

doi:10.6041/j.issn.1000-1298.2015.09.047

# 基于可见/近红外光谱的牡丹叶片花青素含量预测\*

刘秀英<sup>1,2</sup> 申健<sup>1</sup> 常庆瑞<sup>1</sup> 严林<sup>1</sup> 高雨茜<sup>1</sup> 谢飞<sup>1</sup>

(1. 西北农林科技大学资源环境学院, 陕西杨凌 712100;

2. 河南科技大学农学院, 洛阳 471003)

**摘要:** 以开花初期不同品种牡丹叶片为研究对象, 分析叶片花青素含量与反射光谱之间的相关关系, 分别建立基于单波长、不同植被指数、相关系数大于0.52的可见光波段的叶片花青素含量预测模型。研究表明, 牡丹叶片反射光谱与花青素含量的最大相关系数位于544 nm; 以544 nm波长反射率及花青素反射指数(ARI)、调整花青素反射指数(MARI)为自变量建立的预测模型可以用于牡丹叶片花青素含量预测; 以偏最小二乘回归(PLSR)构建的牡丹叶片花青素含量预测模型的建模和验模 $R^2$ 分别为0.873和0.811, RMSE为0.068  $\mu\text{mol/g}$ , RPD为2.352, 是预测牡丹叶片花青素含量的最优模型。

**关键词:** 牡丹 叶片 花青素 可见/近红外光谱 偏最小二乘回归 预测模型

中图分类号: O657.33; Q94-3 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2015)09-0319-06

## Prediction of Anthocyanin Content in Peony Leaves Based on Visible/Near-infrared Spectra

Liu Xiuying<sup>1,2</sup> Shen Jian<sup>1</sup> Chang Qingrui<sup>1</sup> Yan Lin<sup>1</sup> Gao Yuqian<sup>1</sup> Xie Fei<sup>1</sup>

(1. College of Resources and Environment, Northwest A&amp;F University, Yangling, Shaanxi 712100, China

2. College of Agronomy, Henan University of Science and Technology, Luoyang 471003, China)

**Abstract:** The anthocyanin content in leaves can provide valuable information about the physiological conditions of plants and their responses to stress. Thus, there is a need for accurate, efficient and practical methodologies to estimate the biochemical parameters of vegetation. In this study, the peony leaves of different varieties in the early flowering stage were selected as the research objects to analyze the correlation between anthocyanin content in leaves and reflectance spectra. The predictive models were established based on a single band or different vegetation indices. The PLSR (Partial least squares regression) model was constructed to estimate anthocyanin content in leaves by using the reflectance spectra with correlation coefficient more than 0.52 in visible band as independent variables. The results showed that the maximum correlation coefficient between reflectance spectra and anthocyanin content was located at 544 nm. These predictive models which used the reflectance at 544 nm, ARI (Anthocyanin reflectance index) or MARI (Modified anthocyanin reflectance index) as independent variables could be used to estimate anthocyanin content in peony leaves in fact. The calibration and validation  $R^2$  of optimum model for predicting anthocyanin content in poeny leaves established by PLSR were 0.873 and 0.811, and the RMSE and RPD were 0.068  $\mu\text{mol/g}$  and 2.352, respectively. This study can provide a method for nondestructive estimation of anthocyanin content in plant leaves, and make a reference for the assessment of physiological status of plants and early stress detection.

**Key words:** Poeny Leaf Anthocyanin Visible/Near-infrared spectra Partial least squares regression Predictive model

收稿日期: 2015-07-06 修回日期: 2015-07-27

\* 国家高技术研究发展计划(863计划)资助项目(2013AA102401-2)

作者简介: 刘秀英, 博士生, 河南科技大学讲师, 主要从事农业遥感及GIS应用研究, E-mail: csfulxy@126.com

通讯作者: 常庆瑞, 教授, 博士生导师, 主要从事资源环境和3S技术应用研究, E-mail: changqr@nwsuaf.edu.cn

## 引言

花青素是植物叶片色素中第3类主要色素,它是一种水溶性的黄酮类化合物,能够提供植物生理状况及其对胁迫响应有价值的信息,但是对于它们的存在和功能没有统一的解释<sup>[1]</sup>。通常,花青素在植物幼小和衰老叶片中含量丰富。花青素的有效积累是由许多环境胁迫引起的,包括强光、中波紫外线照射、低温、干旱、损伤、细菌及真菌感染、氮和磷的缺乏、某些除草剂及污染物<sup>[2]</sup>。花青素对植物具有多种功能,如花青素能够修复叶片的光环境,具有潜在地调节光合作用和限制光抑制与光漂白作用的能力,因此具有光保护的功能<sup>[3]</sup>;花青素作为渗透调节物质,能提高植物抗冰冻与抗干旱胁迫的能力<sup>[4]</sup>;花青素具有抗氧化特性,有助于叶片损伤后的修复<sup>[5]</sup>等。因此,识别花青素的存在,并了解它们的绝对和相对数量,对于陆地生态系统中许多监测和管理应用非常重要<sup>[6]</sup>。

