

谷子叶绿素含量高光谱特征分析 及其反演模型构建

彭晓伟¹, 张爱军^{1,2}, 杨晓楠¹, 王楠³, 赵丽⁴

(1.河北农业大学国家北方山区农业工程技术研究中心,河北保定 071000;2.河北省山区研究所,河北保定 071000;
3.河北农业大学机电工程学院,河北保定 071000;4.河北农业大学农学院,河北保定 071000)

摘要:基于高光谱数据综合分析不同施肥条件下谷子各生长期冠层叶绿素含量的高光谱特征,在分析各光谱特征参数与叶绿素相关性的基础上,基于偏最小二乘法和人工神经网络构建叶绿素含量的遥感反演模型。结果表明: $NDVI$ (归一化植被指数)、 $GNDVI$ (绿色归一化植被指数)、 $PSNDA$ (特殊色素归一化指数 a)、 $PSSRc$ (特征色素简单比值指数 c)、 $RENDVI$ (红边归一化植被指数)及 Dy (黄边幅值)与不同生育期的 SPAD 值均呈极显著相关关系($P < 0.05$)。基于上述光谱指数为自变量建立的最佳一元回归模型 R^2 (决定系数)在 0.4~0.6 之间,基于偏最小二乘法的回归模型 R^2 在 0.55~0.71 之间, $RMSECV$ (交叉验证均方根)在 1.34~2.23 之间, Q_{cum}^2 (主成分累积模型预测能力)在 0.54~0.83 之间,对自变量的解释能力在 63.1%~95.8%之间,说明上述光谱参数对叶片叶绿素的解释程度较好。利用 BP 神经网络估测叶绿素含量可达到最优精度,建模集的 R^2 达到 0.70 以上, $RMSE$ (均方根误差)在 1.18~2.48 之间。综上所述,利用 BP 神经网络建模效果最优。

关键词:谷子;叶绿素含量;高光谱;特征波段;反演模型

中图分类号:S515;S127 **文献标志码:**A

Hyperspectral characteristics and remote sensing inversion model of chlorophyll content of millet

PENG Xiaowei¹, ZHANG Aijun^{1,2}, Yang Xiaonan¹, WANG Nan³, ZHAO Li⁴

(1.National North Engineering Technology Research Center for Agricultural in Northern Mountainous Areas,
Baoding, Hebei 071000, China; 2.Hebei Mountain Research Institute, Baoding, Hebei 071000, China;

3.College of Mechanical and Electrical Engineering, Agricultural University of Hebei, Baoding, Hebei 071000, China;

4.College of Agriculture, Agricultural University of Hebei, Baoding, Hebei 071000, China)

Abstract: This study used the comprehensive analysis of the hyperspectral data of the hyperspectral characteristics of the chlorophyll content in the millet canopy under different fertilization conditions to examine the correlation between the spectral characteristics and the chlorophyll. The remote sensing inversion model of chlorophyll content was constructed based on the partial least squares method and artificial neural network. The results showed that; through correlation analysis, $NDVI$, $GNDVI$, $PSNDA$, $PSSRc$, $RENDVI$, and Dy all had extremely significant correlations with SPAD in different growth stages. The coefficient of determination R^2 of the best unary regression model established based on the above spectral index as the independent variable was between 0.4 and 0.6, and the coefficient of determination R^2 of the regression model based on the partial least squares method was between 0.55 and 0.71. The cross-validated root mean square $RMSECV$ fell between 1.34 and 2.23, and the predictive ability of the principal component accumulation model Q_{cum}^2 was between 0.54 and 0.83. The explanatory ability of the independent variable was between 63.1% and 95.8%, indicating that the above-mentioned spectral parameters explained the leaf chlorophyll better. The BP neural network estimated the chlorophyll content to achieve the best accuracy, and the

determination coefficient R^2 of the modeling set was above 0.70. The $RMSE$ was between 1.18 and 2.48. In summary, the modeling effect using BP neural network was the best.

Keywords: millet; chlorophyll content; hyperspectral; characteristic band; inversion model

叶绿素直观反映作物的生长状态,其含量与植被胁迫、光合作用能力以及健康状况密切相关^[1-2],很大程度决定了作物的产量^[3-4]。及时准确地估算叶绿素含量有助于发现叶片缺素症状,从而避免作物减产。目前,估测叶绿素的方法主要为点位采样测定,及基于卫星遥感影像大面积估算^[5]。其中,点位测定依赖作物叶片组织,耗时耗力,难以实时、大范围估测^[6];卫星遥感影像时空分辨率较低、存在易受到大气及空间辐射影响等缺陷也严重制约大面积评估作物生长状态的精度^[7]。无人机技术的出现以其高时空分辨率、低干扰及使用简便灵活的优点,填补了现有农业监测技术的缺陷,能通过监测氮素含量^[8]、叶绿素^[9]、叶面积指数^[10]等生理生化指标快速精准评估大田作物长势^[11]。因此,无人机航测在农业生产中的广泛应用有助于指导农业生产及保证作物产量,并为集群农业管理提供新技术、新思路。

高光谱数据反演叶绿素含量的研究已相当成熟,400~700 nm 波段的透射率及反射率与叶绿素含量高度相关,众多研究通过构建不同的数学模型来量化高光谱数据与叶绿素含量的关系^[12]。一元线性回归模型,及多元线性回归模型被广泛应用于构建光谱一阶导数与叶绿素含量的关系,其精度($R^2 > 0.8$)较高,具有估测叶绿素含量的能力^[13-14]。但单一的线性关系不足以表征变量间的相互作用,模型参数具有极大的局限性^[15]。亦有研究基于敏感波段建立优化型土壤调节指数 $TCARI$ (Transformed chlorophyll absorption ratio index)/ $OSAVI$ (Optimization of soil adjust vegetation index),以估测植株的叶绿素含量^[16]。随着计算机技术的高速发展,基于大数据基础的机器学习方法提升了叶绿素含量估算数学模型的适用性和精度^[17]。BP 神经网络能大大提高利用高光谱反射数据估算玉米叶绿素含量的精度^[18],支持向量机和粒子群优化算法亦能对作物叶绿素含量有较优($R^2 > 0.88$)的精度估算^[19-20]。现有基于高光谱估算叶绿素含量的研究基本基于单一的数学模型,集中在作物的某一生育期^[21-22],而对于多模型结合能否有效估算不同生育期的叶绿素含量这一问题仍缺乏充分的回答。因此,构建不同数学模型估算叶绿素含量有助于补充科研空缺,为多模型综合估算农作物长势提供科学基础。

