生菜叶片含水率光谱特征模型研究*

毛罕平 高洪燕 张晓东

(江苏大学现代农业装备与技术省部共建教育部重点实验室,镇江 212013)

【摘要】 利用便携式光谱分析仪测量生菜叶片的光谱反射率,并对其进行对数变换。通过变量筛选得到 725、1075、1272、1450、1640和1958nm波长处的光谱反射率与生菜干基含水率呈极显著相关。为克服多重共线 性影响,分别采用多元线性回归分析、主成分回归分析、偏最小二乘回归分析及偏最小二乘-人工神经网络回归分 析4种方法建立了叶片干基含水率的定量分析模型。结果表明4种算法预测值与实测值相关系数分别为0.4850、 0.8992、0.9174和0.9470,偏最小二乘-人工神经网络模型的预测能力优于其他模型。

关键词:水分胁迫 生菜 叶片 含水率 光谱特征 数学模型 中图分类号:0657.33:0945.17 文献标识码:A 文章编号:1000-1298(2011)05-0166-05

Spectral Characteristics Model of Lettuce Leaves' Water Content

Mao Hanping Gao Hongyan Zhang Xiaodong

(Key Laboratory of Modern Agricultural Equipment and Technology, Ministry of Education & Jiangsu Province, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

Abstract

Spectral reflectance of lettuce leaves in growing status was measured using the ASD FieldSpec3, and logarithmic transformation was also obtained. By variable selection, it was found that the linear relationships between dry-basis moisture content of lettuce leaves and spectral reflectance data in 725 nm, 1 075 nm, 1 272 nm, 1 450 nm, 1 640 nm and 1 958 nm were very notable. In order to overcome the impact of multicollinearity, quantitative analysis models of dry-blade's moisture content have been established respectively with methods of multiple linear regression analysis, principal component regression analysis, partial least squares regression analysis and PLS-neural network analysis. The result showed that the correlation coefficient R of measured and predictive values from the four algorithms were 0. 485 0, 0. 899 2, 0. 917 4 and 0. 947 0 respectively, which showed better predictive performance of the model based on PLS-neural network analysis than the others.

Key words Water stress, Lettuce, Leaves, Water content, Spectral characteristics, Mathematical model

引言

水分亏缺将影响作物的生理特征,使其光合速 率降低,直接影响作物产量。生菜的叶片多、叶面积 大、蒸腾量大、耗水多、不耐旱;但是水分过多且温度 高时,又容易引起徒长。叶球形成及球体迅速增大 时期,是水分管理的关键时期,必须满足叶片继续分 化和扩张的需要以及叶球的生长和膨大,但水分供 应要均衡,避免出现裂球现象。 光谱技术具有分析速度快、精度高、结果稳定和 易于实现在线分析等优点^[1]。光谱数据在作物生 理参数诊断中所起的作用逐渐受到重视。Carter^[2] 研究发现,在近红外波段 950~970 nm 范围内,对应 一个弱的水吸收峰,并证明该吸收峰可以监测植物 含水率。Dobrowski 等^[3]发现,690 nm 和 740 nm 处 的冠层光谱能够反映植株的水分胁迫状态。吉海彦 等^[4]在1400~1600 nm 范围内,测量冬小麦叶片的 反射光谱,用偏最小二乘法建立了含水率与反射光

收稿日期: 2010-07-16 修回日期: 2010-08-30

^{*} 国家高技术研究发展计划(863 计划)资助项目(2008AA10Z204)、国家自然科学基金资助项目(61075036)、江苏省农业装备与智能化 高技术研究重点实验室项目(BM2009703)和江苏省"333 人才工程"科研项目

作者简介:毛罕平,教授,博士生导师,主要从事现代设施农业研究,E-mail: maohp@ujs.edu.cn

谱的模型。然而,对于生菜叶片含水率的光谱反射 特征及定量模型的研究至今未见报道。本文通过获 得不同水分胁迫下莲座期到结球期生菜叶片的光谱 曲线,提取特征波长,探寻最优的定量分析模型,为 生菜含水率快速检测提供理论依据。

