

# 基于稀疏自注意力和可见-近红外光谱的土壤氮含量预测

冀荣华<sup>1,2</sup> 李常昊<sup>2</sup> 郑立华<sup>2</sup> 宋丽芬<sup>1</sup>

(1. 中国农业大学烟台研究院海洋与农业工程学院, 烟台 264670; 2. 中国农业大学信息与电气工程学院, 北京 100083)

**摘要:** 氮是影响作物生长的关键因素, 精准获取土壤氮含量是实施各类农田水肥管理技术的基础。利用可见-近红外光谱技术可以快速检测土壤氮含量, 预测模型精度和泛化能力是制约将光谱技术应用于土壤氮含量检测的瓶颈。为此, 提出了一种基于稀疏自注意力和可见-近红外光谱的土壤氮含量预测模型 (Visible - near-infrared reflection spectrum and sparse transformer, VNIRSformer) 用于提升预测精度和泛化能力。模型由输入层、嵌入层、编码器、解码器、预测层和输出层组成。采用大型公开数据集 (Land use/cover area frame statistical survey, LUCAS) 训练模型以提升模型泛化能力。实验测试 VNIRSformer 模型在 15 种不同光谱波长间隔下的性能, 发现: 随着波长间隔增加, 预测精度先升后降, 模型规模不断变小。波长间隔为 1 nm 时模型预测精度最低, RMSE 为 0.47 g/kg,  $R^2$  为 0.78。波长间隔为 5 nm 时模型预测精度最高, RMSE 为 0.35 g/kg,  $R^2$  为 0.89。当波长间隔从 0.5 nm 增加至 1 nm 时, 模型规模下降最快, 下降比例约为 72%。当增加至 5 nm 后, 模型规模匀速下降, 下降比例约为 5%。综合考虑模型规模及性能, 最佳波长间隔设为 5 nm。与 6 种不同预测模型 (2 种卷积神经网络、传统自注意力模型、偏最小二乘回归、支持向量机回归和 K 近邻回归) 进行对比实验, 发现: VNIRSformer 模型性能最佳, RMSE 为 0.35 g/kg,  $R^2$  为 0.89, RPD 为 2.95。测试 VNIRSformer 对不同等级的土壤氮含量预测能力, 发现: VNIRSformer 模型能够较好预测小于 5 g/kg 的土壤氮含量。将 VNIRSformer 模型直接应用于自采数据集, 发现:  $R^2$  下降约 0.17, 表明模型具有一定泛化能力。研究表明, 选取波长间隔为 5 nm 的光谱数据作为 VNIRSformer 模型输入, 预测性能最佳, 规模适中; 稀疏注意力机制有助于提升模型预测精度, 降低模型训练时间; 预测模型具有一定泛化能力。研究结果可为基于可见-近红外光谱的土壤氮含量预测技术田间实际应用提供理论支持。

**关键词:** 土壤氮含量; 预测模型; 稀疏自注意力机制; 可见-近红外光谱

中图分类号: O433.4 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2024)10-0392-07

OSID:



## Prediction of Soil Nitrogen Content Based on Sparse Self-attention and Visible – Near-infrared Spectroscopy

JI Ronghua<sup>1,2</sup> LI Changhao<sup>2</sup> ZHENG Lihua<sup>2</sup> SONG Lifen<sup>1</sup>

(1. College of Ocean and Agricultural Engineering, Yantai Institute of China Agricultural University, Yantai 264670, China

2. College of Information and Electrical Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China)

**Abstract:** Nitrogen is a key factor that affects crop growth. The basis for the implementation of various agricultural water and fertilizer management technologies is the accurate determination of soil nitrogen content. Soil nitrogen content could be detected quickly by the visible – near-infrared spectroscopy technology. The bottleneck that limits the application of spectral technology in soil nitrogen test is the accuracy and generalizability of predictive models. In order to improve the prediction accuracy and generalization ability, a soil nitrogen content prediction model was proposed based on sparse self-attention and visible – near-infrared spectroscopy, which was called VNIRSformer. The model consisted of input layer, embedding layer, encoder, decoder, prediction layer and output layer. The land use/cover area frame statistical survey dataset (LUCAS) was used to train model to improve its generalization ability. The performance of VNIRSformer was tested at 15 different spectral wavelength intervals, and the result showed that as the wavelength interval was increased, the model prediction accuracy was firstly increased

收稿日期: 2023-12-17 修回日期: 2024-02-20

基金项目: 山东省自然科学基金项目(ZR2021MD100)和国家重点研发计划项目(2022YFD2002202)