本研究基于无人机平台,通过机载高光谱相机

进行田间光谱测定,并综合分析农作物的长势状况,探究不同模型对不同生育期谷子叶绿素含量估算的适宜性。并且,选择了不同生育期的最佳参数,基于一元线性模型、PLSR 模型及 BP 神经网络建立估算模型,比较不同模型的估测精度及其对谷子各时期的适用性。

1 材料与方法

试验地位于河北省保定市顺平县耕耘农机服务专业合作社(115°08'19''E, 38°46'59''N),该地属暖温带季风大陆性气候,年均气温 12.7℃,年均降水量 511.7 mm。试验品种为‘冀谷 19’和‘冀谷 38’,设计了 6 个谷子试验小区氮肥梯度处理,分别为对照组 CK(0 kg · hm⁻²)、N1(90 kg · hm⁻²)、N2(180 kg · hm⁻²)、N3(270 kg · hm⁻²)、N4(360 kg · hm⁻²)、N5(450 kg · hm⁻²),施用氮肥为尿素(含氮量 46%)和磷酸二铵(含氮量为 18%),磷肥为磷酸二铵(P₂O₅ 含量为 46%)和粒状过磷酸钙(P₂O₅ 含量为 12%),钾肥为硫酸钾(K₂O 含量为 52%)。每个处理 3 次重复。氮肥基追比为 1:1,磷、钾肥作为基肥一次性施入。小区长 10 m,宽 4 m,面积为 40 m²,按大田管理方式进行管理。

1.1 光谱测定

分别在拔节期(8 月 11 日)、抽穗期(8 月 21 日)、灌浆期(9 月 10 日)、成熟期(9 月 28 日)利用大疆公司经纬 M600 Pro 无人机搭载双利合谱公司 10 cm 分辨率的 Gaiasky mini 2-VN 高光谱相机对谷子冠层的光谱进行采集,无人机飞行高度为 200 m,测量时段为 10:00—14:00,天气晴朗无风。无人机测量前用白板进行校正,以保证数据的准确性,每个小区均随机采集 3 个样点的光谱数据,并利用 ENVI 5.3 对每个小区的光谱数据进行校正。与光谱测量同步,使用日本柯尼卡美能达公司叶绿素仪(SPAD-502)测定样点附近 5 株植株的叶绿素含量,每片叶子均匀测量 3 次,取平均值作为样本的叶绿素含量,实现与叶片光谱数据的一一对应。

1.2 模型构建

1.2.1 一元函数模型及植被参数的选取 采用五点加权平滑法对原始光谱数据进行预处理,并利用 SPSS 20.0 软件计算光谱数据与叶绿素值的相关性,从而选取相关系数最大的波段即特征光谱,采用指

数函数、一元线性函数、对数函数、多项式以及幂函数构建叶绿素含量估算模型,选取最优的函数模型作为叶绿素含量的一元线性回归模型,光谱反射率中的近红外波段会受到作物中叶片的色素、水分、细胞结构的影响,而这些影响会导致可见及近红外区域特定范围内特定位置与特定面积的改变^[23],基于光谱曲线,计算植被指数及三边参数(表 1),并建立相应的拟合方程。

表 1 基于光谱曲线构建的植被指数和三边参数

Table 1 Vegetation indices and trilateral parameters based on the spectra data

变量 Variable	计算公式或定义 Calculation formula or definition	
基于植被指数的特征变量 Characteristic variables based on vegetation index	NDVI	$(R_{800}-R_{670})/(R_{800}+R_{670})$
	GNDVI	$(R_{801}-R_{550})/(R_{801}+R_{550})$
	RVI	R_{NIR}/R_{Red}
	CARI	$(R_{700}-R_{670})-0.2(R_{700}+R_{670})$
	TCARI	$3[(R_{700}-R_{670})-0.2(R_{700}-R_{550})(R_{700}/R_{670})]$
	MCARI	$[(R_{700}-R_{670})-0.2(R_{700}-R_{550})](R_{700}/R_{670})$
	HNDVI	$(R_{827}-R_{668})/(R_{827}+R_{668})$
	MTCI	$(R_{754}-R_{709})/(R_{709}-R_{681})$
	PSNDa	$(R_{800}-R_{680})/(R_{800}+R_{680})$
	PSNDb	$(R_{800}-R_{635})/(R_{800}+R_{635})$
	PSSRa	R_{800}/R_{680}
	PSSRb	R_{800}/R_{635}
基于光谱位置的特征变量 Characteristic variables based on spectral position	PSSRc	R_{800}/R_{470}
	RENDVI	$(R_{750}-R_{705})/(R_{750}+R_{705})$
	Dr	波长 680~760 nm 内一阶导数光谱最大值 The maximum value of the first derivative spectrum within the wavelength of 680~760 nm
	Dy	波长 560~640 nm 内一阶导数光谱最大值 The maximum value of the first derivative spectrum within the wavelength of 560~640 nm
	Db	波长 490~530 nm 内一阶导数光谱最大值 The maximum value of the first derivative spectrum within the wavelength of 490~530 nm
	Rg	波长 510~560 nm 范围光谱反射率最大值 Wavelength 510~560 nm range spectral reflectance maximum
	Ro	波长 650~690 nm 范围光谱反射率最小值 Wavelength 650~690 nm range spectral reflectance minimum

1.2.2 偏最小二乘回归 偏最小二乘回归方法(Partial least squares regression, PLSR)集主成分分析、典型相关分析及多元回归分析的优点为一体,

可以有效解决多元回归分析中的变量高度自相关及噪声问题^[24-25]。除此之外,模型具有一定的预测功能,而且允许在样本数量少于自变量个数的条件下回归建模,且能在最终模型中包含原有的所有自变量,亦于辨识系统信息与噪声。本研究中,光谱参数为自变量,叶绿素含量为因变量。为了避免过度拟合,引入交叉验证以确定 PLSR 模型中的主成分数量^[26]。当 R^2 值大于 0.5 时,PLSR 模型被认为对结果有良好的预测^[27]。一般具有最大的 Q^2 和最小的 $RMSECV$ (交叉验证均方根误差)的 PLSR 模型最优。计算公式如下:

$$Q^2 = 1.0 - \frac{PRESS}{SS}$$

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (\hat{P}_i - Q_i)^2$$

$$SS = \sum_{i=1}^n (P_i - Q_i)^2$$

$$Q^2_{cum} = 1.0 - \prod \left(\frac{PRESS}{SS} \right)_k \quad (k = 1, 2, \dots, m)$$

$$RMSECV = \sqrt{\frac{PRESS}{n}}$$

其中, $PRESS$ 表示预测误差平方和; SS 表示残差平方和; $\hat{P}_i$ 为分析样本的预测叶绿素含量; P_i 和 Q_i 分别为预测叶绿素含量和实测叶绿素含量; Q^2 为模型预测能力。 Q^2_{cum} 为主成分累积模型预测能力; m 为 PLSR 主成分数量; n 是样本个数。

