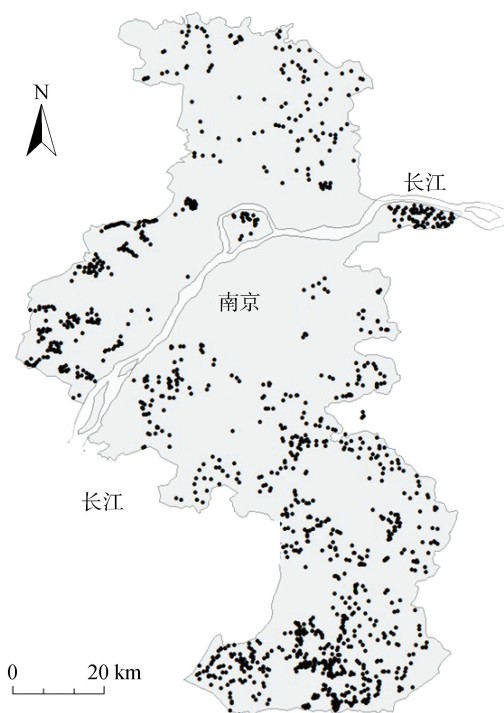


图 1 南京土壤采样点分布图

谱仪(Agilent 4300, Agilent Technologies Inc., 美国)测定土壤中红外衰减全反射光谱。光谱范围为 4 000~500  $\text{cm}^{-1}$ ,扫描次数设为 32,分辨率为 8  $\text{cm}^{-1}$ 。激光诱导击穿光谱(LIBS)测定前,使用全自动压片机(PP-30S, 中国天津)在 75 MPa 压强下持续运转 30 s,再称取 0.50 g 土壤样品压制成直径为 13 mm、厚度为 2.5 mm 的压片。然后,使用手持式 LIBS 光谱仪(Z-300, SciAps, 美国)测定土壤 LIBS 光谱,配备 1 064 nm 激光源,能量为 5~6 mJ,重复频率为 50 Hz,测定在 14 psi 的氩气吹扫下进行<sup>[10]</sup>。获取的原始光谱数据进行预处理(如去噪、平滑、基线校正、归一化和波长变量选择等),降低数据中的干扰和误差<sup>[11]</sup>。预处理后的光谱数据用于后续的预测模型构建。

### 1.3 自适应智能模型算法

常见的光谱预测模型算法有偏最小二乘法、人工神经网络法和随机森林法等。自适应模型算法是基于光谱相似性原理和偏最小二乘法结合的模型处理方法,能够有效提高预测精度<sup>[12]</sup>,其思路如图 2 所示。首先,建立土壤样本数据库,该数据库包含了土壤样本的理化属性和预处理后的光谱数据。对于新获取的未知样本,从已有的光谱库中通过光谱相似法,检索出一个或多个与待测样本最相似的样本,进行建模集的构建。常用的光谱相似算法主要有欧氏距离法、马氏距离法、系统聚类法、k-均值聚类法、相似系数法