1 材料与方法

1.1 仪器设备

光谱测量设备采用美国 ASD 公司生产的 FieldSpec3 型便携式光谱分析仪。该仪器光谱测量 范围 350~2500 nm;在 350~1000 nm 光谱区采样 间隔为1.4 nm,分辨率为3 nm;在1000~2500 nm 光谱区采样间隔为2 nm,分辨率为10 nm。叶片质 量采用高精度分析天平称取,精度为0.1 mg。

1.2 样本培育与采集

实验地点为江苏大学现代农业装备与技术省部 共建教育部重点实验室的 Venlo 型温室,实验品种 为意大利全年耐抽苔生菜,按山崎配方进行营养液 管理。将样本分为4个水平进行处理,其中4个水 平依次为(发棵期浇水量相同):第1组(W1)在整 个生长期都保证充足的水分供应;第2(W2)、3 (W3)和4(W4)组分别灌溉含水率为标准配方 75%、50%和25%的浓缩液。在每个水平各摘取20 片叶片,共80片,其中60片用于模型建立,其余用 于模型验证。所取叶片要为同一层级,这主要是考 虑到不同层级的叶片,其含水率差别较大且对光谱 反射率贡献不同。

1.3 含水率测定

将鲜叶分别装入保鲜袋带回,在恒温 60 ℃干燥 箱中进行 12 h 的干燥处理,分别测量各叶片干质 量。由于鲜叶片的质量远大于其干燥后质量,所以 为了突出它们之间的差异,文中采用干基含水率,公 式为

$$w = \frac{m_1 - m_2}{m_2} \times 100\%$$

式中 m_1, m_2 ——测试样本的鲜质量、干质量, mg

1.4 光谱数据的获取

将叶片放置于黑色绒布上,测量时将光谱探头 置于工作台上方5 cm 处,垂直于被测物,设定视场 为25°。测量叶片之前先测量标准反射板,以消除 环境因素(主要是光强)引起的系统误差,每片叶片 测量3次,取平均值作为最终测量结果。

2 结果与分析

2.1 样本培育结果

不同水分处理下生菜的平均干基含水率分

别为2368.611%、1855.565%、1645.941%和 1327.187%,可看出4个水平间有明显差异。

2.2 生菜叶片含水率光谱预处理

从不同水分胁迫下生菜叶片的光谱反射率 (图1)可知:在可见光区域,随叶片含水率上升光谱 反射率逐渐减弱,并在红边区域、1450 nm 左右及 1907~1978 nm 3 处有明显的吸收谷。



为了降低基线漂移、光散射、高频随机噪声等影响,并在敏感波段表现出明显的差异,本文将光谱反射率 R_{λ} 数据进行 $lg(1/R_{\lambda})$ 变换,变换后的曲线如图 2 所示。



变换后的对数光谱曲线与干基含水率存在较强的相关性,如图 3 所示,最大值在 1 075 nm 处 R^2 达 0.794。这意味着经过 lg($1/R_{\lambda}$)变换后,某些波长对生菜叶片水分胁迫具有较强的预测能力。进行相关性分析的同时,得出每两个光谱数据间存在很高的相关性,相关系数更高达 0.94 以上,说明存在严重的多重共线性。

2.3 特征波长的提取

相关分析法虽然可以直观地得到生菜含水率的 敏感光谱波段,但由于要对数以千计的光谱数据进 行处理,分析过程费时、费力。为了实现对光谱特征 波长的快速提取,保证特征波长提取的针对性和有 效性,减少噪声影响,提高运算效率和模型的稳定 性,通过实验得到的生菜水分胁迫对数光谱反射特 征,并结合课题组前期研究基础,及参考美国农业部



moisture content of the lettuce leaves

(USDA)研究人员得出的主要生物化学组分的光谱 吸收特征^[5],本文对红边区域及近红外区域中一些 波段进行逐步回归剔除波长。基本思路是:被选变 量所对应的 F 统计量大于指定的"纳入标准",则进 入;反之,则剔除。变量选取的一般原则是在回归模 型中保留对因变量影响最显著的变量,并保证变量 的个数少和质量精^[6]。波长选取以 F≥3.63 进入, F≤2.67 移除,并使每个区间变量数小于 2 个,选取 的特征波长如表 1 所示。