PLSR 使用 SIMCA-P14.1 计算。SIMCA-P14.1 是由 Sartorius Stedim 公司开发的一款多元变量统计分析软件,通过 SIMCA-P14.1 的 PLS 模块建立回归模型,计算得出主成分个数、解释能力、累积解释能力、交叉验证均方根误差($RMSECV$)和变量投影重要性(VIP)。

1.2.3 BP 神经网络模型 本研究构建了一个输入层、一个输出层、五个隐含神经元、一个输出所构成的 BP 神经网络进行训练,迭代次数为 1 000,学习精度为 0.01。训练目标为均方根误差小于 0.001。BP 神经网络算法的参数如表 2,针对各时期 108 组谷子叶片样本,利用神经网络建立叶绿素估算模型,选取各个时期的人选植被指数作为输入层,以谷子叶片的叶绿素值作为输出层,隐含层由公式 1 确定节点数,经过多次模拟训练,最优节点数确定为 9。用其中 72 个样本作为建模集,32 个样本为测试集,在 Matlab 2019b 软件中通过编写程序代码进行 BP 神经网络建模,对各生育期谷子叶片叶绿素值进行训练,建立不同生育期谷子叶片叶绿素值的

BP 神经网络模型。

$$q = \sqrt{k + m} + \alpha$$

式中, k 为输入层单元数; m 为输出层单元数; α 为 $[1,10]$ 之间的常数。

1.2.4 模型精度检验 本研究采用决定系数(Coefficient of determination, R^2)、均方根误差 $RMSE$ (Root mean square error)两个指标来评估模型的精度,主要公式如下:

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

式中, $\hat{y}_i$ 和 y_i 分别为实测值和由模型计算出的理论值; n 为样本数; $\bar{y}$ 为 y_i 的平均值。

2 结果与分析

2.1 谷子叶片反射光谱特征分析

不同生育期的谷子叶片叶绿素值如表 3 所示,谷子叶片叶绿素含量在不同生育期呈先增加后减少的趋势,最大值出现在抽穗期,约为 66.40。

谷子叶片的光谱反射率变化趋势基本一致,而光谱反射率随着叶绿素的增加呈现出降低的趋势(图 1a)。在可见光波段 400~700 nm,拔节期和抽穗期谷子分别在 550、660 nm 处存在明显的吸收峰和吸收谷。在此波段内,光谱反射率并不随叶绿素含量线性变化,而呈先增加后减小的趋势,SPAD 值分别为 44.80、50.14 及 60.40 时,对应的光谱反射率归一化均值分别为 0.048、0.054、0.050,有 10.86%和 3.0%的增幅。反射率在 700~780 nm 波段开始急剧上升,SPAD 值分别为 44.80、50.14 及 60.40 的光谱反射率归一化均值分别为 0.582、0.573、0.648,有 1.87%的降幅和 11.24%的增幅。在 780~1 300 nm 波段,亦有一个明显的吸收峰(800 nm)和一个明显的吸收谷(900 nm),其中,3 种叶绿素含量对应的光谱反射率的归一化均值亦随着叶绿素的增加存在 1.70%和 18.56%的增加。

如图 1b 所示,近红外波段的光谱一阶导数可以显著地增强红边波段,红边波段的一阶导数光谱是整个波段范围的最大值,对应为反射率在 600~800 nm 的强吸收效应。SPAD 值分别为 44.80、50.14 及 60.40 时,对应的一阶导数光谱反射率归一化均值

分别为 0.298、0.401、0.339,有 34.70%和 13.93%的增幅。在 700~780 nm 波段,740 nm 左右出现波峰,780 nm 处出现波谷,SPAD 值分别为 44.80、50.14 及 60.40 的一阶导数光谱反射率的归一化均值分别为 0.619、0.667、0.635,有 7.70%和 2.65%的增幅。在 780~1 300 nm 波段,SPAD 值分别为 44.8、50.14 及 60.4 的一阶导数光谱反射率的归一化均值分别为 0.391、0.448 和 0.363,有 14.67%的增幅和 7.16%的降幅。

2.2 谷子叶片叶绿素一元预测模型的构建

光谱特征参量与叶绿素的相关性分析显示, $NDVI$ 、 $GNDVI$ 、 $PSNDa$ 、 $PSSRc$ 、 $RENDVI$ 及 Dy 与不同生育期的叶绿素均呈极显著相关关系(表 4)。因此,可用 $NDVI$ 、 $GNDVI$ 、 $PSNDa$ 、 $PSSRc$ 、 $RENDVI$ 及 Dy 6 种指数作为建立估算谷子叶绿素含量的自变量。

表 2 BP 神经网络算法参数	
Table 2 BP neural network algorithm parameters	
参数 Parameter	取值 Value
输入层到输出层函数 Input layer to output layer function	双曲正切 S 型函数 Hyperbolic tangent sigmoid function
隐含层到输出层函数 Hidden layer to output layer function	对数 S 型函数 Logarithmic sigmoid function
学习函数 Learning function	梯度下降动量权重函数 Gradient descent momentum weight function
隐含层节点数 Hidden layer nodes	9
迭代次数 Number of iterations	2000
最大失败次数 Maximum number of failures	20
学习目标 Learning target	0.001
学习率 Learning rate	0.01

表 3 谷子叶片叶绿素含量统计分析					
Table 3 Statistical analysis of chlorophyll content in millet leaves					
生育期 Growth period	样本数 Number of samples	最小值 Minimum	最大值 Max	平均值 Average	标准偏差 Standard deviation
拔节期 Jointing period	108	38.50	63.70	49.07	4.62
抽穗期 Heading period	108	39.90	66.40	53.75	5.29
灌浆期 Grouting period	108	35.60	66.00	49.17	6.16
成熟期 Maturation period	108	30.00	49.80	38.78	4.91