作者简介: 冀荣华(1973—),女,副教授,主要从事农业信息化研究,E-mail: jessic1212@cau.edu.cn

通信作者: 宋丽芬(1971—),女,副教授,主要从事土壤肥料与农业废弃物资源化利用研究,E-mail: 15805351189@126.com

and then decreased, and the model size was reduced. The model prediction accuracy was the lowest at the wavelength interval of 1 nm, where the RMSE was 0.47 g/kg and the  $R^2$  was 0.78. The highest predictive accuracy of the model was for the 5 nm wavelength interval, of which the RMSE was 0.35 g/kg and the  $R^2$  was 0.89. The greatest reduction in model size was observed when the wavelength interval was increased from 0.5 nm to 1 nm, which was decreased by 72%. The model size was decreased uniformly at a rate of 5% as the wavelength interval was increased from 1 nm to 5 nm. Considering the model size and performance, the optimal wavelength interval was set to be 5 nm. When compared with six different prediction models (two convolutional neural networks, traditional self-attention model, partial least squares regression, support vector machine regression, and K-nearest neighbor regression), the VNIRSformer model had the best performance, with RMSE of 0.35 g/kg,  $R^2$  of 0.89 and RPD was 2.95. To test the adaptability of VNIRSformer to predict the soil nitrogen content at different grades, it was found that VNIRSformer had high prediction accuracy for soil nitrogen content below 5 g/kg. VNIRSformer was directly applied to self-collected datasets to verify the model's generalization ability.  $R^2$  was decreased by 0.17, indicating that VNIRSformer had a certain generalization ability. The research results indicated that spectral data with a wavelength interval of 5 nm was selected as input of VNIRSformer, which had the best prediction performance and moderate scale. Sparse attention mechanism was able to improve model prediction accuracy and reduce model training time. The VNIRSformer model had a certain generalization ability. The results could provide support for the practical application of field soil nitrogen content prediction based on visible - near-infrared spectroscopy technology.

**Key words:** soil nitrogen content; prediction model; sparse self-attention mechanism; visible - near-infrared spectroscopy

## 0 引言

快速、准确地检测土壤氮含量是实现精准施肥的前提和基础。利用光谱技术对土壤养分含量预测具有检测速度快、操作简单及环保等优势<sup>[1]</sup>。利用光谱预测土壤氮含量的大部分研究按照数据预处理、特征工程和模型构建<sup>[2-7]</sup>等顺序开展,其中特征工程对模型性能有着重要影响。大部分预测模型以特定土壤为目标,模型的泛化能力有待提高<sup>[8-10]</sup>。

深度学习算法具有优秀的非线性表达和特征提取能力<sup>[11]</sup>,使得将深度学习相关算法应用于土壤氮含量预测成为近年来研究热点。研究人员利用卷积神经网络<sup>[12]</sup>与其他算法融合<sup>[13-15]</sup>建立预测模型,研究结果表明深度学习算法可以仅进行少量数据预处理,不需要特征工程的情况下就可以获得较好的模型预测性能。光谱波长间隔对深度学习预测模型影响较大,目前缺少对光谱数据波长间隔选取研究。文献[16]将注意力机制引入土壤氮含量预测,发现注意力机制较卷积神经网络更有助于提高预测精确度。而基于注意力机制的预测模型存在规模过大和训练时间过长等问题。与此同时,泛化能力是制约预测模型实际应用的瓶颈之一。文献[17]提出利用大规模数据集训练模型,能够有效提升模型泛化能力。

为此本文建立一种基于稀疏自注意力机制和可见-近红外光谱的土壤氮含量预测模型

(VNIRSformer)。VNIRSformer 模型通过稀疏自注意力机制提升模型预测性能和训练速度。探究光谱波长间隔对模型影响,选取最优波长间隔,利用大型公开数据集训练模型来改善模型泛化能力。

## 1 材料与方法

### 1.1 数据来源及处理

利用大型公开数据集对模型训练、验证和测试模型泛化能力。公开数据集采用欧盟土地利用及覆盖面积框架统计调查数据集(LUCAS)。LUCAS 数据集的土壤样本在 2009—2022 年期间采集于欧盟各国的农田、林地、灌木、草地、湿地、荒地等地。土壤样本经过 40℃ 风干、去除杂质、研磨和过筛(孔径小于 2 mm)处理后,利用 FOSS XDS 型光谱分析仪扫描。每个土壤样本正向和反向各扫描一次,取两次扫描结果平均值作为该样本光谱数据。利用凯氏定氮法测量土壤氮含量。LUCAS 数据集共含有 20 791 个样本,每个样本由 400 ~ 2 500 nm 内土壤吸光度和土壤氮含量组成,波长间隔为 0.5 nm。每个样本包含 4 201 个数据。将公开数据集按比例 8:1:1 划分为训练集(16 631)、验证集(2 080)和测试集(2 080)。其中,训练集和验证集数据用于模型训练,测试集数据用于评价模型预测性能。

将公开数据集进行标准化处理以消除量纲影响,计算公式为

$$y = \frac{x - \bar{x}}{\sigma} \quad (1)$$

式中  $x$ —标准化前的数据  
 $y$ —标准化后的数据  
 $\bar{x}$ —数据均值  
 $\sigma$ —数据标准差

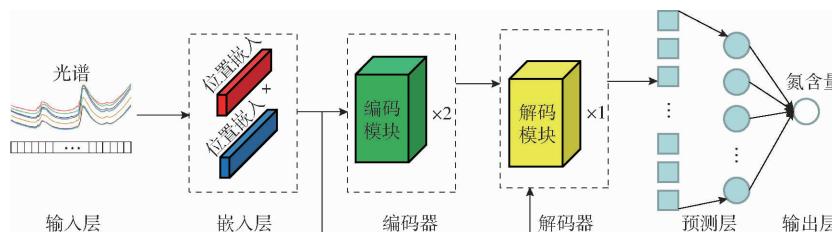


图 1 VNIRSformer 模型结构  
Fig. 1 Structure of VNIRSformer

表 1 VNIRSformer 模型参数说明及设置

Tab. 1 VNIRSformer parameters illustration and setting

网络层	参数说明及设置
输入层	土壤可见-近红外光谱序列
嵌入层	位置编码长度, 设为 24
编码器	2 层编码模块, 注意力头数 4, 稀疏因子设为 10
解码器	1 层解码模块, 注意力头数 4, 稀疏因子设为 10
预测层	全连接方式, 共 2 048 个神经元
输出层	1 个神经元, 土壤氮含量预测值