Tab.1 Characteristic wavelength extracted by stepwise regression method

波段/nm	入选波长/mm	<i>F</i> 值	R^2	校正 R ²
680 ~ 750	725	43.431	0.707	0. 691
$950 \sim 1\ 080$	1 075	69.443	0.794	0.783
$120\sim 1\ 290$	1 272	45.805	0.718	0.702
140 ~1 490	1 450	39.748	0.528	0.492
164 ~1 730	1 640	20. 149	0.703	0.668
189 ~1 980	1 958	5.947	0.412	0.342

2.4 回归方法的优选

为了建立最优生菜含水率预测模型,本文对 4种生物统计模型进行分析对比,以优选出预测能 力强的预测模型。

2.4.1 对数光谱的多元线性回归分析

利用 SPSS 软件对所提取出的 6 个变量与干基 含水率进行回归,得到各自变量间的相关系数较高, 可达 0. 670,其病态指数(condition index)大多大于 15,叶片干基含水率预测值与实测值的相关系数为 0. 485 0,模型预测精度较差,故此方法未从根本上 解决多重共线性问题,拟合方程未被采用。

2.4.2 主成分回归分析

主成分回归分析^[7](PCR)主要是对相互有关的一组数据,通过正交变换使其变为相互无关的变量,即主成分。应用这种个方法时,首先对各变量进行标准化,将标准化因变量与主成分得分进行 OLS回归,得到主成分回归系数;然后,把主成分回归系数转化为标准化因变量对标准化自变量回归方程的

系数;最后,把该系数转化为原因变量对原自变量的 回归系数,通过上述变换,最终得到基于原变量的主 成分回归模型。对提取的波长进行主成分分析可 知:当主成分数为2,贡献率大于0.85,得到基于 6个入选波长的主成分回归模型为

Y = 4 540. 69 - 2 686. 86*x*₁ - 2 894. 81*x*₂ - 2 590. 04*x*₃ + 343. 02*x*₄ - 977. 70*x*₅ + 899. 54*x*₆ 式中 *x_i*——波长 *i* 处的光谱反射率对数值

y-----生菜叶片干基含水率

利用样本采集时同时获取的 20 个样本的光谱数据,对所建立的模型进行检验,如图 4 所示,结果表明:叶片干基含水率预测值与实测值的相关系数为 0.899 2,建立的回归直线方程为



2.4.3 偏最小二乘回归分析

为消除多重相关性的影响,利用所得的6个特征波长进行偏最小二乘相关分析(PLS)。PLS是基于成分提取的思想,可解决变量间多重相关性的问题^[8]。本文利用 SIMCA – P 软件进行处理,得出分别选择不同个数主成分时的交叉有效性及累积解释能力,如表2所示。

表 2 偏最小二乘回归分析主成分数选择 Tab. 2 Selection of PLS analyses principal component number

会粉		主成分数	
<i>参</i> 奴	1	2	3
交叉有效性	0.720	0. 543	0.752
累积解释能力	0.806	0. 938	0.992

当提取 3 个 PLS 主成分时,对干基含水率的累 积解释能力达到 0.992;交叉有效性是 0.752;并得 出 1 958 nm 对模型贡献较小。利用所得的 3 个 PLS 主成分与干基含水率作相关分析,最终得到基于原 变量 x_i的 PLS 回归模型为

 $Y = 4557.25 + 2487.83x_1 - 5167.80x_2 -$

2 737. 38 x_3 + 966. 04 x_4 + 602. 61 x_5 + 393. 21 x_6

利用样本采集时同时获取的20个样本的光谱数据,对所建立的模型进行检验,如图5所示,结果表明:叶片干基含水率预测值与实测值的相关系数为0.9174,建立的回归直线方程为



verification

2.4.4 偏最小二乘-人工神经网络回归分析

人工神经网络(ANN)被认为可以揭示样本数 据间存在的非线性关系,并且具有良好的自适应性、 自组织性及很强的学习、联想、容错和抗干扰能力, 在光谱分析中得到了广泛的应用^[9]。因此,本文探 索基于偏最小二乘-人工神经网络回归法的生菜叶 片干基含水率与其光谱特性间的关系。选择提取出 的6个敏感波长作为3层BP网络输入层中的神经 元输入;隐含层为6;输出层为1,建模样品采集波长 通道为6个。误差指数和训练步长分别设置为 0.001和0.05。当训练次数到达3807次时成功,此 时提取的主成分数为3,贡献率大于0.85。