传统花青素含量的测定主要是通过湿化学方法,包括色素的提取,分光光度计测定花青素的吸光度,把吸光度转换成花青素含量<sup>[2,7-8]</sup>。然而实验室测量劳动强度大,费时、费力并损坏叶片,不能进行原位重复测量及大区域监测,因此需要一种精确、高效、实用的方法来估计花青素含量<sup>[9]</sup>。有研究表明,所有的植物色素都选择性吸收或反射特定波长的光,并且很容易用吸收和反射光谱法进行评估,因此吸收和反射光谱法能够替代破坏

性的、费时的化学方法<sup>[2,8]</sup>,从而对植物色素进行快速、无损估测。

已有学者通过光谱信息构建了5个植被指数用于建立叶片花青素含量提取模型<sup>[2,9-12]</sup>,这些指数已经成功估计了某一种或几种植物叶片花青素含量,但也有研究者使用不同的植物测试 Red/Green 指数时,表明它与花青素并无相关性<sup>[13]</sup>。由于不同的物种具有不同的色素含量及冠层和叶片结构,因此,这5个指数对于其它不同种类植物叶片花青素含量估计是否具有普适性仍需进一步验证。在开花初期,不同品种的牡丹叶片显现红颜色的程度不同,叶片花青素含量差异较大,是研究中、低花青素含量较理想的对象;另外,对于牡丹叶片的花青素含量无损估测研究目前未见系统报道。

因此,本文在分析牡丹叶片光谱特征的基础上,利用特征波段及5个植被指数进行牡丹叶片花青素含量预测研究;同时,利用偏最小二乘回归法(Partial least squares regression, PLSR)构建牡丹叶片花青素含量光谱预测模型,并对模型进行验证。

## 1 材料与方法

### 1.1 试验对象

试验于2015年4月在西北农林科技大学牡丹园内进行,在牡丹(*Paeonia Suffruticosa*)开花初期,基于可视化特征,根据叶片颜色从绿、微红到完全红进行随机选择(图1),共采集了14个不同品种牡丹的健康、无损伤叶片396片。



图1 不同颜色牡丹叶片

Fig. 1 Peony leaves with different colors

### 1.2 光谱测量

牡丹叶片光谱测量选用美国 Spectra Vista 公司生产的 SVC HR-1024i 型便携式光谱仪,光谱仪波长范围为 350~2 500 nm,在波段 350~1 000 nm,光谱分辨率小于等于 3.5 nm;1 000~1 850 nm 波段,光谱分辨率小于等于 9.5 nm;1 850~2 500 nm 波段,光谱分辨率小于等于 6.5 nm<sup>[14]</sup>。利用自带光源型手持叶片光谱探测器直接测定叶片光谱,光源为内置卤钨灯。每次进行光谱测定前,都要利用漫反射参考板进行仪器的优化,测定时,将待测叶片置于探测器直接测定。为了得到具有代表性的光谱,每个叶片测量3个位置,每个位置测量1条光谱,总共

测量3个叶片9条光谱,把9条光谱平均值作为1个样本光谱,共采集了132个样本光谱。由于花青素对叶片光谱的响应波段主要位于可见光,因此本文主要选择400~1 000 nm 波段进行研究,并将光谱重采样至1 nm。

### 1.3 花青素含量测定

进行光谱测量后的叶片进行花青素含量测定。叶片被剪碎、称量,并用 0.1 mol/L 盐酸-甲醇溶液进行低温浸提。以 0.1 mol/L 盐酸-甲醇溶液做参比液,在分光光度计上测得提取液在 530、620、650 nm 波长下的光密度<sup>[15]</sup>(花青素含量  $C_{\text{ANTH}}$  基于叶片质量进行表达( $\mu\text{mol/g}$ ))。

$$D_{\lambda} = D_{530} - D_{620} - 0.1(D_{650} - D_{620}) \quad (1)$$

$$C_{\text{ANTH}} = \frac{D_{\lambda} V}{\varepsilon_{\lambda} m} \times 10^3 \quad (2)$$