其中, 嵌入层将光谱数据编入位置信息, 并形成编码器和解码器所需要数据格式; 编码器和解码器生成用于预测氮含量的特征集; 预测层根据特征集预测土壤氮含量。

不同波段的吸收光谱与土壤氮含量的相关性不同, 对土壤氮含量预测贡献度不同。在光谱序列中加入波段信息(即位置), 有助于寻找与土壤氮含量有较强相关性的敏感波段, 改善模型性能。位置信息编码方式有多种, 如基于正余弦的编码方式<sup>[18]</sup>和基于可学习编码矩阵的编码方式<sup>[19]</sup>等。正余弦编码能体现出吸光度的绝对位置和相对位置。本文选用正余弦编码方式生成位置矩阵, 计算公式为

$$\mathbf{P}_{(A,2i)} = \sin \frac{\mathbf{A}}{10000 \frac{2i}{l_A}} \quad (2)$$

$$\mathbf{P}_{(A,2i+1)} = \cos \frac{\mathbf{A}}{10000 \frac{2i}{l_A}} \quad (3)$$

式中  $\mathbf{P}$ —编码得到的位置矩阵  
 $\mathbf{A}$ —原始光谱吸光度序列  
 $i$ —位置矩阵中位置序号  
 $l_A$ —光谱序列长度

将土壤光谱序列与位置矩阵对齐后, 将二者合并作为嵌入层输出, 合并公式为

$$\mathbf{S} = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{p}_1, \mathbf{a}_2 + \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{a}_i + \mathbf{p}_i, \dots, \mathbf{a}_n + \mathbf{p}_n) \quad (4)$$

式中  $\mathbf{S}$ —融合位置信息光谱序列

$a_i$ —光谱序列第  $i$  个位置吸光度

## 1.2 模型建立

VNIRSformer 模型由输入层、嵌入层、编码器、解码器、预测层、输出层组成。模型总体结构和模型参数设置分别如图 1 和表 1 所示。

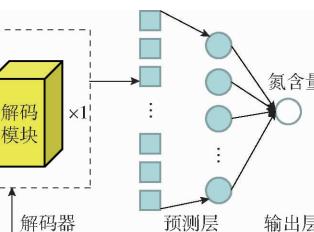


图 2 编码模块和解码器结构  
Fig. 2 Structure of encoder module and decoder

$p_i$ —第  $i$  个波长对应的位置矩阵

$n$ —波长总数

编码器由 2 个相同编码模块组成, 每个编码模块包含 2 个子模块。编码模块结构如图 2a 所示。

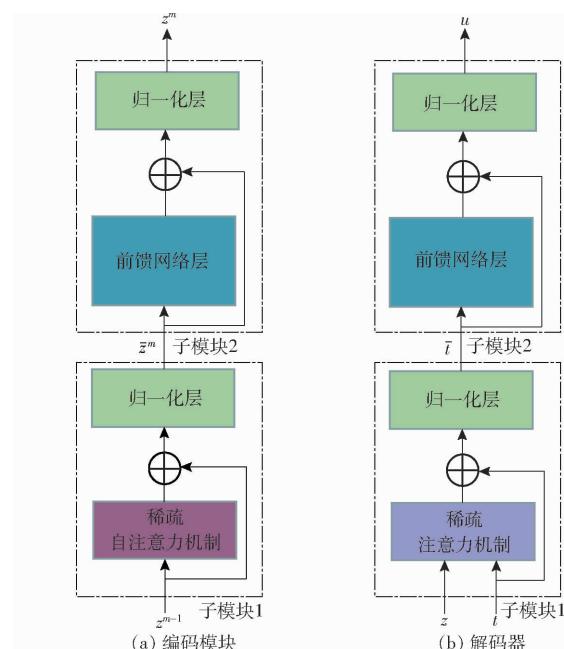


图 2 编码模块和解码器结构

Fig. 2 Structure of encoder module and decoder

编码模块计算公式为

$$z^m = L_N(F_N(\bar{z}^m) + \bar{z}^m) \quad (5)$$

其中  $\bar{z}^m = L_N(P_A(z^{m-1}) + z^{m-1}) \quad (6)$

式中  $z^m$ —编码模块输出值, 其中  $z^0$  为嵌入层输出值

$\bar{z}^m$ —编码模块中子模块 1 输出值

$m$ —编码模块编号

$L_N$ —归一化层算法

$P_A$ —稀疏自注意力机制算法

$F_N$ —前馈网络层算法

解码器分为 2 个子模块, 具体结构如图 2b 所示。解码器计算公式为

$$u = L_N(F_N(\bar{t}) + \bar{t}) \quad (7)$$

$$\bar{t} = L_N(B_A(t, z) + t) \quad (8)$$

其中  $\bar{t}$ ——解码器中子模块 1 输出值

$t$ ——嵌入层输出值

$z$ ——编码器输出值

$u$ ——解码器输出值

$B_A$ ——稀疏注意力机制算法

稀疏自注意力机制<sup>[20]</sup>通过筛选查询向量  $Q$  中有代表性的元素参与注意力计算以实现在保证模型性能的同时降低模型复杂度。具有代表性元素的筛选思路具体如下。

利用权重得分衡量  $q_i$  在  $Q$  中代表性程度。权重得分计算公式为

$$W(q_i) = \max\left(\frac{\mathbf{q}_i \mathbf{k}_j^T}{\sqrt{d_K}}\right) - \frac{1}{l_K} \sum_{j=1}^{l_K} \frac{\mathbf{q}_i \mathbf{k}_j^T}{\sqrt{d_K}} \quad (9)$$

