

冬油菜叶面积指数高光谱监测最佳波宽与有效波段研究

李岚涛^{1,2} 李 静^{1,2} 明 金^{1,2} 汪善勤² 任 涛^{1,2} 鲁剑巍^{1,2}

(1. 华中农业大学微量元素研究中心, 武汉 430070; 2. 农业部长江中下游耕地保育重点实验室, 武汉 430070)

摘要: 以冬油菜为研究对象,利用连续3季(2013—2016年)不同氮营养水平下冬油菜关键生育期400~1350 nm冠层高光谱和LAI数据,研究基于偏最小二乘(Partial least square, PLS)回归分析的冬油菜原初光谱(Raw spectral reflectance, *R*)及一阶微分光谱(First derivative reflectance, FDR)窄波段光谱变量(1.5、10、20 nm)和宽波段光谱变量(40、80、100 nm)与LAI之间关系,确定可稳定指示油菜LAI时空变化的最佳波宽及其有效波段。在此基础上,进行了基于有效波段最优波宽下冬油菜LAI预测和精度验证。结果表明,冬油菜LAI对氮肥响应具有高度敏感性,可较为充分反映油菜LAI时空变化,其建模集和验证集变异系数分别为65.4%和54.4%;随波宽增加,基于*R*-PLS和FDR-PLS回归模型的冬油菜LAI预测精度均呈先增加后降低趋势,至窄波段光谱变量和宽波段光谱变量临界处20 nm波宽时达最高,且FDR-PLS预测效果显著优于*R*-PLS,建模集和验证集相对分析误差(Relative percent deviation, RPD)分别为2.223和2.004。根据FDR-PLS回归模型中各波段变量重要性投影值(Variable importance for the projection, VIP),确定基于该最佳波宽条件下油菜LAI有效波段分别为759、847、921、1002、1129 nm。此后,再次构建基于上述有效波段的油菜LAI预测模型,建模集和验证集RPD分别为2.004和1.707,反演效果较为理想。

关键词: 冬油菜; 高光谱; 叶面积指数; 波段宽度; 有效波段; 偏最小二乘回归

中图分类号: S565.4; S127 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2018)02-0156-10

Selection Optimization of Hyperspectral Bandwidth and Effective Wavelength for Predicting Leaf Area Index in Winter Oilseed Rape

LI Lantao^{1,2} LI Jing^{1,2} MING Jin^{1,2} WANG Shanqin² REN Tao^{1,2} LU Jianwei^{1,2}

(1. Microelement Research of Center, Huazhong Agricultural University, Wuhan 430070, China

2. Key Laboratory of Arable Land Conservation (Middle and Lower Reaches of Yangtze River), Ministry of Agriculture, Wuhan 430070, China)

Abstract: Leaf area index (LAI) is an important biophysical parameter for assessing of agroecosystems, which is widely used in various applications. The ground-based hyperspectral remote sensing technique is known to be inexpensive but effective for monitoring of the LAI of crop canopies. During the past twenty years period, hyperspectral technique has been adopted increasingly for plant LAI evaluation, which demands unique technique procedures compared with the conventional multispectral dataset, such as dimension reduction and denoising. Thus, identifying of the optimal bandwidths as well as effective wavelengths (sensitive wavelengths) is of great importance for improving the accuracy of crop LAI assessment based on the hyperspectral remote sensing data. As one of the most important oil crop in China, with a cultivated area of 7.5 million hectares and a production of about 14.4 million tons of seeds. Accurate and real-time assessment of spatial and temporal variations of crop LAI is particularly important. The objectives were to identify the optimal bandwidths and their effective wavelengths which were best suited for characterizing the winter oilseed rape biophysical variables. Five nitrogen field experiments involving different ecological sites, cultivars and planting patterns were carried out over three consecutive growing years (2013—2016) in Hubei, China. The in-site canopy hyperspectral reflectance dataset of winter oilseed rape were obtained over a wavelength region from 400 nm to 1350 nm (the

收稿日期: 2017-06-09 修回日期: 2017-07-27

基金项目: 国家自然科学基金项目(31471941)和国家油菜产业体系建设专项项目(CARS-12)

作者简介: 李岚涛(1987—),男,博士生,主要从事作物营养光谱诊断研究,E-mail: lilantao@webmail.hzau.edu.cn

通信作者: 鲁剑巍(1967—),男,教授,博士生导师,主要从事作物营养与现代施肥技术研究,E-mail: lunm@mail.hzau.edu.cn

visible and near-infrared region), and quantitative correlations between LAI and their hyperspectra were analyzed. Moreover, a partial least square (PLS) regression model for LAI prediction was employed with different bandwidths (narrow and broad band spectral variables) canopy raw spectral reflectance (R) and its transformation technique; the first derivative reflectance (FDR). The prediction accuracy of the optimal bandwidths were determined by comparing coefficient of determination (R^2), root mean square error (RMSE) and relative percent deviation (RPD) between the observed and predicted LAI values for both the calibration(cal) and validation(val) datasets. The results indicated that the values of LAI had a similar range in both the calibration dataset and the validation dataset and provided high variable coefficient values, indicating that the data partitioning was reasonable and could avoid unbiased evaluation. Compared with the R -PLS model for LAI estimation, the FDR-PLS model yielded higher retrieval accuracy for LAI prediction, and the optimal bandwidth was 20 nm. The R_{val}^2 , $RMSE_{val}$ and RPD_{val} between the observations and predictions were 0.779, 0.414 and 2.004, respectively. The VIP scores of the FDR-PLS model with a full hyperspectral region (400~1350 nm) were applied to select the effective wavelengths and decrease the high dimensionality of the canopy spectral reflectance data. Five wavelengths centered at 759 nm, 847 nm, 921 nm, 1002 nm and 1129 nm were selected as sensitive wavelengths for monitoring the LAI status. The newly-developed FDR-PLS models for LAI prediction (R_{val}^2 was 0.715, $RMSE_{val}$ was 0.486 and RPD_{val} was 1.707) provided accurate estimations based on the field experiment validations using the effective wavelengths. The analytical thinking could provide an inventive thought thread of plant spectral wavelength selection for crop LAI prediction, and it also could provide a theoretical foundation for wavelength settings of broadband multispectral imaging spectrometer and monitoring potential applications of remote sensing data.