式中  $D_{\lambda}$ ——花青素在波长  $\lambda$  下的光密度

$\varepsilon_{\lambda}$ ——花青素摩尔消光系数,取  $4.62 \times 10^4$

$V$ ——提取液总体积, mL

$m$ ——取样质量, g

$C_{\text{ANTH}}$ ——花青素含量,  $\mu\text{mol/g}$

### 1.4 数据处理

132 个样本数据根据花青素含量按升序进行排列,按顺序每 3 个样本取 2 个组成校正集,余下的样本作为验证集,为了进行比较,所有预测模型的校正集和验证集均相同。依据反射光谱与叶片花青素含量的关系,选择 5 种光谱指数构建预测模型;通过对反射光谱与叶片花青素含量的相关分析,选择相关性最大的波段,即特征波段构建花青素含量单波长预测模型;选择可见光波段范围内相关系数大于 0.52,并达到极显著相关的波段反射率作为自变量,构建叶片花青素含量预测的偏最小二乘回归(PLSR)模型。以单波长和植被指数为自变量时,基于模型构建简单、实用的原则,采用一元线性回归、指数回归、对数回归、幂函数及一元二次方程建立叶片花青素含量的预测模型。所有预测模型的预测效果分别采用预测值和观测值间的决定系数( $R^2$ )、均方根误差(RMSE)和相对预测偏差(RPD)进行评价<sup>[16]</sup>(表1)。模型的 RPD 值可以解释模型的预测能力,RPD 的评价标准采用 Chang 等<sup>[17]</sup>提出的阈值划分方法,即 RPD 大于 2.0 表明模型是稳定的、准确的;RPD 大于 1.4 小于 2.0 表明是可以接受的模型,并可以改进;RPD 小于 1.4 表明模型的预测能力很差。总之,一个好的预测模型应该有大的  $R^2$  和 RPD,小的 RMSE<sup>[18]</sup>。

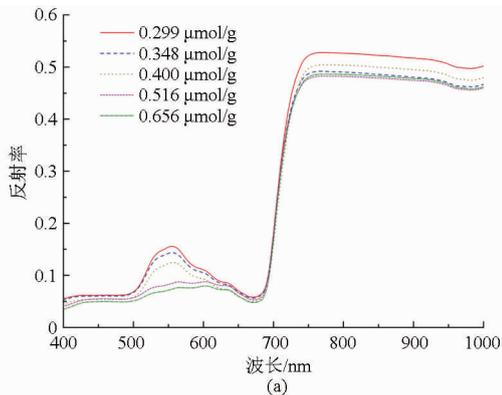


表1 光谱参数及预测模型评价指标  
Tab.1 Spectral parameters and evaluation indices of prediction model

参数	缩写	计算公式	文献编号
红/绿指数	Red/Green	$\rho_{\lambda\text{Red}}/\rho_{\lambda\text{Green}}$	[10]
花青素含量指数	ACI	$\alpha_{\lambda\text{Green}}/\alpha_{\lambda\text{NIR}}$	[11]
调整花青素含量指数	MACI	$\rho_{\lambda\text{NIR}}/\rho_{\lambda\text{Green}}$	[9]
花青素反射指数	ARI	$\rho_{\lambda\text{Green}}^{-1} - \rho_{\lambda\text{Rededge}}^{-1}$	[2]
调整花青素反射指数	MARI	$(\rho_{\lambda\text{Green}}^{-1} - \rho_{\lambda\text{Rededge}}^{-1})\rho_{\text{NIR}}$	[12]
决定系数	$R^2$	$\frac{\sum_{i=1}^n (2\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$	[16]
均方根误差	RMSE	$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}}$	[16]
相对预测偏差	RPD	$D_{\text{SDV}} / (D_{\text{RMSEv}} \sqrt{n/(n-1)})$	[16]

注: $\rho_{\lambda\text{Green}}$  表示 540 ~ 560 nm 的平均反射率, $\rho_{\lambda\text{Red}}$  表示 660 ~ 680 nm 的平均反射率, $\rho_{\lambda\text{NIR}}$  表示 760 ~ 800 nm 的平均反射率, $\rho_{\lambda\text{Rededge}}$  表示 690 ~ 710 nm 的平均反射率, $\alpha_{\lambda\text{Green}}$  表示 530 nm 处的吸收, $\alpha_{\lambda\text{NIR}}$  表示 940 nm 处的吸收。 $\hat{y}$  是预测值; $\bar{y}$  是观测值的均值; $y$  是观测值; $n$  是样本数,用  $i = 1, 2, \dots, n$  表示; $D_{\text{SDV}}$  是验证集的标准偏差 SDV; $D_{\text{RMSEv}}$  是验证的均方根误差 RMSEv(下同)。

## 2 结果与分析

### 2.1 牡丹叶片光谱特征

图 2 为 400 ~ 1 000 nm 波段内,不同花青素含量和不同品种牡丹叶片反射光谱。从图 2a 可以看出不同花青素含量牡丹叶片光谱变化趋势基本一致,差异较大的波段位于 520 ~ 680 nm、715 ~ 1 000 nm,而其他波段几乎不变。从图 2a 可以看出,520 ~ 680 nm 波段,随花青素含量增加,550 nm 处吸收峰明显增大,吸收峰增宽;当花青素含量达到 0.656  $\mu\text{mol/g}$  时,550 nm 处的反射峰几乎消失,光谱曲线呈平直状态。715 ~ 1 000 nm 波段,反射光谱差异明显,随花青素含量增加,反射率具有明显降低的趋势。而图 2b 显示,当花青素含量相同(约为 0.235  $\mu\text{mol/g}$ )时,不同品种牡丹叶片光谱曲线同样