式中  $q_i$ —— $Q$  中第  $i$  行向量

$l_K$ ——关键向量  $K$  总行数

$k_j$ —— $\bar{K}_i$  中第  $j$  行向量

$d_K$ —— $K$  的总列数

$W$ ——权重得分

对于  $Q$  中每个行向量  $q_i$ , 按照随机方式从  $K$  中抽取  $M$  个行向量  $k$  组成  $\bar{K}_i$ 。 $M$  计算公式为

$$M = f \ln l_K \quad (10)$$

式中  $f$ ——稀疏因子

通过权重得分  $S$  从  $Q$  中选取前  $N$  个得分最高的行向量  $q$  组成稀疏矩阵  $\bar{Q}$ 。其中  $N$  计算公式为

$$N = f \ln l_Q \quad (11)$$

式中  $l_Q$ —— $Q$  总行数

使用稀疏矩阵  $\bar{Q}$  与  $K$ 、价值向量  $V$  进行稀疏注意力计算, 计算公式为

$$T(\bar{Q}, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{\bar{Q}K^T}{\sqrt{d_K}}\right)V \quad (12)$$

式中  $T$ ——注意力得分

softmax——归一化指数函数

### 1.3 模型训练

模型主要超参数如下: 批量大小 (batch\_size) 为 16。初始学习率 (learning\_rate) 为 0.0009。学习率衰减 (learning\_rate decay) 方案为每 20 轮训练后下降为原来的 1/2。激活函数 (activation) 为 GeLU。优化器 (optimizer) 为 Adam。训练轮次 (epochs) 为 100。停止训练标准 (early-stopping) 为 20 个训练轮次中损失值不再下降。

模型利用 Pytorch 1.7.0 实现。硬件环境: CPU 为 Intel Core i7-7700K 4.20 GHz; RAM 为 16 GB; GPU 为 GeForce RTX3090(24 GB)。

### 1.4 模型评价指标

利用决定系数  $R^2$ 、均方根误差 (RMSE) 和相对误差分析 (RPD) 3 个指标评价模型性能。决定系数越接近 1, 说明模型拟合程度越好, 预测性能越高。均方根误差与决定系数呈负相关, 决定系数越大, 均方根误差越小。相对误差分析是通过  $R^2$  倒数获得, 用于评价模型稳定性。RPD 越大, 说明模型稳定性越好。

## 2 结果与讨论

### 2.1 波长间隔对模型预测性能的影响

模型输入为土壤光谱序列, 波长间隔决定序列长度, 影响模型预测精度和规模。为分析波长间隔对模型预测性能的影响, 选取最优输入波长间隔, 设置 15 种不同波长间隔进行实验。不同波长间隔下模型预测性能如图 3 所示。可以发现, 随着波长间隔增加, 模型预测精度呈先升后降的趋势。当波长间隔为 1 nm 的模型预测精度最低, RMSE 为 0.47 g/kg,  $R^2$  为 0.78。输入波长间隔为 5 nm 的模型预测精度最高, RMSE 为 0.35 g/kg,  $R^2$  为 0.89。在一定范围内增大波长间隔可减少光谱序列中共线性和冗余<sup>[21]</sup>, 提升预测精度。当波长间隔大于 5 nm, 会损失部分光谱特征, 导致模型预测性能下降。图 4 展示了不同波长间隔下的模型参数量变化。从图 4 来看, 随着波长间隔增大, 模型参数量不断变小。波长间隔从 0.5 nm 变为 1 nm 时, 模型参数量下降最快, 降低比例约为 72%。当波长间隔增加至 5 nm 后, 模型参数量下降比例平稳, 约为 5%。光谱波长间隔对模型性能影响较大, 选取合适的波长间隔能够有效提高模型预测性能, 降低模型规模。当波长间隔为 5 nm 时, 模型预测精度最高, 模型规模适中。

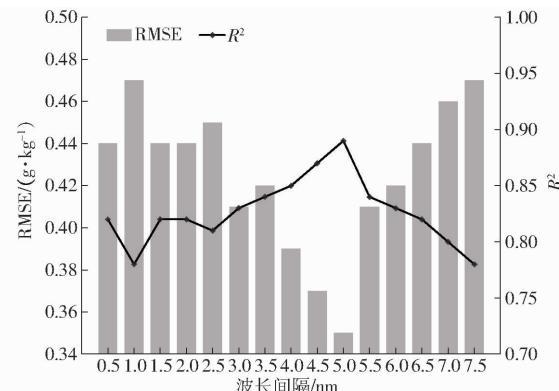


图 3 不同波长间隔模型预测性能

Fig. 3 Prediction performance of model with different wavelength intervals

### 2.2 不同预测模型对比

选取 3 种传统预测模型和 3 种深度学习预测

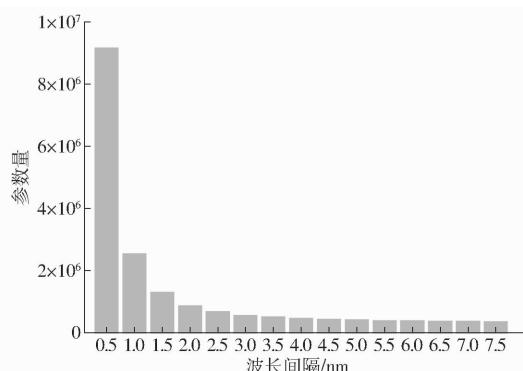


图4 不同波长间隔模型参数量

Fig. 4 Parameter number of model with different wavelength intervals

模型与 VNIRSformer 模型对比实验。传统预测模型分别采用偏最小二乘回归(PLS)、支持向量机回归(SVR)和 K 近邻回归(KNN)3 种经典算法。3 种深度学习模型分别为两种卷积神经网络模型<sup>[22-23]</sup>和基于传统自注意力机制的模型。上述模型均利用相同训练数据集和 1.3 节的环境进行训练,然后在相同测试集上进行性能测试。测试结果如表 2 所示。

