doi:10.6041/j.issn.1000-1298.2025.06.044

基于高光谱和 CNN－LSTM 的白菜叶片铜胁迫分析与分类模型研究

封润泽[1]　韩　鑫[1]　兰玉彬[1]　勾馨悦[1]　王　娟[1]　白京波[2]

（1. 山东理工大学农业工程与食品科学学院，淄博 255000；2. 山东思远农业开发有限公司，淄博 255000）

摘要：为探究蔬菜在不同浓度重金属胁迫下的高光谱响应，本文采集 10 个浓度 Cu^{2+} 胁迫下的白菜叶片高光谱数据，提出一种基于高光谱和卷积长短期记忆神经网络（CNN－LSTM）的白菜叶片 Cu^{2+} 胁迫分类预测模型。首先采用 S－G 平滑、一阶微分进行光谱数据预处理，其次采用竞争自适应重加权采样（Competitive adapative reweighted sampling，CARS）和非信息变量剔除（Uninformative variables elimination，UVE）提取 10 个公共特征波长。模型试验结果表明：采用 UVE 和 CARS 方法提取的两者共同波长作为 CNN－LSTM 模型的输入，测试集准确率为 94.8%，精确率为 93.1%，召回率为 93.5%，分别比 SVM、CNN 和 LSTM 模型高 8.7、5.7、6.4 个百分点，6.6、4.7、5.9 个百分点和 10.1、5.2、3.9 个百分点。采用 ICP－700T 型电感耦合等离子体发射光谱仪精确测量白菜叶片重金属含量对结果进行验证。采用 UVE－CARS 特征波长筛选后的 CNN－LSTM 分类预测模型用于白菜叶片无损分类监测效果最优，为蔬菜重金属的无损分类监测提供新方法。

关键词：白菜叶片；铜胁迫分类；高光谱；特征波长；CNN－LSTM

中图分类号：S24　　**文献标识码**：A　　**文章编号**：1000-1298(2025)06-0477-10　　**OSID**：

Analysis and Non-destructive Monitoring of Chinese Cabbage Leaf Copper Stress Based on Hyperspectral and CNN－LSTM

FENG Runze[1]　HAN Xin[1]　LAN Yubin[1]　GOU Xinyue[1]　WANG Juan[1]　BAI Jingbo[2]

(1. *College of Agricultural Engineering and Food Science*, *Shandong University of Technology*, *Zibo* 255000, *China*
2. *Shandong Siyuan Agricultural Development Co.*, *Ltd.*, *Zibo* 255000, *China*)

Abstract: Vegetable heavy metal pollution monitoring is an essential component of precision agriculture. In order to explore the hyperspectral response of vegetable under different concentrations of heavy metal stress, hyperspectral imaging (HSI) data of cabbage leaves under ten concentrations of Cu^{2+} stress was collected, and feature wavelength selection and classification modeling was conducted. A convolutional long short-term memory neural network (CNN－LSTM) model for cabbage leaf Cu^{2+} stress classification based on hyperspectral data was proposed. Ten cabbage samples with different concentration gradients of copper stress were set, with four pots of samples at each concentration. Hyperspectral data collection was carried out when the cabbage grew to 15～20 leaves. Ten leaf samples were collected for each cabbage. A total of 400 hyperspectral data were collected. Firstly, spectral data preprocessing was performed by using S－G smoothing and first-order differentiation. Then, competitive adaptive reweighted sampling (CARS) and uninformative variable elimination (UVE) were used to extract ten common feature bands. The experimental results indicated that using the common wavelengths extracted by the UVE and CARS methods as input for the CNN－LSTM model achieved a test set accuracy of 94.8%, precision of 93.1%, and recall of 93.5%. These values were higher than those achieved by the SVM, CNN, and LSTM models by 8.7, 5.7, and 6.4 percentage points in accuracy, 6.6, 4.7, and 5.9 percentage points in precision, and 10.1, 5.2, and 3.9 percentage points in recall, respectively. The results were

收稿日期：2024－04－22　修回日期：2024－06－30

基金项目：山东省引进顶尖人才“一事一议”专项（鲁政办字〔2018〕27 号）、山东临淄设施蔬菜科技小院建设项目（教育部教研厅函〔2022〕7 号）和山东理工大学研究生教育质量提升计划项目（研究生函〔2022〕26 号）

作者简介：封润泽（2000—），男，硕士生，主要从事光谱检测技术研究，E-mail：19862515131@163.com

通信作者：王娟（1979—），女，教授，博士，主要从事作物原位光谱无损监测研究，E-mail：wangjuan7912@163.com

verified by accurate measurement of heavy metal content in cabbage leaves using an ICP - 700T inductively coupled plasma emission spectrometer. For non-destructive classification monitoring of cabbage leaves under copper stress, the CNN - LSTM classification model with UVE - CARS feature bands selection performed the best, providing a method for non-destructive detection of vegetable heavy metals.

Key words: butterhead lettuce; copper stress classification; hyperspectral; characteristic wavelengths; CNN - LSTM

0 引言

当前温室中大量投入动物有机肥、塑料薄膜、杀虫剂和化肥等,其封闭且高输入输出的蔬菜生产环境极易造成重金属超标[1]。因此研究蔬菜重金属监测对降低环境污染和提高人类健康十分必要[2]。

传统蔬菜中重金属检测方法有经验观察法和定性定量检测法。定性定量检测法包括电感耦合等离子体质谱法(ICP - MS)[3]、原子吸收光谱法(AAS)[4]、X 射线荧光光谱法(XRF)[5]等。传统定性定量检测法的特点是设备昂贵、具有破坏性、操作繁琐、检测周期长、环境污染等,无法满足便捷、无损检测的要求。蔬菜叶片原位光谱表现是研究蔬菜重金属污染的重要特征[6]。高光谱数据可提供丰富的光谱反射率信息,区分极为相似的光谱图像点位[7]。随着机器学习和深度学习技术的发展,高光谱技术在降维、特征提取和分类等方面取得显著进步[8]。