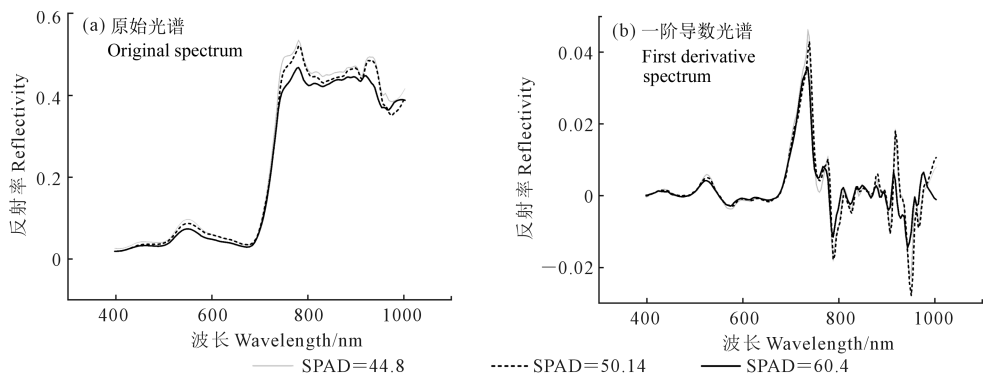


图 1 谷子叶片不同 SPAD 值下的光谱反射率
Fig.1 Spectral reflectance of different SPAD millet leaves

表 4 光谱特征参数与谷子叶片叶绿素的相关系数 (n = 108)
Table 4 Correlation coefficient between spectral characteristic parameters and SPAD of millet leaves (n = 108)

变量 Variable		拔节期 Jointing period	抽穗期 Heading stage	灌浆期 Grouting period	成熟期 Maturation period
基于植被指数 的特征变量 Characteristic variables based on vegetation index	NDVI	0.66 **	0.59 **	0.33 **	0.76 **
	GNDVI	0.73 **	0.54 **	0.51 **	0.78 **
	RVI	0.60 **	0.50 **	0.15	0.77 **
	CARI	-0.14	0.56 **	0.22 **	0.76 **
	TCARI	-0.58 **	-0.01	0.07	0.71 **
	MCARI	-0.27 **	0.49 **	0.18 *	0.76 **
	HNDVI	0.61 **	-0.43 **	-0.27 **	-0.71 **
	MTCI	0.36 **	0.055	-0.09	-0.68 **
	PSNDa	0.63 **	0.57 **	0.36 **	0.76 **
	PSNDb	0.58 **	-0.10	-0.17 *	-0.69 **
基于光谱位置 的特征变量 Characteristic variables based on spectral position	PSSRa	0.65 **	-0.22	0.25 **	0.74 **
	PSSRb	0.59 **	0.56 **	-0.12	0.76 **
	PSSRc	0.80 **	0.45 **	0.35 **	0.76 **
	RENDVI	0.57 **	0.46 **	0.35 **	0.77 **
	Dr	-0.09	0.56 **	0.34 **	0.77 **
	Dy	0.63 **	0.64 **	0.44 **	0.78 **
	Db	-0.31 **	-0.06	0.14	0.64 **
	Rg	0.49 **	-0.02	0.01	0.57 **
	Ro	0.11	0.21 *	0.29 **	-0.20 *

注：*、** 分别表示在 $P<0.05$ 和 $P<0.01$ 水平具有显著性差异。
Note: *, ** indicate significant differences comparing with seedling stage at $P<0.05$ and $P<0.01$ level, respectively.

如表 5 所示,在不同生育期,分别基于一次线性、二次非线性、指数及对数形式构建各因子与叶绿素含量的对应关系。在拔节期和抽穗期 $NDVI$ 与叶绿素含量有较好的对应关系 ($R^2>0.52$),估算值也具有最小的残差 ($RMSE<2.28$)。在灌浆期和成熟期, $RENDVI$ ($R^2=0.51, RMSE=2.21$)、 $PSSRc$ ($R^2=0.62, RMSE=2.47$) 则分别对叶绿素含量估算有较好的适用性。其中, $NDVI$ 的二次非线性、一次线性模型分别在拔节期和抽穗期表现良好; $RENDVI$ 、 $PSSRc$ 则分别以一次线性及指数形式出现在灌浆期

和成熟期。
2.3 谷子叶片叶绿素含量 PLSR 预测模型构建
基于高相关的光谱特征参数 $NDVI$ 、 $GNDVI$ 、 $PSNDa$ 、 $PSSRc$ 、 $RENDVI$ 及 Dy 构建了谷子叶片叶绿素含量 PLSR 预测模型(表 6)。PLSR 模型的 Q^2 均高于 0.56,对因变量的解释程度一般, R^2 均在 0.6 以上,而预测集的 R^2 在 0.55~0.71 之间,其 $RMSECV$ 在 1.41~2.66 之间。在拔节期,PLSR 模型的第一主成分对叶绿素变化的解释能力为 67.8%,加入第二、三主成解释能力增加到 82.7%、95.8%;抽穗期、灌浆期和成熟期 PLSR 模型对叶绿素的总解释能力分别为 63.1%、84.5%和 84.7%。
由图 2 可知,在拔节期 PLSR 模型第一主成分 Dy 和 $PSSRc$ 权重较大,分别在负侧和正侧起主导作用。第二主成分则为 $RENDVI$ (正侧)和 $GNDVI$ (负侧)起主导作用。抽穗期分析结果与成熟期一致,PLSR 模型第一主成分 Dy (负侧)和 $NDVI$ (正侧)权重较大,起主导作用,第二主成分则由 $NDVI$ (正侧)和 $GNDVI$ (负侧)起主导作用。在灌浆期,第二主成分的正侧权重由 $NDVI$ 变为 Dy ,其他权重结果与抽穗期一致。

PLSR 主成分权重显示了光谱指数对叶绿素的重要程度,通过挖掘光谱指数的变量投影重要性(VIP),可以更全面地表达光谱指数的相对重要性,如表 7,4 个时期的 $NDVI$ 与 $PSNDa$ 及 $PSSRc$ 对叶绿素的变量投影重要性均大于 1, $NDVI$ ($VIP_{抽穗期}=1.38, VIP_{灌浆期}=1.17, VIP_{成熟期}=1.33$), $PSNDa$ ($VIP_{抽穗期}=1.30, VIP_{灌浆期}=1.18, VIP_{成熟期}=1.24$);拔节期叶绿素的光谱指数与其他时期有所不同,主要表现为 $RENDVI$ ($VIP_{拔节期}=1.18$),该参数对拔节期叶绿素的影响达到最大。叶绿素的变量投影重要性表明, $NDVI$ 、 $PSNDa$ 和 $PSSRc$ 是影响不同时期谷子叶绿素的最重要光谱指数。

