doi:10.6041/j.issn.1000-1298.2019.S0.031

# 基于双标图差异分析的离子选择电极营养液建模研究

张 淼1,2 阳清亮1 潘林沛1

(1. 中国农业大学现代精细农业系统集成研究教育部重点实验室,北京 100083;

2. 中国农业大学农业农村部农业信息获取技术重点实验室, 北京 100083)

**摘要:**基于双标图法量化表征了山崎生菜、山崎草莓、山崎番茄、康奈尔生菜、康奈尔草莓 5 种营养液配方以及NO<sub>3</sub>-N、PO<sub>4</sub>-P、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>、NH<sub>4</sub>-N、SO<sub>4</sub>-S 7 种养分元素间的差异性。研究表明,NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>在差异性及含量比例皆排在前 3 位,同时山崎系列营养液配方与康奈尔系列营养液配方各自具有高度相关性。通过分别建立统一的建模样本集合进行支持向量机(SVM)模型训练,实现了对 NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>的准确测量,相比于未进行差异性分析为输入的 SVM 预测模型,在山崎配方环境下,平均相对误差分别从 7.66%、11.88%、11.55%减小至 6.41%、6.14%、10.20%;在康奈尔配方环境下,平均相对误差则分别降低了 1.79、2.98、1.13 个百分点。基于双标图营养液配方分析方法可为无土栽培营养液电极法监测提供参考。

关键词:双标图法;营养液差异;离子选择电极;预测模型;支持向量机 中图分类号:S24 文献标识码:A 文章编号:1000-1298(2019)S0-0200-07

# ISE Modeling of Hydroponic Formula Based on Biplot Method Difference Analysis

ZHANG Miao<sup>1,2</sup> YANG Qingliang<sup>1</sup> PAN Linpei<sup>1</sup>

(1. Key Laboratory of Modern Precision Agriculture System Integration Research, Ministry of Education,

China Agricultural University, Beijing 100083, China

2. Key Laboratory of Agricultural Information Acquisition Technology, Ministry of Agriculture and Rural Affairs,

China Agricultural University, Beijing 100083, China)

Abstract: A nutrient solution recipe analysis method was developed based on biplot method. The difference of five recipes containing seven nutrient elements, including NO<sub>3</sub>-N, K<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, PO<sub>4</sub>-P, NH<sub>4</sub>-N, SO<sub>4</sub>-S was discussed. The result revealed NO<sub>3</sub>-N, K<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup> got a better performance than other elements in terms of the difference and content. Meanwhile, Yamazaki nutrient solution recipe and Cornell nutrient solution recipe independently hold a high correlation, respectively. A unified modeling samples collection training support vector machine (SVM) model was established for the detection of NO<sub>3</sub>-N, K<sup>+</sup> and Ca<sup>2+</sup>. Compared with the prediction model without difference analysis as input, the mean relative error of NO<sub>3</sub>-N, K<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup> was decreased from 7.66%, 11.88% and 11.55% to 6.41%, 6.14% and 10.20%, respectively, in the Yamazaki recipe environment. While in the Cornell formula environment, the mean relative error was reduced by 1.79 percentage points, 2.98 percentage points and 1.13 percentage points, respectively.

Key words: biplot method; hydroponic formula difference; ion-selective electrode; prediction model; support vector machine

### 0 引言

无土栽培是设施蔬菜种植的一种重要方式,可 人工调控植物根系环境,有望缓解设施蔬菜的连作 障碍、资源浪费、环境污染等困扰<sup>[1-2]</sup>,满足我国农 业结构调整的需要,在解决人口爆炸、气候变化和环 境退化等问题上展现良好的潜力<sup>[3-4]</sup>。

近几十年来,在水培栽培中,电导率(EC)和酸 碱度(pH值)被用于管理水培养分,且该方法技术 上成熟<sup>[5-8]</sup>,但其主要问题在于无法提供各营养离