近几年高光谱技术与长短期记忆网络(Long short-term memory, LSTM)等深度学习方法结合用于检测作物重金属胁迫的国内外研究大量涌现[9-11]。高小梅等[12]基于高光谱图像融合技术,构建渍害胁迫下基于 BP 神经网络的叶绿素估算模型。这类模型在处理光谱图像时,为充分考虑序列图像的时间特征属性,因而留下了进一步提升的空间。为此,YU 等[13]提出采用循环神经网络(Recurrent neural network, RNN)探究营养液多元素胁迫对生菜品质和产量的影响。然而 RNN 在挖掘空间特征信息中存在不足,导致关键信息流的流失阻碍了网络捕获任务导向的有效空间信息。卷积神经网络(Convolutional neural network, CNN)具备可学习参数的卷积核,从而善于从数据中提取空间特征;LSTM 是一种时间循环神经网络,其独特设计可以有效考虑序列数据的时序特征。通过结合 CNN 和 LSTM 以充分挖掘数据的时空特征,可以实现更为精准和全面的数据分析和模式识别。HE 等[14]研究基于近红外光谱的 CNN - LSTM 混合模型快速无损检测中药中多指标成分,所得不同组分平均绝对百分比误差(MAPE)为 0.7% ~2.8%,结果表明,CNN - LSTM 模型在快速、无损检测和质量监控方面具有显著的潜力。XIA 等[15]采用建立CNN - LSTM 模型分析织物中棉含量,得到测试集 RMSE 为 0.75%,比 CNN 模型降低 14.41%。成功建立了纺织物棉含量的快速定量分析模型。

但高光谱处理方法较为繁琐,分类准确率和高光谱数据空间特征和波长序列特征提取效果仍需提高。因此本文提出基于高光谱数据的 CNN - LSTM 分类模型。采集不同浓度 Cu^{2+} 胁迫下奶油白菜叶片高光谱数据,采用 CARS 和 UVE 特征波长筛选法提取有效高光谱波段,探究不同波段筛选方法的分类效果。构建 SVM、CNN、LSTM、CNN - LSTM 分类模型,对比 4 种机器学习模型对于 Cu 胁迫下的白菜叶片高光谱数据分类预测效果,筛选最优分类模型。

1 试验材料与数据获取

1.1 试验材料

蔬菜中对重金属的吸收能力由大到小依次为叶菜类、根菜类、果菜类[16]。由于莲座期为白菜产量形成的关键时期[17],且白菜生长速度快,因此选取试验对象为人工培养实验室生长的 Cu^{2+} 胁迫下的株高 15 cm 左右的莲座期盆栽白菜,品种选取当地广泛种植的“胶州大白菜”以确保试验结果的可靠性和代表性。选用分析纯硫酸铜($CuSO_4 \cdot 5H_2O$ 分子量:250)作为胁迫重金属源。根据 GB 15618—2018《土壤环境质量农用地土壤污染风险管控标准(试行)》设置 10 个 Cu^{2+} 质量比梯度 0、0.3、1、5、10、50、100、200、400、600 mg/kg,每个质量比梯度设置 4 组平行样,共计 40 盆白菜样本。选取双层自动吸水花盆,内盆为种植盆,外盆为蓄水盆,防止重金属渗出液污染环境。将 10 个质量比的重金属溶液采用二级超纯水定容于 10 个试剂瓶中。当白菜生长至 6 叶时,开始每天定时定量进行胁迫浇灌。每 5 d 添加一次 Hoagland's 营养液,且将土壤 pH 值保持为 6.5 ~6.8。为减少光照、湿度等引起的误差,每隔 2 ~3 d 随机调整人工气候室中的奶油白菜种植盆的位置[18]。在试验期间发现随着土壤中重金属浓度升高,蔬菜叶片表面逐渐出现白色斑点,叶片变黄枯萎,边缘表现为黄白色干枯。当白菜叶片生

长至 18 片左右时开始进行高光谱图像采集。

1.2　数据获取

1.2.1　高光谱图像采集

采用 Cubert s185ST 型画幅式高光谱仪，光谱波段范围为 450～998 nm，分辨率 1 000 像素×1 000 像素，积分时间为 11 ms，拍摄模式设置为实验室 PC 模式。测试地点为避光的室内，采用 4 个 60 W 的卤素灯补光。采集系统软件在 Windows 11 操作系统下运行。将奶油白菜叶片置于黑色背景布且距离镜头50 cm，为保证拍摄时光源稳定，提前将卤素灯预热30 min。为减少相机光源分布不均匀和当前电流不均匀的影响，数据采集前进行白板校正。将标定白板置于载物台，让镜头内范围充满白板（24 cm×26 cm），并保持白板与镜头垂直。点击 white，10 s 后获得白图像 P_w，加装镜头盖，点击 dark，进行扣除暗电流，获取暗图像 P_d。校正公式为

$$P = \frac{P_r - P_d}{P_w - P_d} \tag{1}$$

式中　P_r——初始图像　　P——校准图像

设置积分时间 auto，模式调整为反射率模式，取下镜头盖，即可进行高光谱数据采集。避开嫩叶和老叶，选取每盆白菜中部采集 10 个叶片，每个叶片拍摄 3 次高光谱数据，取平均值作为该叶片的平均光谱反射率[19]。所有制备的样品依次放到试验台上进行高光谱采集，共采集 400 个高光谱图像。

1.2.2　ROI 区域选择

由于背景等外部因素影响，容易使高光谱曲线产生噪声信息[18]。将整个白菜叶片作为感兴趣区域，采用比值法获得无背景的感兴趣区域的掩膜图像，并计算平均光谱反射率，如图 1 所示。

1.2.3　奶油白菜 Cu^{2+} 含量测定

为了精确测量白菜叶片中 Cu^{2+} 含量，首先将烘

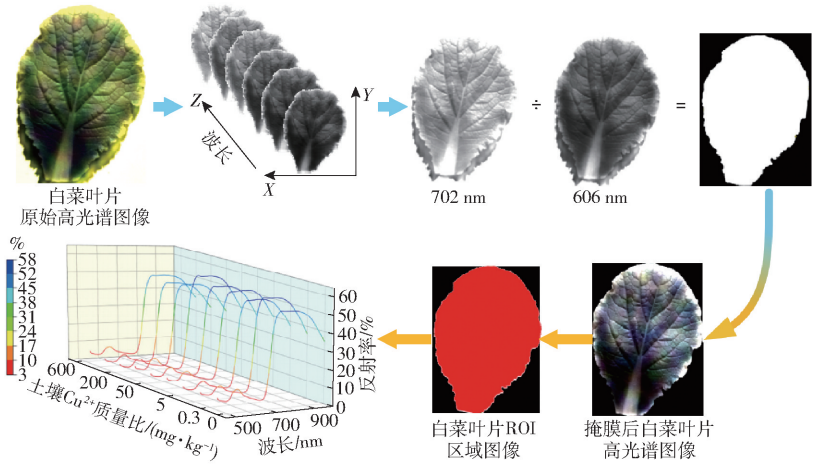

图 1　白菜叶片高光谱图像采集与 ROI 区域提取

Fig. 1　Process of hyperspectral image acquisition and ROI (region of interest) extraction for cabbage leaves