表 5 基于光谱指数的谷子叶片叶绿素含量预测模型
Table 5 Prediction model of chlorophyll content of millet leaves based on spectral index

时期 Period	光谱指数 Spectralindex	预测模型 Predictive model	建模集 Training set		验证集 Validation set	
			R^2	RMSE	R^2	RMSE
拔节期 Jointing period	NDVI	$y = 3107.8x^2 - 5092.1x + 2130$	0.52	1.97	0.45	1.99
	GNDVI	$y = 74.172x^{1.031}$	0.47	2.40	0.41	2.90
	PSNDa	$y = 2408.1x^2 - 3903.9x + 1626.6$	0.44	2.13	0.38	2.20
	PSSRc	$y = 0.3289x^2 - 4.8662x + 61.463$	0.37	2.30	0.35	1.85
	RENDVI	$y = 270.46x^2 - 367.34x + 169.86$	0.50	2.02	0.42	2.55
	Dy	$y = -348446x^2 - 2347.5x + 54.55$	0.07	2.76	0.13	3.60
抽穗期 Heading period	NDVI	$y = 248.71x - 161.09$	0.60	2.28	0.45	2.72
	GNDVI	$y = 940.52x^2 - 1258.3x + 472.53$	0.41	2.49	0.34	2.68
	PSNDa	$y = 2232.4x^2 - 3613.2x + 1509.8$	0.49	2.32	0.43	2.83
	PSSRc	$y = 29.412\ln(x) - 23.154$	0.50	2.31	0.44	2.46
	RENDVI	$y = 52.765x^{-0.051}$	0.00	3.07	0.01	3.24
	Dy	$y = 6577.6x + 53.338$	0.04	3.02	0.04	3.18
灌浆期 Grouting period	NDVI	$y = 21.142x + 36.362$	0.31	3.37	0.35	0.11
	GNDVI	$y = 147.14x^2 - 149.94x + 86.345$	0.35	2.13	0.31	0.27
	PSNDa	$y = 18.21\ln(x) + 57.368$	0.11	2.18	0.10	0.11
	PSSRc	$y = 0.0685x^2 - 1.0473x + 56.293$	0.29	2.09	0.19	0.19
	RENDVI	$y = 54.641e^{-0.027x}$	0.51	2.21	0.44	0.91
	Dy	$y = 0.1144x^2 - 4.2485x + 49.671$	0.39	2.21	0.31	0.39
成熟期 Maturation period	NDVI	$y = 13.096x + 32.608$	0.46	2.53	0.39	3.54
	GNDVI	$y = 18.267x + 31.067$	0.47	2.50	0.36	3.44
	PSNDa	$y = -2.3627x^2 + 16.237x + 31.68$	0.48	2.52	0.46	3.55
	PSSRc	$y = 0.082x^2 - 0.8342x + 39.914$	0.62	2.47	0.48	3.05
	RENDVI	$y = 10.751x^2 - 2.1574x + 37.933$	0.45	2.59	0.43	3.49
	Dy	$y = 5E+07x^2 - 33505x + 43.197$	0.30	2.87	0.26	4.03

表 6 谷子叶片叶绿素值与敏感光谱指数的 PLSR 模型
Table 6 PLSR model of SPAD value and sensitive spectral index of millet leaves

时期 Period	R^2	Q^2	RMSECV	主成分 Major constituent	Y 解释能力/% Y explainedability	Y 累积解释能力/% Y cumulative explanationability	Q^2_{cum}
拔节期 Jointing period	0.67	0.58	2.23	1	67.8	67.8	0.58
				2	14.8	82.7	0.55
				3	13.2	95.8	0.55
抽穗期 Heading period	0.57	0.58	1.61	1	59.1	59.1	0.58
				2	39.4	63.1	0.57
灌浆期 Grouting period	0.60	0.57	1.38	1	78.5	78.5	0.54
				2	6.02	84.5	0.57
成熟期 Maturation period	0.88	0.83	1.34	1	60.3	60.3	0.80
				2	13.7	74.0	0.81
				3	10.7	84.7	0.83

2.4 谷子叶片叶绿素含量的 BP 神经网络分析及精度检验

表 8 列出了基于 6 个光谱参数构建的 BP 神经网络模型,以 6 个光谱参数(NDVI、GNDVI、PSNDa、PSSRc、RENDVI、Dy)作为模型的输入层,叶绿素含量作为输出层,经过多次训练隐含层达到最佳精度,从建模集来看,4 个时期的模型决定系数均大于 0.84,模型的稳定性较高,而其中模型在灌浆期达到最佳估测精度,建模集 R^2 达到了 0.96,而 RMSE 最

低,说明该时期的模型稳定性和预测能力较好。
从图 3 可以看出,相比于传统的一元模型,利用 BP 神经网络对谷子叶片的 SPAD 值估测具有较高的精度,4 个时期的预测精度均在 0.66 以上。谷子在灌浆期具有较好的预测精度($R^2 = 0.80$)和较小的均方根误差($RMSE = 1.82$),在成熟期虽然预测精度较高,但其均方差误差 RMSE 达到了 2.49,表示模型的稳定性较差,而拔节期和抽穗期的预测精度及均方差误差相差不大,模型预测效果较好。