和夹角余弦法等。本研究通过欧氏距离法进行光谱相似性选择<sup>[9,13]</sup>。

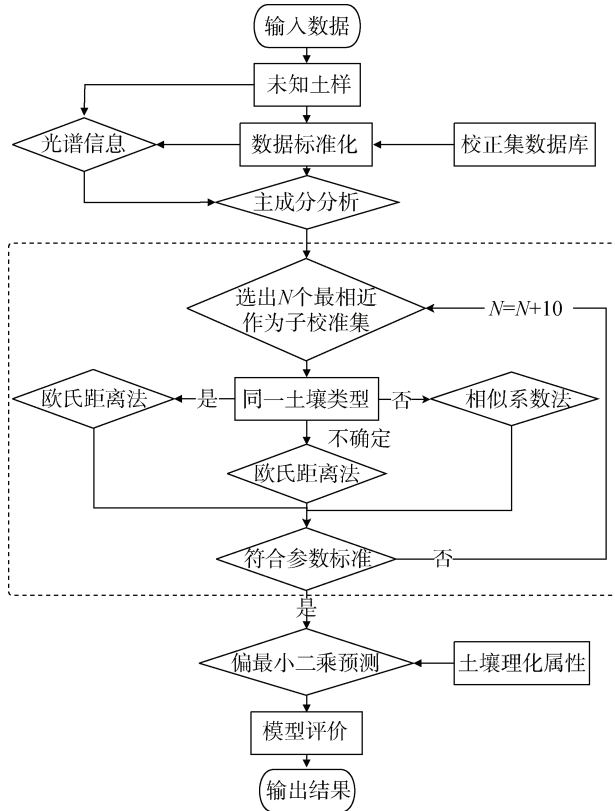


图 2 自适应算法流程图

## 2 结果与讨论

### 2.1 南京市农田土壤的光谱分析

图 3 为南京市典型农田土壤的傅里叶变换中红外漫反射光谱、衰减全反射光谱和光声光谱<sup>[9]</sup>。在 400~4 000  $\text{cm}^{-1}$ ，不同峰位表现出土壤中不同基团的分子振动特征，不同类型的中红外光谱反映的官能团特征又各有特点。中红外衰减全反射光谱显示，水和羧基和羟基中 O-H 产生的伸缩振动主要在 3 560  $\text{cm}^{-1}$  处，芳香族中 C=C 的伸缩振动在 1 640  $\text{cm}^{-1}$  处，硅酸盐和石英中 Si-O 的伸缩振动在 1 000  $\text{cm}^{-1}$  处，NH<sub>2</sub> 的平面外振动在 766  $\text{cm}^{-1}$  处。中红外漫反射光谱显示，水和羧基和羟基中 O-H 和 N-H 的伸缩振动的主要吸收峰在 3 560~3 100  $\text{cm}^{-1}$  的较宽范围内；脂肪族甲基和亚甲基中 C-H 的伸缩振动在 2 895  $\text{cm}^{-1}$  处；而 1 660  $\text{cm}^{-1}$  处的峰则是酰胺和芳香族中 C=C 和 C=O 的伸缩振动。中红外光声光谱显示，3 670  $\text{cm}^{-1}$  处的峰为于黏土矿物中 O-H 的伸缩振动；3 000  $\text{cm}^{-1}$  处的微弱峰对应于脂肪族甲基和亚甲基的 C-H 的伸缩振动；1 954  $\text{cm}^{-1}$  处的峰值对应于石英谐波；1 100  $\text{cm}^{-1}$  附近的峰对应于硅酸盐中 Si-O 的伸缩振

动以及多糖和核酸中 C-O 的伸缩振动<sup>[14-15]</sup>。

南京市农田土壤的 LIBS 光谱如图 4 所示。其中，波长为 193.1 nm 处的信号是 C 元素特征线；O 元素的特征波长分别为 533.1 nm 和 777.7 nm。N 元素的特征谱线为多条，主要分布在 343.7、819.3、938.6、946.0 nm 等处；K 元素的特征谱线主要位于 766.5 和 769.9 nm 处。Ca 元素也有多条特征谱线，主要分布在 393.3、422.7、445.5、487.8、558.9、586.1、616.2、646.2 和 854.2 nm 处；Mg 元素的特征谱线在 279.7、383.9 和 518.4 nm 处，而 S 元素的特征谱线在 912.2 和 922.8 nm 处<sup>[16]</sup>。