干的白菜叶片研磨成粉末，称量 0.8 g（精确至 0.000 1 g）左右的样品放入聚四氟乙烯烧杯中，采用超纯水润湿，加入 9 mL 硝酸和 1 mL 高氯酸，盖上聚四氟乙烯烧杯盖，放在设置温度 150℃ 加热板上加热。待消解充分后，过滤定容于 50 mL 容量瓶，滤纸仅留下微量不溶解于强酸的有机物杂质。同时，将消解试验采用的酸作为重金属空白组。

采用的测量设备为电感耦合等离子体原子发射光谱仪（ICP－700T 型，苏州博维仪器科技有限公司），测定 Cu 胁迫白菜叶片铜质量比（mg/kg）。表 1 数据表明，土壤中不同浓度的 Cu^{2+} 胁迫下白菜叶片 Cu 含量存在显著差异。

2　数据处理与模型分析

2.1　光谱数据预处理

2.1.1　光谱平滑处理

由于未经平滑处理的高光谱包含噪声，可能会使模型过度拟合噪声而非真实的光谱反射率数据，从而降低模型的泛化能力[20]。因此要对光谱进行平滑处理降低环境噪声干扰[21]。采用基于最小二乘多项式的 Savitzky－Golay（S－G）卷积平滑算法，窗口点数设置为 5，多项式阶数设置为 2。在减小噪声的同时，保持数据的峰值和幅宽。计算式为

$$\hat{y} = \sum_{j}^{m} C_j y_{i+j} \tag{2}$$

式中　m——窗口半径

C_j——卷积系数

$\hat{y}$——原始数据点经过平滑后的估计值

y_{i+j}——原始信号中第 $i+j$ 个观测值

j——相对于中心点 i 的偏移量

平滑处理后的光谱如图 2 所示。

2.1.2　光谱微分处理

高光谱往往存在重叠的反射率数据等难以区分。对高光谱进行微分处理，有效地减小基线漂移

表 1 不同梯度胁迫下白菜叶片铜含量的定量检测值

Tab. 1 Quantitative measurement of copper content in cabbage leaves under different gradient stresses

mg/kg

土壤 Cu^{2+} 质量比	白菜叶片 Cu^{2+} 质量比		
	最小值	最大值	平均值
0	0	0	0
0.3	0	0.311	0.125
1	0.213	1.242	0.957
5	0.242	2.519	1.219
10	0.657	3.486	2.724
50	1.132	4.248	3.612
100	1.844	4.782	4.586
200	2.481	8.941	7.791
400	4.578	14.484	12.474
600	4.214	22.511	18.693

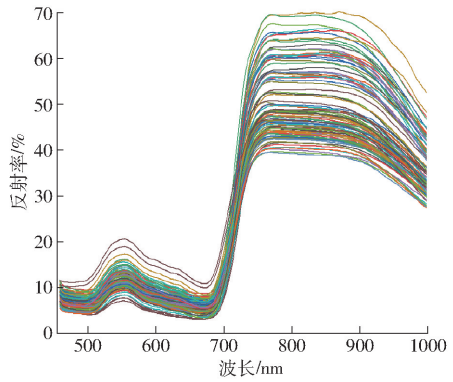

图 2 Cu^{2+} 胁迫的白菜叶片原始高光谱反射率曲线

Fig. 2 Original hyperspectral reflectance curves of copper-polluted cabbage leaves

影响,同时突出光谱有用信息[22]。采用一阶微分增强光谱曲线斜率变化,使吸收峰的上升和下降边缘更加明晰,结果如图 3 所示。微分计算式为

$$D'(\lambda)=\frac{I(\lambda)-I(\lambda-\Delta\lambda)}{\Delta\lambda} \tag{3}$$

式中 $D'(\lambda)$——一阶微分光谱

$I(\lambda)$——波长 λ 处光强度

$\Delta\lambda$——波长间隔

2.2 特征波长筛选

高光谱全波段进行数据分析可以提供丰富的光谱信息[23],但高光谱数据维度较高,为降低光谱数据维度减少无关和冗余特征,提高模型的性能和分类预测的准确度和泛化能力。采用 UVE 和 CARS 从高光谱全波段(450 ~ 950 nm)进行特征波长提取[24],该方法广泛应用于高光谱特征波长选择。

2.2.1 非信息变量剔除法

UVE 将随机的噪声信号加到高光谱数据中,并采用 PLSR 计算每个变量稳定性,消除无关的变量降低数据的维度[7]。筛选过程如图 4 所示,右侧为添加随机噪声矩阵,红点标注为 UVE 所选 24 个特征波长,占全部波长的 17.5%。

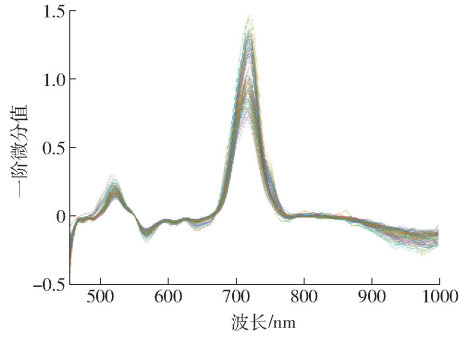

图 3 Cu 胁迫的白菜叶片高光谱一阶微分曲线

Fig. 3 First derivative of hyperspectral curves of cabbage leaves under copper stress

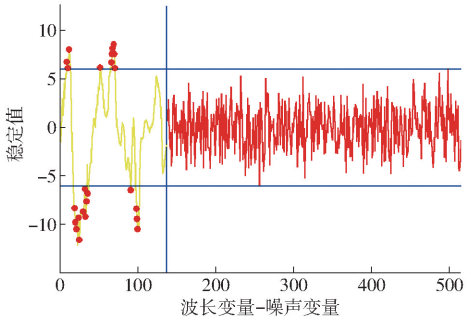

图 4 UVE 特征波长筛选

Fig. 4 Feature band selection process using uninformative variables elimination

2.2.2 竞争性自适应重加权采样法

CARS 根据达尔文进化论中“适者生存”原理,通过交叉验证和竞争机制,将多元回归模型中绝对系数较大的波长定为特征波长[25]。采用偏最小二乘(Partial least squares,PLS)进行降维[26]。首先将蒙特卡洛抽样(Monte carlo method)设置为 200 次,采用随机选择的波段构建 PLS 模型,其次采用指数递减函数(Exponentially decreasing function, EDF)进行波长选择,根据当前模型的残差重新计算每个波长的权重波长,回归系数权重计算公式为

$$w_i=\frac{|a_i|}{\sum_{i=1}^{n}a_i} \tag{4}$$

式中 a_i——第 i 个变量回归系数

n——采样中剩余变量数量

w_i——第 i 个变量回归系数权重

图 5 表示 CARS 特征波长选择横纵参数的变化趋势,包括选择变量的数量,交叉验证的 RMSE(RMSECV)的 5 倍交叉验证和回归系数。该方法相对于传统特征波长筛选方法(如主成分分析法(Principal components analysis, PCA)等)优点是无

