

铜胁迫下玉米叶片光谱 STFT 分析与叶片铜离子浓度反演

孟 飞 崔 宇 付萍杰

(山东建筑大学测绘地理信息学院, 济南 250101)

摘要: 采集不同浓度梯度铜离子(Cu²⁺)胁迫下玉米叶片的可见光-近红外光谱及实测玉米叶片 Cu²⁺ 浓度,采用短时傅里叶变换(Short-time Fourier transform, STFT)时频分析技术,研究不同浓度 Cu²⁺ 胁迫下玉米叶片光谱的能量振幅响应,进而提取特征波段的振幅参数,利用偏最小二乘回归(Partial least squares regression, PLSR)方法反演叶片 Cu²⁺ 浓度。研究发现,玉米叶片光谱的 STFT 变换所得能量振幅峰值随 Cu²⁺ 胁迫浓度梯度的增加呈先降低、后升高趋势,且随 Cu²⁺ 浓度的升高不断向短波方向迁移。选取不同浓度梯度的能量振幅峰值波段为特征波段,利用特征波段上随频域变化的能量幅值,建立玉米叶片 Cu²⁺ 浓度反演的偏最小二乘回归模型,模型 R² 为 0.986 3。选取相同培育期的另外 2 组植株数据为验证数据,进行相同 STFT 变换,利用建立的偏最小二乘回归模型对两组验证数据进行玉米叶片 Cu²⁺ 浓度反演,并与验证组实测 Cu²⁺ 浓度进行相关性分析,Cu²⁺ 反演 R² 分别为 0.880 6 和 0.733 1 (P<0.01),RMSE 分别为 1.563、2.619 μg/g。研究表明,光谱的时频分析方法可用于 Cu²⁺ 胁迫下玉米叶片的快速检测,为农作物的重金属胁迫监测提供了新的思路。

关键词: 高光谱; 玉米叶片; 重金属胁迫; 时频分析; 铜离子浓度; 反演

中图分类号: S127

文献标识码: A

文章编号: 1000-1298(2021)04-0181-09

OSID:



Spectral STFT Analysis and Leaf Copper Ion Concentration Inversion of Maize Leaves under Copper Stress

MENG Fei CUI Yu FU Pingjie

(School of Surveying and Geo-Informatics, Shandong Jianzhu University, Ji'nan 250101, China)

Abstract: The visible-near infrared spectra and leaf copper ion concentration data of maize leaves under different concentration gradient of Cu²⁺ stress were collected. Then through the short-time Fourier transform (STFT) time-frequency analysis technology, the energy amplitude response of the corn leaf spectrum under different concentrations of Cu²⁺ stress was studied. Furthermore, the amplitude parameters of the characteristic bands were extracted, and the partial least squares regression (PLSR) method was used to invert the leaf copper ion concentration. It was found that the peak of energy amplitude obtained by STFT transform of the corn leaf spectrum showed a decrease trend first and then increase trend with the increase of Cu²⁺ stress concentration gradient, and it continued to move to the short wave direction with the increase of Cu²⁺ concentration gradient. The peak bands of energy amplitude of different concentration gradients were selected as the characteristic bands, and the energy amplitude of the characteristic bands that varied with the frequency domain were used as parameters to establish a partial least square regression model of leaf copper ion concentration inversion. The PLSR model accuracy performed good, and the determination coefficient of R² was 0.986 3. The other two sets of plant data in the same cultivation period were selected as the verification data, and the same STFT transformation for the verification data. The established partial least square regression model was used to invert the leaf copper ion concentration of the two sets of verification data, and correlation analysis with the measured leaf copper ion concentration of the verification group was conducted. The leaf copper ion inversion accuracy R² was 0.880 6 and 0.733 1, RMSE was 1.563 μg/g and 2.619 μg/g, respectively. The research result showed that the spectral time-frequency analysis method can be used for rapid and

收稿日期: 2020-05-24 修回日期: 2020-09-27

基金项目: 山东省自然科学基金项目(ZR2018MD008)和国家自然科学基金项目(41971401)

作者简介: 孟飞(1974—),男,教授,主要从事环境遥感与GIS应用研究,E-mail: lzhmf@sdjzu.edu.cn

通信作者: 付萍杰(1989—),女,讲师,主要从事高光谱遥感研究,E-mail: fpj890622@163.com

efficient detection of corn leaves under Cu^{2+} stress, and provided ideas for the monitoring of heavy metal stress in crops.

