



葛辰俊, 魏鲁誉, 杨增玲, 黄圆萍, 史卓林, 韩鲁佳. 秸秆原料堆肥过程参数的NIRS模型转移研究[J]. 中国农业大学学报, 2025, 30(07): 1-13.
GE Chenjun, WEI Luyu, YANG Zengling, HUANG Yuanping, SHI Zuolin, HAN Lujia. Study on NIRS model transfer for straw feedstock composting process parameters[J]. *Journal of China Agricultural University*, 2025, 30(07): 1-13.
DOI: 10.11841/j.issn.1007-4333.2025.07.01

秸秆原料堆肥过程参数的NIRS模型转移研究

葛辰俊 魏鲁誉 杨增玲* 黄圆萍 史卓林 韩鲁佳

(中国农业大学 工学院, 北京 100083)

摘要 为提高秸秆好氧堆肥近红外分析模型在不同光谱设备下的通用性和准确性,以玉米秸秆和奶牛粪便为原料,进行静态槽式好氧堆肥和膜覆盖好氧堆肥,采集堆肥全过程样本,分析含水率、总氮、总碳、有机质含量共4个堆肥过程参数,分别使用台式光谱仪和手持便携式光谱仪采集近红外光谱数据,并建立相关模型,通过直接校正算法(Direct standardization, DS)和典型相关分析算法(Canonical correlation analysis, CCA)实现台式和便携式光谱仪之间的共享。结果表明该2种算法均可用于堆肥过程参数的模型转移,但DS算法的表现更优。其中:含水率、总氮模型在使用模型转移算法后具有良好表现,便携式光谱仪的含水率模型使用模型转移算法后相对偏差误差RPD可达2.62,总氮含量模型RPD可达2.00;总碳、有机质含量模型虽未达到良好水平,但相较未使用模型转移算法有较大提升,对应模型的RPD分别由0.33、0.39提升到1.78、1.76。此外,本研究的2种算法对于不同仪器间的光谱差异进行了有效校正,降低了近红外光谱技术用于堆肥时仪器差异的限制,提高了不同光谱仪的共享性。综上,本研究可为堆肥过程现场高频次检测提供新解决策略。

关键词 好氧堆肥; 堆肥过程参数; 近红外光谱; 模型转移

中图分类号 S216.1

文章编号 1007-4333(2025)07-0001-13

文献标志码 A

Study on NIRS model transfer for straw feedstock composting process parameters

GE Chenjun, WEI Luyu, YANG Zengling*, HUANG Yuanping, SHI Zuolin, HAN Lujia

(College of Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China)

Abstract To enhance the universality and accuracy of the near-infrared analysis model for straw aerobic composting across different spectral devices. Corn stover and cow manure were used as raw materials to conduct static trough aerobic composting and membrane-covered aerobic composting. Samples were collected throughout the composting process, and four key parameters moisture content, total nitrogen, total carbon, and organic matter content were analyzed. Near-infrared spectra were collected using benchtop and handheld spectrometers, and corresponding predictive models were developed. Model transfer between the two instruments was achieved using Direct Standardization (DS) and Canonical Correlation Analysis algorithms, enabling better compatibility and data sharing between the benchtop and portable devices. The results demonstrate that both algorithms effectively facilitate the transfer of models for composting process parameters, with the DS algorithm exhibiting superior performance. Specifically, the moisture content and total nitrogen models exhibit good performance after model transfer. The moisture content model of the portable spectrometer achieved an Ratio of Prediction to Deviation (RPD) of 2.62, and

收稿日期: 2024-12-15

基金项目: 国家重点研发计划(2022YFD2002101)

第一作者: 葛辰俊(ORCID:0009-0005-0307-3074),博士研究生,E-mail:gechenjun@cau.edu.cn

通讯作者: 杨增玲(ORCID:0000-0002-1146-1350),教授,主要从事农业信息智能感知机理与方法及无损检测技术,E-mail:yangzengling@cau.edu.cn

the total nitrogen model reached an RPD of 2.00. While the total carbon and organic matter content models did not achieve the same high performance levels, there was a significant improvement compared to models without transfer. Their RPD values increased from 0.33 and 0.39 to 1.78 and 1.76, respectively. The two algorithms effectively corrected spectral discrepancies between instruments, mitigating the limitations of instrument variation in near-infrared spectroscopy for composting applications and enhancing the interoperability of different spectrometers. This study provides a novel solution for high-frequency on-site monitoring of the composting process, offering practical strategies for field applications.

Keywords aerobic composting; composting process parameters; NIRS; model transfer

好氧堆肥是近些年来解决畜禽粪便和农作物秸秆等农业固体废弃物污染问题并实现其资源化利用的有效途径之一^[1-2],是一种利用好氧微生物在有氧条件下分解有机废弃物(如农作物秸秆、畜禽粪便等),最终生成可利用的肥料的过程。好氧堆肥过程受到诸多关键参数的影响,包括温度^[3]、含水率^[4]、有机质含量^[5]、碳氮比^[6]等。这些参数相互作用,相互影响,呈现出复杂的非线性关系^[7-8]。因此,实现对于堆肥过程中关键参数的及时、便携且低成本的检测,确保对堆肥过程的有效控制,可以提升堆肥效率及有机肥质量^[9]。在对好氧堆肥过程关键的参数监测中,传统的分析方法显露出检测步骤繁琐,需要耗费大的弊端。

近红外光谱(Near-infrared spectroscopy, NIRS)分析技术作为一种快速分析手段,具有分析简便、分析速度快、无损、操作技术要求低等优势^[10],已在药品^[11]、食品^[12]、油品^[13]等行业被广泛使用。为了满足生产效率和实际需求,近年来便携式光谱仪越来越受到人们的关注并得到广泛应用,而在对堆肥过程关键参数的测定中,定标模型建立目前通常采用精密度高、分辨率高、光能利用率高、不受杂散光影响的实验室台式光谱仪建立。相比之下,采用体积小、质量轻的便携式光谱仪检测堆肥过程关键参数的应用较少,主要是由于便携式光谱仪的检测精度低,光谱信号的信噪比相较于台式光谱仪较差。台式光谱仪很难在堆肥现场进行光谱扫描,因此,对堆肥过程关键参数的实时检测,则需要依赖便携式光谱仪。

不同光谱仪的光程长度、光源强度、分光系统等存在差异,由光谱仪产生的差异会导致在一台光谱仪上所建立的定标模型很难在另一台光谱仪上适用^[14],而重新建立一台光谱仪的近红外定标模型通常比较费时费力^[15]。因此,将合适的模型转移技术运用到好氧堆肥过程关键参数的快速检测模型中,以提高不同仪器模型的共享性,对于提高农业

废弃物资源化利用水平具有非常重要的意义。

模型转移是解决模型在不同仪器上通用性问题的总称,其基本原理是尽量减小同一样品在不同仪器上测量信号的不一致性,消除同一仪器间不同时间参数的影响因素^[16]。模型转移算法可以分为有标样和无标样2种,其中:有标样算法较为常见^[17]。这类算法在使用过程中需要在主仪器和从仪器获取的光谱中选取标样集光谱数据,找出2台光谱仪之间的数学关系。例如直接校正算法(Direct standardization, DS)^[18-19]、典型相关分析算法(Canonical correlation analysis, CCA)^[20-21]。近年来,在农业领域对模型转移已有很多相关研究。王红鸿等^[22]利用DS算法和具有稳定一致光谱信号的波长算法(SWCSS)结合,在纸浆中纤维素含量的检测中,预测均方根误差(RMSEP)降低了1.43%,实现了不同地域、不同批次的光谱仪之间的模型转移。刘智健等^[23]在对木质素含量的预测模型中,使用DS算法令2台从仪器的相对偏差误差(Ratio of prediction to deviation, RPD)分别从0.28、0.31提升到了3.39、2.86,实现了不同仪器间的模型转移。Yang等^[24]研究了烟草中糖和尼古丁含量的模型转移方法,利用CCA算法在台式和便携式光谱仪之前实现了RMSEP从2.17、0.70降低到2.02、0.39,有效提升了便携式光谱仪的模型性能。