收稿日期: 2019-04-30 修回日期: 2019-05-30

**基金项目:**国家重点研发计划项目(2016YFD0800900-2016YFD0800907、2016YFD0700300-2016YFD0700304)和农业农村部农业物联网 技术集成与应用重点实验室开放项目(2016KL03)

作者简介:张淼(1982—),女,副教授,主要从事基于电化学原理的土壤养分传感技术研究,E-mail: zhangmiao@ cau. edu. cn

子的具体浓度信息,以致无法根据作物的实际需求 实时调整对应的养分浓度<sup>[6]</sup>。部分营养成分的积 累带来的后果是频繁更换营养液,以达到营养成分 的相对平衡<sup>[9]</sup>。准确的养分监测是水培根系环境 供需平衡的基础<sup>[10]</sup>。由于成本、时间消耗和实验室 操作的复杂性,常规的测试方法受到很大的限 制<sup>[11]</sup>。基于离子选择电极(ISE)的水培营养物监 测,由于其检测范围广、集成度高,在水培营养物监 测中的应用越来越受到重视[12-14]。离子选择电极 作为一种电位型传感器,需要建立传感电势信息与 目标离子浓度之间的计量模型,以实现对特定目标 离子的检测。ISE 在检测过程中易受干扰离子影 响。营养液中离子组分复杂,多种离子共存,在线检 测时无法以化学方法阻隔于扰离子作用。因此,影 响了 ISE 对营养液中目标离子的检测精度。通过建 立合适的计量模型可提高检测的准确性。BEEBE 等<sup>[15]</sup>基于 Nernst 方程建立检测电势与离子浓度多 元非线性回归模型,尝试用投影追踪回归(Projection pursuit regression)算法确定模型参数,标准混合溶 液中钾、钠离子含量预测相对误差小于5%和12%。 王永等[16]结合最小二乘法中的"逐步拟合法"尝试 建立离子选择电极测量电势、被测溶液温度与温室 营养液养分(硝态氮、钾、钙)含量之间的三维数学 模型,预测的钾离子浓度最大相对偏差小于等于 7%。李彧文等[17]结合单片机系统,基于离子选择 电极采用 Nernst 方程同时检测标准混合溶液中硝 酸根、钾和钠离子浓度,各离子含量检测结果的平均 相对误差分别为 5.54%、6.01% 和 5.17%。人工智 能机器学习方法自21世纪初以来不断发展,由于其 支持多输入多输出,常被用于多变量预测问题。 WANG 等<sup>[18]</sup> 基于离子选择电极阵列,采用 BP -ANN 同时预测镉、铅、铜离子质量浓度,预测结果相 对误差均小于9%。支持向量机模型作为一种带相 关训练算法的监督计算学习模型,可实现对给定输 入数据集分配两个可能的归属类别,具有良好的泛 化能力<sup>[19-20]</sup>。REN 等<sup>[21]</sup>将支持向量机(Support vector machine,SVM)应用于土壤硝态氮和钾离子的 测量,在响应面法(Response surface method, RSM) 优化之后,得到 NO<sub>3</sub>-N 和 K<sup>+</sup> 的绝对误差分别为 1.47 mg/L 和 2.36 mg/L。

根据植物的生长生理情况,不同作物的不同生 长阶段对营养元素的需求各不相同,营养液配方需 根据作物生长需求设计,其养分组成差异较大。同 时,电极传感信息除与目标检测离子浓度相关,也受 到共存离子与溶液环境影响<sup>[22]</sup>。因此,分析营养液 样本,有助于建立预测模型,提高检测准确性。双标 图作为一种可视化数据分析方法,已广泛用于农学、 生物学、环境科学等领域<sup>[23-26]</sup>,可尝试用于营养液 配方间的差异性分析,以探究不同养分元素在各配 方中的组成差异及不同配方之间的关联。

本文开展基于双标图的营养液配方差异分析, 建立理论依据及实验设计参考,为 SVM 的电极法预 测模型确定输入变量,以提高营养液目标离子的检 测准确性。

## 1 材料与方法

## 1.1 双标图样本差异分析

双标图作为一种可视化的数据分析方法,用于 营养液配方间的差异性分析,其绘图原理如下

设有矩阵

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$
(1)

X矩阵中的行 $[x_{i1} \ x_{i2} \ \cdots \ x_{ip}]$ 表示样本,即第i个样本的对应值, $i = 1, 2, \cdots, n$ ;矩阵中的列 $[x_{1j} \ x_{2j}]$ 