表 2 7 种模型在测试数据集上的预测性能

Tab. 2 Prediction performance of seven models on test dataset

模型	评价指标		
	R <sup>2</sup>	RMSE/(g·kg <sup>-1</sup> )	RPD
VNIRSformer	0.89	0.35	2.95
传统自注意力模型	0.88	0.36	2.86
CNN1	0.83	0.42	2.44
CNN2	0.85	0.39	2.59
PLS	0.81	0.45	2.31
SVR	0.79	0.47	2.19
KNN	0.78	0.48	2.15

可以发现,3 种传统预测模型中,K 近邻回归和支持向量机回归的 R<sup>2</sup> 均低于 0.8, 预测效果较差。偏最小二乘回归的 R<sup>2</sup> 为 0.81, 是传统预测模型中性能最优的。在深度学习模型中, 预测性能最差为 CNN1 模型, 由于 CNN2 模型层数大于 CNN1, CNN2 模型性能有所提升, 注意力机制模型性能普遍高于

卷积神经网络模型。VNIRSformer 模型预测精度最高, 较 3 种传统预测模型 R<sup>2</sup> 分别提高 0.08、0.10 和 0.11, 较 3 种深度学习预测模型 R<sup>2</sup> 分别提高 0.01、0.06 和 0.04。

VNIRSformer 模型与传统自注意力模型的参数量相同(均为  $4.062 \times 10^8$ ), 浮点计算量分别为  $1.4 \times 10^6$  和  $1.6 \times 10^6$ 。计算量降低的原因在于稀疏自注意力降低运算复杂度。进一步考察模型训练时间, 如图 5 所示。可以看出, VNIRSformer 模型所用训练时间更少。在训练轮数较少时, 两种模型训练所用时间差距较小, 随着训练轮数增加, 两种模型所用训练时间差距不断增大, 当训练轮数达到 50 时, VNIRSformer 比传统自注意力模型所用时间减少 260 s。

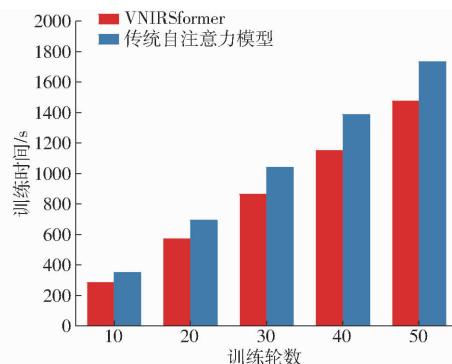


图5 两种自注意力模型训练时间

Fig. 5 Time of two self-attention models under different training rounds

### 2.3 模型预测性能及泛化能力验证

为验证 VNIRSformer 模型对不同土壤氮含量的预测性能, 本文按照全国第二次土壤普查养分分级标准<sup>[24-25]</sup>, 将土壤氮含量(质量比)分为 8 个级别。其中, 第 1 级别土壤氮含量大于 10.0 g/kg, 第 2 级别到第 7 级别土壤氮含量分别为 5.0 ~ 10.0 g/kg、2.0 ~ 5.0 g/kg、1.5 ~ 2.0 g/kg、1.0 ~ 1.5 g/kg、0.75 ~ 1.0 g/kg、0.5 ~ 0.75 g/kg, 第 8 级别的土壤氮含量小于 0.5 g/kg。

训练集、验证集和测试集在不同土壤氮含量级别的样本分布及统计信息如表 3 所示。从表 3 可以看出, 3 种数据集的数据分布基本一致。

利用 VNIRSformer 模型分别对测试集内 8 个级别的土壤氮含量进行预测, 预测结果如图 6 所示。

表 3 3 种数据集数据分布及统计信息

Tab. 3 Data distribution and statistical information of three datasets

数据集	不同级别下样本比例/%								最小值/(g·kg <sup>-1</sup> )	最大值/(g·kg <sup>-1</sup> )	平均值/(g·kg <sup>-1</sup> )	标准差/(g·kg <sup>-1</sup> )
	1	2	3	4	5	6	7	8				
训练集	4.3	6.9	34.8	16.6	19.5	10.8	4.7	2.4	0.2	37.6	3.1	3.7
验证集	4.2	6.8	34.5	16.8	19.4	10.9	4.8	2.6	0.3	36.6	2.9	3.4
测试集	4.3	6.9	34.7	16.6	19.4	10.8	4.8	2.5	0.2	36.2	3.1	3.6