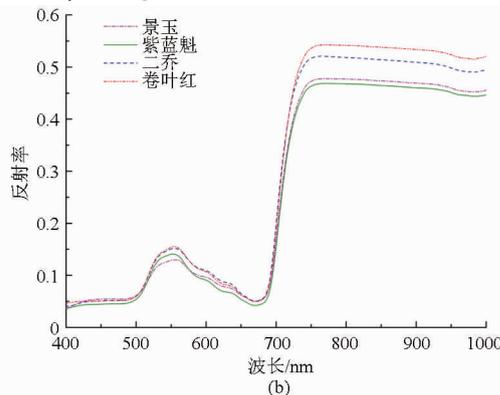


图2 牡丹叶片光谱

Fig.2 Reflectance spectra of poenoy leaves

(a) 不同花青素含量时,同一品种牡丹叶片(大红花,DHH) (b) 0.235  $\mu\text{mol/g}$  花青素时,不同品种牡丹叶片

在 520 ~ 680 nm、715 ~ 1 000 nm 差异较大。

## 2.2 基于单波长的叶片花青素含量预测

图 3 为牡丹叶片花青素含量与反射光谱相关系数变化趋势,从图 3 中可以看出在 427 ~ 464 nm、635 ~ 690 nm 波段内,叶片花青素含量与反射光谱呈正相关,其他波段范围均呈负相关;相关系数最大值为 0.839 7,呈负相关,位于波长 544 nm;在 500 ~ 609 nm、709 ~ 1 000 nm 波段内,两者的相关性达到了 0.01 水平下极显著相关。图 4 为叶片花青素含量与 544 nm 处反射光谱散点图,从图中可以看出随花青素含量增加,544 nm 处反射光谱减小,因此,进行单波长牡丹叶片花青素含量预测时选择 544 nm 处反射光谱构建模型。

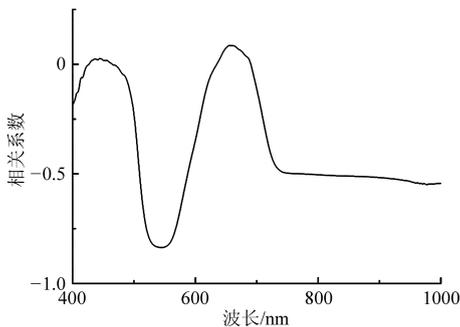


图 3 花青素含量与反射光谱相关系数变化曲线  
Fig. 3 Correlation coefficient between anthocyanin content and reflectance spectra

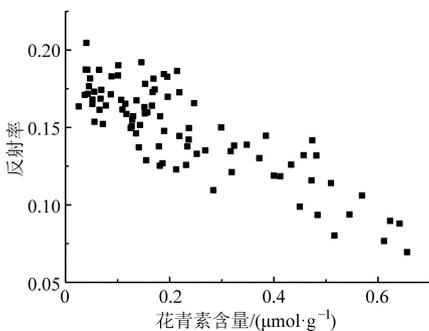


图 4 花青素含量与 544 nm 处反射光谱  
Fig. 4 Anthocyanin content and reflectance spectra in 544 nm

表 2 列举了 544 nm 处反射光谱与牡丹叶片花青素含量的回归模型及验证结果,表格中  $R_c^2$  表示校正模型决定系数,  $R_v^2$  表示验证模型决定系数,  $RMSEv$  表示验证均方根误差,单位为  $\mu\text{mol/g}$ ,  $RPDv$  表示验证相对预测偏差。通过对比可以发现,一元二次方程的建模及验模决定系数  $R^2$  分别为 0.743、0.757,高于其他类型回归模型;预测值与实测值的总均方根误差  $RMSEv$  为  $0.077 \mu\text{mol/g}$ ,小于其他类型回归模型;而  $RPDv$  为 2.052,大于其他类型回归模型;且  $RPDv$  大于 2.0,表明预测模型是稳定的、准确的,可以用于牡丹叶片花青素含量预测。通过对比还可发

现,对数模型的建模及验模决定系数  $R^2$  分别为 0.735、0.732,  $RMSEv$  为  $0.082 \mu\text{mol/g}$ ,  $RPDv$  为 1.935,仅次于一元二次模型,说明对数模型的预测效果也比较好。

表 2 基于 544 nm 处反射光谱的牡丹叶片花青素含量的拟合及验证

Tab. 2 Fitting and performance of anthocyanin content models in peony leaves based on reflectance spectra in 544 nm

函数	方程	$R_c^2$	$R_v^2$	$RMSEv/(\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1})$	$RPDv$
一元线性	$y = -4.750x + 0.932$	0.711	0.686	0.091	1.749
一元二次	$y = 28.23x^2 - 12.60x + 1.452$	0.743	0.757	0.077	2.052
指数	$y = 3.813e^{-20.9x}$	0.594	0.741	0.083	1.923
对数	$y = -0.63\ln x - 1.001$	0.735	0.732	0.082	1.935
幂函数	$y = 0.0009x^{-2.71}$	0.573	0.670	0.100	1.591