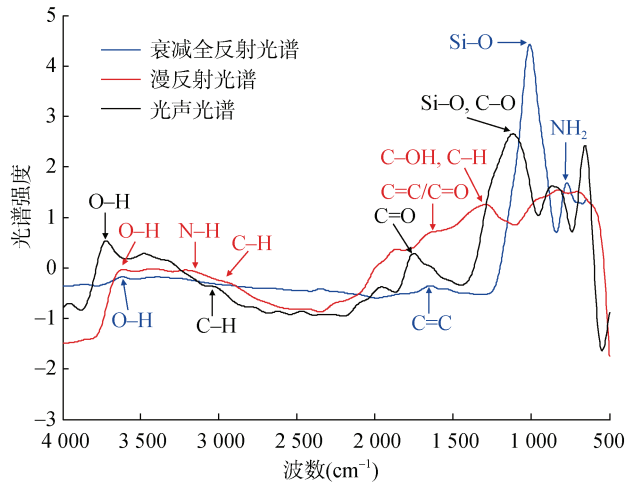


图 3 南京市农田土壤中红外漫反射光谱、衰减全反射光谱和光声光谱

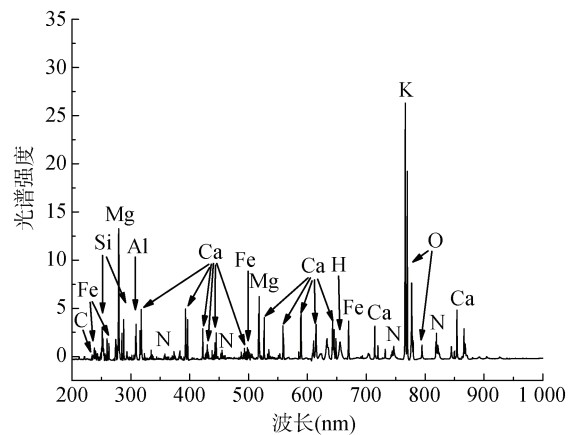


图 4 南京市农田土壤的激光诱导击穿光谱(LIBS)

### 2.2 自适应预测模型

采用南京市土壤中红外衰减全反射光谱数据，通过自适应模型算法，可实现南京市土壤样本中有机质含量的预测(图 5A)。该模型的决定系数( $R^2$ )为 0.929 3，相对预测偏差(RPD)为 3.18。与传统的偏最小二乘模型算法相比(图 5B)，其预测均方根误差(RMSEP)