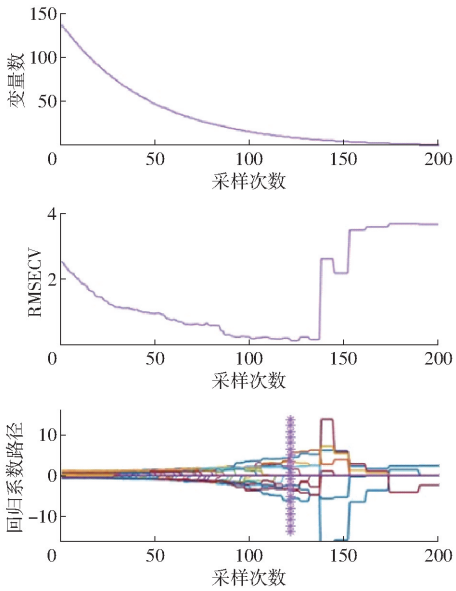

图 5　CARS 特征波长选择

Fig. 5　CARS feature wavelength selection

需手动调节参数即可获取特征波长组合及其 RMSECV[27]。当采样次数增加时，由于剔除无用信息，当采样次数达到 128 时 RMSECV 最小，此时对应波长变量的子集为特征波长，共提取出 19 个特征波长，占全部波长的 13.9%，并计算特征波长的权重，如图 6 所示。CARS 和 UVE 算法共有 10 个共同波长，特征波长如表 2 所示。

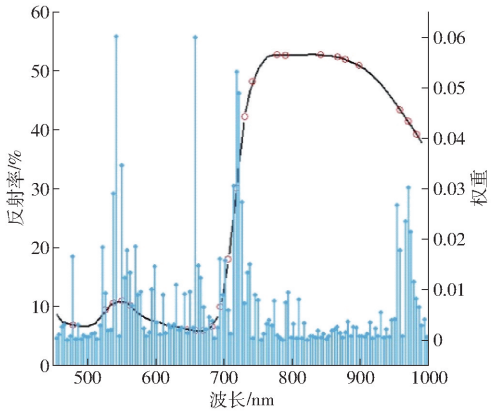

图 6　CARS 提取的特征波长和权重

Fig. 6　Feature wavelengths and weights extracted by CARS

表 2　UVE 和 CARS 筛选特征波长结果

Tab. 2　Results of feature band selection using UVE and CARS

特征波长筛选方法	筛选波长/nm
UVE	478、526、538、550、562、646、658、670、682、694、706、714、730、742、778、790、842、862、882、878、898、958、970、982
CARS	478、522、526、538、542、550、554、558、562、702、714、718、790、830、842、898、974、978、982
UVE＋CARS	478、526、538、550、562、714、790、842、898、982

2.3　模型建立

2.3.1　数据集划分

光谱波长范围为 450～998 nm，每 4 nm 为 1 个波段，全光谱共获得 137 个波段。随机打乱样本集，将拍摄所得 400 个光谱数据按比例划分为 280 个训练集和 120 个测试集。算法首先将训练集和测试集进行归一化，使训练集和测试集处于相同尺度，消除尺度差异的干扰，可以加快收敛速度提高模型的精度，提高泛化能力[10]。归一化公式为

$$x_{\text{norm}}=\frac{x-x_{\min}}{x_{\max}-x_{\min}} \tag{5}$$

式中　x_{norm}——归一化值　　x——原始值

$x_{\max}$、$x_{\min}$——最大值和最小值

2.3.2　运行平台

在 Windows 11 操作系统下进行建模试验，处理器为 Intel(R) i5－12400，基频 2.50 GHz，CARS 特征波长选择及建模在 Matlab R2022a 软件中进行。采用支持向量机(Support vector machines，SVM)、CNN、LSTM、CNN－LSTM 4 种机器学习分类预测模型，对 4 种波长选择方式选择的波长作为输入进行分类训练，试验参数设置学习率为 0.008，最大迭代次数为 1 000，每轮迭代次数 2，目标类别数为 10。

2.3.3　分类模型

采用的高光谱分类模型包括 SVM、CNN、LSTM 和 CNN－LSTM。

SVM 是一种基于监督分类的算法，基于风险最小化原理，将输入变量映射到高维空间，寻找用最大几何区间能够正确将样本分类的超平面，采用径向基核函数(RBF)和交叉验证的建模方式[28]。线性分类超平面方程表示为

$$\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}+b=0 \tag{6}$$

式中　$\boldsymbol{W}$——超平面到原点距离

$\boldsymbol{X}$——输入特征向量

b——截距

SVM 的优化目标是使间隔最大化，同时要满足约束条件为

$$y^{(i)}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{(i)}+b)\geqslant 1\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{7}$$

CNN 能够识别不同波长之间的关系和模式，减少网络参数数量，从而降低过拟合的风险，在特征识别方面标展良好[15]。CNN 结构主要包括以下部分：①卷积层(Convolutional layer)，这些层通过卷积核提取输入数据的特征[14]，使用大小为[3,1]的卷积核，分别对应 16 个和 32 个特征图的 2 个卷积层。②ReLU 激活层(ReLU activation layer)，使用非线性的激活函数(ReLU)，输入为负时输出为零，从而激活大部分神经元，增强网络的表达能力。③序列

反折叠层(Sequence unfolding layer),将卷积层处理后的数据转换回序列格式,以供后续的 LSTM 层处理。④网络平铺层(Flatten layer),将多维的网络输出铺平成一维,以便连接到全连接层。高光谱数据经过 CNN 层处理后,通过序列展开层和平铺层转换格式,输入 LSTM 中[29],结构如图 7 所示。