综上,在多个领域中,模型转移方法均有效减少不同设备、批次或环境对光谱模型的影响,提高了模型的适用性和稳健性,从而降低重新建模的成本。然而,在堆肥过程参数实时监测的研究中缺乏使用模型转移方法提升便携式仪器模型性能的研究。因此,本研究拟以玉米秸秆和奶牛粪便为原料,进行静态槽式好氧堆肥和膜覆盖好氧堆肥,采集整个堆肥过程中的样品,分别使用台式傅里叶变换近红外光谱仪(主仪器)和短波便携式近红外光谱仪(从仪器),选择经典的DS算法和CCA算法探

究不同近红外光谱仪下的堆肥样品含水率、总氮、总碳、有机质含量模型转移情况,以期提高秸秆好氧堆肥近红外分析模型在不同光谱设备下的通用性和准确性。

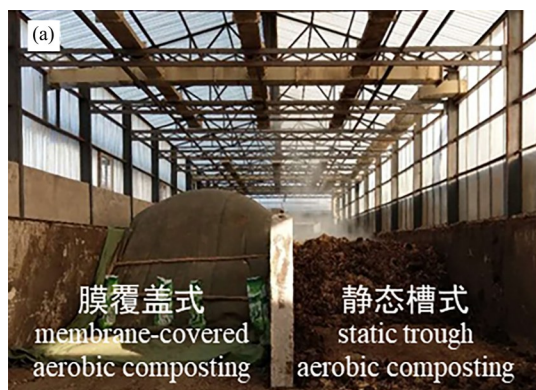
1 材料与方法

1.1 样品采集及制备

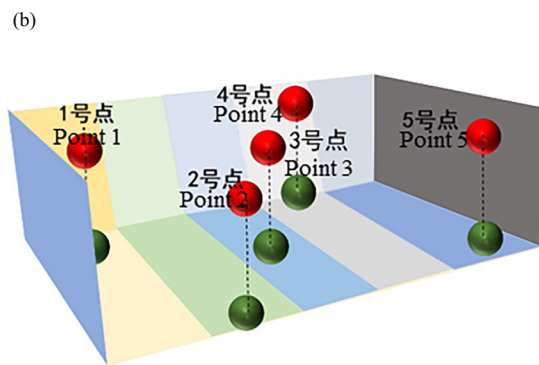
堆肥样品取自于北京市北郎中有机肥料生产厂间进行的发酵试验,试验所用发酵槽的长度为44 m,宽度为3.85 m,高度为1.8 m,堆肥原料 m (奶牛粪): m (玉米秸秆)=10:1。奶牛粪便取自北京市顺义区的养殖场,玉米秸秆取自密云区农机合作社,堆肥时添加质量占总堆体质量的40%的腐熟堆

肥用于调节水分。为提高近红外光谱数据的代表性,在2条堆肥槽中分别开展静态槽式好氧堆肥^[25-26]和膜覆盖好氧堆肥^[27-28]。膜覆盖好氧堆肥即在堆体上覆盖以聚四氟乙烯为核心材料的半渗透性功能膜。膜覆盖式好氧堆肥和静态槽式好氧堆肥的堆肥现场详见图1(a)。

取样时间分别为堆肥开始的第0、4、8、12、16、20、24、28、32、36天。为消除堆肥过程中堆体在不同位置的差异,在发酵槽的上层(0~30 cm)和下层(80~110 cm)共计5个点取样,堆肥样品的质量约为1 kg,取样点分布如图1(b)所示。取样后在-20℃下冷冻存放,在化学值测定分析和采集光谱时常温解冻至室温。



(a) 堆肥现场
(a) Composting production site



(b) 取样点示意图
(b) Sampling location schematic diagram

图1 堆肥现场及取样点示意图

Fig. 1 Composting site and schematic diagram of sampling points

1.2 堆肥过程关键参数测定方法

含水率(MC)采用热风干燥法进行测定。取大约100 g堆肥过程样品在105℃干燥箱(上海精宏实验设备有限公司,中国)中恒温干燥24 h。

总氮含量(TN)及总碳含量(TC)采用元素分析仪(Elementer公司,德国)测定。取干燥粉碎的堆肥过程样品约40.0 mg,在元素分析仪的CHNS模式下的标准方法测定。

有机质含量(OM)通过马弗炉燃烧法测定。取堆肥过程干燥粉碎样品大约1.0 g放于575℃的马弗炉(上海精宏实验设备有限公司,中国)中反应6 h。

1.3 样品近红外光谱采集

主仪器为Spectrum 400傅里叶变换近红外光谱

仪(Perkin Elmer公司,美国),如图2(a)所示。该光谱仪采用卤钨灯光源和铟镓砷检测器,光谱采集范围为10 000~4 000 cm^{-1} 、光谱分辨率为8 cm^{-1} 、扫描次数为32次。在采集堆肥样品光谱数据前扫描背景和暗电流,背景使用仪器内置聚四氟乙烯白板。光谱采集时,将样品装满仪器配套样品杯,放于积分球采集窗口后在旋转模式下采集光谱数据。

从仪器为Micro-NIR 1700便携式微型近红外光谱仪(JDSU公司,美国),如图2(b)所示。该光谱仪采用线性滤光片分光元件和128线元非制冷铟镓砷二极管阵列检测器,光谱采集范围为950~1 650 nm、光谱分辨率为6.24 nm、扫描速度为50次/s。在使用时需每隔10 min扫描暗电流和背景,采集样品时直接将传感器探头插入样品袋中。

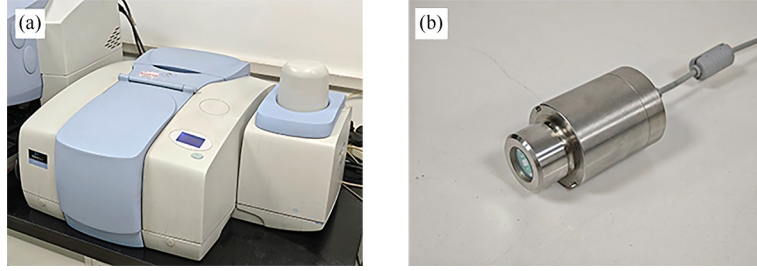


图2 本研究选用的近红外光谱仪主仪器(a)和从仪器(b)

Fig. 2 The master instrument (a) and slave instrument (b) used in this study

为保证光谱具有良好的信噪比,主仪器在采集时重复装填3次,从仪器重复扫描5次,均取平均值作为样品光谱。

1.4 定标模型的建立及评价

建立模型之前首先需要确定合适的预处理方法,来消除光谱中与样品性质无关的信息,然后采用偏最小二乘回归(Partial least squares regression, PLSR)建立定标模型。图1(b)中3号点的40个样品作为待测样品(外部验证集),这组样品不参与堆肥过程关键参数定标模型的建立,仅用于完成模型转移及验证模型转移效果;其余4个取样点的160个样品用于建立定标模型,为验证模型效果,采用浓度梯度法,按3:1的比例将160个样品划分为校正集和验证集,其中120个样品作为校正集,40个样品作为验证集。