## 2.3 基于植被指数的叶片花青素含量预测

表 3 列举了 5 类植被指数与牡丹叶片花青素含量的 5 种类型回归模型及验证结果。对于植被指数 Red/Green,从建模决定系数  $R^2$  来看,效果最好的方程为一元线性、一元二次和对数方程,这 3 个方程的  $R^2$  均大于 0.76,但是一元二次和对数方程的验证结果比一元线性方程略差,其验证  $R^2$  和  $RPD$  值均略小于一元线性方程,而  $RMSEv$  略高于一元线性方程;其余 2 类模型拟合效果较差。综合来看,一元线性方程的稳定性及精度是最好的;同理可知,对于植被指数 ACI、MACI、ARI、MARI,建模和验模效果最好的也是一元线性模型。另外,通过比较还可以发现,植被指数 ARI 和 MARI 建立的一元线性模型,其建模  $R^2$  为 0.763 和 0.759,验模  $R^2$  为 0.820 和 0.825,而  $RMSEv$  较小,均为  $0.077 \mu\text{mol/g}$ ,相比其他指数建立的模型效果更佳,说明这 2 个植被指数建立的牡丹叶片花青素含量一元线性预测模型最稳定,精度最高,而它们的  $RPDv$  值分别为 2.077 和 2.069,大于 2.0,说明模型可以用于牡丹叶片花青素含量预测。

## 2.4 基于偏最小二乘回归的叶片花青素含量预测

PLSR 集主成分、典型相关和多元线性回归分析 3 种分析方法的优点,能够利用所有有效的数据构建模型,提取出反映数据变异的最大信息,具有良好的预测功能<sup>[19]</sup>,因此利用 PLSR 构建牡丹叶片花青素含量预测模型,并用独立样本进行验证。通过对叶片反射光谱与花青素含量进行相关分析发现,在花青素含量敏感波段区域,相关系数大于 0.52 并达

到了 0.01 极显著性检验水平的波段为 510 ~ 585 nm,因此选择这个波段内的 76 个反射光谱作为自变量构建花青素含量预测模型,并进行验证。表 4 列出了叶片花青素含量 PLSR 建模及验模参数,  $R_c^2$  表示交叉验证模型决定系数,  $RMSE_{cv}$  表示交叉验证均方根误差,  $RPD_{cv}$  表示交叉验证相对预测偏差。从表 4 中可以看出,校正模型的决定系数

较大,为 0.873,选择的主成分数为 4 个;交叉验证及独立样本验证过程中,模型的决定系数  $R^2$  均较大,分别为 0.857 和 0.811,  $RMSE$  均较小,分别为 0.063  $\mu\text{mol/g}$ 和 0.068  $\mu\text{mol/g}$ ,而  $RPD$  均大于 2.0,分别为 2.512 和 2.352,说明 PLSR 建立的牡丹叶片花青素含量预测模型稳定、精度较高,能用于叶片花青素含量的预测。

表 3 基于植被指数的牡丹叶片花青素含量的拟合及验证

Tab. 3 Fitting and performance of anthocyanin content models in peony leaves based on vegetation indices

植被指数	函数	模型表达式	$R_c^2$	$R_v^2$	$RMSE_{cv}/(\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1})$	$RPD_v$
Red/Green	一元线性	$y = 1.575x - 0.354$	0.772	0.740	0.095	1.672
	一元二次	$y = -1.001x^2 + 2.450x - 0.532$	0.777	0.734	0.097	1.641
	指数	$y = 0.015e^{6.525x}$	0.570	0.650	0.139	1.145
	对数	$y = 0.646\ln x + 0.888$	0.767	0.722	0.098	1.617
	幂函数	$y = 2.893x^{2.766}$	0.605	0.715	0.111	1.428
ACI	一元线性	$y = 0.162x - 0.402$	0.645	0.708	0.084	1.893
	一元二次	$y = -0.016x^2 + 0.310x - 0.720$	0.655	0.695	0.087	1.828
	指数	$y = 0.012e^{0.672x}$	0.473	0.633	0.100	1.595
	对数	$y = 0.711\ln x - 0.720$	0.651	0.685	0.088	1.800
	幂函数	$y = 0.003x^{3.018}$	0.505	0.683	0.091	1.754
MACI	一元线性	$y = 0.171x - 0.387$	0.670	0.732	0.092	1.730
	一元二次	$y = -0.023x^2 + 0.372x - 0.792$	0.689	0.714	0.101	1.570
	指数	$y = 0.013e^{0.703x}$	0.484	0.643	0.108	1.467
	对数	$y = 0.707\ln x - 0.660$	0.684	0.704	0.098	1.619
	幂函数	$y = 0.004x^{2.985}$	0.532	0.715	0.102	1.564
ARI	一元线性	$y = 0.088x + 0.089$	0.763	0.820	0.077	2.077
	一元二次	$y = -0.011x^2 + 0.163x + 0.030$	0.833	0.815	0.089	1.782
	指数	$y = 0.097e^{0.357x}$	0.543	0.646	0.113	1.412
	对数	$y = 0.139\ln x + 0.229$	0.711	0.748	0.105	1.520
	幂函数	$y = 0.172x^{0.672}$	0.716	0.820	0.074	2.156
MARI	一元线性	$y = 0.179x + 0.084$	0.759	0.825	0.077	2.069
	一元二次	$y = -0.045x^2 + 0.326x + 0.026$	0.825	0.803	0.092	1.738
	指数	$y = 0.095e^{0.737x}$	0.549	0.720	0.096	1.662
	对数	$y = 0.140\ln x + 0.322$	0.699	0.739	0.107	1.488
	幂函数	$y = 0.270x^{0.682}$	0.708	0.816	0.075	2.117