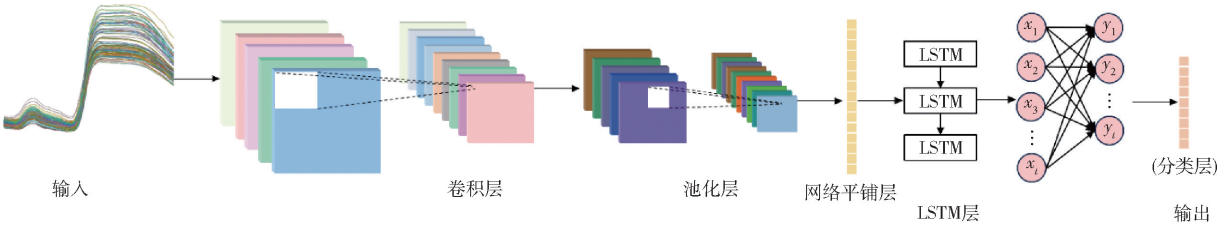

图 7 CNN - LSTM 结构图

Fig. 7 CNN - LSTM structure diagram

LSTM 层(Long short-term memory layer),处理序列数据,记忆长期和短期模式。LSTM 的结构旨在克服 RNN 在学习长期依赖方面的局限性,其关键功能是记忆和利用先前的信息,用于理解序列数据的波长序列动态[15]。LSTM 单元通常由以下组件组成:Cell State 为 LSTM 的记忆载体,它直接沿着整个链运行,在整个序列中携带信息。且其通过输入门、遗忘门、输出门的控制具有移除或添加信息的能力。输入门,决定要向单元状态添加的新信息。遗忘门,确定应该从单元状态中丢弃的信息。输出门,控制单元状态中的值用于计算 LSTM 单元的输出激活的程度。LSTM 中的每个门都可以学习在训练期间保留或忘记哪些信息,从而允许网络有效地捕获顺序数据中的长期依赖关系[30]。

分类层(Classification layer)由全连接层(Fully connected layer)和 Softmax 函数组成,全连接层对 LSTM 输出的隐藏状态进行线性变换,Softmax 函数将其转换为胁迫浓度的类别概率。

2.4 结果分析

2.4.1 光谱波段分析

被测叶片在波段 680 ~ 720 nm 重叠较为严重,无法直接区分,如图 2 所示。本研究中,UVE 和 CARS 筛选 10 个公共特征波长。其中波长 526、538、550、562 nm 处于电磁波谱“绿峰”波段,有研究表明,波长 540 ~ 560 nm 对叶绿素 A 的含量较为敏感[31]。低浓度胁迫的白菜叶片在波长 550 nm 附近出现叶绿素反射高峰,反射率为 30% ~ 35%。但随着土壤中 Cu^{2+} 浓度升高,在波长 522 ~ 577 nm 的反射率逐渐降低,可能由于叶绿素浓度的降低,叶绿素吸收蓝光和红光,对绿光的反射逐渐增强,如图 3 所示,这与 ZHOU 等[32]的研究成果一致。波长 714、790 nm 位于“红边”左右,该范围是指示作物叶片中叶绿素健康度、Cu 胁迫程度的重要波段[33]。Cu^{2+} 被蔬菜吸收后在细胞壁集聚,然后与细胞膜上的亲离子基结合,使细胞膜结构发生变化,从而影响植物细胞正常生理功能[18]。在白菜培育过程中,随着土壤中 Cu^{2+} 浓度升高,叶片出现白色斑点,白菜植株明显变小。图 8 为可见光波段 500 ~ 600 nm 10 个浓度 Cu^{2+} 胁迫下的平均光谱反射率。

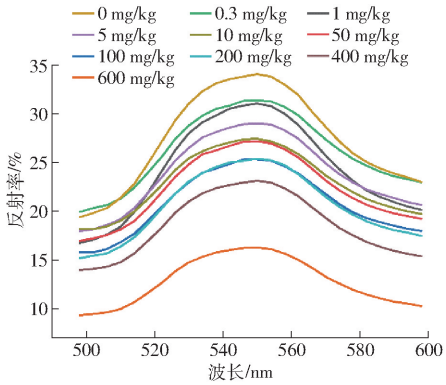

图 8 500 ~ 600 nm 可见光波段 10 个浓度 Cu 胁迫下白菜叶片反射率

Fig. 8 Reflectance of cabbage leaves under ten copper concentration stresses in 500 ~ 600 nm visible light spectrum

2.4.2 模型结果分析

将 400 个高光谱数据分为训练集(280 个)和测试集(120 个)。为对比 CNN - LSTM 模型分类的优越性,采用全光谱、UVE、CARS、UVE + CARS 4 种光谱波段输入 SVM、CNN、LSTM、CNN - LSTM 4 种分类模型。以 4 种分类模型准确率(Accuracy)、精确率(Precision)、召回率(Recall)作为评价指标。

UVE 和 CARS 特征提取后的简化光谱波段输入 CNN - LSTM 模型,然后模型同时利用光谱数据的空间和波长序列特征,CNN 能够有效地提取光谱数据中的局部高层次空间特征,捕捉复杂的局部模式和非线性关系,而 LSTM 能够捕捉光谱数据中的波长序列依赖关系。在 LSTM 前加入卷积层和池化层。高光谱图像的卷积处理,模型利用卷积核的滑动机制,从空间领域中提取局部特征,池化层进行重要特征提取形成并降低特征维度,特征向量按照时间步(波长)顺序进入 LSTM 层,利用 LSTM 网络的记忆能力,从而捕捉高光谱数据波段依赖关系。然

后将 LSTM 层输出的高层次特征进行融合，通过全连接层进行特征融合和分类。最后，通过 Softmax 层（Softmax activation layer），用多类分类的激活函数，将全连接层的输出转换为 10 个土壤 Cu^{2+} 浓度胁迫的白菜叶片分类的概率，将每个输出值映射为介于 0～1 的概率，完成分类任务。CNN－LSTM 模型技术路线如图 9 所示。

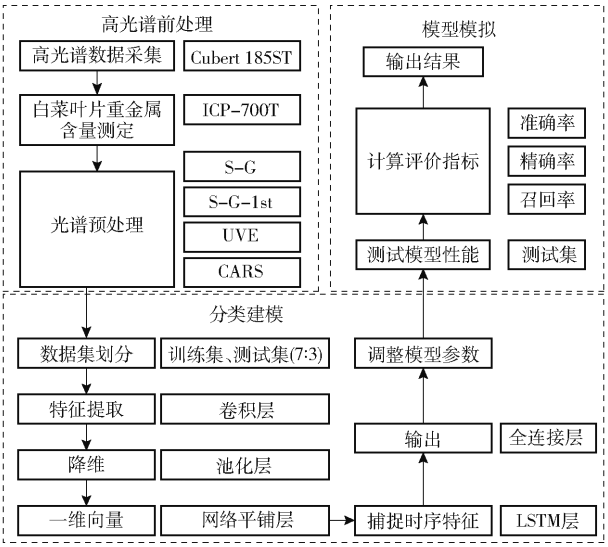

图 9　CNN－LSTM 模型构建流程图

Fig. 9　CNN－LSTM model construction flowchart

SVM、CNN、LSTM 和 CNN－LSTM 4 种模型分类预测结果如表 3 所示。采用高光谱 137 个全波段作为分类模型输入，SVM 模型分类准确率为 65.2%，精确率为 79.4%，召回率为 60.8%，在 4 种输入中均为最低。采用全波段综合考虑波段数量对模型数据维度的影响以及容易出现过拟合，因此全光谱不适宜用于分类模型。采用 UVE、CARS、UVE＋CARS 进行特征波长选择，特征波长分别精简为 24、19、10 个。CARS 提取的 19 个特征波长在 4 种分类模型中准确率和精确率均高于 UVE 筛选的 24 个特征波长，准确率分别高出 2.5、4.6、1.7 个百分点，精确率分别高出 1.5、1.5、7.1 个百分点。通过对 4 种模型整体分类结果对比，UVE 与 CARS 的 10 个共同波长在 SVM、LSTM 和 CNN－LSTM 模型中均表现出最高的分类准确率和精确率。UVE 和 CARS 公共波长精简至 10 个作为分类模型的输入，极大降低光谱的复杂性。