利用决定系数(R^2)和相对偏差误差(RPD)进行模型的评价。RPD的计算公式如下^[29-30]:

$$RPD = \frac{SD}{RMSEP} \quad (1)$$

式中:SD为验证集化学测量值的标准差;RMSEP为验证集的均方根误差。其中,当 $R^2 > 0.90$, $RPD > 3.00$ 时,认为该模型非常优秀;当 $0.82 < R^2 \leq 0.90$, $2.50 \leq RPD \leq 3.00$ 时,认为该模型效果良好;当 $0.66 < R^2 \leq 0.82$, $2.00 < RPD \leq 2.50$ 时,模型可进行近似定量预测;当 $0.50 < R^2 \leq 0.66$, $1.50 \leq RPD < 2.00$ 时,认为该模型只能进行高低浓度鉴别;当 $R^2 \leq 0.50$, $RPD \leq 1.50$ 时,认为模型不可用。

使用相对标准偏差(Relative standard deviation, RSD)评估模型预测结果的稳定性,反映模型的可靠性。具体计算公式如下^[29]:

$$RSD = \frac{RMSEP}{MEAN} \quad (2)$$

式中:MEAN为验证集样品平均值。当 $RSD < 5\%$ 时模型效果良好; $RSD < 10\%$ 时模型可用于定量

分析。

1.5 模型转移算法

1.5.1 直接校正算法(DS)

DS算法通过在主从仪器中选取的标样集 $X_{M,cal}^S$, $X_{S,cal}^S$ 求得转化矩阵 F ,转化矩阵 F 的求解公式为:

$$X_{M,cal}^S = X_{S,cal}^S \cdot F \quad (3)$$

$$F = X_{S,cal}^{S+} \cdot X_{M,cal}^S \quad (4)$$

式中: $X_{M,cal}^S$ 为主仪器标样集光谱矩阵; $X_{S,cal}^S$ 为从仪器标样集光谱矩阵; $X_{S,cal}^{S+}$ 为从仪器标样集广义逆矩阵。通过计算得到的 F 矩阵,对从仪器的待测样品光谱 $X_{S,val}$ 先进行校正:

$$X_{S,valp} = X_{S,val} \cdot F \quad (5)$$

随后用主仪器模型预测校正后的从仪器待测样品光谱。

1.5.2 典型相关分析算法(CCA)

CCA算法是一种利用综合变量间的相关关系来反映2组指标间整体相关性的多元统计分析方法。CCA是通过对比主从仪器的标样集 $X_{M,cal}^S$, $X_{S,cal}^S$ 的典型相关分析:

$$L_M = X_{M,cal}^S \cdot W_M \quad (6)$$

$$L_S = X_{S,cal}^S \cdot W_S \quad (7)$$

式中: L_M , L_S 为主从仪器标样集的典型变量, W_M , W_S 为主从仪器标样集的典型向量

$$F_1 = L_S^+ \cdot L_M \quad (8)$$

$$F_2 = L_M^+ \cdot X_{M,cal}^S \quad (9)$$

$$F = F_1 \cdot F_2 \cdot W_M \quad (10)$$

式中: L_M^+ 和 L_S^+ 分别为 L_M 和 L_S 的广义逆矩阵。最后,采用式(10)得到的转换矩阵 F 对从光谱仪的测样品光谱 $X_{S,val}$ 进行转换。

$$X_{S,valp} = X_{S,val} \cdot F \quad (11)$$

1.6 数据分析软件

NIRS定标模型通过含有PLS_Toolbox 8.2

(Eigenvector Research, Inc., 美国)的 MATLAB R2016a(MathWorks,美国)中编程实现。

2 结果与讨论

2.1 样品分集及堆肥过程关键参数统计分析

建模样品的和外部验证集样品的化学值统计结果分别见表 1 和表 2。由表 1 可见:建模样品的含水率范围为 32.08%~68.22%;总氮含量范围为 0.48%~1.09%;总碳含量范围为 8.02%~13.33%;有机质含量范围为 16.31%~26.80%。所测堆肥样品的性质有较大的变异,化学值覆盖范围广且覆盖了堆肥全过

程,可以用于建立近红外定标模型并进行过程分析,这与样品来自不同的堆肥方式、不同的堆肥时间以及不同的取样深度的情况相符。由表 2 可见:外部验证集样品的含水率范围为 33.40%~64.27%;总氮含量范围为 0.57%~1.06%;总碳含量范围为 8.80%~13.47%;有机质含量范围为 17.12%~22.82%。尽管不同取样点的发酵情况存在差异,但是外部验证集化学值覆盖范围和建模样品的化学值覆盖范围基本一致,可以用于验证分析;此外,校正集、验证集、待测样品集的均值和标准差均接近,表明校正集和验证集均具有良好的代表性。

表 1 建模样品的化学值统计
Table 1 Statistical analysis of chemical values of modeled samples

指标 Index	校正集 Calibration set				验证集 Validation set			
	样品量 No. of samples	平均值/% Mean	标准差/% SD	范围/% Range	样品量 No. of samples	平均值/% Mean	标准差/% SD	范围/% Range
含水率 MC	120	50.46	6.69	32.08~68.22	40	50.31	6.70	33.75~66.26
总氮含量 TN	120	0.78	0.12	0.48~1.09	40	0.78	0.12	0.56~1.06
总碳含量 TC	120	10.54	1.05	8.02~13.33	40	10.53	1.04	8.36~12.92
有机质含量 OM	120	20.59	1.98	16.31~26.80	40	20.54	1.93	16.61~25.22

表 2 外部验证集样品的化学值统计
Table 2 Statistical analysis of chemical values of external validation samples

指标 Index	样品量 No. of samples	平均值/% Mean	标准差/% SD	范围/% Range
含水率 MC	40	48.55	8.28	33.40~64.27
总氮含量 TN	40	0.81	0.40	0.57~1.06
总碳含量 TC	40	10.82	1.30	8.80~13.47
有机质含量 OM	40	21.96	2.74	17.12~22.82

槽式和膜覆盖好氧堆肥过程中含水率、总氮含量、总碳含量、有机质含量随堆肥时间变化的测算结果见表 3。数据为同一天采集的 10 个样品化学测量值的平均值和标准差。所有关键参数化学值统计分析均为湿基基础。可见,随着堆肥的进行,堆

体的水分呈下降趋势,主要由于堆体温度升高引起水分蒸发、通风水分蒸发以及有机物分解产生水引起。整体来看,膜覆盖堆体的含水率高于槽式堆肥堆体,这是由于功能膜能够阻挡水分蒸发,在膜内形成一层水膜,使水分可以再次回到堆体。随着堆

表 3 堆肥过程中各指标随堆肥时间的变化
Table 3 Changes in composting process parameters over composting time