… x<sub>nj</sub>]表示属性,即第 j 个属性的对应值, j = 1, 2,…, p。在本研究的配方 – 养分分析中行对应营养 液配方,列对应养分元素;在养分-配方分析中行对 应养分元素,列对应营养液配方。以矩阵 X 为基 础,绘制双标图的主要步骤包括矩阵中心化、奇异值 分解以及坐标获取。

(1)中心化

设Z为中心化后矩阵

$$\mathbf{Z} = \mathbf{Z}_{n \times p} = \begin{bmatrix} z_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_1 & z_2 & \cdots & z_p \end{bmatrix}$$
(2)

其中  $z_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_j$  (*i*=1,2,...,*n*) (3)

$$z_{j} = [z_{1j} \ z_{2j} \ \cdots \ z_{nj}]^{\mathrm{T}} \ (j = 1, 2, \cdots, p) \ (4)$$

$$\bar{x}_{j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}$$
 (5)

(2)奇异值分解

V

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

其中 
$$\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_{ij}]_{n \times r} = [\boldsymbol{u}_1 \quad \boldsymbol{u}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{u}_r]$$
  
(*i*=1,2,…,*n*; *j*=1,2,…,*r*) (7)

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_{ij} \end{bmatrix}_{n \times r} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_r \end{bmatrix}$$

$$u = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, r)$$
(8)

$$\Gamma = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_r) \tag{9}$$

式中 
$$\lambda_r$$
——矩阵  $ZZ^T$  和  $Z^TZ$  的非零特征值

$$u_j$$
——矩阵  $ZZ^T$  的单位正交向量

$$v_j$$
——Z<sup>T</sup>Z 的单位正交向量

*Γ*——右奇异正交矩阵

(3)坐标获取

经过中心化及奇异值分解后,矩阵 X 中第 n 行 对应的点坐标及第 p 列对应的向量坐标分别为  $(\lambda_1^{\alpha}u_{i1},\lambda_2^{\alpha}u_{i2},\dots,\lambda_r^{\alpha}u_{ir}), i = 1,2,\dots,n; (\lambda_1^{\alpha}v_{j1},\lambda_2^{\alpha}v_{j2},\dots,\lambda_r^{\alpha}v_{jr}), j = 1,2,\dots,p_{\circ}$  承取值通常为 0,0.5,1,本 研究中  $\alpha = 0_{\circ}$ 

以矩阵信息损失最小为前提,根据点与向量的 坐标信息将样本及属性信息表示在一张二维图上, 如图1所示。



图1中,向量A、B、C、D表示数据中的列信息, 即样本对应的属性信息;各点表示数据中的行信息, 即样本信息。两点间的距离表示行与行之间的相似 性,即不同样本间的相似性;向量长度近似表示列中 各元素的标准差,向量间夹角的余弦值表示列与列 之间的相关性,即样本属性间的相关程度;点在向量 上的投影表示行与列之间的相互作用,即样本属性 对样本信息的影响。

#### 1.2 支持向量机预测模型

支持向量机(SVM)模型的原理可以简单地描述为由输入、内积函数和线性组合输出组成的3层网络结构,如图2所示。

不同的核函数可以构造出不同类型的机器学习 决策曲面。由于参数确定的数值难度较小<sup>[27]</sup>,径向



基函数(RBF)是应用最广泛的核函数之一,RBF 通 常为高斯形式<sup>[28]</sup>,即

$$K(x_i, x) = \exp(-\alpha ||x_i - x ||^2)$$
(10)

SVM 主要设置参数有 SVM 类型、核函数类型、 核函数 gamma 反差系数、损失函数。

#### 1.3 检测系统组成

基于离子选择电极的营养液养分检测系统结构 如图3所示。系统检测功能由电极阵列、流体控制 单元、数据采集器和信号漂移校正及浓度预测等模 块实现。为了更好地管理和共享实验数据,建立了 营养液信息在线管理网站,利用数据库对实验数据 进行在线管理。此外,为方便用户实时远程查看营 养液养分信息,开发了对应的微信公众号。为验证 系统性能,选取11组贴近实际营养液情况的标准混 合溶液用于检验康奈尔营养液模型以及山崎营养液 模型性能。康奈尔营养液模型验证集中, NO<sub>3</sub>-N、 K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>质量浓度范围分别为40~200 mg/L、10~ 200 mg/L、40~160 mg/L,山崎营养液模型验证集 中,NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>质量浓度范围分别为 10~ 145 mg/L、100~300 mg/L、10~120 mg/L。 硝酸根 (NO<sub>3</sub><sup>-</sup>)、钾离子(K<sup>+</sup>)和钙离子(Ca<sup>2+</sup>)ISE(美国 Thermo Scientific Orion 公司,型号 No. 9707 BNMP、 No. 9719BNMP和 No. 9720BNMP) 检测所得电势经 SBC 校正后,用于建立养分预测模型。以 UV-2450 型紫外可见分光光度计(日本 Shimadzu 公司)和 M410型火焰光度计(英国 Sherwood 公司)实现对