SVM 模型分类准确率为 86.1%，精确率为 86.5%，召回率为 83.4%，其能力受限于核函数类型[34]。UVE 与 CARS 的共同波长输入 LSTM 模型，分类准确率为 89.1%，精确率为 88.4%，召回率为 88.3%，比 SVM 模型有一定提高。相较于 LSTM 模型，CNN－LSTM 中 CNN 已经处理了大部分关于空间特征的提取任务，LSTM 模型可以专注于更为关键的波长序列动态特征，从而在面对新场景时能够更好地进行分类[15]。采用 UVE 与 CARS 筛选的公共特征波长作为输入变量获得的准确率为 94.8%，精确率为 93.1%，召回率为 93.5%，为最高，因此 CNN－LSTM 模型为最优分类模型。采用 UVE－CARS 提取的 10 个特征波长输入 SVM、LSTM、CNN－LSTM 分类模型的训练集和测试集混淆矩阵如图 10 所示。对比显示，CNN－LSTM 模型实现了最高的总体准确率和最低的跨类别混淆率。

表 3　4 种特征波长筛选结果作为输入的 4 种模型测试集分类结果

Tab. 3　Classification results of four models test using four selected feature wavelengths as inputs

分类模型	筛选方法	波段数	准确率/%	精确率/%	召回率/%
SVM	全波段	137	65.2	79.4	60.8
	UVE	24	83.4	81.2	80.7
	CARS	19	85.9	82.7	84.4
	UVE＋CARS	10	86.1	86.5	83.4
LSTM	全波段	137	59.6	63.4	64.3
	UVE	24	82.6	80.2	79.7
	CARS	19	87.2	87.1	85.6
	UVE＋CARS	10	89.1	88.4	88.3
CNN	全波段	137	57.2	62.1	70.8
	UVE	24	83.5	79.4	82.2
	CARS	19	83.1	81.8	80.7
	UVE＋CARS	10	88.4	87.2	89.6
CNN－LSTM	全波段	137	81.8	79.5	70.2
	UVE	24	88.5	83.6	81.5
	CARS	19	90.2	90.7	88.4
	UVE＋CARS	10	94.8	93.1	93.5

3　结论

（1）采用高光谱结合深度学习对 10 个不同土壤 Cu^{2+} 浓度胁迫下的白菜叶片进行无损分类监测，分别采用全波段、CARS、UVE 和 CARS＋UVE 模型筛选的特征波长作为输入变量，建立 SVM、LSTM 和 CNN－LSTM 分类模型。

（2）土壤中不同浓度 Cu^{2+} 胁迫下的白菜叶片波长 522～577 nm 原始高光谱响应最明显。反射率随土壤中 Cu 胁迫浓度的升高而降低，波长 700～750 nm 叶片光谱反射率差异较小。

（3）CARS 选择的特征波长准确率和精确率均优于 UVE 算法。对比 UVE、CARS、UVE＋CARS 3 种特征波长建模效果，UVE 和 CARS 筛选的 10 个公共波长准确率和精确率均最优，可以作为 Cu^{2+} 污染监测波长。

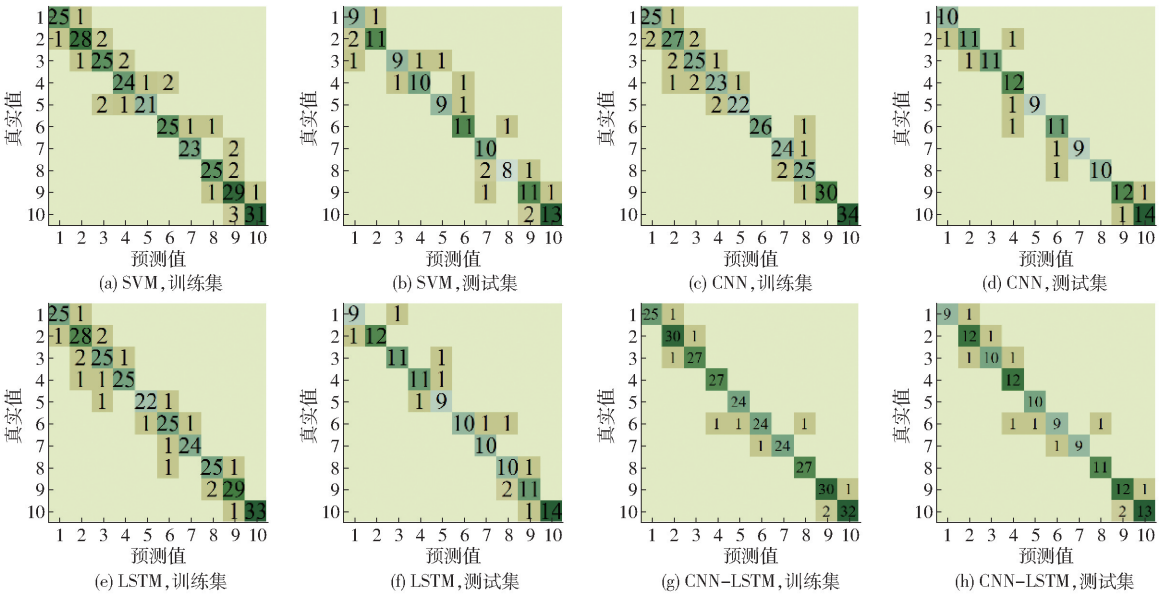

图 10 UVE－CARS 输入 4 种分类模型混淆矩阵

Fig. 10 UVE－CARS input four kinds of classification model confusion matrix

(4)CNN－LSTM 模型分类预测效果最优。其测试集准确率为 94.8%,精确率为 93.1%,召回率为 93.5%,相较于 SVM、LSTM 分别提高 8.7、6.6、10.1 个百分点和 5.7、4.7、5.2 个百分点,可以对 Cu 污染白菜叶片样本进行有效无损分类监测。