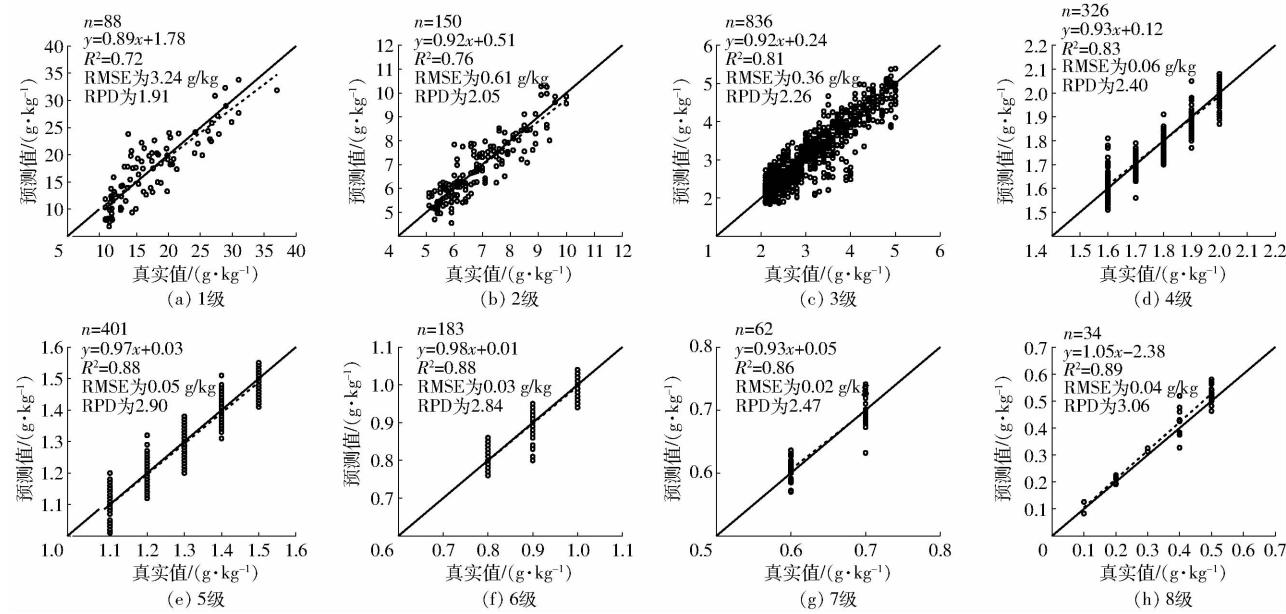


图 6 VNIRSformer 模型对测试集内不同土壤氮含量级别的预测

Fig. 6 Prediction results of VNIRSformer for different grades of soil nitrogen content of test dataset

从图 6 可以看出, 随着氮含量降低, VNIRSformer 预测精度升高。当土壤氮含量大于 5 g/kg 时, 模型预测精度  $R^2$  小于 0.8。当土壤氮含量小于 5 g/kg 时, 模型预测指标  $R^2$  大于 0.8。可能原因在于所采用的公开数据集样本分布不均匀, 公开数据集中 87% 样本的氮含量小于 5 g/kg。

利用高氮含量和低氮含量两种自采数据集验证所建模型的泛化能力。其中高氮数据集(大于 5 g/kg)从黑龙江胜利农场(东经 133°45', 北纬 47°24')获取, 低氮数据集(小于 5 g/kg)从内蒙古自治区兴安盟科尔沁右翼前旗(东经 121°92', 北纬 46°07')获取。两种自采数据集统计信息如表 4 所示。

表 4 自采数据集统计信息

Tab. 4 Statistical information of self-collected datasets

来源	样本数	最大值/(g·kg⁻¹)	最小值/(g·kg⁻¹)	平均值/(g·kg⁻¹)	标准差/(g·kg⁻¹)
高氮数据集	44	27.4	5.0	23.3	4.3
低氮数据集	44	4.9	0.4	2.2	1.3

利用 VNIRSformer 模型直接对两种自采数据集进行预测, 预测结果如图 7 所示。

从图 7 可以看出, VNIRSformer 模型在高氮数据集预测  $R^2$  为 0.59, 低氮数据集预测  $R^2$  为 0.73。在高氮和低氮两种自采数据集上的  $R^2$  下降约 0.17。可以发现, 将 VNIRSformer 模型直接应用于全新数据, 也能够获得较好效果, 即模型具有一定的泛化能力。

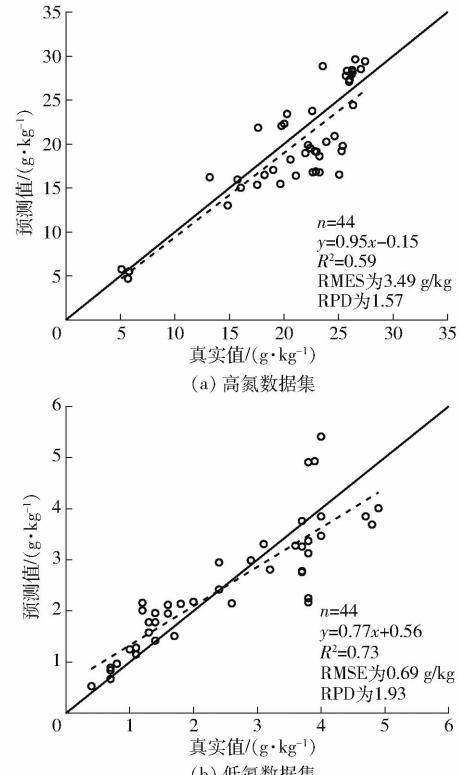


图 7 VNIRSformer 模型对自采数据集的预测结果

Fig. 7 Prediction results of VNIRSformer for two self-collected datasets

### 3 结论

(1) 可见-近红外光谱的波长间隔对基于深度学习的预测模型影响较大。随着波长间隔增加, 模型预测精度先升后降, 模型规模逐渐下降。综合考虑模型精度和规模, 设置 5 nm 为最优波长间隔。

(2) 注意力机制较卷积神经网络更适合用于基

于光谱的土壤氮含量预测建模。对比实验结果表明,VNIRSformer模型在基于光谱的土壤氮含量预测任务中表现最佳,  $R^2$  为 0.89, RMSE 为 0.35 g/kg, RPD 为 2.95。自注意力机制的全局感知能力有助