堆肥时间/d Composting time	含水率/% MC		总氮含量/% TN		总碳含量/% TC		有机质/% OM	
	槽式 Static trough	膜覆盖 Membrane-covered	槽式 Static trough	膜覆盖 Membrane-covered	槽式 Static trough	膜覆盖 Membrane-covered	槽式 Static trough	膜覆盖 Membrane-covered
0	55.64±6.11Aa	56.16±6.38Aa	0.71±0.05Aa	0.69±0.06Aabc	10.61±0.52Aa	10.24±0.65Aab	21.51±1.28Aa	20.78±1.19Aabc
4	51.84±3.39Aa	55.11±7.68Babc	0.72±0.05Aa	0.64±0.11Ba	10.60±0.67Aa	10.17±1.60Aab	21.10±0.83Aa	20.79±3.29Aabc
8	51.07±4.75Aab	54.23±4.84Babc	0.76±0.05Aa	0.68±0.05Bab	11.08±0.59Aa	10.68±0.59Aab	21.96±1.24Aa	21.18±1.11Abc
12	50.08±7.32Aabc	55.46±4.98Bab	0.79±0.10Aab	0.67±0.06Bab	10.86±1.19Aa	10.15±0.61Aab	21.80±2.45Aa	20.03±1.69Aabc
16	50.33±7.55Aab	52.74±8.00Babcd	0.79±0.11Aab	0.74±0.15Babcd	10.71±1.42Aa	10.27±1.59Aab	21.07±2.71Aa	20.77±3.14Aac
20	45.48±7.36Abc	48.38±5.53Bd	0.87±0.12Abc	0.78±0.12Bcd	11.12±1.24Aa	10.80±1.41Ab	21.64±3.14Aa	21.56±2.68Abc
24	44.91±8.37Abc	49.57±7.18Bcd	0.91±0.14Ac	0.76±0.14Bbcd	10.85±1.52Aa	10.00±1.37Aab	21.25±2.77Aa	19.45±2.45Aabc
28	43.78±4.01Ac	47.74±3.21Bd	0.89±0.06Ac	0.84±0.06Bd	11.31±0.57Aa	10.62±0.65Aab	21.72±1.40Aa	20.54±1.18Aabc
32	42.55±6.52Acd	50.81±3.94Babcd	0.90±0.11Ac	0.84±0.10Bd	10.90±1.20Aa	10.29±0.84Aab	21.20±2.18Aa	19.09±1.61Aab
36	44.87±6.91Ab	50.25±3.62Bbcd	0.88±0.11Aabc	0.79±0.09Bd	10.71±1.17Aa	9.60±0.78Aa	20.77±2.26Aa	18.84±1.60Bb

注：表中数值为平均值±标准偏差。表中结果均为湿基基础。同一堆肥时间，数据后的不同大写字母表示不同堆肥模式的指标具有显著性差异 ($P<0.05$)；同一堆肥模式，数据后的不同小写字母表示不同堆肥时间的指标具有显著性差异 ($P<0.05$)。

Note: Values in the table are presented as mean ± standard deviation. The results are all based on a wet basis. Within the same composting time, different capital letters following the values indicate significant differences among the indexes of different composting modes ($P<0.05$). Different lowercase letters indicate significant differences at different composting times ($P<0.05$) for the same composting mode.

肥的进行,微生物逐步消耗氮源、碳源,使堆体的绝对总氮、总碳含量降低。尽管含水率在逐渐降低,总氮的消耗速度不及水分的散失速度,总碳的消耗速度大于水分的散失速度,使总氮含量呈上升,而总碳含量下降。随着堆肥的进行,微生物活动消耗有机质,有机质绝对含量下降,但水分散失,使有机质相对含量下降不明显。整个堆肥过程中,膜覆盖堆体的有机质含量低于槽式堆肥堆体,主要由于功能膜使堆体内空气更均匀,有利于微生物分解有机质。因此,堆肥过程中,不同模式的堆肥关键参数均存在显著性差异性;同种模式下,不同发酵时间的堆肥关键参数化学值也存在显著性差异。

2.2 波长点匹配结果

由于主从仪器的光谱数据所涵盖的波长范围

有所差异,因此波长点的匹配方向为将从仪器的波长点以主仪器为标准进行匹配。对主仪器截取与从仪器重合波段的光谱,即1 000~1 650 nm,主仪器波长截取前后的光谱见图3(a₁)和(a₂)。可见截取后去除了1 650~2 500 nm波段的同时,也丢失了一些光谱信息,需要进一步验证被截取的波段是否包含了样品的关键信息,只有截取后的定标模型与全波段定标模型无明显差异,模型转移才有实际意义。对从仪器使用3次样条插值法^[31-32]增加波长点,使得主从仪器波长点数一致。最终匹配后波长点数为2018。从仪器数据匹配前后光谱见图3(b₁)和(b₂)。可见从仪器光谱进行数据匹配前后光谱无明显差异,但仍需要进一步对比不同波段长度下的定标模型。

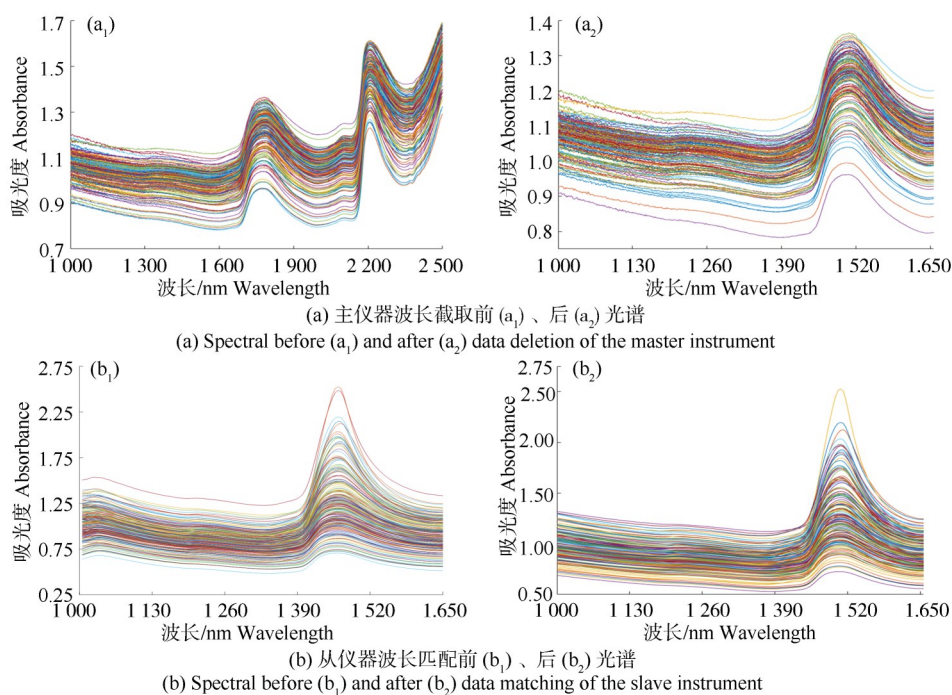


图3 近红外光谱主仪器数据删减前后和从仪器数据匹配前后的光谱图像对比

Fig. 3 Comparison of spectral images before and after data deletion from the master instrument and before and after data matching from the slave instrument

建立波段截取前后的主仪器的定标模型,4个指标的模型前后变化见表4。可见:其4个指标的定标模型在波段删减前后的 R_C^2 、 R_{CV}^2 、 R_P^2 基本无变化,表明模型的稳定性基本无变化;而RMSEC、RMSECV、RMSEP略有降低,模型的预测误差减小,模型的预测精度略有提升。上述结果表明主仪器截取波段不会对主仪器模型产生负面影响,可以

进行后续模型转移。

建立波长匹配前后的从仪器的定标模型,4个指标的模型前后变化见表5。可见数据匹配后,从仪器总氮和总碳含量的模型效果基本不变,而含水率和有机质模型的 R_C^2 、 R_{CV}^2 、 R_P^2 均有下降,其中:有机质含量模型 R_P^2 为0.64,较匹配前的0.74下降最为明显,而RMSEC、RMSECV、RMSEP均有上升,模型效果下