参 考 文 献

[1] 林楠,刘翰霖,孟祥发,等. 基于高光谱的黑土区土壤重金属含量估测[J]. 农业机械学报,2021,52(3):218－225.
LIN Nan, LIU Hanlin, MENG Xiangfa, et al. Hyperspectral estimation of heavy metal contents in black soil region[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021,52(3):218－225. (in Chinese)

[2] 金柯达, 彭宇志, 杨高中, 等. 蔬菜栽培中连续施用猪粪沼肥的肥效及重金属风险研究[J]. 农业机械学报, 2023, 54(8):359－370.
JIN Keda, PENG Yuzhi, YANG Gaozhong, et al. Fertilizer efficiency and heavy metal risk analysis of continuous application of biogas fertilizer in vegetable cultivation[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2023,54(8):359－370. (in Chinese)

[3] 朱禹奇, 张鑫, 杜盼盼, 等. 红外光谱与 X 射线光谱结合电感耦合等离子体质谱对蒙药禹粮土质量控制方法的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2023,43(10):3163－3169.
ZHU Yuqi, ZHANG Xin, DU Panpan, et al. Infrared spectroscopy and x-ray spectroscopy combined with inductively coupled plasma mass spectrometry for quality control of Mongolian medicine Yu grain soil[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2023, 43(10): 3163－3169. (in Chinese)

[4] 邓丹, 罗凤焱, 李洁. 石墨炉原子吸光谱法测定铀硅化合物中痕量镉的含量[J]. 核动力工程, 2023,44(增刊 2):216－220.
DENG Dan, LUO Fengyan, LI Jie. Determination of trace cadmium in uranium silicon compounds by graphite furnace-atomic absorption spectroscopy[J]. Nuclear Power Engineering, 2023,44(Supp. 2):216－220. (in Chinese)

[5] 吴世豪, 宋祥瑞, 赵鹏, 等. 高精度 X 射线荧光光谱法快速分析人体血液中 6 种有毒重金属元素[J]. 分析试验室, 2023,42(7):878－882.
WU Shihao, SONG Xiangrui, ZHAO Peng, et al. Rapid analysis of six toxic heavy metal elements in human blood by highdefinition X-ray fluorescence spectrometry[J]. Chinese Journal of Analysis Laboratory, 2023, 42(7): 878－882. (in Chinese)

[6] ZHOU Xin, SUN Jun, TIAN Yan, et al. Detection of heavy metal lead in lettuce leaves based on fluorescence hyperspectral technology combined with deep learning algorithm[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2022,266:120460.

[7] SIMKO I, JIMENEZ A, FURBANK T. Detection of decay in fresh-cut lettuce using hyperspectral imaging and chlorophyll fluorescence imaging[J]. Postharvest Biology and Technology, 2015,106:44－52.

[8] SANAEIFAR A, YANG C, GUARDIA M, et al. Proximal hyperspectral sensing of abiotic stresses in plants[J]. Science of The Total Environment, 2023,861:160652.

[9] ABDEL M, MUTANGA O, ODINDI J. Estimating swiss chard foliar macro- and micronutrient concentrations under different irrigation water sources using ground-based hyperspectral data and four partial least squares[J]. Computers and Electronics in

Agriculture, 2017,132:21－33.
[10] YU Keqiang, FANG Shiyan, ZHAO Yanru. Heavy metal Hg stress detection in tobacco plant using hyperspectral sensing and data-driven machine learning methods[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2021,245: 118917.
[11] XIN Zhou, JUN Sun, YAN Tian, et al. A deep learning based regression method on hyperspectral data for rapid prediction of cadmium residue in lettuce leaves[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2020,200:103996.
[12] 高小梅, 李燕丽, 卢碧林, 等. 基于高光谱和数字图像特征指数的受渍冬小麦 SPAD 估算[J]. 应用生态学报, 2021, 32(3):959－966.
GAO Xiaomei, LI Yanli, LU Bilin, et al. Estimation of SPAD value in waterlogged winter wheat based on characteristic indices of hyperspectral and digital image[J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2021,32(3):959－966. (in Chinese)
[13] YU Shuan, FAN Jiangchuan, LU Xianju, et al. Deep learning models based on hyperspectral data and time-series phenotypes for predicting quality attributes in lettuces under water stress[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2023, 211: 108034.
[14] HE Tianyu, SHI Yabo, CUI Enzhong, et al. Rapid detection of multi-indicator components of classical famous formula Zhuru Decoction concentration process based on fusion CNN－LSTM hybrid model with the near-infrared spectrum[J]. Microchemical Journal, 2023,195:109438.
[15] XIA Haoran, ZHU Rong, YUAN Hongfang, et al. Rapid quantitative analysis of cotton-polyester blended fabrics using near-infrared spectroscopy combined with CNN－LSTM[J]. Microchemical Journal, 2024,200:110391.
[16] 祁浩, 庄坚, 庄重, 等. 不同种类蔬菜重金属富集特征及健康风险[J]. 环境科学, 2023,44(6):3600－3608.
QI Hao, ZHUANG Jian, ZHUANG Zhong, et al. Enrichment characteristics of heavy metals and health risk in different vegetable[J]. Environmental Science, 2023,44(6):3600－3608. (in Chinese)
[17] 王诗琪, 孙约兵, 黄青青, 等. 纳米氧化铜对镉胁迫下小油菜生理生化和重金属累积的影响[J]. 环境科学, 2023, 44(9):5204－5213.
WANG Shiqi, SUN Yuebing, HUANG Qingqing, et al. Effects of nano-copper oxide on physiobiochemical properties of brassica chinensis l. and its heavy metal accumulation under cadmium stress[J]. Environmental Science, 2023,44(9):5204－5213. (in Chinese)
[18] 李岚涛, 申凤敏, 马文连, 等. 镉胁迫下菊苣叶片原位高光谱响应特征与定量监测研究[J]. 农业机械学报, 2020, 51(3):146－155.
LI Lantao, SHEN Fengmin, MA Wenlian, et al. Response characteristics and quantitative monitoring models analyzed using in situ leaf hyperspectra under different Cd stress conditions[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2020, 51(3):146－155. (in Chinese)
[19] YEH Yuhui, CHUANG Weichang, LIAO Juiyu, et al. Strawberry foliar anthracnose assessment by hyperspectral imaging[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2016, 122:1－9.
[20] YU Shuan, FAN Jiangchuan, LU Xianju, et al. Deep learning models based on hyperspectral data and time-series phenotypes for predicting quality attributes in lettuces under water stress[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2023,211: 108034.
[21] 唐子竣, 张威, 向友珍, 等. 基于高光谱和机器学习模型的冬小麦土壤含水率监测研究[J]. 农业机械学报, 2023, 54(12):350－358.
TANG Zijun, ZHANG Wei, XIANG Youzhen, et al. Monitoring of soil moisture content of winter wheat based on hyperspectral and machine learning models[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2023,54(12):350－358. (in Chinese)
[22] LI Yiting, YOU Sicong, WU Shasha, et al. Exploring the limit of detection on early implicit bruised 'Korla' fragrant pears using hyperspectral imaging features and spectral variables[J]. Postharvest Biology and Technology, 2024,208:112668.
[23] 李鸿强, 孙红, 李民赞. 基于光谱结构特性的马铃薯干腐和疮痂病识别方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(8):2471－2476.
LI Hongqiang, SUN Hong, LI Minzan. Study on Identification of common diseases in potato storage period based on spectral structure[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022,42(8):2471－2476. (in Chinese)
[24] 张俊逸, 高德华, 宋迪, 等. PROSPECT 模型的特征波长优化与作物叶绿素含量检测[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(5):1514－1521.
ZHANG Junyi, GAO Dehua, SONG Di, et al. Wavelengths optimization and chlorophyll content detection based on prospect model[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022,42(5):1514－1521. (in Chinese)
[25] FENG Shuai, ZHAO Dongxue, GUAN Qiang, et al. A deep convolutional neural network-based wavelength selection method for spectral characteristics of rice blast disease[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2022,199:107199.
[26] LI Hongdong, LIANG Yizeng, XU Qingsong, et al. Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration[J]. Analytica Chimica Acta, 2009,648(1):77－84.
[27] 杨可明, 何家乐, 李艳茹, 等. 玉米生长铜铅污染信息光谱辨别研究[J]. 农业机械学报, 2023,54(9):254－259.