于发现光谱长序列内全局依赖关系。采用稀疏注意力机制可以减少模型训练时间。

(3) VNIRSformer 模型对小于 5 g/kg 的土壤氮含量预测精度较高,且具有一定泛化能力。

## 参 考 文 献

- [1] MUKHERJEE S, LASKAR S. Vis-NIR-based optical sensor system for estimation of primary nutrients in soil [J]. Journal of Optic, 2019, 48(1): 83–107.
- [2] HONG Y, LIU Y, CHEN Y, et al. Application of fractional-order derivative in the quantitative estimation of soil organic matter content through visible and near-infrared spectroscopy [J]. Geoderma, 2019, 337: 758–769.
- [3] 陈昊宇, 杨光, 韩雪莹, 等. 基于连续小波变换的土壤有机质含量高光谱反演[J]. 中国农业科技导报, 2021, 31(3): 132–141.  
CHEN Haoyu, YANG Guang, HAN Xueying, et al. Hyperspectral inversion of soil organic matter content based on continuous wavelet transform [J]. Journal of Agriculture Science and Technology, 2021, 31(3): 132–141. (in Chinese)
- [4] 徐丽华, 谢德体. 土壤有机质含量预测精度对光谱预处理和特征波段的响应[J]. 江苏农业学报, 2019, 35(6): 1340–1345.  
XU Lihua, XIE Deti. Response of soil organic matter content prediction accuracy to preprocessing of spectra and feature bands [J]. Jiangsu Journal of Agricultural Sciences, 2019, 35(6): 1340–1345. (in Chinese)
- [5] ZHANG Y, LI M Z, ZHENG L H, et al. Spectral features extraction for estimation of soil total nitrogen content based on modified ant colony optimization algorithm [J]. Geoderma, 2019, 333: 23–34.
- [6] 曹永研, 杨玮, 王懂, 等. 基于水分和粒度的土壤有机质特征波长提取与预测模型[J]. 农业机械学报, 2022, 53(增刊1): 241–248.  
CAO Yongyan, YANG Wei, WANG Dong, et al. Soil organic matter characteristic wavelength extraction and prediction model based on moisture and particle size [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2022, 53 (Supp. 1): 241–248. (in Chinese)
- [7] WARD K J, CHABRILLAT S, NEUMANN C, et al. A remote sensing adapted approach for soil organic carbon prediction based on the spectrally clustered LUCAS soil database [J]. Geoderma, 2019, 353: 297–307.
- [8] 王炜超, 杨玮, 崔玉露, 等. 基于 CatBoost 算法与图谱特征融合的土壤全氮含量预测[J]. 农业机械学报, 2021, 52(增刊): 316–322.  
WANG Weichao, YANG Wei, CUI Yulu, et al. Prediction of soil total nitrogen based on CatBoost algorithm and fusion of image spectral features [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021, 52 (Supp. ) : 316–322. (in Chinese)
- [9] 张鑫, 杨超, 刘洪斌, 等. 基于机器学习的植烟区土壤有机质和全氮含量预测[J]. 烟草科技, 2022, 55(8): 20–27.  
ZHANG Xin, YANG Chao, LIU Hongbin, et al. Predictions on organic matter and total nitrogen contents in tobacco-growing soil based on machine learning [J]. Tobacco Science & Technology, 2022, 55(8): 20–27. (in Chinese)
- [10] 胡国田, 尚会威, 谭瑞虹, 等. 不同土壤类型的有机质含量的可见-近红外光谱检测模型传递方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(10): 3148–3154.  
HU Guotian, SHANG Huiwei, TAN Ruihong, et al. Research on model transfer method of organic matter content estimation of different soils using VNIR spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(10): 3148–3154. (in Chinese)
- [11] MISHRA P, PASSOS D, MARINI F, et al. Deep learning for near-infrared spectral data modelling: hypotheses and benefits [J]. Trends in Analytical Chemistry, 2022, 157: 116804.
- [12] LIANG Z, GUO X, XU Z, et al. Soil properties: their prediction and feature extraction from the LUCAS spectral library using deep convolutional neural networks [J]. Geoderma, 2021, 402: 115366.
- [13] 刘兰军, 翟永庆, 郑俊俊, 等. 基于 PSO-CNN 的土壤氮含量可见/近红外光谱建模[J]. 光学技术, 2021, 47(4): 438–445.  
LIU Lanjun, ZHAI Yongqing, ZHENG Junjun, et al. Visible/near-infrared spectroscopy modeling of soil nitrogen content based on PSO-CNN [J]. Optical Technique, 2021, 47(4): 438–445. (in Chinese)
- [14] TSAKIRIDIS N L, KERAMARIS K D, THEOCARIS J D, et al. Simultaneous prediction of soil properties from VNIR-SWIR spectra using a localized multi-channel 1-D convolutional neural network [J]. Geoderma, 2020, 367: 114208.
- [15] QIAO H, SHI X, CHEN H, et al. Effective prediction of soil organic matter by deep SVD concatenation using FT-NIR spectroscopy [J]. Soil and Tillage Research, 2022, 215: 105223.
- [16] LEI T, SUN D W. Achieving joint calibration of soil Vis-NIR spectra across instruments, soil types and properties by an attention-based spectra encoding-spectra property decoding architecture [J]. Geoderma, 2022, 405: 115449.
- [17] SHEN Z, LEONARDO R L, BEHRENS T, et al. Deep transfer learning of global spectra for local soil carbon monitoring [J]. Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 2022, 188: 190–200.
- [18] DEVLIN J, CHANG M, LEE K, et al. BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding [C] // Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics, 2019.