Key words: winter oilseed rape; hyperspectra; leaf area index; bandwidth; effective wavelength; partial least square regression

0 引言

叶面积指数(LAI)是指单位土地面积上植物单面叶片的面积之和^[1],是反映植物群体长势状况、定量化表征作物冠层表面初始能量交换的最关键结构参数之一^[2-3]。因此,研究基于高光谱遥感的作物 LAI 快速诊断和智能化原位监测技术对及时有效掌握农作物生长发育动态、构建满足作物营养“供需协同平衡”的施肥技术体系提供了有效途径。

高光谱遥感具有光谱信息量大、分辨率高以及波谱连续性强等特点,在作物 LAI 监测中,从海量高光谱数据中确定最优化的波宽与有效波段以获取最佳的反演效果是其研究的难点与热点^[4-5]。目前,利用高光谱技术定量监测基于氮肥效应的作物 LAI 主要有物理模型法(辐射传输模型)和经验统计法(植被指数)^[6]。物理模型法虽具有较高的通用性和机理性,但因其固存的病态反演问题且需要输入较多的调试参数,限制了其推广应用。植被指数法从纷繁复杂的高维光谱数据中利用可敏感指示作物 LAI 时空变化的有效波段,通过简单计算(差值、比值或归一化值)相应光谱参数并构建监测模型,方法便捷、普适性强,可及时准确反演作物 LAI 动态变化^[7]。前人已从不同角度并采用多种技术进行了广泛而深入的定性或定量研究,如主成分分析、逐步判别分析、多元线性回归分析和 Lambda-Lambda

相关分析等^[8-9]。但上述研究大都采用线性统计技术对无连续性的有限个波段进行对比分析,对有效波段研究的系统性较弱,且对高光谱自身的物理特性及其所反映的生物学效应评估不足,因此对该问题的持续研究很有必要。

在确定 LAI 有效波段的基础上,进一步探究基于近地高光谱的作物 LAI 最佳波宽,对简化数据分析难度并减少存储空间具有重要意义^[10]。就作物 LAI 监测而言,在不降低光谱预测性能的同时,尽可能降低光谱传感器的光谱分辨率,适当提高波段宽度,降低仪器成本,已成为农业生产和推广应用中的重要考虑因素;此外,合理提高波宽还可增强光谱信噪比、降低背景噪声干扰并提高光谱稳定性^[11-12]。目前,国内外关于窄波段亦或宽波段更适于作物农学参数监测的问题尚未达成共识。一些研究显示,窄波段光谱参数估算作物 LAI 模型性能优于宽波段光谱参数^[13-14],但也有研究结论与此相反^[12,15]。THENKABAIL 等^[16]研究发现,相比于宽波段光谱变量,窄波段光谱可提供更多的作物农学参数光谱信息,且对作物特征敏感性更高。孙小芳^[17]的研究则指出,只有当波宽小于 64 nm 时,才能更为准确地反映与水稻叶绿素相关的光谱曲线波谷细节特征。总体而言,目前国内外关于波段宽度与有效波段相结合的研究仍相对较少,且结论不尽一致,同时关于波段宽度变化对于作物 LAI 监测的影响尚无统

一定论。基于此,本文以连续 3 季冬油菜氮肥田间试验为基础,兼顾不同生态区域、品种、栽培模式和生育时期,采用波段逐步变宽的高光谱数据分析方法,利用偏最小二乘回归技术研究波宽变化对 LAI 监测性能的影响,确定最佳波段宽度以及有效波段。

1 材料与方法

1.1 试验设计

2013—2016 年分别于湖北省武穴市和沙洋县共开展 5 个冬油菜氮肥水平田间试验,涉及不同油菜品种、栽培模式、试验年份和生态区域,其中建模集样本数 303 个,验证集样本数 198 个。设置田间氮肥试验目的除了系统研究氮素营养对冬油菜 LAI 及冠层光谱性能影响之外,另一重要因素是利用 LAI 和高光谱对氮肥效应的高度敏感性,可获取较大变幅的 LAI 和冠层光谱反射率数据,使其具有更大代表性和普适性。

试验 I 于 2013—2014 年在湖北省武穴市从政村($30^{\circ}6'46''\text{N}$, $115^{\circ}35'22''\text{E}$)进行。供试油菜品种为华油杂 9 号,设 5 个氮肥水平:0、90、180、270、360 kg/hm^2 ;磷、钾、硼肥用量分别为 P_2O_5 90 kg/hm^2 , K_2O 120 kg/hm^2 和 B 1.6 kg/hm^2 。所有肥料均在油菜种植前一次性基施,以降低在生长发育过程中连续追肥对油菜光谱测试及生长监测连续性影响。3 次重复,随机区组排列。采用育苗移栽的方式种植,密度为 11 株/ m^2 。分别于 2013 年 12 月 27 日(十叶期)、2014 年 3 月 5 日(蕾薹期)和 2014 年 3 月 15 日进行田间光谱测试与样品采集。本试验资料用于光谱模型构建(样本数为 45)。

试验 II ($30^{\circ}6'21''\text{N}$, $115^{\circ}35'12''$)和试验 III ($30^{\circ}6'20''\text{N}$, $115^{\circ}35'11''$)于 2014—2015 年在湖北省武穴市从政村两毗邻田块同步进行。为进一步细化探究氮素营养对油菜 LAI 形成及光谱特性影响,设 8 个氮肥水平:0、45、90、135、180、225、270、360 kg/hm^2 。供试油菜品种,磷、钾、硼肥用量及施用方式均同试验 I。试验 II 为育苗移栽;试验 III 采用直播方式种植,播种量为 0.45 g/m^2 。试验 II 测试日期分别为 2014 年 11 月 29 日(八叶期)、2015 年 1 月 12 日(十叶期)和 2015 年 3 月 5 日(花期),该数据主要用于模型验证(样本数为 72)。试验 III 则分别为 2014 年 11 月 7 日(六叶期)、2014 年 11 月 29 日、2015 年 1 月 12 日和 2015 年 3 月 1 日,该结果主要用于模型构建(样本数为 96)。

试验 IV ($30^{\circ}43'15''\text{N}$, $112^{\circ}18'5''$)和试验 V ($30^{\circ}6'22''\text{N}$, $112^{\circ}18'12''$)于 2015—2016 年在湖北省沙洋县张池村两相近田块同步开展。试验 IV 设 9 个氮肥

水平:0、45、90、135、180、225、270、315、360 kg/hm^2 ,油菜品种为华油杂 9 号;试验 V 设 7 个氮肥水平:0、60、120、180、240、300、360 kg/hm^2 ,供试品种为华油杂 62 号。试验 IV 和 V 分别采用育苗移栽和直播方式种植。试验 IV 分别于 2015 年 11 月 13 日(六叶期)、2015 年 12 月 13 日(八叶期)、2016 年 1 月 7 日(十叶期)、2016 年 1 月 27 日(越冬期)、2016 年 2 月 21 日(蕾薹期)和 2015 年 3 月 17 日(花期)进行光谱测试和样品采集,该内容主要用于模型构建(样本数为 162)。试验 V 测试时间同此,该结果主要用于模型验证(样本数为 126)。

1.2 测定方法

1.2.1 冠层光谱测定

分别于上述各试验年份和生育期,采用美国 Anaytical Spectral Devices (ASD)生产的 FieldSpec Pro FR 型高光谱仪测试冬油菜冠层光谱反射率。各小区选取有代表性油菜样方 5 处(样方面积约 1.0 m^2),以其平均值作为该小区冠层光谱测试值。测试时,将光谱探头距油菜冠层约 1.0 m,在太阳高度角变化较小的 10:00—14:00 进行(天气晴朗,无云或少云),各小区在测试前后均采用标准白板进行校正,以降低环境和仪器噪声等因素干扰。该型号高光谱仪波段范围为 350 ~ 2 500 nm,光谱分辨率和采样间隔分别为 3 nm 和 1.4 nm(350 ~ 1 000 nm),10 nm 和 2 nm(1 000 ~ 2 500 nm),视场角为 25° 。在高光谱全波段范围内,可见光-近红外波段(350 ~ 1 350 nm)是指示作物营养(氮素及色素含量)及长势状况(LAI、生物量等结构性参数)的主要区域。因此,本试验在定量探究波段宽度变化对冬油菜 LAI 监测敏感性分析时,主要采用该波段范围。同时,在油菜高光谱测试过程中,由于不可避免地受到外界干扰(仪器自身和环境因素等),因此光谱曲线总含有一些噪声,删除了信噪比较低的 350 ~ 399 nm 波段范围,剔除后的波段区间为 400 ~ 1 350 nm。