YANG Keming, HE Jiale, LI Yanru, et al. Spectral identification of copper and lead pollution information during corn growth [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2023,54(9):254 – 259. (in Chinese)

[28] ZHANG Shanzhe, YIN Yingqian, LIU Cuiling, et al. Discrimination of wheat flour grade based on PSO – SVM of hyperspectral technique[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2023,302:123050.

[29] WANG Zheli, FAN Shuxiang, AN Ting, et al. Detection of insect-damaged maize seed using hyperspectral imaging and hybrid 1D-CNN-BILSTM model[J]. Infrared Physics & Technology, 2024,137:105208.

[30] WU Xijun, DU Zherui, MA Renqi, et al. Qualitative and quantitative studies of phthalates in extra virgin olive oil (EVOO) by surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) combined with long short term memory (LSTM) neural network[J]. Food Chemistry, 2024,433:137300.

[31] GITELSON A, MERZLYAK N. Signature analysis of leaf reflectance spectra: algorithm development for remote sensing of chlorophyl[J]. Journal of Plant Physiology, 1996,148(3):494 – 500.

[32] ZHOU Xin, ZHAO Chunjiang, SUN Jun, et al. Detection of lead content in oilseed rape leaves and roots based on deep transfer learning and hyperspectral imaging technology[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2023,290:122288.

[33] 杨可明, 张文文, 程龙, 等. 玉米叶片重金属铜污染的 ED – T – DSGA 光谱分析模型[J]. 农业机械学报, 2017, 48(4):154 – 159.
YANG Keming, ZHANG Wenwen, CHENG Long, et al. ED – T – DSGA spectral analysis model on monitoring heavy metal copper pollution of corn leaves[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017,48(4):154 – 159. (in Chinese)

[34] 张伏,张方圆,崔夏华,等. 高光谱成像结合 PSO – SVM 的银杏果种类鉴别[J]. 光谱学与光谱谱分析, 2024,44(3): 859 – 864.
ZHANG Fu, ZHANG Fangyuan, CUI Xiahua, et al. Identification of ginkgo fruit species by hyperspectral image combined with PSO – SVM[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2024,44(3):859 – 864. (in Chinese)

(上接第 433 页)

[18] 李琪飞,张震,李仁年,等. 带 MGV 装置水泵水轮机无叶区压力脉动特性[J]. 排灌机械工程学报,2018,36(12):1270 – 1275.
LI Qifei, ZHANG Zhen, LI Rennian, et al. Pressure fluctuation in vaneless space of pump turbine with misaligned guide vanes [J]. Journal of Drainage and Irrigation Machinery Engineering, 2018, 36(12): 1270 – 1275. (in Chinese)

[19] 张自超,李延频,陈德新. 水泵水轮机压力脉动传播特性试验研究[J]. 农业机械学报,2022,53(7):171 – 178.
ZHANG Zichao, LI Yanpin, CHEN Dexin. Experimental investigation on transmission characteristics of pressure fluctuation in pump-turbine[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2022,53(7):171 – 178. (in Chinese)

[20] LI D, ZHU Y, LIN S, et al. Cavitation effects on pressure fluctuation in pump-turbine hump region[J]. Journal of Energy Storage, 2022, 47: 103936.

[21] 王福军. 水泵与泵站流动分析方法[M]. 北京:中国水利水电出版社,2020.

[22] JONES W P, LAUNDER B E. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence[J]. Int. J. Heat Mass Transfer, 1972, 15(2):301 – 314.

[23] 邓锐,高子予,李裕龙,等. 湍流模型的研究现状与最新进展(英文)[J]. 船舶力学,2019,23(3):360 – 376.
DENG Rui,GAO Ziyu, LI Yulong,et al. Development and research status of turbulence model[J]. Journal of Ship Mechanics, 2019,23(3):360 – 376. (in Chinese)

[24] BINAMA M, KAN K, CHEN H X, et al. Flow instability transferability characteristics within a reversible pump turbine (RPT) under large guide vane opening (GVO)[J]. Renewable Energy, 2021, 179: 285 – 307.

[25] 谢文祥,张自超,潘璇,等. 水泵水轮机无叶区压力脉动特性试验研究[J]. 水电能源科学,2022,40(8):161 – 164.
XIE Wenxiang,ZHANG Zichao, PAN Xuan,et al. Experimental study on pressure fluctuation in vaneless region of pump turbine under turbine operation condition[J]. Water Resources and Power, 2022,40(8):161 – 164. (in Chinese)

[26] 倪晋兵,李国凤,郑津生,等. 降低变速水泵水轮机无叶区压力脉动的活动导叶优化研究[J]. 水电与抽水蓄能,2023, 9(4):1 – 9,19.