- of carbon in the ecosystem[J]. Journal of Environmental Management, 2023,334(15):118529.
- [17] GORD N, SHARIFI A, SEYEDABADI M, et al. Development of two devices for high-throughput screening of ethanol-producing microorganisms by real-time CO<sub>2</sub> production monitoring[J]. Bioprocess and Biosystems Engineering, 2023,46(8):1209–1220.
- [18] ANDREA T, HAAKON E H, CAROLINE S M N, et al. Bioprocess monitoring: a moving horizon estimation experimental application[J]. IFAC – PapersOnLine, 2022,55(7):222–227.
- [19] TUVERI A, PÉREZ-GARCÍA F, LIRA-PARADA P A, et al. Sensor fusion based on extended and unscented Kalman filter for bioprocess monitoring[J]. Journal of Process Control, 2021,106:195–207.
- [20] MAROSE S, LINDEMANN C, ULMER R, et al. Sensor systems for bioprocess monitoring[J]. Trends in Biotechnology, 2015,17(1):30–34.
- [21] WANG X, RASHID I, ZHAO Z, et al. Machine learning algorithm integrated with real-time in situ sensors and physiochemical principle-driven soft sensors toward an anaerobic digestion-data fusion framework[J]. ACS ES&T Water, 2023,4(3):1061–1072.
- [22] BROWN S L, GOULSBRA C S, EVANS M G, et al. Low cost CO<sub>2</sub> sensing: a simple microcontroller approach with calibration and field use[J]. HardwareX, 2020,8:e00136.
- [23] BLACKSTOCK J M, COVINGTON M D, PERNE M, et al. Monitoring atmospheric, soil, and dissolved CO<sub>2</sub> using a low-cost, Arduino monitoring platform (CO<sub>2</sub> – LAMP): theory, fabrication, and operation[J]. Frontiers in Earth Science, 2019,7:313.
- [24] MARTIN C R, ZENG N, KARION A, et al. Evaluation and environmental correction of ambient CO<sub>2</sub> measurements from a low-cost NDIR sensor[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2017,10(7):2383–2395.
- [25] TATSUMI K, YAMAZAKI T, ISHIKAWA H. An open-source, low-cost measurement system for collecting hydrometeorological data in the open field[J]. Technologies, 2021,9(4):78.
- [26] FURST L, FELICIANO M, FRARE L, et al. A portable device for methane measurement using a low-cost semiconductor sensor: development, calibration and environmental applications[J]. Sensors, 2021,21(22):7456.
- [27] OH P, KANG S. Integrating artificial intelligence to chemistry experiment: carbon dioxide fountain[J]. Journal of Chemical Education, 2021,98(7):2376–2380.
- [28] SUPARTA W, WARSITA A, IRCHAM I. A low-cost development of automatic weather station based on Arduino for monitoring precipitable water vapor[J]. Indonesian Journal of Electrical Engineering and Computer Science, 2021,24(2):744–753.
- [29] DURSO P R, ARCIDIACONO C, CASCONE G. Assessment of a low-cost portable device for gas concentration monitoring in livestock housing[J]. Agronomy, 2023,13(1):5.
- [30] GAGNON S, L'HÉRAULT E, LEMAY M, et al. New low-cost automated system of closed chambers to measure greenhouse gas emissions from the tundra[J]. Agricultural and Forest Meteorology, 2016,228–229:29–41.
- [31] Infrared carbon dioxide module (model: MH-Z14B) user's manual V1.1 [EB/OL]. [https://www.winsen-sensor.com/d/files/infrared-gas-sensor/mh-z14b-co2-manual\(ver1\\_1\).pdf](https://www.winsen-sensor.com/d/files/infrared-gas-sensor/mh-z14b-co2-manual(ver1_1).pdf).
- [32] 才金玲, 胡秦博, 郑薇琳, 等. 低温秸秆降解菌研究进展[J]. 微生物学通报, 2024, 51(7): 2312–2325.  
CAI Jinling, HU Qinbo, ZHENG Weilin, et al. Research progress in straw-degrading psychrotrophic microorganisms [J]. Microbiology China, 2024, 51(7): 2312–2325. (in Chinese)
- [33] NZWEIG J M G, HEMMING D, MASEYK K, et al. Water limitation to soil CO<sub>2</sub> efflux in a pine forest at the semiarid "timberline" [J]. Journal of Geophysical Research, 2008,114(G3):1–14.
- [34] SHI W, DU S, MORINA J C, et al. Physical and biogeochemical controls on soil respiration along a topographical gradient in a semiarid forest[J]. Agricultural and Forest Meteorology, 2017,247:1–11.

(上接第398页)

- [19] DOSOVITSKIY A, BEYER L, KOLESNIKOV A, et al. An image is worth 16x16 words: transformers for image recognition at scale[C]//9th International Conference on Learning Representations, 2021.
- [20] ZHOU H Y, ZHANG S, PENG J, et al. Informer: beyond efficient transformer for long sequence time-series forecasting[C]// Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2021.
- [21] NG W, MINASNY B, MALONE B P, et al. Optimizing wavelength selection by using informative vectors for parsimonious infrared spectra modelling[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2019,158:201–210.
- [22] XU X, MA F, ZHOU J, et al. Applying convolutional neural networks (CNN) for end-to-end soil analysis based on laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) with less spectral preprocessing[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2022,199:107171.
- [23] ZHANG X, LIN T, XU J, et al. DeepSpectra: an end-to-end deep learning approach for quantitative spectral analysis[J]. Analytica Chimica Acta, 2019,1058:48–57.
- [24] 全国土壤普查办公室. 中国土壤[M]. 北京:中国农业出版社, 1998:860–934.
- [25] 沈善敏. 中国土壤肥力[M]. 北京:中国农业出版社, 1998:351–382.