利用样本采集时同时获取的 20 个测试样本的 光谱数据,对所建立的模型进行检验,如图 6 所示, 结果表明:叶片干基含水率预测值与实测值的相关 系数为 0.947 0,建立的回归直线方程为

Y = 0.9535X + 84.3279

2.5 多种回归方法的比较分析

由以上分析可知 PLS 比 PCR 多提取出一个主成分,说明作 PCR 分析时,有一个主成分未通过检验进而被引入模型。因为 PCR 及 PLS 都是从众多的光谱变量中提取出少数几个主成分,这些主成分



都能很好地代表和解释原始光谱,并均可以克服多 重共线性,但同时 PLS 能将提取的主成分与生菜的 干基含水率进行相关性分析。由表2 可知 PLS 提取 3 个主成分对生菜叶片干基含水率的累积解释能力 为0.992,明显高于提取2 个主成分的0.938,证明 了未入选的主成分对模型的影响较大。PLS 吸收 了 PCR 提取成分,降低维数的优良特点,在实际系 统中的可解释性也更强,故 PLS 模型验证的精度 比 PCR 稍高。PLS – ANN 分析方法是利用 PLS 提 取出的主成分,作为 ANN 的输入。相对于其他的 回归分析, ANN 能够较好地处理多个敏感波长与 干基含水率的非线性问题。因此 PLS 和 ANN 结 合,可较好地同时处理自变量间的高度相关和非 线性问题。

3 结论

(1)利用便携式光谱分析仪测量生菜叶片的反射光谱,对其进行对数变换,并对全波段进行相关性分析,在1075 nm处可获得满意的相关系数,利用逐步回归筛选出6个特征波长。

(2)由于存在明显的多重共线性,分别用多元 线性回归分析、主成分回归分析、偏最小二乘回归分 析和偏最小二乘-人工神经网络回归分析4种方法 建立生菜叶水分的定量分析模型,建模结果预测值 与实测值相关系数分别为0.4850、0.8992、0.9174 和0.9470,表明偏最小二乘-人工神经网络方法模 型的预测能力优于其他模型。

参考文献

1 陈斌,崔广,金尚忠,等. 近红外光谱在快速检测棉制品中含棉量的应用[J]. 江苏大学学报:自然科学版,2007, 28(3):185~188.

Chen Bin, Cui Guang, Jin Shangzhong, et al. Application of near infrared spectra in rapid inspection of cotton contents[J]. Journal of Jiangsu University: Natural Science Edition, 2007, 28(3):185 ~ 188. (in Chinese)

- 2 Carter G A. Primary and secondary effects of water content on the spectral reflectance of leaves [J]. Am. J. Bot., 1991, 78(7):916~924.
- 3 Dobrowski S Z, Pushnik J C, Zarco-Tejada P J, et al. Simple reflectance indices track heat and water stress-induced changes in steady state chlorophyll fluorescence at the canopy scale [J]. Remote Sensing of Environment, 2005, 97(3):403 ~414.

4	吉海彦,王鹏新,严泰来. 冬小麦活体叶片叶绿素和水分含量与反射光谱的模型建立[J]. 光谱学与光谱分析, 2007,
	27(3):514~516.
	Ji Haiyan, Wang Pengxin, Yan Tailai. Estimations of chlorophyll and water contents in live leaf of winter wheat with
	reflectance spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(3):514~516. (in Chinese)
5	浦瑞良,宫鹏. 高光谱遥感及其应用[M]. 北京:高等教育出版社,2000.

6 郑咏梅,张军,陈星旦,等. 基于逐步回归法的近红外光谱信息提取及模型的研究[J]. 光谱学与光谱分析,2004, 24(6):675~678.