表 4 牡丹叶片花青素含量的 PLSR 拟合及验证

Tab. 4 Fitting and performance of anthocyanin content models in peony leaves by PLSR

主成分数	$R_c^2$	$R_v^2$	$RMSE_{cv}$	$RPD_{cv}$	$R_v^2$	$RMSE_{cv}/(\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1})$	$RPD_v$
4	0.873	0.857	0.063	2.512	0.811	0.068	2.352

### 3 讨论

通过分析不同花青素含量牡丹叶片光谱可知,光谱反射率差异较大的波段为 520 ~ 680 nm、715 ~ 1 000 nm。其中,520 ~ 680 nm 光谱差异,主要是由于叶片中不同色素含量(主要是叶绿素和花青素)对绿光波段的吸收不同引起的;而 715 ~ 1 000 nm 的光谱差异,主要是由于植株冠层结构及叶片内部细胞

结构差异造成的<sup>[20]</sup>。当花青素含量相同时,不同品种牡丹叶片光谱差异的原因,同样是由于不同品种叶片色素含量不同以及植株冠层结构及叶片内部细胞结构差异所致。通过对叶片花青素含量与反射光谱进行相关分析可知,牡丹叶片花青素的特征波长为 544 nm,这与前人的研究结论“在活体内,叶片花青素吸收峰最大值大约位于 550 nm”一致<sup>[2, 21]</sup>。

基于特征波段建立的单波长模型,由于利用了叶片花青素的吸收特征波段,所以建立的模型不但简单,普适性较强,而且精度较高。而光谱植被指数是不同光谱波段的数学组合,它们的目的是增强反射光谱数据包含的信息,例如叶片色素含量,并且最小化由于叶片和冠层结构等产生的复杂散射模式的影响及其他噪声来源<sup>[22]</sup>,因此利用光谱植被指数预

测叶片或冠层色素含量及其他生化成分,有其独特的优势。本文的研究结果表明以植被指数ARI和MARI为自变量建立的模型预测效果较好,且能用于实际牡丹叶片花青素含量的预测,这主要由于ARI和MARI在预测花青素含量时考虑了叶片叶绿素含量及叶片厚度、密度的影响<sup>[2,13]</sup>,因而预测效果更佳;另外,ACI、MACI的预测效果最差,主要是由于牡丹叶片的花青素含量较低,叶绿素含量较高,绿光波段反射率受叶绿素的影响较大,从而降低了花青素含量预测的精度;当叶片中花青素含量较低时,Red/Green比值的预测效果同样受叶片中色素组成干扰较大,从而降低了叶片花青素含量的预测效果,这与其他研究者的结论一致<sup>[2,8]</sup>。因此,ARI和MARI进行不同品种植物的叶片花青素含量预测时通用性较好,而Red/Green比值、ACI、MACI在某些情况下可以用于叶片花青素含量的预测。

已有研究表明,偏最小二乘回归方法进行高光谱的叶片色素含量预测时效果较好<sup>[23]</sup>。前人研究表明,叶片花青素含量影响500~600nm的光吸收,并且伴随吸收峰加宽<sup>[21]</sup>。本研究通过相关分析选择了510~585nm波段反射光谱作为自变量进行PLSR分析,说明选择的波段位于花青素的敏感波段。建模结果表明偏最小二乘回归模型的整体效果优于基于单波长和植被指数构建的花青素含量预测模型,主要是由于偏最小二乘回归可以利用所有有效波段的光谱信息构建模型<sup>[18]</sup>,从而构建的预测模

型较大提高了牡丹叶片花青素含量的预测精度,模型稳定性也得到增强,而单波长模型和植被指数模型仅利用了1个或2到3个波段光谱信息,从而模型的精度受到限制。本研究基于植被指数的牡丹叶片的花青素含量预测的效果比其他研究者对其他植物叶片的估算效果要略差<sup>[2,7,8-12]</sup>,主要是由于牡丹叶片的花青素含量相对较低,属于中、低水平,而叶片叶绿素含量相对较高。已有研究表明,在绿光范围,叶绿素和花青素对绿光吸收的重叠是发展花青素含量无损估计算法的主要问题<sup>[8]</sup>,因此,牡丹叶片中高的叶绿素含量影响了花青素的光谱预测效果,对于叶绿素干扰作用的排除还有待进一步研究。