表4 主仪器波段截取前后4个指标的模型对比

Table 4 Model comparison of 4 indexes before and after the master instrument data deletion

指标 Index	状态 Status	R_c^2	RMSEC/%	R_{cv}^2	RMSECV/%	R_p^2	RMSEP/%
含水率	截取前	0.92	1.88	0.91	2.02	0.88	2.30
MC	截取后	0.94	1.57	0.91	1.92	0.90	2.16
总氮含量	截取前	0.83	0.05	0.78	0.06	0.83	0.05
TN	截取后	0.86	0.04	0.78	0.06	0.86	0.05
总碳含量	截取前	0.73	0.55	0.69	0.59	0.76	0.52
TC	截取后	0.83	0.44	0.73	0.55	0.80	0.51
有机质含量	截取前	0.79	0.87	0.75	0.95	0.76	0.96
OM	截取后	0.85	0.73	0.75	0.96	0.83	0.78

注： R_c^2 、 R_{cv}^2 、 R_p^2 分别为校正决定系数、交叉验证决定系数、预测决定系数。
Note: R_c^2 , R_{cv}^2 and R_p^2 are the correction coefficient of determination, cross-validation coefficient of determination, and prediction coefficient of determination, respectively.

表5 从仪器波长匹配前后4个指标的模型对比

Table 5 Model comparison of 4 indexes before and after the slave instrument data matching

指标 Index	状态 Status	R_c^2	RMSEC/%	R_{cv}^2	RMSECV/%	R_p^2	RMSEP/%
含水率	匹配前	0.87	2.37	0.83	2.80	0.85	2.71
MC	匹配后	0.84	2.66	0.83	2.77	0.81	2.85
总氮含量	匹配前	0.68	0.07	0.65	0.07	0.77	0.06
TN	匹配后	0.69	0.07	0.66	0.07	0.77	0.06
总碳含量	匹配前	0.68	0.59	0.65	0.62	0.65	0.65
TC	匹配后	0.68	0.59	0.65	0.62	0.68	0.64
有机质含量	匹配前	0.73	1.02	0.69	1.10	0.74	0.98
OM	匹配后	0.69	1.10	0.67	1.13	0.64	1.16

降,原因可能是插值导致光谱数据波长点增多,但包含有效信息的数据点数量不变,引入了部分冗余信息。但各参数模型预测精度整体差距较小,仍然满足模型转移的需求,数据匹配并未对从仪器光谱数据产生明显影响,可进行后续模型转移。

对截取和波长匹配后的主从仪器光谱进行主成分分析(Principle component analysis,PCA),第一和第二主成分的分散点图见图4。可见第一和第二主成分共同解释了99.23%的光谱信息。通过置信椭圆(C Confidence ellipse)可以看出主从仪器光谱之间仍有明显差异,无法直接利用主仪器定标模型对从仪器光谱进行预测,需要采用合适的模型转移算法实现对光谱数据的校正,从而使定标模型共享具有可行性。

2.3 模型转移结果

对经过DS算法、CCA算法转移后的从仪器光谱

和主仪器光谱进行主成分分析,主成分分析结果见图5。可见:经过2种转移算法之后,主从仪器的光谱在第一和第二主成分空间上的分布重合;2种方法均不同程度地消减了不同光谱仪间的光谱信号差异。结果表明,DS算法的主从仪器光谱的置信椭圆重合面积更大,意味着相较于CCA算法,DS算法转化了从仪器光谱的更多有效信息,主从仪器的光谱有更多相似特征,展现出了更强的处理复杂光谱的能力,能够在面对具有高度相关性和多重共线性的光谱数据时,更好地捕捉复杂关系,提高预测的精度。

分别选取10、15、20、25、30、35、40、45、50共9个标样数梯度进行DS、CCA算法的模型转移,以RMSEP最小为原则选择最合适的标样数。RMSEP随标样数的变化见图6。可见:采用DS算法时,含水率、总氮含量、总碳含量、有机质含量模型的标样数分

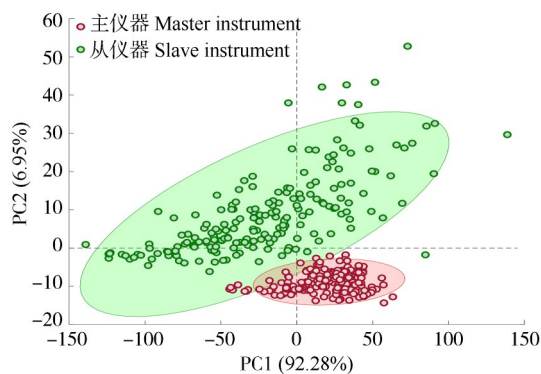
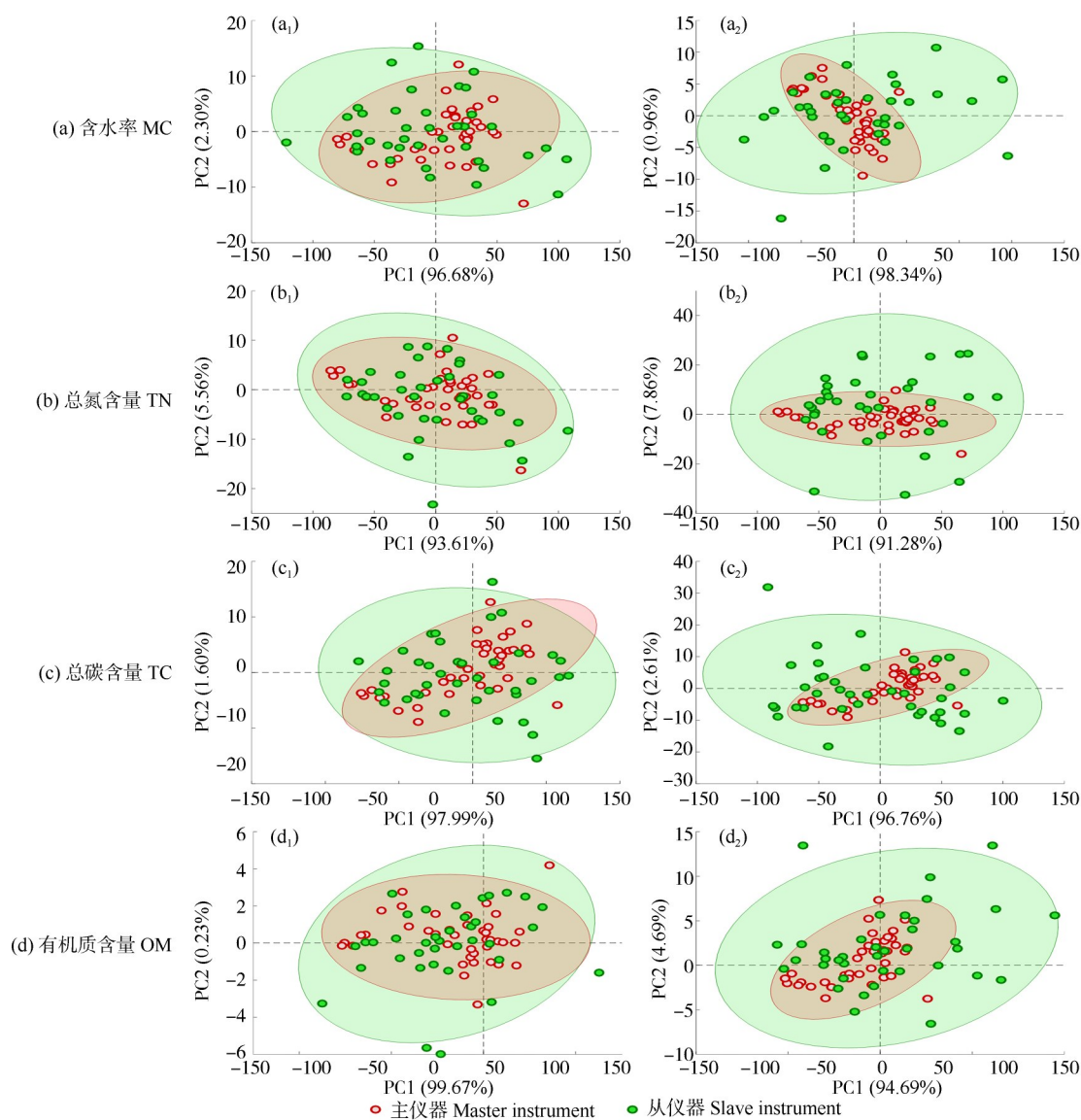