Zheng Yongmei, Zhang Jun, Chen Xingdan, et al. Research on model and wave and wavelength selection of near infrared spectral information [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2004, 24(6):675~678. (in Chinese)

- 7 张淑娟,王凤花,张海红,等. 鲜枣品种和可溶性固形物含量近红外光谱检测[J]. 农业机械学报,2009,40(4):139~142. Zhang Shujuan, Wang Fenghua, Zhang Haihong, et al. Detection of the fresh jujube varieties and SSC by NIR spectroscopy [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2009, 40(4):139~142. (in Chinese)
- 8 夏俊芳,李培武,李小昱,等. 不同预处理对近红外光谱检测脐橙 VC 含量的影响[J]. 农业机械学报,2007,38(6):107~111. Xia Junfang, Li Peiwu, Li Xiaoyu, et al. Effect of different pretreatment method of nondestructive measure vitamin C content of umbilical orange with near-infrared spectroscopy [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2007, 38(6):107~111. (in Chinese)
- 9 张喜杰,李民赞. 基于反射光谱的温室黄瓜叶片磷素含量分析与预测[J]. 光谱学与光谱分析,2008,28(10):2404~2408. Zhang Xijie, Li Minzan. Analysis and estimation of the phosphorus content in cucumber leaf in greenhouse by spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(10): 2404~2408. (in Chinese)

(上接第135页)

量差异随着干燥进程而逐渐减小,且与整体连续开 启方式相比,微波交替间歇开启方式能明显提高料 盘之间的干燥均匀性。 (2)干燥过程中,同一料盘呈现周边物料干燥 速度快、中心部位干燥速度慢的趋势,与整体连续开 启方式相比,微波交替间歇开启方式可明显改善同 一料盘的干燥均匀性。

参考文献

- 曹有福,韩清华,李树君,等. 微波真空冷冻干燥装置设计与试验[J]. 农业机械学报,2010,41(7):105~108.
 Cao Youfu, Han Qinghua, Li Shujun, et al. Design and experiment on microwave vacuum free drying equipment [J].
 Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2010, 41(7): 105~108. (in Chinese)
- 2 段续,张慜,朱文学. 食品微波冷冻干燥技术的研究进展[J]. 化工机械,2009(3):178~184. Duan Xu, Zhang Min, Zhu Wenxue. Research progress of microwave freeze drying technique for foods [J]. Chemical Engineering & Machinery, 2009(3):178~184. (in Chinese)
- 3 胡志超,陈有庆,谢焕雄,等.微波真空冷冻干燥技术研究及应用现状[J].农机化研究,2009,31(9):6~9. Hu Zhichao, Chen Youqing, Xie Huanxiong, et al. Present situation of research and application for microwave vacuum freeze drying technology [J]. Journal of Agricultural Mechanization Research, 2009, 31(9):6~9. (in Chinese)
- 4 韩清华,李树君,马季威,等. 连续式微波真空干燥设备的研究[J]. 农业机械学报,2006,37(8):136~139.
 Han Qinghua, Li Shujun, Ma Jiwei, et al. Study on continuous microwave vacuum drying equipment [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2006, 37(8):136~139. (in Chinese)
- 5 徐小东,崔政伟.农产品和食品干燥技术及设备的现状和发展[J].农业机械学报,2005,36(12):171~174.
- 6 王瑞芳,李占勇.水平转盘与转鼓微波干燥均匀性的实验研究[J].天津科技大学学报,2009,24(4):58~61.
 Wang Ruifang, Li Zhanyong. Experimental study on microwave drying uniformity in rotating turntable and rotary drum [J].
 Journal of Tianjin University of Science & Technology, 2009, 24(4):58~61. (in Chinese)
- 7 施明恒,祝涛,王朝晖. 蜂王浆微波冷冻干燥特性的实验研究[J]. 东南大学学报,1998,28(11):1~6. Shi Mingheng, Zhu Tao, Wang Zhaohui. Experimental investigation on the drying characteristics of royal jelly in microwave freeze drying [J]. Journal of Southeast University, 1998, 28(11):1~6. (in Chinese)
- 8 王朝晖. 微波冷冻干燥过程的传热传质机理[D]. 南京:东南大学,1996. Wang Zhaohui. Heat and mass transfer during microwave freeze drying [D]. Nanjing: Southeast University, 1996. (in Chinese)