## 4 结论

(1) 随花青素含量增加,牡丹叶片550nm处吸收峰增大。在500~609nm、709~1000nm波段,牡丹叶片反射光谱与花青素含量呈极显著负相关关系,相关系数最大值为0.8397,位于波长544nm。

(2) 以544nm波长反射率、ARI、MARI为自变量建立的预测模型稳定性和精度均较好,可以用于牡丹叶片花青素含量预测;ARI、MARI的通用性比较好,可以用于多种植物叶片花青素含量预测。

(3) 以PLSR构建的牡丹叶片花青素含量光谱预测模型,建模和验模 $R^2$ 分别为0.873和0.811,验模RMSE为0.068 $\mu\text{mol/g}$ ,RPD为2.352,是预测牡丹叶片花青素含量的最优模型。

## 参 考 文 献

- 伍维模,牛建龙,温善菊,等.植物色素高光谱遥感研究进展[J].塔里木大学学报,2009,21(4):61-68.  
Wu Weimo, Niu Jianlong, Wen Shanju, et al. Research advances in hyperspectral remote sensing techniques in quantifying plant pigments[J]. Journal of Tarim University, 2009, 21(4):61-68. (in Chinese)
- Gitelson A A, Merzlyak M N, Chivkunova O B. Optical properties and nondestructive estimation of anthocyanin content in plant leaves[J]. Photochemistry and Photobiology, 2001, 74(1): 38-45.
- Close D C, Beadle C L. The ecophysiology of forliar anthocyanin[J]. The Botanical Review, 2003, 69: 149-161.
- Chalker-Scott L. Environmental significance of anthocyanins in plant stress responses[J]. Photochemistry and Photobiology, 1999, 70(1): 1-9.
- Gould K S, McKelvie J, Markham K R. Do anthocyanins function as antioxidants in leaves? Imaging of  $\text{H}_2\text{O}_2$  in red and green leaves after mechanical injury[J]. Plant, Cell and Environment, 2002, 25(10): 1261-1269.
- Asner G P, Nepstad D, Cardinot G, et al. Drought stress and carbon uptake in an Amazon forest measured with spaceborne imaging spectroscopy[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2004, 101(16): 6039-6044.
- Gitelson A A, Merzlyak M N. Non-destructive assessment of chlorophyll, carotenoids and anthocyanin content in higher plant leaves: principles and algorithms[M] // Stamtiadis S, Lynch J M, Shepers J S. Remote Sensing for Agriculture and the Environment. Greece: Ella, 2004: 78-94.
- Gitelson A A, Chivkunova O B, Merzlyak M N. Nondestructive estimation of anthocyanins and chlorophylls in anthocyanic leaves[J]. American Journal of Botany, 2009, 96(10): 1861-1868.
- Steele M R, Gitelson A A, Rundquist D C, et al. Nondestructive estimation of anthocyanin content in Grapevine leaves[J]. American Journal of Enology and Viticulture, 2009, 60(1): 87-92.
- Gamon J A, Surfus J S. Assessing leaf pigment content and activity with a reflectometer[J]. New Phytologist, 1999, 143(1): 105-117.