Key words: hyperspectral; maize leaves; heavy metal stress; time-frequency analysis; copper ion concentration; inversion

0 引言

土壤重金属污染是影响农作物正常生长的重要因素之一,其中铜(Cu)、铅(Pb)、镉(Cd)等重金属污染较为突出^[1]。土壤重金属污染隐蔽性强、毒性大、治理难且周期长^[2]。以Cu为例,常量时Cu是植物生长发育的必需微量元素^[3],而土壤 Cu^{2+} 含量的超标会破坏农作物细胞组织结构,引起植物代谢紊乱^[4]。受重金属胁迫的农作物不但生长会受到抑制,而且土壤生化参数也会发生改变^[5],这些变化都会反映在光谱曲线上。因此,利用光谱技术对农作物重金属污染胁迫等弱信息进行提取与判别已成为高光谱遥感的研究热点,快速有效地监测农作物重金属污染对生态系统的安全与稳定具有重要意义。研究利用叶片光谱判别玉米铜胁迫程度的最佳生长阶段同样具有重要意义^[6]。

高光谱数据具有波段众多、光谱分辨率高的优势,可实现农作物快速、无损、实时的动态监测^[7-8],也为监测和防治土壤总金属污染提供了技术保障^[9]。刘厚田等^[10]基于一、二阶微分分析了土壤中过量铜对水稻叶片光谱反射特性的影响;李苑溪等^[11]研究发现,铜胁迫下玉米叶片光谱红边波长与叶片中叶绿素含量存在一定的相关关系;高鹏等^[12]基于铜胁迫下玉米叶片光谱的MRSVD特征构建奇异特征参数,进行了光谱奇异性分析,并采用逐步回归分析法建立奇异特征参数与玉米叶片 Cu^{2+} 含量之间的定量关系模型。光谱时频分析在前人研究中同样有了长足的发展。杨可明等^[13]采用结合EMD算法的HHT时频分析方法,对不同浓度 Cu^{2+} 污染下土壤光谱进行信息挖掘及诊断,并依据信息进行 Cu^{2+} 浓度的反演;姜雪芹等^[14]将谐波分析与BP神经网络结合,利用土壤高光谱遥感的传统处理数据进行土壤含水率反演,取得较好的效果;李旭青等^[15]基于小波变换和BP神经网络建立水稻冠层重金属含量反演模型,该模型精度较高,具有一定的实用性。信号的STFT时频分析方法是针对非平稳信号非常有效的分析工具^[16-17]。妮娇^[18]对不同类型复杂雷达信号经STFT变换后的结果进行统计,形成了基于短时傅里叶变换的雷达信号脉内特征自动识别流程,这对电子侦察情报的获取及应用具有重要意义;同晓荣^[19]提出一种基于STFT的声信号盲

分选算法,优化了声信号盲分选仿真系统的实时性,提高了分选精度;张博等^[20]基于轨道高低不平顺数据提出一种基于STFT时频分析模型的高速铁路路基局部变形识别方法;LIU等^[21]提出了一种基于STFT的端点检测方法,应用于光纤干涉振动传感系统;NARASIMHAN等^[22]提出一种新的STFT控制算法,以减少基础隔震建筑物的响应;CHIKKERUR等^[23]提出了一种基于STFT分析的指纹增强新方法,提高了传统指纹识别精度。尽管高光谱遥感已广泛应用于农业检测领域,但传统的农作物重金属污染监测多数围绕植被原始光谱获取较为复杂的光谱特征参数,而重金属胁迫下农作物叶片光谱信号产生的变化微小,根据传统监测方法和常规的光谱特征参数很难区别光谱之间的微弱差异^[24],因此引入在雷达信号、声音信号、光线信号、电信号等异常检测中广泛应用的STFT时频分析方法,研究重金属胁迫下农作物叶片光谱响应。