1.2.2 LAI 测定

光谱测试结束后,各小区选取有代表性移栽油菜 4 株或直播油菜样方 0.25 m^2 (0.5 m $\times$ 0.5 m),按茎、叶和花(花期时)等器官分样并测定叶面积,计算 LAI。测试时,将叶片平展于黑色背景布上,并于四角放置 4 个面积为 25 cm^2 (5 cm $\times$ 5 cm)标准白板。采用常规数码相机(Nikon,D7000 型)垂直向下拍照,利用 Image-Pro Plus 6.0 软件计算叶面积^[18],并换算 LAI。

1.3 数据处理与分析

1.3.1 波段宽度扩展方法

参照 GOMEZ-CASERO 等^[19]光谱平均处理思

路和姚霞等^[20]数据分析技术,采用波段逐步变宽的方法,将 400 ~ 1 350 nm 光谱反射率分别按窄波段和宽波段光谱宽度的方法逐步变宽。

窄波段光谱变宽:将 400 ~ 1 350 nm 单波段光谱数据分别以 5、10、20 nm 逐步平均扩展。具体的,对每一固定波段宽度(如 400 nm),求算波段宽度时是逐步滑动的,当波段宽度为 5 nm 时,第 1 次取值为 400、401、402、403、404 nm 的平均值,第 2 次为 401、402、403、404、405 nm 的平均值,以此类推一直到 1 350 nm。其他波段变化方式与此相同。

宽波段光谱变宽:继续将 400 ~ 1 350 nm 波段范围分别以 40、80、100 nm 平均,作为宽波段光谱变量。

1.3.2 光谱变换方式

为有效降低或消除因环境噪声、土壤背景、水分吸收及仪器本身等因素干扰对原始光谱所构建模型预测性能和检验精度的影响,本文采用一阶微分光谱变换措施对原初光谱进行处理。一阶微分光谱变换是目前应用最多且十分有效的高光谱处理技术之一,通过微分变换可平缓背景干扰和消除基线漂移的影响,增强光谱信噪比^[21]。此外,该技术可有效减弱或消除大气散射与背景噪声的影响并提高不同吸收特征的对比度^[22]。在实际分析过程中,由于实测高光谱数据的离散性,高光谱数据的一阶微分变换一般采用差分方法来近似计算,即

$$\rho'(\lambda_i) = [\rho(\lambda_i + 1) - \rho(\lambda_i - 1)] / (2\Delta\lambda)$$

式中 λ_i ——每个波段波长

$\rho'(\lambda_i)$ ——波长 λ_i 的一阶微分

$\Delta\lambda$ —— $\lambda_i - 1$ 到 λ_i 的间隔

1.3.3 偏最小二乘回归模型构建与应用

以不同波段宽度冬油菜冠层高光谱反射率为自变量,LAI 为因变量,利用 PLS 模型整体探究原初光谱和一阶微分光谱对 LAI 监测的适宜性和精确性,确定最佳光谱波段宽度。此外,为进一步细化探究不同波宽下原初光谱及其变换形式各波段对 LAI 的贡献程度,明确影响 LAI 变化的有效波段,利用 PLS 中无量纲评价指标 VIP 定量表征各波段 VIP 值。VIP 值越高(临界值为 1),表明相应波段对因变量(LAI)的影响力越大,其在模型构建中所起作用就越高^[23]。

所有模型构建均采用留一交叉验证法确定主成分个数,模型预测精度利用实测值与预测值的决定系数(R^2)、均方根误差(RMSE)和相对分析误差(RPD)3 个指标来衡量。 R^2 表明模型构建和检测的准确度和稳定性, R^2 越高(最大值为 1),说明模型拟合程度越高、稳定性越好。RMSE 反映模型的预测精度,其值越小模型估算精度越高。RPD 是数据集

样本标准差与平均数的比值,其值可以解释相应模型的预测能力,具体评价标准采用 CHANG 等^[24]提出的临界值划分方法,RPD 大于 2.0,表明模型具有较高的稳定性和预测能力;RPD 在[1.4,2.0]区间表示模型预测精度可以接受但仍需改进;RPD 小于 1.4 表明模型具有很差的预测能力。

2 结果与分析

2.1 冬油菜 LAI 统计分析

综合各试验年份、生育期、氮素水平和生态区域,同时兼顾模型构建及验证的典型性与代表性,将 501 个试验样本划分为建模集($N = 303$)和验证集($N = 198$)两部分。由表 1 知,施氮可显著影响冬油菜 LAI 空间变异性,建模集和验证集 LAI 均具有较大的标准差和变异系数(%),可充分有效反映不同生态环境及氮营养条件下冬油菜 LAI 的时空变化特征。建模集中,油菜 LAI 变幅和平均值分别为 0.118 ~ 6.670 和 1.661,平均值离最大值距离较大(相差 5.009),主要原因在于试验 I 中不同生育期氮营养对 LAI 影响极为显著(苗期 0 ~ 360 kg/hm² LAI 变幅为 0.61 ~ 2.20,蕾薹期为 1.31 ~ 6.67,花期 0.75 ~ 4.01),而其他试验不同氮处理下油菜 LAI 分布则相对较为适中所致。此外,本试验中 LAI 最大值和最小值区间跨幅较广,且验证集变幅均在建模集内,可保证所构建 LAI 诊断模型的普适性和稳定性。

表 1 建模集和验证集冬油菜 LAI 统计参数
Tab.1 Statistical parameters of calibration and validation datasets for winter oilseed rape LAI

数据集	样本数	最小值	最大值	平均值	标准差	变异系数/%
建模集	303	0.118	6.670	1.661	1.087	65.4
验证集	198	0.214	3.098	1.526	0.830	54.4
全集	501	0.118	6.670	1.607	0.995	61.9

2.2 不同波段宽度冬油菜冠层高光谱反射率与 LAI 的相关性分析

将建模集不同波宽原初光谱及一阶微分光谱与 LAI 进行相关性分析并绘制相关系数图(图 1)。对于原初光谱(图 1a),当波宽为 1 nm 时,波长小于 723 nm 光谱反射率与 LAI 呈极显著负相关,其中在 620 ~ 710 nm 间相关系数存在一个较低的波谷($r < -0.38$),即红谷,由叶绿素强吸收而引起,与氮营养关系紧密。750 ~ 960 nm 间相关系数进入一个较高的平台($r > 0.50$),此区域光谱对油菜叶面积和生物量等结构性指标反应敏感。由于施氮显著促进植株生长发育,提高油菜群体 LAI 和生物量,此范围对

氮营养同样敏感。其他波宽条件下(5~100 nm),油菜冠层光谱反射率与 LAI 相关性变化趋势与 1 nm 波宽相一致,且最大负/正相关系数对应波段位置随波宽增加分别有向短/长波方向移动趋势。此外,随波宽增加,冠层原初光谱反射率与 LAI 相关性呈先升高后下降趋势,至 20 nm 波宽时达最大,该