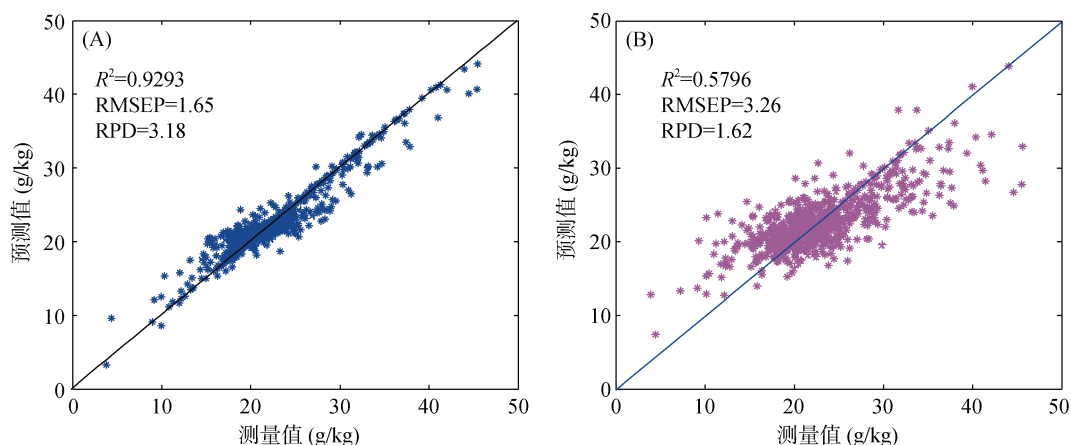


图 5 自适应模型算法(A)和传统偏最小二乘法 (B) 建模的预测结果比较

由 3.26 g/kg 下降至 1.65 g/kg, 自适应模型算法有效地提高了预测精度<sup>[17]</sup>。

### 2.3 土壤光谱信息系统构建

由于光谱数据的分析具有专业性和复杂性, 需要开发一个基于土壤数据库和土壤自适应算法的用户友好型系统, 为用户提供包括土壤养分监测、肥力评估以及施肥推荐服务。“南京市土壤光谱信息系统<sup>[18-19]</sup>”集成土壤中红外光谱信息(分子光谱信息)和激光诱导击穿光谱信息(原子光谱信息)的数据库模块、自适应模型算法模块以及测土配方施肥推荐模块。该系统包含单点位土壤属性查询、耕地田块理化属性分布地图绘制、土壤理化属性快速预测和测土配方施肥推荐等核心功能, 旨在通过土壤光谱分析技术和模型算法, 为农业管理精准施肥提供数据支撑。扫描二维码(图 6)即可进入“南京市土壤光谱信息系统”。



微信扫一扫, 使用小程序

图 6 南京市土壤光谱信息系统微信小程序二维码

土壤光谱信息系统小程序主要具有点位查询、地图绘制、样本预测和测土配方 4 大功能(图 7)。点位



图 7 南京市土壤光谱信息系统小程序主页面(左)和目标田块尺度有机质制图(右)

查询功能是根据管理者上传至云端数据库的土壤信息开发的, 通过地图选点或点位的经纬度信息, 可以快速查询所选点位的理化属性; 地图绘制功能是点位查询功能的扩展版, 可在地图上圈出目标田块, 实现目标田块的理化属性制图, 直观地获得田块尺度不同理化属性的变化特征; 样本预测功能是指将待测土壤样本的光谱数据通过信息系统客户端上传至云端, 通过云计算对土壤的理化属性进行预测; 测土配方功能是指根据目标田块土壤数据, 结合作物类型和目标产量, 并参考环境参数给用户快速高效施肥推荐。

### 2.4 土壤光谱信息系统在土壤分析与评价中的应用

土壤光谱分析作为一种无需复杂前处理、非破坏性的技术手段, 可有效表征土壤中的多种养分。通过

对光谱数据的分析,可以预测土壤的养分含量,包括土壤的有机质<sup>[20]</sup>、氮<sup>[21-23]</sup>、磷<sup>[24]</sup>和钾<sup>[25-26]</sup>,以及钙、镁、硫及微量养分元素等<sup>[27-28]</sup>,为精准施肥提供科学依据。激光诱导击穿光谱还能有效检测土壤中的铜、铅、镉和汞等重金属含量<sup>[29-33]</sup>。土壤光谱分析也能通过表征土壤中的有机污染物和微塑料含量<sup>[34-35]</sup>,为土壤修复和污染治理提供数据支撑。

与传统的实验室分析方法相比,土壤光谱技术将有效降低人力成本和时间成本,还可多源测定土壤的养分含量以及重金属污染状况等;同时土壤光谱信息系统可实现大面积区域快速测定,提高数据检测的高效性和多元性,具有广泛的应用前景。然而,光谱分析模型的精度受到土壤类型、气候条件等多种因素的影响,光谱数据和光谱模型需要不断优化和校正,这是土壤光谱信息系统面临的一大挑战。此外,不同光谱仪器和方法获取的光谱数据存在差异,而标准化水平较为欠缺,所获取的数据可比性不强。因此,在光谱技术应用中,应制定统一的光谱数据采集、处理和分析的相关标准,推动土壤光谱信息获取的标准化和规范化,提高数据的可靠性和可比性;在数据处理方面,还需要优化光谱模型算法,提高模型的准确性和稳定性,逐步促进该技术的推广和应用。未来农业的数字化水平将不断提升,需要进一步开发多源光谱传感技术,构建土壤大数据,应用深度学习和 AI 技术,实现多源数据融合应用,以提高耕地质量监测与评价的全面性和准确性,并与现代信息技术和农机装备相耦合,为未来智慧农业发展提供技术支撑。