- 6 周广猛,刘瑞林,董素荣,等. 高压共轨柴油机高海拔(低气压)燃烧特性[J]. 内燃机学报, 2012, 30(3): 220-226.  
Zhou Guangmeng, Liu Ruilin, Dong Surong, et al. Combustion characteristics of common rail diesel engine under high altitude (low pressure) conditions[J]. Transactions of CSICE, 2012, 30(3): 220-226. (in Chinese)
- 7 姜泽浩,张付军,董长龙,等. 涡轮增压柴油机高原性能试验研究[J]. 车用发动机, 2014(6): 59-63.  
Jiang Zehao, Zhang Fujun, Dong Changlong, et al. Experimental study on performance of turbocharged diesel engine on plateau [J]. Vehicle Engine, 2014(6): 59-63. (in Chinese)
- 8 靳嵘,张俊跃,胡力峰,等. 高原自适应柴油机涡轮增压技术研究[J]. 内燃机工程, 2011, 32(4): 27-31.  
Jin Rong, Zhang Junyue, Hu Lifeng, et al. Study on varying altitude self-adaptive turbocharging system for diesel engine [J]. Chinese Internal Combustion Engine Engineering, 2011, 32(4): 27-31. (in Chinese)
- 9 朱振夏,张付军,韩恺,等. 柴油机高原功率恢复供油参数调节方法[J]. 兵工学报, 2014, 35(5): 583-589.  
Zhu Zhenxia, Zhang Fujun, Han Kai, et al. Adaption of fuel injection parameters for turbocharged diesel engines working at high altitude[J]. Acta Armamentarii, 2014, 35(5): 583-589. (in Chinese)
- 10 张海雷. 柴油机变海拔涡轮增压技术研究[D]. 北京:清华大学,2008.
- 11 郭猛超,王宪成,袁善勇,等. 高原环境车用柴油机与辅助系统耦合仿真[J]. 农业机械学报, 2013, 44(7): 17-22.  
Guo Mengchao, Wang Xiancheng, Yuan Shanyong, et al. Coupled simulation on vehicle diesel engine and auxiliary system in plateau environment[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(7): 17-22. (in Chinese)
- 12 施新,李文祥. 匹配二级顺序增压系统的柴油机高原特性仿真[J]. 兵工学报, 2011, 32(4): 397-402.  
Shi Xin, Li Wenxiang. Simulation on plateau performance of diesel engine matched with two-stage sequential turbocharging system [J]. Acta Armamentarii, 2011, 32(4): 397-402. (in Chinese)
- 13 刘系嵩,魏名山,马朝臣,等. 不同海拔下单级和二级增压柴油机的仿真[J]. 内燃机学报, 2010, 28(5): 447-452.  
Liu Xihao, Wei Mingshan, Ma Chaocheng, et al. Simulation on one-stage and two-stage turbocharged diesel engines at different altitudes[J]. Transactions of CSICE, 2010, 28(5): 447-452. (in Chinese)
- 14 韩恺,朱振夏,张付军,等. 可调复合增压柴油机高原功率恢复方案研究[J]. 兵工学报, 2013, 34(2): 129-136.  
Han Kai, Zhu Zhenxia, Zhang Fujun, et al. Research on composite adjustable supercharged program of diesel engine for power recovery at plateau[J]. Acta Armamentarii, 2013, 34(2): 129-136. (in Chinese)
- 15 Sui Lingge, Liu Zhongchang, Han Yongqiang, et al. Realization of the simulation platform of turbo-charged diesel engine with EGR loop under transient conditions[C] //2010 International Conference on Computer Application and System Modeling (ICCASH), 2010, 8: 274-279.

(上接第 324 页)

- 11 van Den Berg A K, Perkins T D. Nondestructive estimation of anthocyanin content in autumn sugar maple leaves [J]. HortScience, 2005, 40(3): 685-686.
- 12 Gitelson A A, Keydan G P, Merzlyak M N. Three-band model for noninvasive estimation of chlorophyll, carotenoids, and anthocyanin contents in higher plant leaves[J]. Geophysical Research Letters, 2006, 33(11): 1-5.
- 13 Sims D A, Gamon J A. Relationships between leaf pigmerit content and spectral reflectance across a wide range of species, leaf structures and development stages[J]. Remote Sensing of Environment, 2002, 81(2-3): 337-354.
- 14 刘秀英,王力,宋荣杰,等. 黄绵土风干过程中土壤含水率的光谱预测[J]. 农业机械学报, 2015, 46(4): 266-272.  
Liu Xiuying, Wang li, Song Rongjie, et al. Prediction of soil moisture content in air-drying loess using spectral data [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2015, 46(4): 266-272. (in Chinese)
- 15 熊庆娥,叶珍,杨世民,等. 植物生理学实验教程[M]. 成都:四川科学技术出版社,2003: 94-95.
- 16 Hu Xueyu. Application of visible/near-infrared spectra in modeling of soil total phosphorus[J]. Pedosphere, 2013, 23(4): 417-421.
- 17 Chang C W, Laird D A. Near-infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N[J]. Soil Science, 2002, 167(2): 110-116.
- 18 Yang H, Kuang B, Mouazen A M. Quantitative analysis of soil nitrogen and carbon at a farm scale using visible and near infrared spectroscopy coupled with wavelength reduction[J]. European Journal of Soil Science, 2012, 63(3): 410-420.
- 19 唐启义,冯明光. DPS 处理系统[M]. 北京:科学出版社,2007.
- 20 林辉,臧卓,刘秀英,等. 森林树种高光谱遥感研究[M]. 北京:中国林业出版社,2011.
- 21 Merzlyak M N, Chivkunova O B, Solovchenko A E, et al. Light absorption by anthocyanins in juvenile, stressed and senescing leaves[J]. Journal of Experimental Botany, 2008, 59(14): 3903-3911.
- 22 Viña A, Gitelson A A. Sensitivity to foliar anthocyanin content of vegetation indices using green lectance[J]. Geoscience and Remote Sensing Letters, 2011, 8(3): 463-467.
- 23 邹小波,陈正伟,石吉勇,等. 基于近红外高光谱图像的黄瓜叶片色素含量快速检测[J]. 农业机械学报, 2012, 43(5): 152-156.  
Zou Xiaobo, Chen Zhengwei, Shi Jiyong, et al. Rapid detection of cucumber leaves pigments based on near infrared hyperspectral image technology[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2012, 43(5): 152-156. (in Chinese)