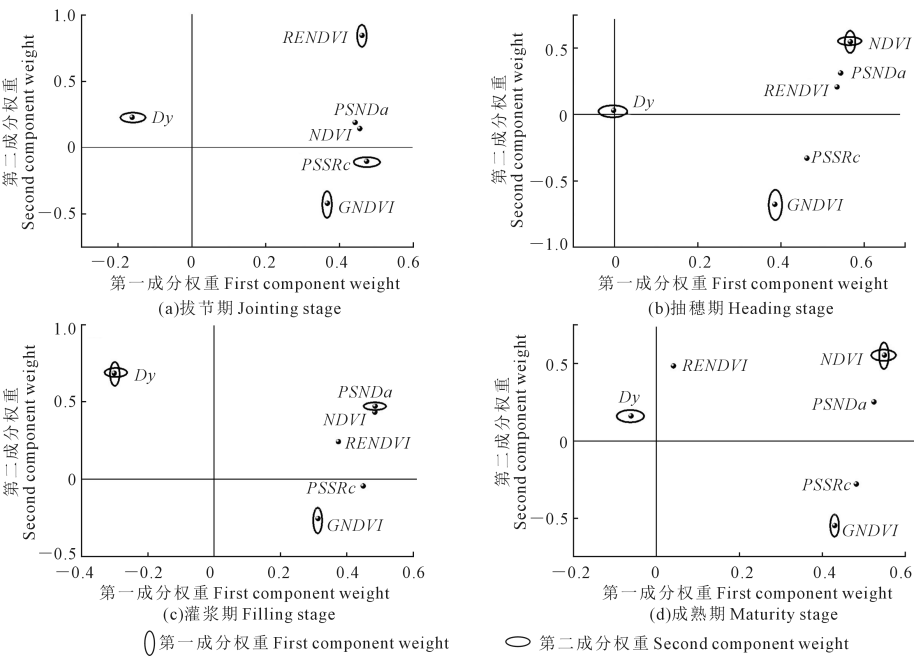


图 2 谷子叶片 SPAD 值的第一、第二 PLSR 模型组分权重
Fig.2 Weights of first and second PLSR components in SPAD of millet leaves

表 7 各敏感光谱指数对 SPAD 值的投影重要性(VIP)

Table 7 Projection importance of sensitive spectral indices to SPAD values (VIP)

时期 Period	NDVI	PSNDa	PSSRc	GNDVI	RENDVI	Dy
拔节期 Jointing period	1.08	1.06	1.12	0.90	1.18	0.49
抽穗期 Heading period	1.38	1.30	1.12	1.01	0.74	0.02
灌浆期 Grouting period	1.17	1.18	1.05	0.76	0.90	0.88
成熟期 Maturation period	1.33	1.24	1.15	1.06	0.41	0.24

表 8 不同时期的建模结果

Table 8 Modeling results in different periods

时期 Period	建模集 Training set	验证集 Validation set		
	R^2	RMSE	R^2	RMSE
拔节期 Jointing period	0.95	1.86	0.67	2.05
抽穗期 Heading period	0.84	2.15	0.67	2.25
灌浆期 Grouting period	0.96	1.21	0.79	1.07
成熟期 Maturation period	0.87	2.17	0.75	2.49

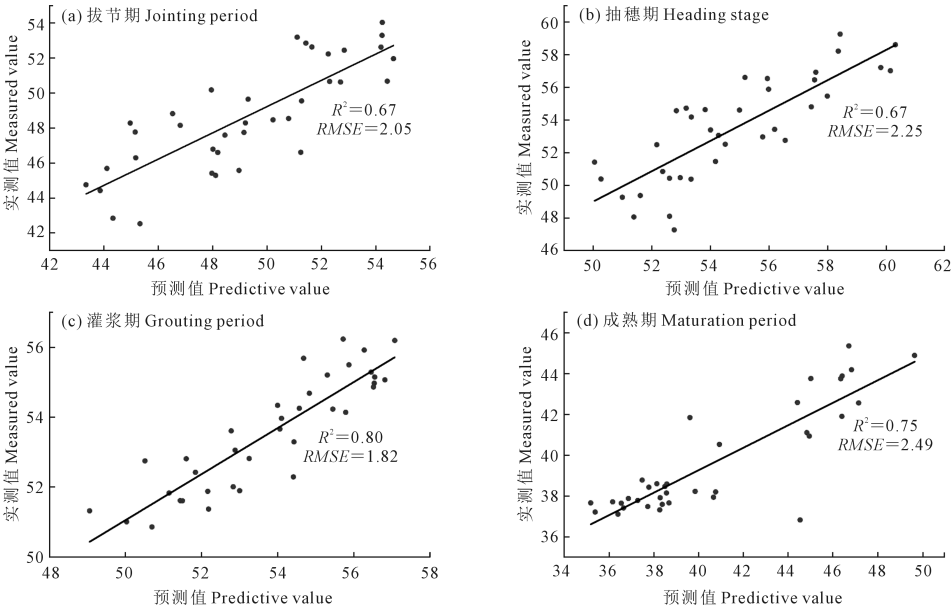


图 3 谷子各时期光谱反射率 BP 神经网络模型测试集 SPAD 值预测结果
Fig.3 SPAD value prediction results of the BP neural network model test set of the spectral reflectance of millet in each period

3 讨 论

研究表明,谷子在生育期叶绿素含量呈现先增高后降低的趋势,从拔节期到抽穗期叶片均处于营养生长阶段,叶绿素含量不断增加。到了灌浆期谷子从营养生长阶段进入生殖生长阶段,此阶段叶绿素含量逐渐下降,这可能是由于植物体内的营养元素从供给植株生长转向供应籽粒的发育和形成^[28]。在 400~1 000 nm 之间,由于谷子叶面内部细胞壁和细胞空隙间折射率的影响,导致波段范围内的高反射率及差异性^[12]。而叶绿素的含量也会引起光谱反射率的变化,在波段范围内,光谱反射率会随着叶绿素的增加而降低,这与陈澜等^[29]的研究结果一致。作物产生“红移”现象,其主要原因是由于作物即将成熟时,叶绿素向着叶黄素的转变^[30-31]。

本研究采用一元线性模型对不同生育期的叶片叶绿素进行估测,王丹^[32]、赵占辉^[33]等分别对夏玉米、玉米冠层的叶绿素进行高光谱建模,均发现 *NDVI* 与 *SPAD* 值得关系密切,与本文部分研究结果一致,4 个生育时期最佳模型的建模集及验证集精度在 0.4~0.6 之间,由此可以看出利用一元线性模型进行建模有一定的局限性,在一定程度上制约着叶绿素的反演精度^[34-35],因此本研究利用 BP 神经网络对叶绿素进行非线性模型构建,可以看出,利用 BP 神经网络建模可使模型精度大幅度提高,模型的回归拟合结果 R^2 在 0.6~0.8 之间。

4 结 论

1) 不同 *SPAD* 值的光谱反射率具有相似的光谱特征,表现为光谱反射率会随着叶绿素的增加而降低,在 740 nm 处吸收特征越来越明显。

2) 在拔节期和抽穗期以 *NDVI* 光谱指数为自变量建立的二次函数模型 ($R^2 = 0.52$, $RMSE = 1.97$) 和线性模型 ($R^2 = 0.60$, $RMSE = 2.28$) 效果最佳,而灌浆期和成熟期分别以 *RENDVI* 和 *PSSRc* 建立的指数模型 ($R^2 = 0.51$, $RMSE = 2.21$) 和二次函数模型 ($R^2 = 0.62$, $RMSE = 2.47$) 的效果最佳,可以较好地估算出该时期的叶绿素变化。