范围也是窄波段与宽波段一个分界点。对于一阶微分光谱(图 1b),冠层光谱反射率与 LAI 相关性随波宽变化趋势同原初光谱,但相关性却优于原初光谱,同时分别在红边(687 nm 和 751 nm)和近红外区域(922、1 012、1 227 nm)处达到峰值,上述波段也是指示作物营养和结构状况的关键区域。

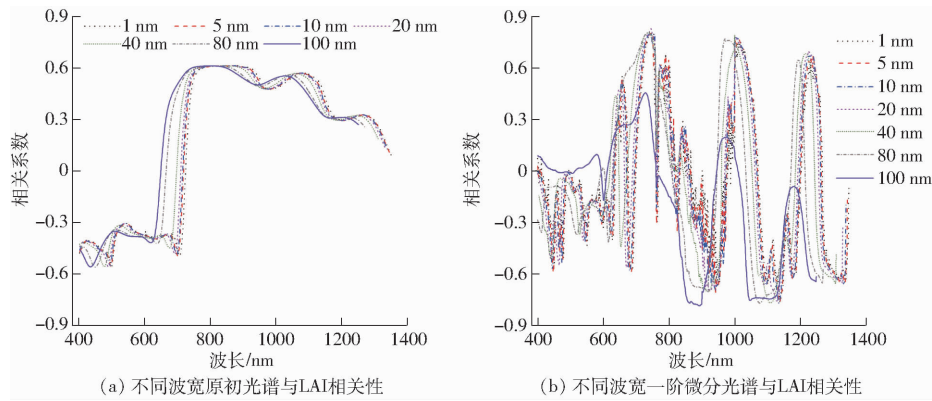


图 1 不同波宽冬油菜冠层原初光谱及其变换光谱反射率与 LAI 相关性分析

Fig.1 Correlation coefficient (r) between winter oilseed rape LAI and canopy hyperspectral reflectance and its transformation with different bandwidths in calibration dataset

2.3 基于 LAI-PLS 模型的不同光谱变换方式最佳因子数确定

采用留一交叉验证法来确定冬油菜原初光谱及其变换方式 LAI-PLS 监测的最佳因子数,为避免模型拟合过度并使其具有较强的鲁棒性和预测性能,仅当 RMSECV 减少高于 2% 时,加入新的因子^[25]。图 2 表明,随因子数(LVs)增加,油菜 LAI-PLS 模型的 RMSECV 呈先降低后升高趋势。因子数过多,则模型拟合过度,反之,则拟合不充足。仅当 RMSECV 最小时对应的因子数为应用 PLS 进行

油菜 LAI 监测的最佳因子数。基于此标准,波宽分别为 1、5、10、20、40、80、100 nm 时,确定油菜原初光谱 PLS-LAI 最佳因子数分别为 7、6、6、6、6 和 4,一阶微分光谱则分别为 4、4、4、6、6、6 和 7。

2.4 原初光谱 LAI-PLS 预测精度分析

2.4.1 不同波宽原初光谱 LAI-PLS 预测精度

不同波宽原初光谱冬油菜 LAI-PLS 分析结果(表 2)显示,对于窄波段光谱变量,随波段宽度增加,建模集油菜 LAI-PLS 模型准确度(R^2_{cal})和精度(RPD_{cal})无显著差异,分别在 0.75 和 2.0 左右,表

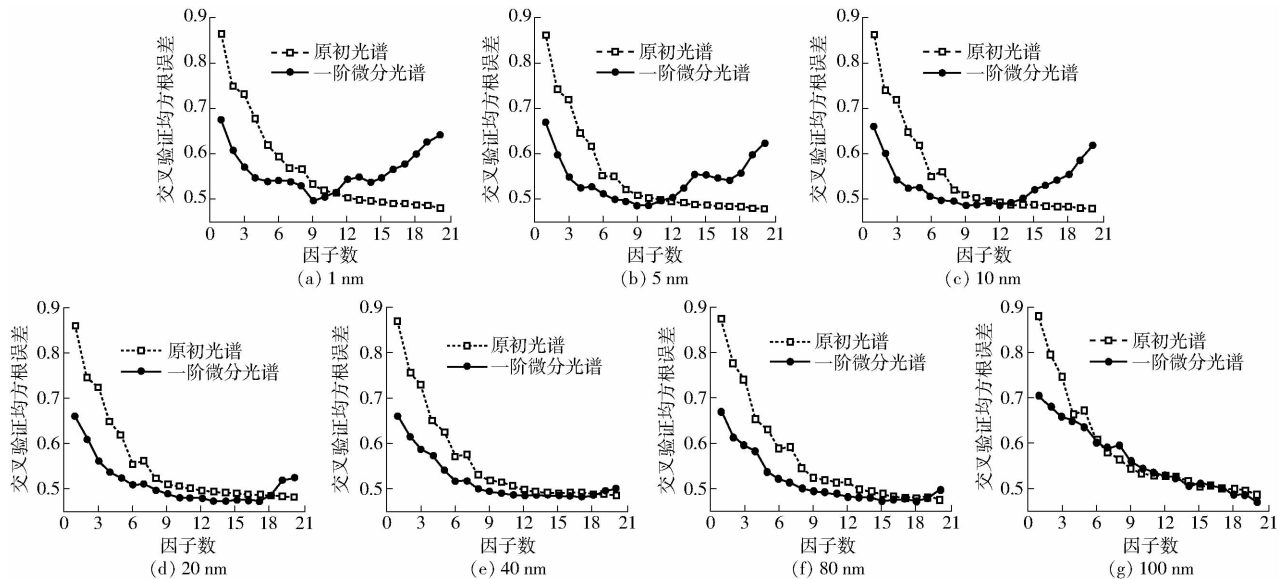


图 2 不同波宽冬油菜冠层原初光谱及其变换光谱 PLS-LAI 预测模型的交叉验证均方根误差

Fig.2 Changes of RMSECV by increasing number of PLS LVs used in canopy hyperspectral reflectance and its transformation for LAI prediction

明所构建模型均具有较高的预测性能;验证集变化趋势则与此不尽一致,在 5 nm 波宽时精准度最低, R^2_{val} 和 RPD_{val} 分别为 0.703 和 1.761,20 nm 波宽时精准度最高, R^2_{val} 和 RPD_{val} 分别为 0.726 和 1.805。宽波段光谱变量,建模集和验证集 LAI-PLS 模型预

测性能变化趋势一致,其精准度均随波段宽度增加而减少,即在波宽 100 nm 时最低, RPD_{cal} 和 RPD_{val} 分别为 1.696 和 1.236,模型预测性能较差(表 2)。上述结果表明,波段宽度变化对冬油菜 LAI 预测性能具有较大影响,且在 20 nm 波宽时模型预测性能最好。

表 2 基于不同波段宽度原初光谱的冬油菜 LAI-PLS 模型精度分析
Tab.2 PLS model for LAI prediction with different bandwidths canopy R hyperspectra

光谱变量	波段宽度/nm	建模集 (n = 303)			验证集 (n = 198)		
		R^2_{cal}	$RMSE_{cal}$	RPD_{cal}	R^2_{val}	$RMSE_{val}$	RPD_{val}
窄波段光谱变量	1	0.751	0.542	2.005	0.725	0.494	1.681
	5	0.756	0.536	2.028	0.703	0.471	1.763
	10	0.755	0.537	2.024	0.715	0.461	1.801
	20	0.751	0.541	2.009	0.726	0.460	1.805
宽波段光谱变量	40	0.734	0.560	1.941	0.709	0.498	1.666
	80	0.716	0.579	1.877	0.661	0.565	1.469
	100	0.652	0.641	1.696	0.555	0.672	1.236