传统的STFT对较为平滑的信号反应并不敏感,本文结合一阶微分和STFT方法的优势,对农作物原始平滑光谱做一阶微分处理后进行STFT时频分析,研究重金属胁迫下的农作物叶片光谱信号能量随波长和频率聚集形态的众多参数,通过分析揭示重金属胁迫下农作物叶片光谱的时频能量变化规律,同时依据其峰值能量参数建立玉米叶片 Cu^{2+} 浓度反演的多变量偏最小二乘回归模型,以期实现基于光谱时频分析法的农作物重金属胁迫的快速、简单、有效监测。

1 实验设计与数据采集

1.1 实验设计

选用含有 Cu^{2+} 的 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 溶液作为重金属胁迫源,植物样品选用“中糯1号”玉米进行培养,实验分别设置0、50、200、300、400、800、1200 $\mu\text{g/g}$ 7个浓度梯度,分别标记为CK、Cu(50)、Cu(200)、Cu(300)、Cu(400)、Cu(800)和Cu(1200),其中CK(0 $\mu\text{g/g}$ 设计浓度的植物样品)为对照组,未添加 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$,每个浓度梯度设置3组同期培养的平行实验,组1为实验组,组2、3为验证组,共计21盆盆栽,作为研究用培养植物,用于获取玉米叶片光谱。

1.2 玉米叶片光谱采集

采用美国SVC公司生产的SVC HR-10241型

高性能地物光谱仪测定 Cu^{2+} 胁迫下玉米叶片光谱。光谱采集使用功率为 50 W 的卤素灯光源和 4° 视场角探头,探头垂直于叶片表面 40 cm,每盆玉米叶片光谱测量 3 次,由原始扫描光谱自动平均得到输出结果,光谱反射系数经专用平面白板标准化处理,由此得到不同 Cu^{2+} 浓度胁迫下的玉米叶片光谱。不同浓度梯度 Cu^{2+} 胁迫下玉米叶片光谱如图 1 所示。

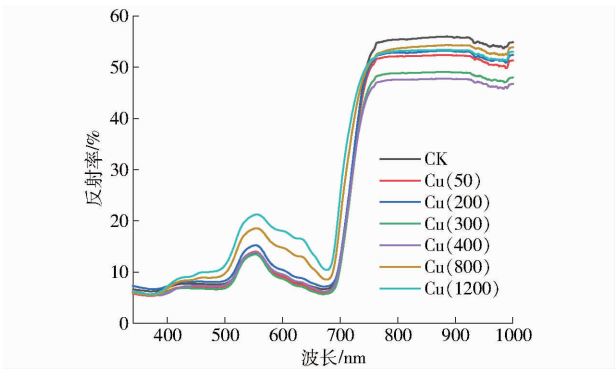


图 1 不同浓度梯度 Cu^{2+} 胁迫下波段 340 ~ 1 000 nm 玉米叶片光谱(组 1)

Fig.1 Spectra of maize leaves under different concentrations of Cu^{2+} at 340 ~ 1 000 nm(Group 1)

1.3 叶片 Cu^{2+} 浓度测定

对采集的玉米叶片样品经过冲洗、干燥、粉碎等预处理后封装在样品袋中,样品经高纯硝酸、高氯酸消化后,用 WFX-120 型原子吸收分光光度计测定 Cu^{2+} 浓度。各浓度梯度 Cu^{2+} 污染胁迫下 3 组玉米叶片样本中 Cu^{2+} 浓度见表 1。

表 1 不同浓度梯度 Cu^{2+} 胁迫下玉米叶片 Cu^{2+} 实测浓度

Tab.1 Measured concentration of Cu^{2+} in maize leaves under different concentrations gradient Cu^{2+} stress

样品编号	$\mu\text{g/g}$		
	组 1	组 2	组 3
CK	5.04	5.70	5.28
Cu(50)	6.19	5.63	5.94
Cu(200)	9.30	8.99	9.49
Cu(300)	8.31	8.82	9.15
Cu(400)	8.09	9.91	9.57
Cu(800)	19.68	10.76	12.07
Cu(1200)	9.08	9.88	9.43

2 研究方法

2.1 光谱信号处理

2.1.1 光谱一阶微分

光谱信号的预处理包括归一化、一阶微分、统去除等,其中对光谱的一阶微分处理是最为常用的方法。光谱数据进行一阶微分处理可以去除线性或接近线性的背景噪声对目标光谱的影响^[25],也能提供