3) 利用偏最小二乘法建模的精度 (R^2) 在拔节期、抽穗期、灌浆期和成熟期分别为 0.67、0.57、0.60、0.88,模型的预测精度 (R^2) 分别为 0.55、0.66、0.56、0.71。*NDVI*、*PSNDa* 和 *PSSRc* 是影响不同时期谷子叶绿素的最重要光谱指数。

4) 在 BP 神经网络中,在拔节期、抽穗期、灌浆期和成熟期的建模集精度 (R^2) 分别为 0.95、0.84、

0.96、0.67,模型的预测精度 (R^2) 分别为 0.67、0.67、0.79、0.75,综合比较,相较于偏最小二乘回归模型与一元线性模型,利用 BP 神经网络建模效果最佳。

参 考 文 献:

- [1] CURRAN P J, DUNGAN J L, GHOLZ H L. Exploring the relationship between reflectance red edge and chlorophyll content in slash pine[J]. *Tree Physiology*, 1990, 7(1/4): 33-48.
- [2] MARION L, PAILLISSON J M. A mass balance assessment of the contribution of floating-leaved macrophytes in nutrient stocks in an eutrophic macrophyte-dominated lake[J]. *Aquatic Botany*, 2003, 75(3): 249-260.
- [3] 唐兴旺,石玉,于振文,等.开花期土壤水分含量对不同穗型小麦品种光合特性及产量的影响[J]. *麦类作物学报*, 2020, 40(5): 609-614.
TANG X W, SHI Y, YU Z W, et al. Effect of soil moisture content at anthesis on photosynthetic characteristics and yield of wheat varieties with different spike types [J]. *Journal of Triticeae Crops*, 2020, 40(5): 609-614.
- [4] 靖建国,李有芳,贾姝萍,等.花后高温胁迫下外施多胺对不同耐热性小麦产量性状及旗叶生理的影响[J]. *麦类作物学报*, 2019, 39(12): 1499-1506.
JING J G, LI Y F, JIA S P, et al. Effects of polyamines on yield traits and flag leaf physiology of wheat under high temperature stress after anthesis[J]. *Journal of Triticeae Crops*, 2019, 39(12): 1499-1506.
- [5] 李旭文,魏爱泓,姜晟,等.基于“哨兵 3 号”卫星 OLCI 影像和 C2RCC 算法的南海黄叶色素 a 及总悬浮物反演效果分析[J]. *环境监控与预警*, 2020, 12(2): 6-12.
LI X W, WEI A H, JIANG S, et al. Retrieval of chlorophyll-a and total suspended matter concentrations from sentinel-3OLCI imagery by C2RCC algorithm in south yellow sea[J]. *Environmental Monitoring and Forecasting*, 2020, 12(2): 6-12.
- [6] 宫兆宁,赵雅莉,赵文吉,等.基于光谱指数的植物叶片叶绿素含量的估算模型[J]. *生态学报*, 2014, 34(20): 5736-5745.
GONG Z N, ZHAO Y L, ZHAO W J, et al. Estimation model for plant leaf chlorophyll content based on the spectral index content [J]. *Acta Ecologica Sinica*, 2014, 34(20): 5736-5745.
- [7] 冯实磊.基于多源卫星遥感数据的多云雨雾地区水稻种植面积提取方法研究[D].成都:电子科技大学,2020.
FENG S L. Study on extraction method of rice planting area in cloudy rain and fog area based on multi-source satellite remote sensing data[D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2020.
- [8] 冯帅,许童羽,于丰华,等.基于无人机高光谱遥感的东北粳稻冠层叶片氮素含量反演方法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2019, 39(10): 3281-3287.
FENG S, XU T Y, YU F H, et al. Research of method for inverting nitrogen content in canopy leaves of japonica rice in northeastern china based on hyperspectral remote sensing of unmanned aerial vehicle [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2019, 39(10): 3281-3287.
- [9] 于丰华,许童羽,曹英丽,等.基于 PSO-ELM 的粳稻冠层叶绿素含量反演模型方法:中国, CN201810564338.8[P]. 2018-12-18.
YU F H, XU T Y, CAO Y L, et al. Inversion model method of chlorophyll content in Japonica rice canopy based on PSO-ELM; China, CN201810564338.8[P]. 2018-12-18.
- [10] 高林,杨贵军,于海洋,等.基于无人机高光谱遥感的冬小麦叶面积指数反演[J]. *农业工程学报*, 2016, 32(22): 113-120.
GAO L, YANG G J, YU H Y, et al. Retrieving winter wheat leaf area index based on unmanned aerial vehicle hyperspectral remote sensing [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2016, 32(22): 113-120.