图 4 波长点匹配后两台仪器的光谱主成分分析

Fig. 4 Spectral principal component analysis after wavelength point matching



左侧图为直接校正算法 DS 分析结果；右侧图为典型相关分析算法 CCA 分析结果。

The images on the left show the direct correction analysis results; those on the right show the canonical correlation analysis results.

图 5 从仪器迁移后的光谱和主仪器光谱的主成分分析结果

Fig. 5 Principal component analysis results of the transferred spectra and the spectra of master instrument

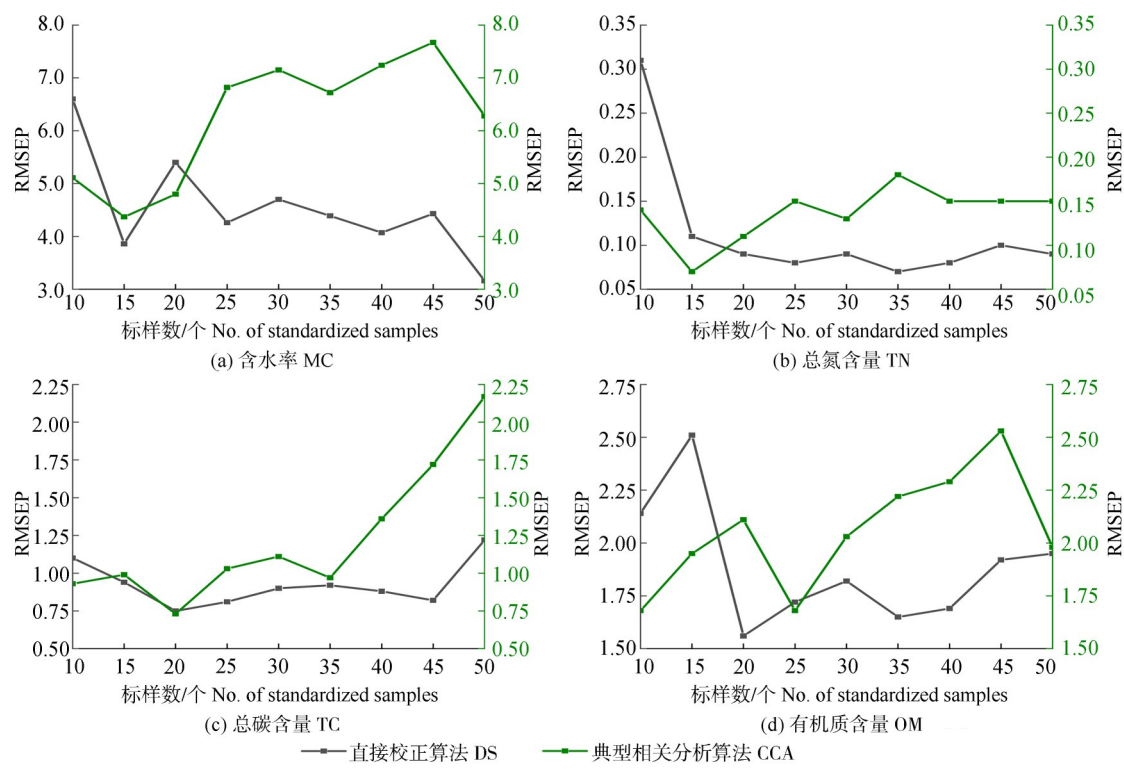


图6 DS和CCA算法随标样个数改变时RMSEP的变化
Fig. 6 Variation of RMSEP with the number of standardized samples

别为50、35、20、20;采用CCA算法时,含水率、总氮含量、总碳含量、有机质含量模型的标样数分别为15、15、20、25。并且DS算法相较于CCA算法,模型RMSEP随标样数变化波动较小。

使用基于2种模型转移算法建立的定标模型对待测样品集的样品进行预测,不使用模型转移算法和使用不同算法的预测结果见表6。可见:在不使用模型转移算法时,利用主仪器的堆肥关键参数定标模型直

表6 模型转移结果对比
Table 6 Comparison of model transfer results

指标 Index	转移算法 Method	标样数 No. of standardized samples	R_p^2	RMSEP/%	RPD	RSD/%
含水率 MC	无		0.02	26.06	0.32	53.68
	直接校正	50	0.85	3.16	2.62	6.51
	典型相关分析	10	0.75	4.37	1.89	9.00
总氮含量 TN	无		0.15	0.91	0.15	112.35
	直接校正	25	0.76	0.07	2.00	8.64
	典型相关分析	15	0.70	0.07	2.00	8.64
总碳含量 TC	无		0.08	4.00	0.33	36.97
	直接校正	25	0.68	0.75	1.73	6.93
	典型相关分析	25	0.71	0.73	1.78	6.74
有机质含量 OM	无		0.06	7.11	0.39	32.38
	直接校正	10	0.62	1.56	1.76	7.10
	典型相关分析	10	0.68	1.68	1.63	7.65

接预测波长点匹配后的从仪器的待测样品光谱时,4种关键参数的预测结果的RPD均低于0.50,模型基本不可用;使用DS和CCA转移算法对光谱进行处理之后,各模型对待测样品的预测结果有明显提升。此外,对于含水率和总氮含量的预测,在采用DS算法进行转移后,预测效果更优,含水率预测结果的 R_p^2 达到0.85,RPD由0.32提升至2.62;总氮含量预测结果的 R_p^2 达到0.76,RPD由0.15提升至2.00;2种转移算法对总碳含量的预测精度的提升相似, R_p^2 从0.08分别提升到了0.68、0.71,RPD则从0.33分别提升到了1.73、1.78;对于有机质含量的预测,DS算法略优于CCA算法, R_p^2 从0.06提升到0.62,RPD从0.39提升到1.76。

综上,DS算法可以更好地缩减从仪器匹配后光谱和主仪器截取后光谱的差距,使二者在主成分空间中的差异更小;在面对标样变化时,提供了更稳定的RMSEP变化;在预测外部验证样品时,模型预测准确性也更优。分析认为,DS算法在模型转移中的表现优于CCA算法,这与刘耀瑶等^[33]的研究结果一致,DS算法的广适用性使其在面对仪器漂移引起的波长漂移、基线漂移等复杂光谱情况时,相较于依赖光谱间典型相关性的CCA算法更稳健。此外,DS算法采用直接变换矩阵的方式来匹配光谱数据,而CCA算法需要将数据进行投影,在这一过程中可能导致信息的丢失,从而降低模型的预测性能。CCA算法通常对数据有更高的要求^[34],例如,对标样的数量要求更高,对光谱的信噪比要求更高,需要更完整且一致的数据。而在堆肥过程监测中,通常从堆肥现场采集的数据无法满足这些要求,因此,DS算法更适合在堆肥过程监测的模型转移中使用,另外,2种算法的差异也在水稻土壤^[35]、食用油^[36]、空气质量监测^[37]等方面得到了验证。