比原光谱更高分辨率和更清晰的光谱轮廓变换^[26],且相比原始平滑光谱曲线,光谱一阶微分曲线更加不平稳,进一步有利于信号的 STFT 变换处理。光谱一阶微分计算式为

$$SD(\lambda_i) = (\rho(\lambda_{i+1}) - \rho(\lambda_{i-1})) / \Delta\lambda \tag{1}$$

式中 λ_i ——光谱波长
 $\rho(\lambda_{i+1})、\rho(\lambda_{i-1})$ ——光谱反射率
 $SD(\lambda_i)$ ——光谱一阶微分
 $\Delta\lambda$ ——波长 λ_{i+1} 与 λ_{i-1} 的波段间隔

2.1.2 光谱短时傅里叶变换(STFT)

STFT 变换的基本原理是把原始信号和窗函数进行相乘并进行一维的傅里叶变换,然后通过窗函数的滑动得到一系列频谱函数,将频谱函数随时域依次展开可得到该信号的三维时频图,即信号随时间和频率变化的复数幅度。STFT 变换的时间分辨率和频率分辨率之间不能兼得,窗长越长,频率分辨率越高,时间分辨率越差^[27]。STFT 常用窗函数有 Hamming 窗、Hanning 窗、矩形窗、高斯窗等。STFT 变换公式为

$$STFTz(t,f) = \int_{-\infty}^{\infty} (Z(u)g(u-t))e^{-j2\pi fu} du \tag{2}$$

式中 $Z(u)$ —— u 时刻的原信号
 $g(u-t)$ ——窗函数 f ——角频率

2.2 回归模型

2.2.1 多元线性回归

多元线性回归模型(MLR)通常用于研究一个因变量与多个自变量的变化关系,若二者的关系可以用线性形式来描述,则可以建立多元线性模型进行分析。本文分别以 7 组受不同浓度 Cu^{2+} 胁迫下叶片光谱一阶微分参数及光谱一阶微分 STFT 分析参数为因变量,实测叶片 Cu^{2+} 浓度为自变量,在 SPSS 中建立叶片 Cu^{2+} 浓度反演的多元线性回归模型。由于光谱一阶微分及光谱一阶微分 STFT 分析参数较多,SPSS 软件自动剔除对因变量无显著影响的自变量,保留 6 个对因变量有显著影响参数,分别建立六变量多元线性回归模型,反演叶片 Cu^{2+} 浓度。MLR 模型为

$$y = \beta_0 + \beta_1x_1 + \cdots + \beta_6x_6 \tag{3}$$

式中 $x_1、x_2、\cdots、x_6$ ——非随机变量,叶片光谱一阶微分参数及光谱一阶微分 STFT 能量幅值
 y ——因变量,模型预测 Cu^{2+} 浓度
 $\beta_0、\beta_1、\cdots、\beta_6$ ——回归系数

2.2.2 偏最小二乘回归

偏最小二乘回归(PLSR)是一种统计学方法,与主成分回归有关,利用多因变量对多自变量进行回

归建模。PLSR 模型通过投影分别将频谱和相关响应变量投影到一个二维空间,来寻找一个线性回归模型,从而降低维数并避免噪声^[28]。相比传统回归分析,在自变量多、样本数量较少的情况下,PLSR 有更明显的优势^[29]。本文分别以 7 组受不同浓度 Cu^{2+} 胁迫下叶片光谱一阶微分参数及光谱 STFT 时域特征波段上随频域变化的 STFT 时频能量幅值(每个特征波段包含 65 个幅值)为因变量,以实测叶片 Cu^{2+} 浓度为自变量分别建立多变量 PLSR 模型,反演叶片 Cu^{2+} 浓度。PLSR 模型流程图如图 2 所示(以 STFT 能量参数为例)。