2.4.2 不同波宽原初光谱 VIP 值特异性分析

为探究不同波宽下各波段(400 ~ 1 300 nm)对波宽变化响应的敏感性,同时确定基于高光谱技术监测油菜 LAI 时空变化的敏感波段(有效波段),采用 PLS 分析中 VIP 这一无量纲指标定量评估各光谱波段的贡献度及影响力差异(图 3)。结果显示,各波段对波宽变化响应的敏感性差异较大,绝大部分波段 VIP 值低于 1.0,即影响力较低且趋于均衡;敏感波段 VIP 值则明显较高(>1.0),即对光谱监测 LAI 具有较高程度的贡献力。窄波段范围内,其

敏感波段分布范围较为一致:两波段位于可见光区域(500 nm 左右蓝光区和 700 nm 附近红边区),另 3 个波段则位于近红外区域(950、1 000、1 100 nm 附近区域);宽波段变量各特征波段 VIP 值整体变化趋势较为紧凑一致,且明显凸出特征峰较少。40 nm 波宽时敏感波段分别为 467 nm(蓝光)、614 nm(红光)和 1 128 nm(近红外光),80 nm 波宽时分别为 432 nm(蓝光)、614 nm(红光)和 663 nm(红边),1 128 nm 波宽时则分别为 593 nm(绿光)和 651 nm(红光)。

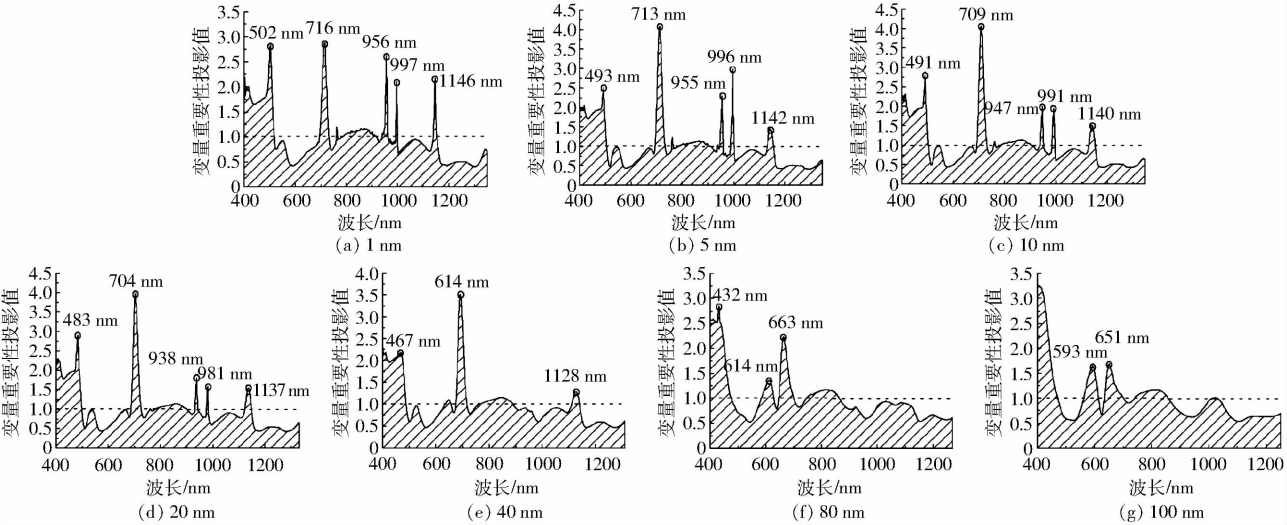


图 3 不同波宽原初光谱冬油菜 LAI 各波段 PLS-VIP 值特异性分析

Fig.3 VIP scores plot of PLS model for LAI prediction with different bandwidths canopy R hyperspectra

2.5 一阶微分光谱 LAI-PLS 预测精度分析

2.5.1 不同波宽一阶微分光谱 LAI-PLS 预测精度

与原初光谱相比,无论是窄波段光谱变量,亦或宽波段光谱变量,对光谱进行一阶微分处理后,建模集与验证集 LAI-PLS 模型精准度均有

显著提高(表 3)。不同波宽下,随波段宽度增加, RPD_{cal} 和 RPD_{val} 均呈先增加后降低趋势,至 20 nm 波宽时达最大,分别为 2.223 和 2.004,表明该波宽对冬油菜 LAI 具有较高的预测性能,且此变化趋势与原初光谱相一致。图 4 为采用 1:1 比例展示

在 20 nm 波宽下原初光谱(图 4a)及一阶微分光谱(图 4b)对 LAI 的预测性能,其散点分布越接近 1:1 线($y = x$)表明所构建 LAI-PLS 模型预测精度越高。结果发现,20 nm 波宽下原初光谱和一阶微分光谱所构建回归方程斜率(分别为

0.883 和 0.917)均略小于 1.0,且微分光谱斜率明显较高,接近 1.0,表明基于 20 nm 波宽所确立油菜 LAI 预测模型低估了实测值,后者预测精度高于前者,具有较高的诊断性能,可以用于 LAI 的快速和精准监测。

表 3 基于不同波段宽度一阶微分光谱的冬油菜 LAI-PLS 模型精度分析

Tab.3 PLS model for LAI prediction with different bandwidths canopy FDR hyperspectra

光谱变量	波段宽度/nm	建模集($n = 303$)			验证集($n = 198$)		
		R^2_{cal}	$RMSE_{cal}$	RPD_{cal}	R^2_{val}	$RMSE_{val}$	RPD_{val}
窄波段光谱变量	1	0.785	0.503	2.161	0.754	0.436	1.904
	5	0.784	0.505	2.152	0.749	0.447	1.856
	10	0.781	0.508	2.140	0.746	0.445	1.867
	20	0.797	0.489	2.223	0.779	0.414	2.004
宽波段光谱变量	40	0.788	0.500	2.174	0.764	0.448	1.854
	80	0.784	0.504	2.157	0.757	0.452	1.836
	100	0.742	0.551	1.973	0.695	0.535	1.551

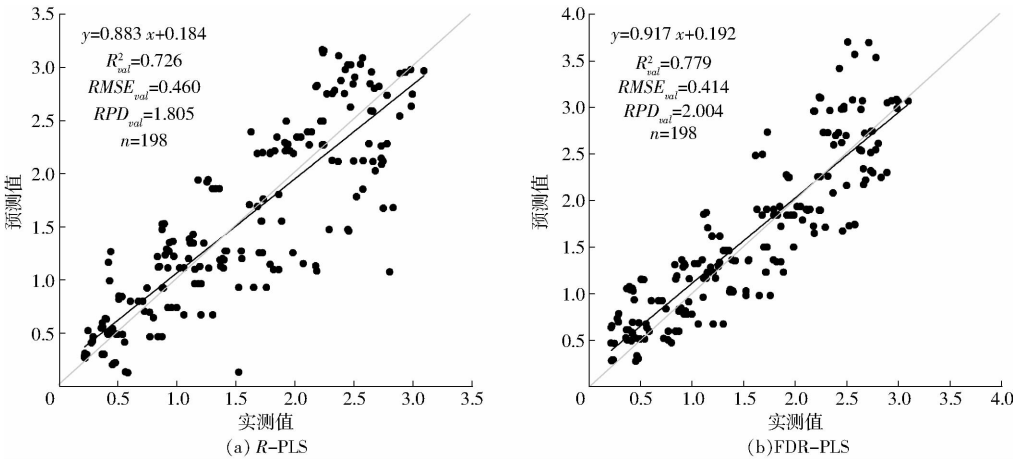


图 4 20 nm 波宽下冬油菜 R-PLS 和 FDR-PLS 预测模型 LAI 实测值与预测值 1:1 比例图

Fig.4 Comparison between observed and predicted LAI values based on 20 nm bandwidth with R-PLS and FDR-PLS models