- [11] 胡昊.基于可见光-近红外光谱的冬小麦氮素营养诊断与生长监测[D].北京:中国农业科学院,2009.
- HU H. Nitrogen diagnosis and growth monitoring of winter wheat based on visible and near-infrared spectrum technology[D]. Beijing: Chinese Academy of Agricultural Sciences, 2009.
- [12] 田明璐.西北地区冬小麦生长状况高光谱遥感监测研究[D].咸阳:西北农林科技大学,2017.
- TIAN M L. Monitoring winter wheat growth conditions in the northwest region of China by using hyperspectral remote sensing[D]. Xianyang: Northwest A&F University, 2017.
- [13] 孙小香.水稻叶片叶绿素和氮素含量的高光谱估测研究[D].南昌:江西农业大学,2019.
- SUN X X. Hyperspectral estimation of chlorophyll and nitrogen content in rice leaves[D]. Nanchang: Jiangxi Agricultural University, 2019.
- [14] 姚付启.冬小麦高光谱特征及其生理生态参数估算模型研究[D].咸阳:西北农林科技大学,2012.
- YAO F Q. Hyperspectral characteristics and estimating models about physiological ecological parameters of winter wheat[D]. Xianyang: Northwest A & F University, 2012.
- [15] 罗丹.基于高光谱遥感的冬小麦氮素营养指标监测研究[D].咸阳:西北农林科技大学,2017.
- LUO D. Study on monitoring nitrogen status based on hyperspectral remote sensing in winter wheat[D]. Xianyang: Northwest A & F University, 2017.
- [16] BROGE N H, MORTENSEN J V. Deriving green crop area index and canopy chlorophyll density of winter wheat from spectral reflectance data[J]. Remote Sensing of Environment, 2002, 81(1): 45-57.
- [17] 赵小敏,孙小香,王芳东,等.水稻高光谱遥感监测研究综述[J].江西农业大学学报,2019,41(1):1-12.
- ZHAO X M, SUN X X, WANG F D, et al. A summary of the researches on hyperspectral remote sensing monitoring of rice[J]. Acta Agriculturae Universitatis Jiangxiensis, 2019, 41(1): 1-12.
- [18] 李媛媛,常庆瑞,刘秀英,等.基于高光谱和BP神经网络的玉米叶片SPAD值遥感估算[J].农业工程学报,2016,32(16):135-142.
- LI Y Y, CHANG Q R, LIU X Y, et al. Estimation of maize leaf SPAD value based on hyperspectrum and BP neural network[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2016, 32(16): 135-142.
- [19] 闫明壮,王浩云,吴媛媛,等.基于光谱与纹理特征融合的绿萝叶绿素含量检测[J].南京农业大学学报,2021,44(3):568-575.
- YAN M Z, WANG H Y, WU Y Y, et al. Detection of chlorophyll content of *Epipremnum aureum* based on fusion of spectrum and texture features[J]. Journal of Nanjing Agricultural University, 2021, 44(3): 568-575.
- [20] 于丰华,冯帅,赵依然,等.梗稻冠层叶绿素含量 PSO-ELM 高光谱遥感反演估算[J].华南农业大学学报,2020,41(6):59-66.
- YU F H, FENG S, ZHAO Y R, et al. Inversion model of chlorophyll content in japonica rice canopy based on PSO-ELM and hyper-spectral remote sensing[J]. Journal of South China Agricultural University, 2020, 41(6): 59-66.
- [21] 陈振,隋学艳,梁守真,等.拔节期夏玉米洪涝胁迫下叶绿素含量和高光谱特征变化[J].江苏农业科学,2017,45(2):69-72.
- CHEN Z, SUI X Y, LIANG S Z, et al. Changes in chlorophyll content and hyperspectral characteristics of summer maize during jointing stage under flood stress[J]. Jiangsu Agricultural Sciences, 2017, 45(2): 69-72.
- [22] 毛博慧,李民赞,孙红,等.冬小麦苗期叶绿素含量检测光谱学参数寻优[J].农业工程学报,2017,33(S1):164-169.
- MAO B H, LI M Z, SUN H, et al. Optimization of spectroscopy parameters and prediction of chlorophyll content at seeding stage of winter wheat[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2017, 33(S1): 164-169.
- [23] 童庆禧,张兵,郑兰芬.高光谱遥感:原理、技术与应用[M].北京:高等教育出版社,2006:22-23.
- TONG Q X, ZHANG B, ZHENG L F. Hyperspectral remote sensing: principle, technology and application[M]. Beijing: Higher Education Press, 2006: 22-23.
- [24] SHI Z H, AI L, LI X, et al. Partial least-squares regression for linking land-cover patterns to soil erosion and sediment yield in watersheds[J]. Journal of Hydrology, 2013, 498: 165-176.
- [25] MA R M, CAI C F, WANG J G, et al. Partial least squares regression for linking aggregate pore characteristics to the detachment of undisturbed soil by simulating concentrated flow in Ultisols (subtropical China)[J]. Journal of Hydrology, 2015, 524: 44-52.
- [26] CARRASCAL L M, GALVÁN I, GORDO O. Partial least squares regression as an alternative to current regression methods used in ecology[J]. Oikos, 2009, 118(5): 681-690.
- [27] TRAP J, HÄTTENSCHWILER S, GATTIN I, et al. Forest ageing: an unexpected driver of beech leaf litter quality variability in European forests with strong consequences on soil processes[J]. Forest Ecology and Management, 2013, 302: 338-345.
- [28] 尹佳硕.变量施肥夏玉米高光谱与农学参数关联模型研究[D].保定:河北农业大学,2018.
- YIN J S. Study on correlation model between hyperspectral and agronomic parameters of summer corn with variable rate fertilization[D]. Baoding: Hebei Agricultural University, 2018.
- [29] 陈澜,常庆瑞,高一帆,等.猕猴桃叶片叶绿素含量高光谱估算模型研究[J].西北农林科技大学学报(自然科学版),2020,48(6):79-89,98.
- CHEN L, CHANG Q R, GAO Y F, et al. Hyperspectral estimation model of chlorophyll content in kiwifruit leaves[J]. Journal of Northwest A & F University(Natural Science Edition), 2020, 48(6): 79-89, 98.
- [30] 刘良云.植被定量遥感原理与应用[M].北京:科学出版社,2014:31-32.
- LIU L Y. The principle and application of vegetation quantitative remote sensing[M]. Beijing: Science Press, 2014: 31-32.
- [31] SEELAN S K, LAGUETTE S, CASADY G M, et al. Remote sensing applications for precision agriculture: a learning community approach[J]. Remote Sensing of Environment, 2003, 88(1/2): 157-169.
- [32] 王丹,赵朋,孙家波,等.基于无人机多光谱的夏玉米叶绿素含量反演研究[J].山东农业科学,2021,53(6):121-126,132.
- WANG D, ZHAO P, SUN J B, et al. Inversion of chlorophyll content in summer maize based on UAV multi-spectrum[J]. Shandong Agricultural Sciences, 2021, 53(6): 121-126, 132.
- [33] 赵占辉,张从志,张佳宝,等.基于回归分析的玉米冠层叶绿素含量高光谱反演分析[J].中国农学通报,2021,37(20):7-16.
- ZHAO Z H, ZHANG C Z, ZHANG J B, et al. The hyperspectral inversion for estimating maize chlorophyll contents based on regression analysis[J]. Chinese Agricultural Science Bulletin, 2021, 37(20): 7-16.
- [34] IRTEZA S M, NICHOL J E. Measurement of sun induced chlorophyll fluorescence using hyperspectral satellite imagery[J]. International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences-ISPRS Archives, 2016, 41: 911-913.
- [35] 付元元,王纪华,杨贵军,等.应用波段深度分析和偏最小二乘回归的冬小麦生物量高光谱估算[J].光谱学与光谱分析,2013,33(5):1315-1319.
- FU Y Y, WANG J H, YANG G J, et al. Band depth analysis and partial least square regression based winter wheat biomass estimation using hyperspectral measurements[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(5): 1315-1319.