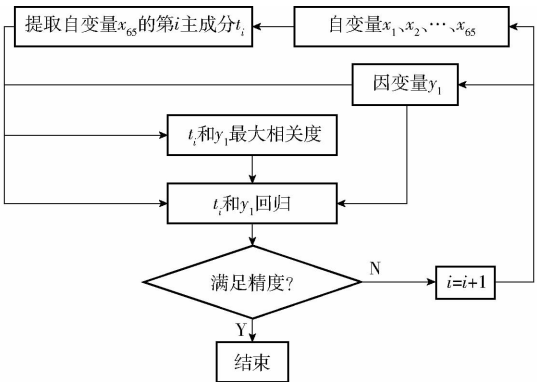


图 2 PLSR 模型流程图
Fig. 2 Flow chart of PLSR model

2.3 模型精度验证

采用决定系数 R^2 评价模型预测值与实测值的拟合精度。决定系数 R^2 是回归平方和占总误差平方和的比例,反映回归直线的拟合程度,其取值范围介于 0~1 之间。 R^2 越趋近于 1,说明回归方程拟合精度越高; R^2 越趋近于 0,说明回归方程拟合精度越差。同时采用均方根误差 RMSE 评价模型精度,反映模型预测值与实测值之间的离散程度,RMSE 越小,说明模型预测值与实测值之间离散程度越小,模型精度越高。

3 结果与分析

3.1 光谱一阶微分分析

用式(1)对获取的波段 340~1 000 nm 玉米叶片光谱信号进行一阶微分处理,发现不同浓度 Cu^{2+} 胁迫下玉米叶片光谱一阶微分处理后在波段 480~670 nm、700~750 nm 处产生较为明显的峰值及低谷变化,原因是该波段范围是较易受重金属胁迫影响的玉米叶片光谱响应特征的“紫谷-绿峰-红谷”所对应的波段范围^[30]。通过信号的 STFT 变换,能够在该明显“峰值-低谷”变化范围获取其对应时频能量的变化规律,并针对相应规律及参数做进一步研究。不同浓度梯度 Cu^{2+} 胁迫下玉米叶片光谱一阶

微分处理结果如图 3 所示。

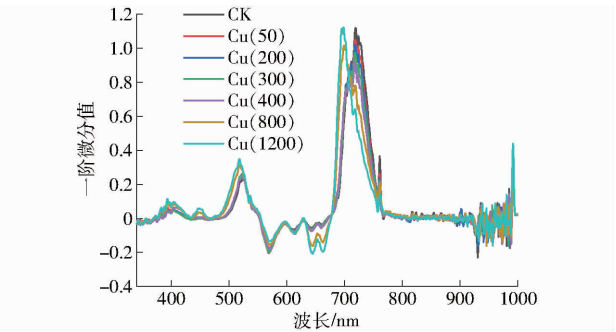


图 3 不同浓度梯度 Cu^{2+} 胁迫下波段 340~1 000 nm 玉米叶片光谱一阶微分(组 1)
Fig. 3 First order differential of maize leaf spectra under different Cu^{2+} stresses at 340~1 000 nm (Group 1)

3.2 光谱的 STFT 分析

以不同浓度梯度 Cu^{2+} 胁迫下波段 340~1 000 nm 玉米叶片光谱的一阶微分数据为原始信号,为突出光谱一阶微分 STFT 时频能量在一阶微分光谱“峰值-低谷”位置的能量值及其变化情况,设置采样间隔为 1,FFT 长度为 128,窗口长度为 32,采样重叠度为 31,窗口选用 Hamming 窗进行 STFT 变换,获取不同浓度梯度 Cu^{2+} 胁迫下波段 340~1 000 nm 玉米叶片光谱响应的一阶微分处理数据的时频图,将时域转换为虚拟光谱,如图 4 所示。能量振幅峰值所处波段随 Cu^{2+} 浓度梯度变化情况见表 2。

由图 4 可看出,随着 Cu^{2+} 浓度的不断增加,能量振幅峰值呈先降低后升高趋势。结合表 2,无重金属 Cu^{2+} 胁迫的正常植株的光谱一阶微分 STFT 峰值所处波长为 722 nm 附近。随着 Cu^{2+} 浓度不断升高,实验组与验证组的光谱一阶微分 STFT 时频能量峰值均在样品 Cu^{2+} 浓度设置为 400 $\mu\text{g/g}$ 时为最小值,峰值能量所处波段均出现在 690~730 nm 之间,且沿波段轴向左,即短波方向迁移,仅验证组组 2 与组 3 在 Cu^{2+} 浓度 800 $\mu\text{g/g}$ 与 1 200 $\mu\text{g/g}$ 时振幅与所处波段出现极小反常情况,但未影响整体规律。红边(REP)是绿色植物叶子光谱曲线在波段 680~740 nm 之间变化率最快的点,也是一阶导数光谱在该区间内的拐点^[31],而重金属 Cu 胁迫程度增加会造成农作物红边“蓝移”程度增强^[32],因此玉米叶片光谱受重金属胁迫影响而产生的红边“蓝移”是其 STFT 时频峰值能量迁移的重要原因。