Fig. 3 Topology structure diagram of online testing scene of self-designed detection bench

NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>和 Ca<sup>2+</sup>质量浓度的标准检测,作为标准 值。

#### 1.4 实验设计

选取山崎生菜、山崎草莓、山崎番茄、康奈尔生 菜和康奈尔草莓 5 种营养液配方,以各个营养液配 方中各养分元素摩尔当量浓度比值为具体信息,以 养分为行、配方为列可分析各营养液配方整体的差 异性;以配方为行、养分为列可分析同一养分元素在 各个配方中的差异性,以及养分元素之间的相似性。 具体信息如表 1 所示,R<sub>YS</sub>、R<sub>YT</sub>、R<sub>YL</sub>、R<sub>CS</sub>、R<sub>CL</sub>分别表 示山崎草莓、山崎番茄、山崎生菜、康奈尔草莓、康奈 尔生菜营养液配方。F<sub>NO</sub>、F<sub>P</sub>、F<sub>K</sub>、F<sub>Ca</sub>、F<sub>Mg</sub>、F<sub>NH</sub>、F<sub>S</sub>分 别表示 NO<sub>3</sub>-N、PO<sub>4</sub>-P、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>、NH<sub>4</sub>-N、SO<sub>4</sub>-S 养分元素。

为充分涵盖实际营养液养分组合情况,山崎营 养液建模中,NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>质量浓度范围分别选 取为55~175 mg/L、85~270 mg/L、30~150 mg/L, 康奈尔营养液建模中,NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>质量浓度范 围均选取为10~250 mg/L。各养分质量浓度范围 被平均分为7个质量浓度等级,采用正交试验法分 别产生两组三因素七水平的49组标准混合溶液,具 体信息如表2所示。未进行差异性分析的多输入训 练模型预测结果作为对照,其中,PO<sub>4</sub>-P、Mg<sup>2+</sup>、NH<sub>4</sub>-N、 SO<sub>4</sub>-S的质量浓度范围分别为10~70 mg/L、10~ 50 mg/L、5~20 mg/L、10~80 mg/L,也被分为7个 质量浓度等级进行训练。

表1	营养液配方双标图表中摩尔当量浓度比值具体信息
Tab 1	Information of hydronomic formula for hinlot metho

			•••• <b>•</b> •••		- <b>r</b>		
配方种类	$NO_3$ -N( $F_{NO}$ )	$PO_4$ - $P(F_P)$	$K^{+}(F_{K})$	$Ca^{2+}(F_{Ca})$	${\rm Mg^{2+}}~({\rm F_{Mg}})$	$\mathrm{NH}_4$ -N( $\mathrm{F}_{\mathrm{NH}}$ )	$SO_4$ - $S(F_S)$
山崎草莓(R <sub>YS</sub> )	0. 823	0.058	0.461	0.307	0.153	0.076	0.117
山崎番茄(R <sub>YT</sub> )	0. 723	0.069	0. 413	0.310	0.206	0.069	0.206
山崎生菜(R <sub>YL</sub> )	0.800	0.066	0. 533	0.266	0.133	0.066	0.133
康奈尔草莓(R <sub>CS</sub> )	0.711	0.066	0. 29	0.429	0.218	0.06	0. 222
康奈尔生菜(R <sub>CL</sub> )	0. 677	0.092	0. 285	0. 479	0.177	0.056	0.230

levels nutrient										
配方	会粉	质量浓度等级								
种类	参奴	1	2	3	4	5	6	7		
山崎	$NO_3$ -N	55	75	95	115	135	155	175		
	K *	85	115	145	175	205	235	270		
	Ca <sup>2</sup> +	30	50	70	90	110	130	150		
康奈尔	$NO_3$ -N	10	50	90	130	170	210	250		
	K +	10	50	90	130	170	210	250		
	Ca <sup>2 +</sup>	10	50	90	130	170	210	250		