### 3 结论

本研究采集了南京典型农田土壤样本,应用现代光谱近距传感技术,建立了土壤中红外光谱与激光诱导击穿光谱数据,研发了自适应智能预测模型,结合云技术,成功地构建了南京市土壤光谱信息系统,实现了对土壤养分与属性的快速、无损监测。系统具备点位查询、地图绘制、样本预测与测土配方等功能,显著提高了土壤信息获取的效率和精度,为精准农业和耕地数字化管理提供了有效工具。尽管在模型普适性、数据标准化等方面仍面临挑战,但该系统展现出良好的应用潜力,为农业绿色可持续高质量发展提供了技术支撑。

#### 参考文献:

[1] 杜昌文. 现代光谱技术在植物营养品质分析中的应用[J]. 植物营养与肥料学报, 2017, 23(6): 1659-1669.

- [2] 马菲, 周健民, 杜昌文. 激光诱导击穿原子光谱在土壤分析中的应用[J]. 土壤学报, 2022, 59(3): 643-654.
- [3] Thomas G W. Soil pH and soil acidity[M]. Madison, Wisconsin, USA: Soil Science Society of America, American Society of Agronomy, 1996: 475-490.
- [4] Walkley A, Black I A. An examination of the Degtjareff method for determining soil organic matter, and a proposed modification of the chromic acid titration method[J]. Soil Science, 1934, 37(1): 29-38.
- [5] Pansu M, Gautheryrou J. Organic and total C, N (H, O, S) analysis[M]//Handbook of Soil Analysis. Berlin, Heidelberg: Springer, 2006: 327-370.
- [6] Olsen S R. Estimation of available phosphorus in soils by extraction with sodium bicarbonate[M]. Washington, DC, USA: Circular (United States, Department of Agriculture), 1954:1-19.
- [7] Murphy J, Riley J P. A modified single solution method for the determination of phosphate in natural waters[J]. Analytica Chimica Acta, 1962, 27: 31-36.
- [8] Rich C I. Soil chemical analysis[M]. New Delhi, India: Soil Science Society of America Journal, 1967, 22: 272-272.
- [9] Ma F, Du C W, Zhou J M, et al. Investigation of soil properties using different techniques of mid-infrared spectroscopy[J]. European Journal of Soil Science, 2019, 70(1): 96-106.
- [10] 陈凯, 陆继东, 李俊彦. 钢液中多元元素的 LIBS 实时定量分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(3): 823-826.
- [11] Xu X B, Du C W, Ma F, et al. Modified self-adaptive model for improving the prediction accuracy of soil organic matter by laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Soil Science Society of America Journal, 2020, 84(6): 1995-2009.
- [12] Ma F, Du C W, Zhou J M, et al. Optimized self-adaptive model for assessment of soil organic matter using Fourier transform mid-infrared photoacoustic spectroscopy[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2017, 171: 9-15.
- [13] 杜昌文, 马菲, 周健民. 基于红外光谱智能鉴定模型的土壤有机质快速检测方法: CN105486655B[P]. 2018-12-18.
- [14] Peltre C, Bruun S, Du C W, et al. Assessing soil constituents and labile soil organic carbon by mid-infrared photoacoustic spectroscopy[J]. Soil Biology and Biochemistry, 2014, 77: 41-50.
- [15] Calderón F, Haddix M, Conant R, et al. Diffuse-reflectance Fourier-transform mid-infrared spectroscopy as a method of characterizing changes in soil organic matter[J]. Soil Science Society of America Journal, 2013, 77(5): 1591-1600.
- [16] Ma F, Zhou J M, Du C W. Controlled release urea altered the paddy soil heterogeneity at mesoscale qualified by laser induced breakdown spectroscopy[J]. Geoderma, 2024, 451: 117063.
- [17] Ma F, Du C W, Zhou J M. A self-adaptive model for the prediction of soil organic matter using mid-infrared