3.3 玉米叶片重金属 Cu^{2+} 浓度反演

3.3.1 基于光谱一阶微分变量的 MLR 及 PLSR 模型反演

选取 17 组不同 Cu^{2+} 浓度梯度胁迫下玉米叶片光谱一阶微分处理参数为自变量,叶片实测 Cu^{2+} 浓

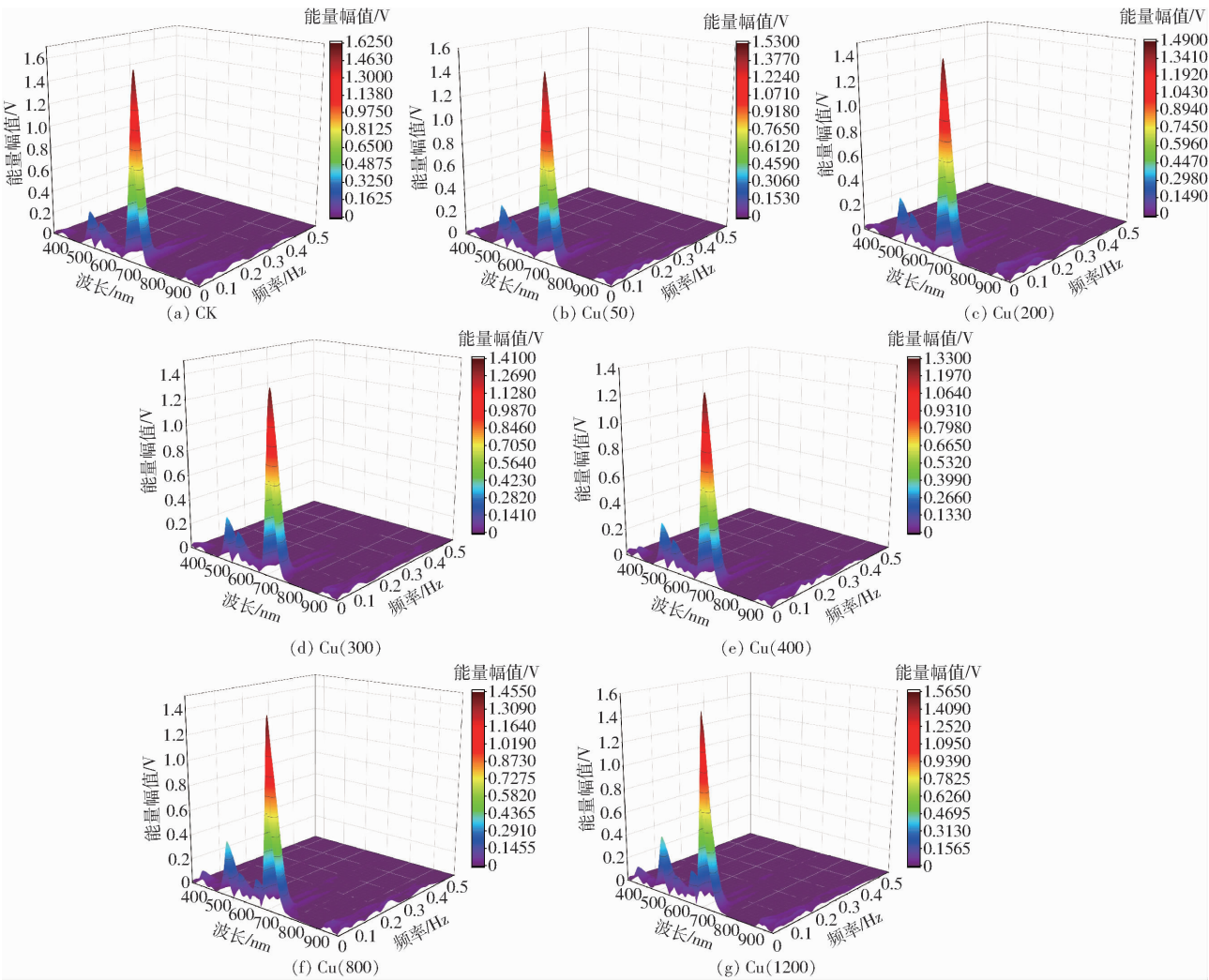


图4 不同浓度梯度 Cu²⁺ 胁迫下波段 340 ~ 1 000 nm 玉米叶片光谱一阶微分 STFT 时频图(组 1)

Fig. 4 First-order differential STFT time-frequency plots of 340 ~ 1 000 nm corn leaf spectra under different concentrations of Cu²⁺ stress (Group 1)

表 2 振幅峰值所处波段随 Cu²⁺ 浓度梯度变化
Tab.2 Change of Cu²⁺ concentration gradient in band where peak amplitude was located

样品编号		组 1	组 2	组 3
CK	能量振幅峰值/V	1. 625	1. 639	1. 635
	波长/nm	722	724	718
Cu(50)	能量振幅峰值/V	1. 530	1. 481	1. 489
	波长/nm	720	720	714
Cu(200)	能量振幅峰值/V	1. 490	1. 299	1. 44
	波长/nm	719	719	716
Cu(300)	能量振幅峰值/V	1. 410	1. 129	1. 355
	波长/nm	718	718	713
Cu(400)	能量振幅峰值/V	1. 330	1. 176	1. 320
	波长/nm	717	709	709
Cu(800)	量振幅峰值能/V	1. 455	1. 595	1. 570
	波长/nm	702	703	696
Cu(1200)	峰值能量振幅/V	1. 565	1. 556	1. 568
	波长/nm	699	700	694

度为因变量,在 SPSS 软件中做多元回归线性拟合,建立 Cu²⁺ 浓度反演的 MLR 模型。光谱一阶微

