|  |  |
| --- | --- |
| ICS | 65.020.01 |
| CCS | |  | | --- | | D:\000000部门项目\09标准化插件开发\程序源代码\StandardEditor_ShanDongKeXieYuan\团标首页面字母T.pngD:\000000部门项目\09标准化插件开发\程序源代码\StandardEditor_ShanDongKeXieYuan\团标首页面字母T后面的反斜杠.png GXAS |   B 05 |

团体标准

T/GXAS XXXX—XXXX

森林土壤有机碳含量可见-近红外光谱反演操作技术规程

Technical code of practice for visible—near infrared spectroscopy inversion of forest soil organic carbon content

XXXX - XX - XX发布

XXXX - XX - XX实施

广西标准化协会  发布

目次

[前言 II](#_Toc212739291)

[1 范围 1](#_Toc212739292)

[2 规范性引用文件 1](#_Toc212739293)

[3 术语和定义 1](#_Toc212739294)

[4 反演流程 1](#_Toc212739295)

[5 仪器与设备选择 2](#_Toc212739296)

[5.1 光谱仪 2](#_Toc212739297)

[5.2 光源 2](#_Toc212739298)

[5.3 样品杯 2](#_Toc212739299)

[5.4 研磨设备 2](#_Toc212739300)

[5.5 筛具 2](#_Toc212739301)

[5.6 实验室常规设备 2](#_Toc212739302)

[6 样品采集与处理 2](#_Toc212739303)

[6.1 样品采集 2](#_Toc212739304)

[6.2 样品处理 2](#_Toc212739305)

[6.3 土壤有机碳含量测定 2](#_Toc212739306)

[7 光谱数据采集 3](#_Toc212739307)

[7.1 环境条件 3](#_Toc212739308)

[7.2 仪器校准 3](#_Toc212739309)

[7.3 测定步骤 3](#_Toc212739310)

[8 光谱数据预处理 3](#_Toc212739311)

[8.1 噪声去除 3](#_Toc212739312)

[8.2 数学变换 3](#_Toc212739313)

[8.3 特征波段筛选 3](#_Toc212739314)

[9 反演模型构建与验证 3](#_Toc212739315)

[9.1 数据划分 3](#_Toc212739316)

[9.2 模型选择 3](#_Toc212739317)

[9.3 模型评价指标 4](#_Toc212739318)

[9.4 反演模型验证 4](#_Toc212739319)

[10 反演结果输出 4](#_Toc212739320)

[10.1 反演影像生成 4](#_Toc212739321)

[10.2 结果报告 4](#_Toc212739322)

[11 档案管理 4](#_Toc212739323)

1. 前言

本文件参照GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由广西壮族自治区林业科学研究院提出和宣贯。

本文件由广西标准化协会归口。

本文件起草单位：广西壮族自治区林业科学研究院、桂林理工大学、广西华沃特集团股份有限公司、南宁师范大学、四川省林业科学研究院、中国林业科学研究院亚热带林业研究所、广西壮族自治区国有东门林场。

本文件主要起草人：唐健、赵隽宇、石媛媛、邓昀、程小辉、林海能、覃祚玉、宋贤冲、柯琴、唐小兰、陈琳、潘桂颖、罗密、张照远。

森林土壤有机碳含量可见-近红外光谱反演操作技术规程

* 1. 范围

本文件界定了森林土壤有机碳含量可见-近红外光谱反演涉及的术语及定义，确立了利用可见-近红外光谱反演森林土壤有机碳含量的程序，规定了反演操作的仪器与设备、样品采集与处理、光谱数据采集、光谱数据预处理、模型构建与验证、成果报告等方面的操作指示，描述了反演操作过程信息的追溯方法。

本文件适用于森林土壤有机碳含量的可见-近红外光谱反演。

* 1. 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 32198 红外光谱定量分析技术通则

GB/T 37969 近红外光谱定性分析通则

HJ 695 土壤 有机碳的测定 燃烧氧化-非分散红外法

JB/T 15096 可见-近红外地物光谱仪

LY/T 1210 森林土壤样品的采集与制备

NY/T 1121.1 土壤检测 第1部分：土壤样品的采集、处理和贮存

NY/T 1121.6 土壤检测 第6部分：土壤有机质的测定

* 1. 术语和定义

GB/T 32198、GB/T 37969界定的术语和定义适用于本文件。

可见-近红外光谱反演 visible—near infrared spectroscopy inversion

利用波长范围在350nm～2500nm的可见-近红外光，以漫反射原理照射土壤样品，通过建立得到的光谱数据与土壤有机碳含量之间的定量关系模型，来实现对土壤有机碳含量的快速、无损定量分析的方法。

土壤有机碳 soil organic carbon

土壤矿质土和有机土（包括泥炭土、沙砾层）中的有机碳储量。

* 1. 反演流程

见图1。

反演结果输出

仪器与设备选择

样品采集与处理

光谱数据采集

光谱数据预处理

模型构建与验证

反演模型验证

1. 反演流程图

* 1. 仪器与设备选择
     1. 光谱仪

选择符合JB/T 15096规定的光谱仪。技术参数覆盖350nm～2500nm波段，光谱分辨率≤3nm（350nm～1000nm）和≤10nm（1001nm～2500nm），光谱采集视角为15°，配套工作笔记本电脑（配制光谱分析软件）、标准白板（反射率≥99％，适用350nm～2500nm波段）、专用测试软件（支持原始光谱存储与预处理）。