#### Tab. 2 Information of three factors and seven

## 2 结果与分析

#### 2.1 营养液差异分析

以配方为行、养分为列,及养分为行、配方为列 分别作双标图,如图4所示。图中横坐标表示特征 值分解后的第一主成分,纵坐标表示第二主成分。 两主成分比例和大于90%,可充分反映全局。

配方为行,养分为列的双标图如图 4a 所示, R<sub>YS</sub> 与 R<sub>YT</sub>间的夹角约 4°,余弦值为 0.99, R<sub>YS</sub>与 R<sub>YL</sub>间 的夹角约 6°,余弦值为 0.99, R<sub>YT</sub>与 R<sub>YL</sub>间的夹角约 10°,余弦值为 0.98,表明山崎草莓、山崎番茄、山崎 生菜营养液配方具有高度的相关性。R<sub>CS</sub>与 R<sub>CL</sub>间 的夹角约 5°,余弦值为 0.99,表明康奈尔生菜、康奈 尔草莓营养液配方具有高度的相关性。R<sub>YS</sub>与 R<sub>CS</sub>



的夹角约 24°,余弦值为 0.91,表明山崎草莓与康奈 尔草莓营养液配方间具有较高的相关性, R<sub>YL</sub>与 R<sub>CL</sub> 的夹角约 32°,余弦值为 0.84,表明山崎生菜与康奈 尔生菜配方间的相关性较弱。

养分为行,配方为列的双标图如图 4b 所示。 F<sub>N0</sub>与 F<sub>K</sub>夹角约 20°,余弦值为 0.94,表明 NO<sub>3</sub>-N、  $K^+$ 含量在各配方中具有较高的相关性。 $F_{N0}$ 与  $F_{s}$ 、 F<sub>p</sub>的夹角大于 90°,余弦值为负数,表示 NO<sub>3</sub>-N 含量 与SO<sub>4</sub>-S<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>-P含量在各配方中无相关性。F<sub>K</sub>与 F<sub>№</sub>的夹角近似0°,余弦值接近1,表明K<sup>+</sup>与NH<sub>4</sub>-N 含量在各配方中具有高度的相关性。 $F_{K}$ 与  $F_{Ca}$ 、 $F_{Ma}$ 的夹角均大于90°,余弦值为负数,表示 K<sup>+</sup>含量与 Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>含量在各配方中无相关性。F<sub>Ca</sub>与F<sub>Ma</sub>间 的夹角约 54°,余弦值为 0.58,表明 Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>含量 在各配方中具有较弱的相关性。Fca与 Fp间的夹角 接近0°,余弦值近似为1,表明Ca<sup>2+</sup>、PO<sub>4</sub>-P含量在 各配方中具有高度的相关性。F<sub>M2</sub>与 F<sub>s</sub>间的夹角约 15°,余弦值为0.96,表明 Mg<sup>2+</sup>、SO<sub>4</sub>-S 含量在各配 方中具有较高的相关性。观察图 4b 中各向量长度.  $F_{K}$ 与  $F_{C_{a}}$ 向量长度最长,为5 cm,表明 K<sup>+</sup>与 Ca<sup>2+</sup>在 各配方中的含量差异最大。F<sub>N0</sub>向量长度为3 cm,表 明 NO<sub>3</sub>-N 在各配方中的含量差异较大。F<sub>s</sub>向量长 度为 2.1 cm、F<sub>Mg</sub>向量长度为 1.5 cm,表明 SO<sub>4</sub>-S、  $Mg^{2+}$ 在各配方中的含量存在差异。 $F_{P_{NH}}$ 向量长 度小于1 cm,表明 PO<sub>4</sub>-P、NH<sub>4</sub>-N 在各配方中的含量 差异最小。