- photoacoustic spectroscopy[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 2016, 80(1): 238–246.
- [18] 杜昌文, 马菲. 土壤光谱信息系统 [简称: 土壤谱] V1.0[S]. 2020SR0112728, 2020.
- [19] 马菲, 杜昌文. 土壤光谱信息系统 [简称: 土壤谱] V2.0[S]. 2022SR1347229, 2022.
- [20] 孔祥麒, 高维常, 潘文杰, 等. 土壤碳氮比的可见-近红外与中红外光谱预测[J]. *土壤学报*, 2025, 62(3): 653–664.
- [21] Angkat A R, Seminar K B, Rahmat M, et al. Estimation of soil nitrate (NO<sub>3</sub>) level using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS)[J]. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 2018, 147(1): 012045.
- [22] 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[J]. *土壤*, 2023, 55(6): 1347–1353.
- [23] 张清文, 吴风华, 宋敬茹, 等. 基于光谱变换的滨海湿地土壤全氮含量建模预测[J]. *土壤*, 2023, 55(4): 880–886.
- [24] Sánchez-Esteva S, Knadel M, Kucheryavskiy S, et al. Combining laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and visible near-infrared spectroscopy (vis-NIRS) for soil phosphorus determination[J]. *Sensors*, 2020, 20(18): 5419.
- [25] Schröder S, Pavlov S G, Rauschenbach I, et al. Detection and identification of salts and frozen salt solutions combining laser-induced breakdown spectroscopy and multivariate analysis methods: A study for future Martian exploration[J]. *Icarus*, 2013, 223(1): 61–73.
- [26] 李学兰, 李德成, 郑光辉, 等. 可见-近红外与中红外光谱预测土壤养分的比较研究[J]. *土壤学报*, 2024, 61(3): 687–698.
- [27] Gazeli O, Stefas D, Couris S. Sulfur detection in soil by laser induced breakdown spectroscopy assisted by multivariate analysis[J]. *Materials*, 2021, 14(3): 541.
- [28] Dequaire T, Meslin P Y, Beck P, et al. Analysis of carbon and nitrogen signatures with laser-induced breakdown spectroscopy; the quest for organics under Mars-like conditions[J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2017, 131: 8–17.
- [29] Meng D S, Zhao N J, Ma M J, et al. Application of a mobile laser-induced breakdown spectroscopy system to detect heavy metal elements in soil[J]. *Applied Optics*, 2017, 56(18): 5204–5210.
- [30] Yi R X, Yang X Y, Zhou R, et al. Determination of trace available heavy metals in soil using laser-induced breakdown spectroscopy assisted with phase transformation method[J]. *Analytical Chemistry*, 2018, 90(11): 7080–7085.
- [31] Gonçalves D A, Senesi G S, Nicolodelli G. Laser-Induced Breakdown Spectroscopy applied to environmental systems and their potential contaminants. An overview of advances achieved in the last few years[J]. *Trends in Environmental Analytical Chemistry*, 2021, 30: e00121.
- [32] 邓源, 樊亚男, 吴秋梅, 等. 基于便携式 X 射线荧光光谱速测的设施菜地土壤重金属污染诊断与评价[J]. *土壤学报*, 2024, 61(1): 174–186.
- [33] 姚胤旭, 邱荣, 万情, 等. 基于激光诱导击穿光谱的基体效应[J]. *强激光与粒子束*, 2023, 35(11): 111004.
- [34] 牟诗怡, 杨美慧, 陈钦清, 等. 太赫兹光谱技术对土壤污染物检测分析的研究[J]. *实验技术与管理*, 2021, 38(4): 89–93.
- [35] 王翔, 赵南京, 俞志敏, 等. 土壤有机污染物激光诱导荧光光谱检测方法研究进展[J]. *光谱学与光谱分析*, 2018, 38(3): 857–863.

(责任编辑: 于 飞)