分前共 661 个波段,一阶微分后得 659 个参数,将参数编号为 Fod1、Fod2、…、Fod659,软件模型参数选取及对应系数如表 3 所示,模型 $R^2 = 0.98 (P < 0.01)$ 。

分别选取组 2 与组 3 光谱一阶微分参数对应参数代入模型进行 Cu²⁺ 浓度反演,Cu²⁺ 浓度反演值与实测值对比见图 5。由图 5 可得,光谱一阶微分参数建立的线性预测模型精度低,组 2 实测值与预测值 $R^2 = 0.114$,RMSE 为 5.696 μg/g;组 3 $R^2 = 0.1201$,RMSE 为 4.159 μg/g,且组 2 反演结果存在一个负值,表明简单的光谱一阶微分参数建立的六变量参数 MLR 模型尽管本身精度较高,但存在一定的局限,不能实现对验证组玉米叶片 Cu²⁺ 浓度的准确预测。

选取 17 组不同 Cu²⁺ 浓度梯度胁迫下玉米叶片光谱一阶微分全部参数为自变量,实测 Cu²⁺ 浓度为因变量,在 Matlab 中建立一阶微分参数 PLSR Cu²⁺ 浓度反演模型。模型自变量系数见图 6a,精度验证

表 3 一阶微分参数反演 MLR 模型选取编号及对应系数

Tab. 3 First-order differential parameter inversion MLR model selection number and corresponding coefficient						
参数编号	常数项	Fod145	Fod488	Fod496	Fod614	Fod645
系数	-24. 739	218. 085	298. 561	177. 302	-47. 6	-7. 593
						1 303. 629

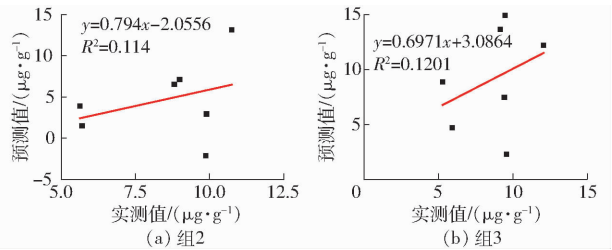


图 5 验证组光谱一阶微分参数 MLR 模型 Cu²⁺ 反演预测值与实测值对比

Fig. 5 Comparison of spectral first-order differential parameter MLR model copper ions inversion predicted value and measured value in verification group