综上,在所研究的5种营养液配方7种养分元 素中,NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>含量在不同配方中差异性及 含量比例皆排在前3位,以此为依据将NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、 Ca<sup>2+</sup>作为电极法检测的养分目标;山崎系列营养液 配方表现出高度相关性,在后期养分浓度预测模型 研究中,山崎生菜、山崎草莓、山崎番茄营养液的人 工神经网络及支持向量机模型将采用同一个建模样 本集合进行模型训练,建立统一的山崎营养液模型 后,该模型将用于以上3种山崎营养液配方的养分 预测。同理,由于康奈尔系列营养液配方具有高度 相关性,康奈尔草莓、康奈尔生菜营养液采用同一个 建模样本集合开展模型训练,建立统一的康奈尔营 养液模型,并用于康奈尔营养液中的目标养分预测。

#### 2.2 养分预测

利用 SBC 算法对检测电势进行校正<sup>[29]</sup>,以检测电势为输入,对应离子浓度为输出,通过多次反复训练 建 立 SVM 模型。基于双标图差异分析 (Difference analysis,DA)结果的 SVM 模型预测标准 混合溶液 NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>质量浓度,未进行差异性 分析(Indifference analysis,IA)的 SVM 模型预测结 果作为对照,以光学标准方法质量浓度作参考,作线 性回归曲线,山崎营养液配方及康奈尔营养液配方 建模预测结果如图 5 所示。

由图 5a、5d 可知,以双标图为基础,对 NO<sub>3</sub>-N 进行差异性分析,相比于未进行差异性分析,训练的 SVM 模型拥有更好的预测能力(DA: *R*<sup>2</sup> = 0.99, 0.95;IA: *R*<sup>2</sup> = 0.98,0.93),其SVM 的平均相对误差 为 6.41%、8.23%,优于后者的结果(7.66%, 10.02%),在山崎和康奈尔配方下平均相对误差在 进行差异性分析后分别降低了 1.25、1.79 个百分 点。通过比较绝对误差(Absolute error, AE)平均 值,进一步说明了基于双标图的分析结果为输入的 SVM 模型具有更好的预测性能:山崎营养液配方



Fig. 5 Prediction result of nutrient solution concentration of NO3-N, K<sup>+</sup> and Ca<sup>2+</sup>

下,二者的 NO<sub>3</sub>-N 预测 AE 平均值为 4.97、6.21 mg/L, 无显著差异,而在康奈尔配方下,则为 12.24、 19.20 mg/L。

对于 K<sup>+</sup>的质量浓度预测, 两种模型在两类营 养液配方中都表现出极佳的相关性,以双标图差异 性分析为输入的 SVM 和未进行差异性分析为输入 的 SVM 对应 R<sup>2</sup>分别为 0.99、0.98 和 0.98、0.99。 以双标图差异性分析为输入的 SVM 模型更接近于 1的斜率,更接近于0的截距,以及在山崎配方和康 奈尔配方中的 AE 平均值分别高于未进行差异性分 析的 SVM 模型 1.49、4.45 mg/L,山崎配分中进行差 异性分析前后 SVM 模型的平均相对误差分别为 11.88%和6.14%,在康奈尔配方中进行差异性分 析后的平均相对误差则减小了 2.98 个百分点,反映 了模型更好的预测能力。同样,对于 Ca<sup>2+</sup> 的浓度预 测,也发现了类似的结果。两种模型在山崎配方和 康奈尔配方中都拥有良好的相关系数,分别相差 0.05 和 0.02。进一步分析发现,在山崎营养液配方 环境下,基于双标图结果为输入的 SVM 预测模型的 AE 平均值为 8.24 mg/L,比未进行差异性分析为输 入的 SVM 的 AE 平均值减小了约 36.9%,平均相对 误差由 11.55% 减小至 10.20%。而在康奈尔营养 液配方环境下,则减小了约29.8%,未进行差异性 分析为输入的 SVM 的 AE 平均值为 15.23 mg/L,对 应平均相对误差由未进行差异性分析的 13.81%降低至 12.68%,降低了 1.13个百分点。

#### 3 结论

(1)基于双标图法,量化表征了山崎生菜、山崎 草莓、山崎番茄、康奈尔生菜、康奈尔草莓 5 种营养 液配方及 NO<sub>3</sub>-N、PO<sub>4</sub>-P、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>、NH<sub>4</sub>-N、 SO<sub>4</sub>-S 7 种养分含量的差异性与相关性,研究表明:5 种配方中,山崎系列配方对应的向量夹角余弦值不 小于 0.98,康奈尔系列营养液配方对应向量夹角余 弦值为 0.99,两种系列内各营养液配方间具有高度 相关性。