3 结 论

为了克服台式光谱仪无法在现场采集光谱、便携式光谱仪无法直接利用台式光谱仪获取的高精度模型的问题,本研究使用台式和便携式光谱仪分别采集秸秆牛粪堆肥全过程光谱,针对含水率、总氮、总碳、有机质含量4个指标,采用DS和CCA方法分别对便携式光谱仪采集的光谱进行转移。主要结论如下:

1)不同的堆肥方式对近红外定标模型的建立几乎没有影响,在实际应用中,可以将膜覆盖堆肥和槽式堆肥的数据共同应用于同一个定标模型。

2)在未使用模型转移算法,仅将光谱波长点进行匹配时,2种光谱仪之间不能实现模型共享,在对外部验证样品集的预测中精度很低。而通过DS算法和CCA算法进行模型转移,RPD由最低0.15提升至最高2.62,RSD由最高112.35%降低至最低6.51%,均可以显著提升模型的预测精度。

3)DS算法处理仪器漂移、光谱噪声大的光谱时更具优势,通过直接变换矩阵的方式,相较于CCA算法保留了更多的有效信息,在处理堆肥过程分析的数据时,使用DS算法后的模型精度更好。

转移后的模型均可用于实际堆肥过程关键参数检测,这为堆肥过程现场高频次检测提供了新的解决策略。

参考文献 Reference

- [1] Al-Suhaibani N, Selim M, Alderfasi A, El-Hendawy S. Comparative performance of integrated nutrient management between composted agricultural wastes, chemical fertilizers, and biofertilizers in improving soil quantitative and qualitative properties and crop yields under arid conditions[J]. *Agronomy*, 2020, 10(10): 1503
- [2] 曾庆东, 刘孟夫. 好氧堆肥技术与装备在农业废弃物资源化中的应用[J]. *现代农业装备*, 2018, 39(2): 53-57
- [3] Zeng Q D, Liu M F. Application of aerobic composting technology and equipment in agricultural waste recycling [J]. *Modern Agricultural Equipment*, 2018, 39(2): 53-57 (in Chinese)
- [4] Ji Z Y, Zhang L Y, Liu Y W, Li X Q, Li Z J. Evaluation of composting parameters, technologies and maturity indexes for aerobic manure composting: A meta-analysis [J]. *Science of The Total Environment*, 2023, 886: 163929
- [5] Yin J, Xie M J, Yu X Q, Feng H J, Wang M Z, Zhang Y F, Chen T. A review of the definition, influencing factors, and mechanisms of rapid composting of organic waste [J]. *Environmental Pollution*, 2024, 342: 123125
- [6] Pizzanelli S, Calucci L, Forte C, Borsacchi S. Studies of organic matter in composting, vermicomposting, and anaerobic digestion by ^{13}C solid-state NMR spectroscopy [J]. *Applied Sciences*, 2023, 13(5): 2900
- [7] Chen L, Chen Y N, Li Y P, Liu Y H, Jiang H J, Li H, Yuan Y, Chen Y R, Zou B. Improving the humification by additives during composting: A review [J]. *Waste Management*, 2023, 158: 93-106
- [8] Luangwilai T, Sidhu H S, Nelson M I. One-dimensional spatial model for self-heating in compost piles: Investigating effects of moisture and air flow [J]. *Food and Bioprocess Technology*, 2018, 108: 18-26
- [9] Ly T B, Pham C D, Bui K D D, Nguyen D A K, Le L H, Le P K. Conversion strategies for durian agroindustry waste: Value-added products and emerging opportunities [J]. *Journal of Material Cycles and Waste Management*, 2024, 26(3): 1245-1263
- [10] 袁远, 张金辉, 李银月, 郭二辉, 张发文. 蔬菜废弃物好氧堆肥处理研究进展 [J]. *江苏农业科学*, 2022, 50(19): 29-35
- [11] Yuan Y, Zhang J H, Li Y Y, Guo E H, Zhang F W. Research progress on aerobic composting of vegetable wastes [J]. *Jiangsu Agricultural*