2.5.2 不同波宽一阶微分光谱 VIP 值特异性分析

为进一步分析不同波宽下一阶微分光谱各波段 VIP 值变化特异性及对 LAI 监测的影响程度,再次利用 LAI-PLS 回归模型的 VIP 值确定基于一阶微分变换光谱的敏感波段(图 5)。结果表明,不同波宽下一阶微分光谱各波段 VIP 值呈山峰错落式分布,且高于临界值(VIP 为 1.0)特征波段明显较多,为有效区分并筛选出最重要有效波段,我们将其临界值设为 2.0。窄波段光谱变量下,其敏感波段分布主要在红边至近红外区域(680~1 100 nm),如在波宽为 20 nm 时,其敏感波段分别为 759(红边),847、921、1 002、1 129 nm(近红外),而该光谱区域正是指示作物群体结构(LAI、生物量、叶片倾角等)变化的敏感位置。与原初光谱相比,采用一阶微分变换光谱所筛选油菜 LAI-PLS 回归模型的敏感波段更为符合氮素营养的高光谱特性和敏感波段的营养敏感特异性。综合 LAI-PLS 建模集和验证集预测

模型的精准度(R^2 、RMSE 和 RPD)和所确定有效波段的营养生物学效应,采用一阶微分变换光谱 20 nm 波宽所对应特征波段为应用 PLS 模型进行油菜 LAI 监测的敏感波段(有效波段)。

2.6 基于 20 nm 波宽 FDR-PLS 有效波段的模型再检验

为深入评估所确定油菜 LAI 高光谱监测最佳波段宽度(20 nm)、光谱变换方式(FDR)及有效波段(759、847、921、1 002、1 129 nm)的普适性和稳定性,利用独立验证集冬油菜氮肥田间试验数据再次检验上述所构建模型的精准性(图 6)。结果发现,采用 20 nm 波宽油菜 LAI 5 个有效波段所建立模型在降低光谱分析维数,简化分析难度的同时,仍具有相对较高的准确度,其建模集和验证集 RPD 分别为 2.004 和 1.707,表明所确立有效波段能够较为准确地预测油菜 LAI 时空变异性。相比于全波段 FDR-PLS 所构建模型(建模集和验证集 RPD 分别为

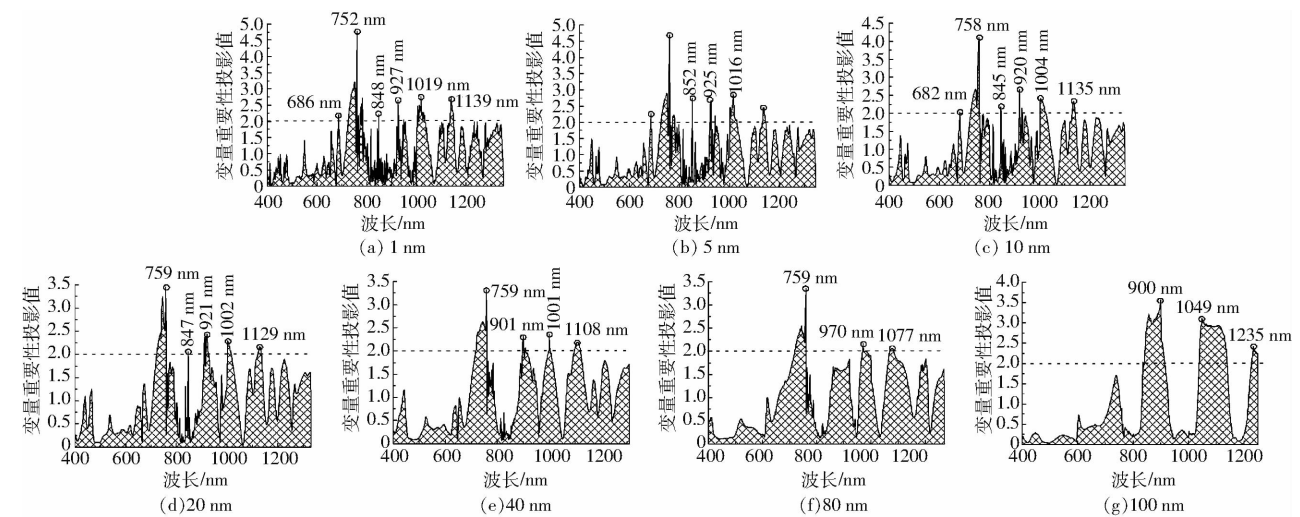


图 5 不同波宽一阶微分光谱冬油菜 LAI 各波段 PLS - VIP 值特异性分析

Fig. 5 VIP scores plots of PLS model for LAI prediction with different bandwidths canopy FDR hyperspectra

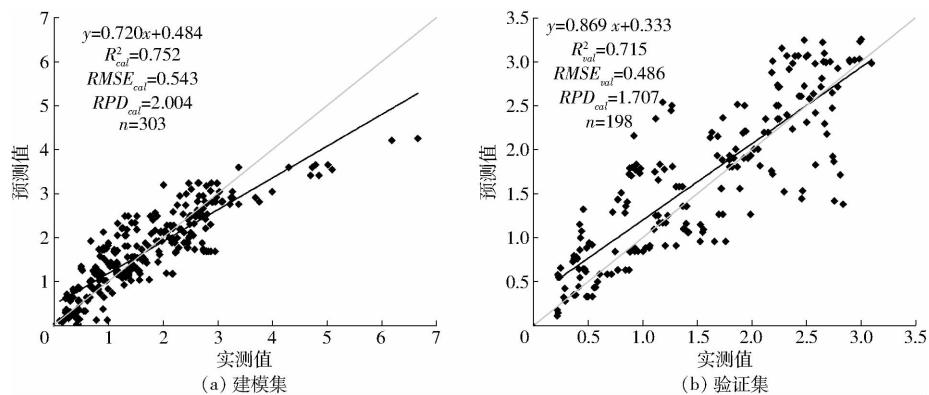


图 6 基于 20 nm 波宽的油菜 LAI - FDR - PLS 回归模型有效波段检验

Fig. 6 Comparisons of observed and predicted LAI value based on 20 nm bandwidth using effective wavelengths with LAI - FDR - PLS model