(2) ISE 营养液养分预测计量模型建模集划分 需考虑配方影响,分别针对山崎及康奈尔系列营养 液,将 SVM 模型建模集设计为 2 个独立组别,分别 开展建模研究;7 种养分元素中,K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>、NO<sub>3</sub>-N 双标图中对应向量长度分别为 5、5、3 cm,在 5 种营 养液配方中的差异性及成分比例排序前 3 位,因此 确定上述 3 成分作为 ISE 信号处理及营养液成分分 析的主要养分监测目标。

(3)基于双标图,训练得到的 SVM 模型预测 NO<sub>3</sub>-N、K<sup>+</sup>、Ca<sup>2+</sup>浓度精度显著提高,在不同营养液 配方环境下,均优于未进行差异性分析为输入的 SVM 的处理结果。

#### 参考文献

- [1] 陈善敏. 酸铝胁迫下钙离子营养对植物生长的作用研究[D]. 南京:南京大学, 2000.
- [2] 熊静,陈清,王敬国,等. 供液方式对番茄基质栽培盐分累积与养分利用率的影响[J]. 农业机械学报, 2017, 48(2): 224-231.
  - XIONG Jing, CHEN Qing, WANG Jingguo, et al. Effect of culture systems on salt accumulation in substrate and nutrient use efficiency of tomato [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017, 48(2): 224 231. (in Chinese)
- [3] PILKINGTON L J, MESSELINK G. "Protected Biological Control"—biological pest management in the greenhouse industry
   [J]. Biological Control, 2010, 52(3): 216 220.
- [4] SCHUCHM W, PEILR M N. Soilless cultivation systems: a new approach in fruit plants propagation in southern Brazil [J]. Acta Horticulturae, 2012,952: 877 - 883.
- [5] COOPERA J, CHARLESWORTHR R. Nutritional control of a nutrient-film tomato crop[J]. Scientia Horticulturae, 1977, 7(3): 189-195.
- [6] GEOFFREY R, DIXONM A, ARNOLDK E. Evaluation of sensor technologies for automated control of nutrient solutions in LSS using higher plants [C] // Proc. 6th European Symp. Space Environ Control Systems, 1997: 851 – 858.
- [7] 袁洪波,王海华,庞树杰,等. 日光温室封闭式栽培系统的设计与试验[J]. 农业工程学报, 2013, 29(21): 159-165.
   YUAN Hongbo, WANG Haihua, PANG Shujie, et al. Design and experiment of closed culture system for solar greenhouse[J].
   Transactions of the CSAE, 2013, 29(21): 159-165. (in Chinese)
- [8] WORTMANS E. Crop physiological response to nutrient solution electrical conductivity and pH in an ebb-and-flow hydroponic system[J]. Scientia Horticulturae, 2015, 194: 34 - 42.
- [9] GIELINGT H, STRATENG V, JANSSENH J J, et al. ISE and chemfet sensors in greenhouse cultivation [J]. Sensors & Actuators B Chemical, 2005, 105(1): 74-80.
- [10] SAVVAS D. SW—soil and water: automated replenishment of recycled greenhouse effluents with individual nutrients in hydroponics by means of two alternative models[J]. Biosystems Engineering, 2002, 83(2): 225-236.
- [11] HASHIMOTO Y, MORIMOTO T, FUKUYAMA T, et al. Identification and control of hydroponic system using ion sensors

[J]. Acta Hort, 1989, 26(10): 2371-2375.