* + 1. 光源

50W卤素灯，光源入射角宜45°，可根据光谱仪探头位置调整，调整范围0°～60°。

* + 1. 样品杯

直径7cm、深1.5cm的圆柱形样品杯。

* + 1. 研磨设备

玛瑙研钵或土壤研磨机、玻璃器皿。

* + 1. 筛具

孔径0.2mm和0.149mm的标准筛。

* + 1. 实验室常规设备

干燥箱、恒温恒湿箱、天平（精度0.001g）、自封袋等。

* 1. 样品采集与处理
     1. 样品采集

采用网格化布点和S型采样法，采样点避开洼地、石砾区、道路、建筑周边等人为干扰区域。

按照LY/T 1210的规定采集样品。采样点布设应具有代表性，每个采样点采集0cm～20cm表层土壤，每个采样点取5个重复样品（间距≥5m），混合后采用“四分法”保留1000g土壤。

* + 1. 样品处理
       1. 风干

将土壤样品去除植物残体、石块等杂质，置于通风阴凉处自然风干，直至含水量≤5％。

* + - 1. 研磨与过筛

用研磨设备研磨风干土壤，分别过0.2mm筛用于有机碳含量测定和0.149mm筛用于光谱测定。过筛后样品装入洁净容器中备用。

* + - 1. 贮存

按NY/T 1121.1规定的方法贮存。

* + 1. 土壤有机碳含量测定

按照HJ 695规定的方法，测定过0.2mm筛土壤样品的有机碳含量，每个样品平行测定3次，相对偏差≤5％，作为建模的参考值。

* 1. 光谱数据采集
     1. 环境条件

宜在暗室内进行，避免外界光线干扰。环境温度控制在20℃～25℃，环境温度保持相对稳定，相对湿度≤60％。

* + 1. 仪器校准

测定前使用标准白板进行仪器校准，每测定10个样品重新校准一次。

* + 1. 测定步骤

将过0.149mm筛的土壤样品装入样品杯，填充均匀并轻轻压实，抹平表面。

调整光谱仪探头至距样品表面10cm～30cm，视场角15°，光源入射角45°，测定光谱反射率。

每个样品连续测定10次，取算术平均值作为该样品的光谱数据。

* 1. 光谱数据预处理
     1. 噪声去除

剔除光谱两端噪声较大的波段（＜400nm和＞2400nm），保留400nm～2400nm波段数据。

* + 1. 数学变换

采用以下一种或多种方法进行光谱变换，增强特征信号：

1. 一阶导数（FDR），Savitzky-Golay平滑，窗口宽度11点，多项式阶数1阶；
2. 对数一阶导数（FDL），先计算lg(1/R)，再执行FDR（参数同左）；
3. 标准正态变量变换（SNV）和一阶导数，先SNV处理，再执行FDR（窗口宽度11点）；
4. 多元散射校正（MSC）和波段筛选，先MSC处理，再通过波段筛选＞1.5的波段。
   * 1. 特征波段筛选
        1. 相关性分析

计算光谱反射率（R、FDR、FDL）与有机碳含量的相关系数，筛选显著相关波段（p＜0.01）。

敏感波段范围宜为：显著相关波段R（600nm～1500nm）、FDR（500nm～540nm、630nm～680nm）、FDL（980nm～1000nm、1250～1350nm、1550nm）作为模型的自变量。

* + - 1. 算法筛选

采用随机森林特征（Ranger）算法设置决策树数量1000棵，筛选重要性排名前30％的波段；或递归特征消除（RFE）基于偏最小二乘（PLS）模型，逐步剔除不重要变量，保留50～200个波段。

* 1. 反演模型构建与验证
     1. 数据划分

按7:3比例将样本集随机划分为训练集（用于构建模型）和验证集（用于验证模型）。

* + 1. 模型选择

宜选择以下的化学计量学方法构建定量校正模型：

1. 正交偏最小二乘法（OPLS），采用留一交叉验证（LOOCV）确定最佳主成分数（3～8个），迭代次数≤1000次；
2. 随机森林（RF）：适用于非线性关系建模，设置决策树数量为100，节点分裂标准为均方误差，最小样本分裂数2，最小样本叶节点数5。
   * 1. 模型评价指标

训练集与验证集的决定系数（R2）均应≥0.90。

验证集的均方根误差（RMSE）应≤5.0g/kg。

鲁棒性验证噪声干扰测试：对光谱添加信噪比（SNR）为35dB的高斯白噪声后，RMSE增幅≤10％。

温度稳定性测试：在10℃～35℃环境温度下，模型预测偏差≤0.5g/kg。

同一均匀样品连续测定6次。

* + 1. 反演模型验证

用训练集构建模型，计算训练集的R²与RMSE。

用验证集代入模型，计算验证集的R²与RMSE，测试鲁棒性与稳定性。

若满足9.3指标要求，模型可用于实际检测；否则重新优化模型，调整预处理方法或模型参数。

* 1. 反演结果输出
     1. 反演影像生成

基于最优模型，将可见-近红外光谱筛选特征波段（或原始光谱）输入模型，逐像元计算土壤有机碳含量。

* + 1. 结果报告

结果报告应包含以下内容：

1. 样品信息：采样地点、土壤类型、采样日期等；
2. 仪器参数：光谱仪型号、波段范围、分辨率等；
3. 处理方法：样品预处理、光谱预处理及模型类型；
4. 反演结果：土壤有机碳含量（平均值±标准差）及模型评价指标（R²、RMSE）。
   1. 档案管理

应建立样品采集、光谱采集与预处理、反演模型构建与验证等反演过程的电子和纸质档案，长期保存。