2. 223 和 2. 004), 采用有效波段所确立模型准确度略微降低, 主要是由于光谱维数大幅度减少 (从 954 个降为 5 个), 其所包含光谱信息明显降低所致。本试验条件下, 由于建模集和验证集油菜田间试验具有较大时空跨度 (时间年份、地点、氮肥水平、油菜品种、生育期和种植方式), 具有很高的代表性和典型性, 这也更为说明所确立油菜光谱变换方式、波段宽度和有效波段的合理性和普适性, 可以用于基于高光谱遥感这一技术进行油菜 LAI 的快速和准确预测与诊断。

3 讨论

通过分析多年多点多生育期的冬油菜原位冠层高光谱和实测 LAI 数据, 在不降低光谱诊断精度的前提下, 利用 PLS 分析整体探究了波宽变化对 LAI 预测性能的影响。结果表明, 无论是原初光谱或一阶微分光谱, 不同波宽下油菜 LAI - PLS 模型预测精准度变化趋势具有高度一致性, 即由单波段 (1 nm) → 窄波段 (5、10、20 nm) → 宽波段 (40、80、

100 nm) 变化时, 模型预测精度呈先增加后降低趋势, 至窄/宽波段分界处 20 nm 波宽时模型鲁棒性最强, RPD_{val} 分别为 1. 805 (原初光谱) 和 2. 004 (一阶微分光谱), 且后者预测精度远高于前者 (表 2、表 3 和图 4)。表明在不降低 LAI 预测精度的条件下, 选取适宜较宽的波宽光谱平均值作为 LAI 反演的光谱变量是可行的。本试验结果与 THENKABAIL 等^[26] 在小麦和黑麦上的研究结论相一致, 即利用高光谱技术进行 LAI 监测的最佳波宽为 20 nm。同时, 王福民等^[27] 利用水稻大田试验通过分析冠层高光谱不同波宽所构建归一化植被指数 (NDVI) 与 LAI 关系, 发现利用 NDVI 估测水稻 LAI 最佳波段宽度为 15 nm。上述研究结论进一步证明了本文试验结果的合理性和普适性, 这也为便携式农作物 LAI 光谱监测仪的开发研制, 提高监测效率和降低生产成本等提供了实践参考和理论依据。

作物农学参数的不同理化特性在各个波段位置上的响应程度差异较大, 波段宽度和及其所对应波段位置 (有效波段) 对参数估测的影响相辅相成, 因

此进一步探寻两者协同变化规律,确定最佳波宽下有效波段分布情况,对提高光谱诊断效率具有重要意义^[28]。YAO等^[5]通过分析波宽变化及其所对应有效波段的分布规律,发现有效波段736和807 nm的最佳波宽分别为18、71 nm时,对冬小麦植株氮素积累量具有最高的估测精度。TEILLET等^[29]研究发现,森林冠层NDVI受波宽和波段位置的综合影响,且红光波段对NDVI影响较大,而当波宽小于50 nm时,近红外波段光谱反射率基本不受波段位置影响。本试验结果表明,冬油菜LAI有效波段分布规律显著受波宽变化影响,在窄波段光谱变量范围内,随波宽增加,其有效波段分布向短波方向偏移,且有效波段数相对较多(原初光谱为5,一阶微分光谱为6),至宽波段光谱范围内,各波段VIP值整体趋于均衡,有效波段数降低(至2~3个)(图3和图5)。LAI-PLS预测模型显示,一阶微分光谱20 nm波宽为应用高光谱数据进行冬油菜LAI监测的最佳光谱变换方式和波段宽度,其对应有效波段分别为759、847、921、1 002、1 129 nm,全部位于红边-近红外区域,前者(759 nm红边区)主要是由于油菜叶绿素的强吸收和叶片结构的高反射所致,是指示作物氮素营养状况和群体结构的关键波段^[30],其余有效波段全部位于近红外区域,是反映作物冠层光谱散射特性和植被结构的关键区域。前人研究表明,红光及近红外区域(700~1 300 nm)的反射光谱主要受叶片细胞排列方式和植被结构影响,对光谱产生强烈反射,是指示作物LAI和生物量的关键区域^[31],这与本试验结果相一致。为进一步验证所优选有效波段的适宜性和准确性,独立验证试验发现,基于有效波段所构建LAI-PLS预测模型 RPD_{cal} 和 RPD_{val} 分别高达2.004与1.707,表明前述所确定油菜LAI

高光谱监测的最佳波宽(20 nm)和有效波段是合理适宜的,可以用于LAI的快捷和准确监测,这为进一步提高光谱分析效率,降低开发便携式光谱监测仪器成本提供了借鉴和参考。虽然本研究内容采用了多生态区和试验年份的冬油菜氮肥大田试验数据,具有较高的代表性和普适性,但试验数据的获得是在特定试验条件(独立小区试验、特定肥效设计等)进行的,因此在推广应用时仍具有一定限制性。

4 结论

(1)一阶微分变换光谱可以显著增强油菜冠层光谱反射率与LAI之间的相关性,尤其是在红边-近红外区域;不同波段宽度间,至20 nm波宽时两者间相关性最好。

(2)随波段宽度增加(1 nm→100 nm),无论原初光谱或一阶微分光谱,冬油菜LAI-PLS模型预测精度均呈先增加后降低趋势,在窄、宽波段分界处20 nm波宽时模型预测性能达到最优,且一阶微分变换光谱优势明显,其验证集决定系数 R^2_{val} 为0.779,均方根误差 $RMSE_{val}$ 为0.414,相对分析误差 RPD_{val} 为2.004,满足冬油菜LAI准确检验需求。

(3)根据20 nm波宽冬油菜一阶微分光谱LAI-PLS回归模型中变量重要性投影值大小,确定冬油菜LAI有效波段(敏感波段)分别为759、847、921、1 002、1 129 nm,同步实现了光谱变宽与降维的目的。此外,基于上述有效波段的冬油菜LAI模型再检验同样获得了较为理想的预测精度, R^2_{val} 、 $RMSE_{val}$ 和 RPD_{val} 分别为0.715、0.486和1.707(样本数 $n=198$)。本试验结论为冬油菜LAI的高光谱快捷实时诊断及便携式LAI监测仪的研制提供了试验基础和理论参考。

参 考 文 献

- 1 NGUY-ROBERTSON A L, PENG Y, GITELSON A A, et al. Estimating green LAI in four crops: potential of determining optimal spectral bands for a universal algorithm [J]. *Agricultural and Forest Meteorology*, 2014, 192: 140–148.
- 2 刘珺, 庞鑫, 李彦荣, 等. 夏玉米叶面积指数遥感反演研究[J/OL]. *农业机械学报*, 2016, 47(9): 309–317. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20160942&flag=1&journal_id=jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2016.09.042.
- 3 LIU Jun, PANG Xin, LI Yanrong, et al. Inversion study on leaf area index of summer maize using remote sensing [J/OL]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2016, 47(9): 309–317. (in Chinese)
- 4 VINA A, GITELSON A A, NGUY-ROBERTSON A L, et al. Comparison of different vegetation indices for the remote assessment of green leaf area index of crops [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2011, 115: 3648–3478.
- 5 李粉玲, 常庆瑞. 基于连续统去除法的冬小麦叶片全氮含量估算[J/OL]. *农业机械学报*, 2017, 48(7): 174–179. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20170722&flag=1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2017.07.022.
- 6 LI Fenling, CHANG Qingrui. Estimation of winter wheat leaf nitrogen content based on continuum removed spectra [J/OL]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2017, 48(7): 174–179. (in Chinese)
- 7 YAO X F, YAO X, TIAN Y C, et al. A new method to determine central wavelength and optimal bandwidth for predicting plant nitrogen uptake in winter wheat [J]. *Journal of Integrative Agriculture*, 2013, 12(5): 788–802.
- 8 PINTY B, LAVERGNE, T, WIDLOWSKI J L, et al. On the need to observe vegetation canopies in the near infrared to estimate visible light absorption[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2009, 113: 10–23.