- [12] KIM H J, KIM W K, ROH M Y, et al. Automated sensing of hydroponic macronutrients using a computer-controlled system with an array of ion-selective electrodes [J]. Computers & Electronics in Agriculture, 2013, 93(4): 46-54.
- [13] PAN L P, ZHANG M, ZHENG J, et al. Response surface methodology optimized NO<sub>3</sub>-N analysis for hydroponic nutrient monitoring[J]. International Agricultural Engineering Journal, 2017, 26(2): 182-190.
- [14] RIUS-RUIZ F X, ANDRADE F J, RIU J, et al. Computer-operated analytical platform for the determination of nutrients in hydroponic systems[J]. Food Chemistry, 2014, 147(6): 92-97.
- [15] BEEBE K R, KOWALSKI B R. Nonlinear calibration using projection pursuit regression: application to an array of ion-selective electrodes[J]. Analytical Chemistry, 1988, 60(20): 2273 2278.
- [16] 王永,司炜,孙德敏,等. 温室营养液循环检测系统中离子选择电极的数学建模与测量[J]. 农业工程学报,2003, 19(4):230-233.
   WANG Yong, SI Wei, SUN Demin, et al. Modeling and measurement of ion-selective electrode of nutrient solution measuring

system in greenhouse [J]. Transactions of the CSAE,2003, 19(4): 230-233.(in Chinese) [17] 李彧文,张西良. 基于 ISE 的营养液多离子浓度检测装置的实现[J]. 电子科技, 2017, 30(3):138-141.

- LI Yuwen, ZHANG Xiliang. A measurement device for multiply ion concentration of nutrient solution based on ISE [J]. Electronic Science & Technology, 2017, 30(3): 138 141. (in Chinese)
- [18] WANG L, YANG D, CHEN Z, et al. Application of neural networks with novel independent component analysis methodologies for the simultaneous determination of cadmium, copper and lead using an ISE array [J]. Journal of Chemometrics, 2014, 28(6):491-498.
- [19] LOOY S V, VERPLANCKE T, BENOIT D, et al. A novel approach for prediction of tacrolimus blood concentration in liver transplantation patients in the intensive care unit through support vector regression[J]. Critical Care, 2007, 11(4): R83.
- [20] GHANBARI M, NAJAFI G, GHOBADIAN B, et al. Support vector machine to predict diesel engine performance and emission parameters fueled with nano-particles additive to diesel fuel[J]. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2015, 100(1): 1-8.
- [21] REN Haiyan, ZHANG Miao, LI Yanhua, et al. Prediction of soil nitrate-nitrogen and potassium with SVM optimized by RSM based on ion-selective electrode[J]. International Agricultural Engineering Journal, 2016, 25(4): 14-24.
- [22] 张丽楠. 基于离子选择电极的土壤主要速效养分快速检测技术研究[D]. 北京:中国农业大学,2015.
   ZHANG Li'nan. Study on fast determination of soil available macronutrients based on ion-selective electrodes[D]. Beijing: China Agricultural University, 2015. (in Chinese)
- [23] GABRIEL K R. The biplot graphical display of matrices with application to principal component analysis [J]. Biometrika, 1971, 58(3): 453-467.
- [24] 严威凯.双标图分析在农作物品种多点试验中的应用[J].作物学报,2010,36(11):1805-1819.
   YAN Weikai. Optimal use of biplots in analysis of multi-location variety test data[J]. Acta Agronomica Sinica, 2010, 36(11):1805-1819. (in Chinese)
- [25] 刘金虎. 秦岭酉水河流域植物群落及其物种多样性的垂直格局研究[D]. 杨凌:西北农林科技大学,2010.
   LIU Jinhu. Study on the vertical pattern of the plant communities in Youshui basin, Qinling Mountains [D]. Yangling: Northwest A&F University, 2010. (in Chinses)
- [26] 马艳芳. 双标图及其在成分数据中的应用[D]. 太原:山西大学, 2016.
   MA Yanfang. The biplot analysis and its application in compositional data [D]. Taiyuan: Shanxi University, 2016. (in Chinses)
- [27] DONG B, CAO C, LEES E. Applying support vector machines to predict building energy consumption in tropical region[J]. Energy & Buildings, 2005, 37(5): 545 - 553.
- [28] TENG W, CHEN J, GAO X, et al. Real-time monitoring for disk laser welding based on feature selection and SVM[J]. Applied Sciences, 2017, 7(9): 884.
- [29] 张森,潘林沛,阳清亮,等. 基于斜率-截距校正算法的番茄营养液 ISE 监测[J]. 农业机械学报, 2018, 49(5):342 347.
   ZHANG Miao, PAN Linpei, YANG Qingliang, et al. ISE monitoring of macronutrients in hydroponic tomato cultivation based on slope and bias correction method[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2018, 49(5): 342 347. (in Chinese)