- Sciences*, 2022, 50(19): 29-35 (in Chinese)
- [10] Ge C J, Yang Z L, Fan X, Huang Y P, Shi Z L, Zhang X T, Han L J. A new spectral simulating method based on near-infrared hyperspectral imaging for evaluation of antibiotic mycelia residues in protein feeds[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2024, 319: 124536
- [11] Liu M D, Liu J C, Wang Q H, Song P, Li H C, Wu S G, Gong J B. Quantitative analysis of low content polymorphic impurities in canagliflozin tablets by PXRD, NIR, ATR-FITR and Raman solid-state analysis techniques combined with stoichiometry [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2023, 293: 122458
- [12] Zhang S P, Tan Z L, Liu J, Xu Z H, Du Z. Determination of the food dye indigotine in cream by near-infrared spectroscopy technology combined with random forest model[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2020, 227: 117551
- [13] Zhang H, Hu X Y, Liu L M, Wei J F, Bian X H. Near infrared spectroscopy combined with chemometrics for quantitative analysis of corn oil in edible blend oil[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2022, 270: 120841
- [14] 张进, 蔡文生, 邵学广. 近红外光谱模型转移新算法[J]. 化学进展, 2017, 29(8): 902-910
Zhang J, Cai W S, Shao X G. New algorithms for calibration transfer in near infrared spectroscopy[J]. *Progress in Chemistry*, 2017, 29(8): 902-910 (in Chinese)
- [15] 徐艳艳. 基于NIR光谱结合模型转移技术的甲醇汽油中甲醇定量分析方法研究[D]. 西安: 西北大学, 2022
Xu Y Y. Quantitative analysis of methanol in methanol gasoline based on NIR spectroscopy combined with calibration transfer technology [D]. Xi'an: Northwest University, 2022 (in Chinese)
- [16] 陈琴. 基于DS与PDS的纸浆材木质素近红外分析模型传递策略研究[D]. 南京: 南京林业大学, 2022
Chen Q. Model transfer strategy of NIR analysis for pulpwood lignin based on DS and PDS [D]. Nanjing: Nanjing Forestry University, 2022 (in Chinese)
- [17] 丁柯, 张月敬, 沈广辉, 于贤龙, 杨增玲, 刘贤. 蛋白饲料原料粗蛋白含量近红外光谱模型转移研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(5): 1334
Ding K, Zhang Y J, Shen G H, Yu X L, Yang Z L, Liu X. Calibration transfer of near infrared spectrometric models for crude protein of protein feed materials [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, 36(5): 1334 (in Chinese)
- [18] 王红鸿, 陈琴, 陈勇, 熊智新, 吴彩娥, 谢德红. 二进制蜻蜓算法-直接校正算法优选标样集在小麦粉蛋白质近红外模型传递中的应用[J]. 分析科学学报, 2023, 39(3): 267-274
Wang H H, Chen Q, Chen Y, Xiong Z X, Wu C E, Xie D H. Application of BDA-DS method to optimize the selection of transfer set in near infrared model transfer of wheat flour protein [J]. *Journal of Analytical Science*, 2023, 39(3): 267-274 (in Chinese)
- [19] Shi Z L, Ren Z X, Yang Z L, Cai L W, Huang Y P, Ge C J, Han L J. Deployment strategy of multiple miniaturized near-infrared spectrometers based on spectral transfer for characterizing soil organic matter and nitrogen[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2024, 320: 124620
- [20] Luo L J, Wang W D, Bao S Y, Peng X, Peng Y G. Robust and sparse canonical correlation analysis for fault detection and diagnosis using training data with outliers[J]. *Expert Systems with Applications*, 2024, 236: 121434
- [21] 罗峻, 聂凤明, 吴淑焕, 范伟, 许敏. 纺织品快速无损检测校正模型的转移与共享研究[J]. 中国纤检, 2016(1): 79-81
Luo J, Nie F M, Wu S H, Fan W, Xu M. Research on the transfer and sharing of fast and nondestructive calibration model for textiles[J]. *China Fiber Inspection*, 2016(1): 79-81 (in Chinese)
- [22] 王红鸿, 汪莹, 黄浩冉, 熊智新, 胡云超, 刘智健, 梁龙. SWCSS-DS算法在纸浆材综纤维素近红外分析模型传递中的应用[J]. 分析试验室, 2024, 43(6): 864-870
Wang H H, Wang Y, Huang H R, Xiong Z X, Hu Y C, Liu Z J, Liang L. Application of SWCSS-DS algorithm in the transfer of near infrared analysis model for holocellulose in pulpwood [J]. *Chinese Journal of Analysis Laboratory*, 2024, 43(6): 864-870 (in Chinese)
- [23] 刘智健, 熊智新, 胡云超, 汪莹, 黄浩冉, 王红鸿, 梁龙. 基于直接标准化与分段直接标准化联用的木质素近红外模型传递方法研究[J]. 分析试验室, 2024, 43(4): 502-510
Liu Z J, Xiong Z X, Hu Y C, Wang Y, Huang H R, Wang H H, Liang L. Research on near-infrared model transfer for lignin based on the combined direct standardization-piecewise direct standardization method [J]. *Chinese Journal of Analysis Laboratory*, 2024, 43(4): 502-510 (in Chinese)
- [24] Yang J X, Lou X P, Yang H Q, Yang H B, Liu C Y, Wu J J, Bin J. Improved calibration transfer between near-infrared (NIR) spectrometers using canonical correlation analysis [J]. *Analytical Letters*, 2019, 52(14): 2188-2202
- [25] 徐翔翔, 孙敏捷, 李季. 规模化肉牛粪污收集与堆肥处理工艺设计[J]. 农业工程学报, 2016, 32(S2): 213-217
Xu P X, Sun M J, Li J. Feces collection and composting technological design on scaled beef cattle farms[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2016, 32(S2): 213-217 (in Chinese)
- [26] Yu H X, Xiao H Y, Deng H Y, Frew A, Hossain M A, Tan W B, Xi B D. Upgrade from aerated static pile to agitated bed systems promotes lignocellulose degradation in large-scale composting through enhanced microbial functional diversity [J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2024, 144: 55-66
- [27] Ma S S, Fang C, Sun X X, Han L J, He X Q, Huang G Q. Bacterial community succession during pig manure and wheat straw aerobic composting covered with a semi-permeable membrane under slight positive pressure[J]. *Bioresource Technology*, 2018, 259: 221-227
- [28] 孙晓曦, 崔儒秀, 马双双, 韩鲁佳, 黄光群. 智能型规模化膜覆盖好氧堆肥系统设计与试验[J]. 农业机械学报, 2018, 49(10): 356-362
Sun X X, Cui R X, Ma S S, Han L J, Huang G Q. Design and test on large-scale semi-membrane-covered compost system [J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2018, 49(10): 356-362 (in Chinese)
- [29] Saeys W, Mouazen A M, Ramon H. Potential for onsite and online analysis of pig manure using visible and near infrared reflectance spectroscopy[J]. *Biosystems Engineering*, 2005, 91(4): 393-402
- [30] Mouazen A M, Saeys W, Xing J, De Baerdemaeker J, Ramon H. Near infrared spectroscopy for agricultural materials: An instrument comparison [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2005, 13(2): 87-97
- [31] 梁晨, 赵众, 曹玉婷, 袁洪福. 近红外光谱模型传递研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(5): 1587
Liang C, Zhao Z, Cao Y T, Yuan H F. A new study of calibration model

- transfer method for near-infrared spectral analysis[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2017, 37(5): 1587 (in Chinese)
- [32] 谭文, 方森, 段峰, 周博文. 基于三次样条插值函数的3D激光图像去噪算法研究[J]. 中南大学学报(自然科学版), 2020, 51(9): 2496-2503
- Tan W, Fang M, Duan F, Zhou B W. Research on 3D laser image denoising algorithm based on three splines interpolation function [J]. *Journal of Central South University (Science and Technology)*, 2020, 51(9): 2496-2503 (in Chinese)
- [33] 刘耀瑶, 杨浩, 熊智新, 梁龙, 房桂干. 制浆材木质素含量近红外分析模型传递研究[J]. 中国造纸学报, 2019, 34(3): 43-49
- Liu Y Y, Yang H, Xiong Z X, Liang L, Fang G G. Study on near-infrared calibration model transfer for lignin content in pulpwood [J]. *Transactions of China Pulp and Paper*, 2019, 34(3): 43-49 (in Chinese)
- [34] Bin J, Li X, Fan W, Zhou J H, Wang C W. Calibration transfer of near-infrared spectroscopy by canonical correlation analysis coupled with wavelet transform[J]. *Analyst*, 2017, 142(12): 2229-2238
- [35] Ji W J, Li S, Chen S C, Shi Z, Rossel R A V, Mouazen A M. Prediction of soil attributes using the Chinese soil spectral library and standardized spectra recorded at field conditions[J]. *Soil and Tillage Research*, 2016, 155: 492-500
- [36] 刘翠玲, 李天瑞, 位丽娜, 徐莹莹, 吴静珠. 直接标准化算法在食用油酸值和过氧化值上的近红外光谱模型转移的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(10): 3042-3050
- Liu C L, Li T R, Wei L N, Xu Y Y, Wu J Z. Research on application of direct standardization algorithm in near-infrared spectrum calibration transfer of acid value spectrum calibration transfer of acid value [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2017, 37(10): 3042-3050 (in Chinese)
- [37] Laref R, Losson E, Sava A, Siadat M. Support vector machine regression for calibration transfer between electronic noses dedicated to air pollution monitoring[J]. *Sensors*, 2018, 18(11): 3716

责任编辑: 杨爱东



第一作者简介: 葛辰俊, 中国农业大学工学院农业工程专业博士研究生。2022年于中国农业大学获得学士学位, 曾获得3次校级学习优秀奖学金、1次硕士二等奖学金、1次博士二等奖学金。参与1项国家重点研发计划课题。目前以第一作者在 *Spectrochimica Acta Part a: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 发表论文1篇。本人对农业工程领域有浓厚兴趣。



通讯作者简介: 杨增玲, 工学博士, 中国农业大学教授, 博士生导师。主要从事农业信息智能感知机理与方法和无损检测方法研究。独立主持国家/省部级科研项目17项, 获国家科技进步奖二等奖1项、神农中华农业科技奖优秀创新团队奖1项、北京市高等教育教学成果奖二等奖1项以及其他各级各类科研教学成果奖3项。在 *Nature Communications*、*Analytical Chemistry*、*Applied Energy*、*Carbohydrate Polymers* 等学术期刊累计发表SCI/EI收录论文130余篇; 获授权国家发明专利10余件; 获国家计算机软件著作权20余件; 制定获颁国家农业行业标准9件。