- 7 赵娟, 黄文江, 张耀鸿, 等. 冬小麦不同生育时期叶面积指数反演方法[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(9): 2546–2552. ZHAO Juan, HUANG Wenjiang, ZHANG Yaohong, et al. Inversion of leaf area index during different growth stages in winter wheat [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(9): 2546–2552. (in Chinese)
- 8 STELLACCI A M, CASTRIGNANO A, TROCCOLI A, et al. Selecting optimal hyperspectral bands to discriminate nitrogen status in durum wheat: a comparison of statistical approaches [J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2016, 188(3): 1–15.
- 9 IM J, JENSEN J R, JENSEN R R, et al. Vegetation cover analysis of hazardous waste sites in Utah and Arizona using hyperspectral remote sensing [J]. Remote Sensing, 2012, 4(2): 327–353.
- 10 佃袁勇, 方圣辉, 徐永荣, 等. 光谱波段宽度对森林叶片叶绿素含量反演的影响分析[J]. 测绘科学, 2012, 37(6): 40–42. DIAN Yuanyong, FANG Shenghui, XU Yongrong, et al. Analysis of spectral band width in retrieval of forest foliar chlorophyll concentration [J]. Science of Surveying and Mapping, 2012, 37(6): 40–42. (in Chinese)
- 11 KNOX N M, SKIDMORE A K, SCHLERF M, et al. Nitrogen prediction in grasses: effect of bandwidth and plant material state on absorption feature selection [J]. International Journal of Remote Sensing, 2010, 31(3): 691–704.
- 12 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.
- 13 ZHAO D H, HUANG L M, LI J L, et al. A comparative analysis of broadband and narrowband derived vegetation indices in predicting LAI and CCD of a cotton canopy [J]. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 2007, 62(1): 25–33.
- 14 LEE K S, COHEN W B, KENNEDY R E, et al. Hyperspectral versus multispectral data for estimating leaf area index in four different biomes [J]. Remote Sensing of Environment, 2004, 91(3–4): 508–520.
- 15 BROGE N H, LEBLANC E. Comparing prediction power and stability of broadband and hyperspectral vegetation indices for estimation of green leaf area index and canopy chlorophyll density [J]. Remote Sensing of Environment, 2001, 76(2): 156–172.
- 16 THENKABAIL P, SMITH R, DE PAUW E. Hyperspectral vegetation indices and their relationships with agricultural crop characteristics [J]. Remote Sensing of Environment, 2000, 71: 158–182.
- 17 孙小芳. 利用小波分形维数确定水稻光谱分辨率特征尺度[J]. 遥感学报, 2013, 17(6): 1420–1426. SUN Xiaofang. Identifying characteristic scales of rice spectral resolution using wavelet fractal dimension [J]. Journal of Remote Sensing, 2013, 17(6): 1420–1426. (in Chinese)
- 18 LU Z F, LU J W, PAN Y H, et al. Anatomical variation of mesophyll conductance under potassium deficiency has a vital role in determining leaf photosynthesis [J]. Plant, Cell and Environment, 2016, 39(11): 2428–2439.
- 19 GOMEZ-CASERO M T, CASTILLEJO-GONZALEZ I L, GARCIA-FERRER A, et al. Spectral discrimination of wild oat and canary grass in wheat fields for less herbicide application [J]. Agronomy for Sustainable Development, 2010, 30(3): 689–699.
- 20 姚霞, 刘小军, 王薇, 等. 小麦氮素无损监测仪敏感波长的最佳波段宽度研究[J]. 农业机械学报, 2011, 42(2): 162–167. YAO Xia, LIU Xiaojun, WANG Wei, et al. Optimal bandwidths of sensitive bands for portable nitrogen monitoring instrument in wheat [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2011, 42(2): 162–167. (in Chinese)
- 21 李民赞. 光谱分析技术及其应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2006.
- 22 MITCHELL J, GLENN N F, SANKEY T T, et al. Remote sensing of sagebrush canopy nitrogen [J]. Remote Sensing of Environment, 2012, 124: 317–223.
- 23 LI L T, LU J W, WANG S Q, et al. Methods for estimating leaf nitrogen concentration of winter oilseed rape (*Brassica napus* L.) using in situ leaf spectroscopy [J]. Industrial Crops and Products, 2016, 91: 194–204.
- 24 CHANG C W, LAIRD D A. Near-infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N [J]. Soil Science, 2002, 167(2): 110–116.
- 25 KOOISTRA L, SALAS E A L, CLEVERS J G P W, et al. Exploring field vegetation reflectance as an indicator of soil contamination in river floodplains [J]. Environmental Pollution, 2004, 127(2): 281–290.
- 26 THENKABAIL P S, SMITH R B, DE PAUW E. Evaluation of narrowband and broadband vegetation indices for determinign optimal hyperspectral wavebands for agricultural crop characterization [J]. Photogrammetric Engineering and Remote Sensing, 2002, 68(6): 607–622.
- 27 王福民, 黄敬峰, 唐艳林, 等. 采用不同光谱波段宽度的归一化植被指数估算水稻叶面积指数[J]. 应用生态学报, 2007, 18(11): 2444–2450. WANG Fumin, HUANG Jingfeng, TANG Yanlin, et al. Estimation of rice LAI by using NDVI at different spectral bandwidths [J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2007, 18(11): 2444–2450. (in Chinese)
- 28 黄彦, 田庆久, 耿君, 等. 遥感反演植被理化参数的光谱和空间效应[J]. 生态学报, 2016, 36(3): 883–891. HUANG Yan, TIAN Qingjiu, GENG Jun, et al. Review of spectral and spatial scale effects of remotely sensed biophysical and biochemical vegetation parameters [J]. Acta Ecologica Sinica, 2016, 36(3): 883–891. (in Chinese)
- 29 TEILLET P M, STAENZ K, WILLIAM D J. Effects of spectral, spatial, and radiometric characteristics on remote sensing vegetation indices of forested regions [J]. Remote Sensing of Environment, 1997, 61(1): 139–149.
- 30 刘京, 常庆瑞, 刘森, 等. 基于 SVR 算法的苹果叶片叶绿素含量高光谱反演[J/OL]. 农业机械学报, 2016, 47(8): 260–272. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20160834&flag=1&journal_id=jcsam. DOI: 10.6041/j.issn.1000-1298.2016.08.034.
- LIU Jing, CHANG Qingrui, LIU Miao, et al. Chlorophyll content inversion with hyperspectral technology for apple leaves based on support vector regression algorithm[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2016, 47(8): 260–272. (in Chinese)
- 31 MUTANGA O, SKIDMORE A K, VAN WIEREN S. Discriminating tropical grass (*Cenchrus ciliaris*) canopies grown under different nitrogen treatments using spectroradiometry[J]. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 2003, 57(4): 263–272.