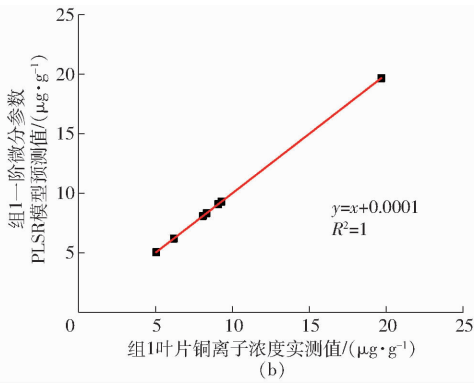
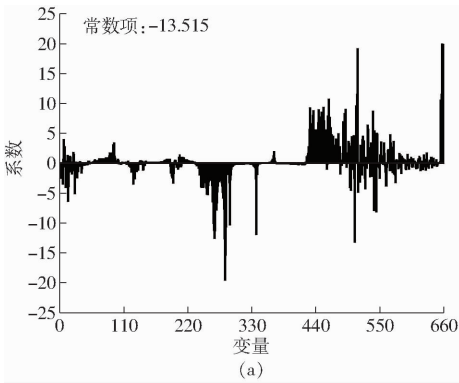


图 6 光谱一阶微分参数 PLSR 模型系数及精度验证

Fig. 6 Spectral first-order differential parameter PLSR model coefficients and accuracy verification

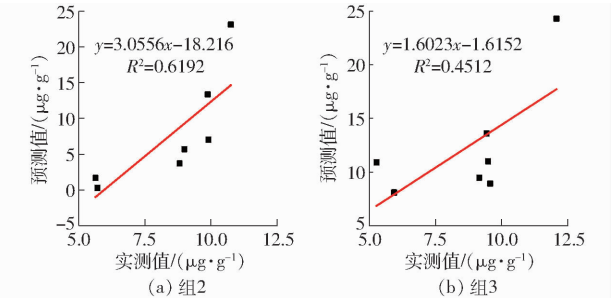


图 7 验证组光谱一阶微分参数 PLSR 模型 Cu²⁺ 反演预测值与实测值对比

Fig. 7 Comparison of spectrum first-order differential parameter PLSR model copper ions inversion predicted value and measured value in verification group

度极高,但其反演结果仅能用作对比,而不予对其参考。

3.3.2 基于光谱一阶微分 STFT 参数的 MLR 及 PLSR 模型反演

同样选取 17 组不同 Cu²⁺ 浓度梯度胁迫下玉米叶片光谱一阶微分 STFT 能量峰值所在时域波段上的能量参数为自变量,实测叶片 Cu²⁺ 浓度为

见图 6b,模型精度 $R^2 = 1$ ($P < 0.01$),由于模型本身精度过高,存在过拟合现象,因此仅将此模型用于对比,而不能对其进行参考。

依据组 1 光谱一阶微分参数建立的 PLSR 模型,对组 2 与组 3 光谱一阶微分参数进行 Cu²⁺ 浓度反演,模型反演值与实测值拟合见图 7。由图 7 可见,组 2 与组 3 反演精度 R^2 分别为 0.619 2 ($P < 0.05$) 和 0.451 2, RMSE 分别为 6.05、5.429 μg/g,尽管模型对验证组反演精度有所提高,但总体离散程度较大,因此光谱一阶微分 STFT 参数建立的 PLSR 模型虽发挥了自变量多的优势,且模型本身精

因变量,在 SPSS 软件中做多元回归线性拟合,建立 Cu²⁺ 浓度反演模型。光谱一阶微分 STFT 处理后在频域上得 65 个参数,将参数编号为 St1、St2、…、St65,软件模型参数选取及对应系数见表 4,模型精度 $R^2 = 0.97$ ($P < 0.01$),精度较高。忽略组 2、3 真实峰值所处波段,仍以组 1 建模波段为参数选取波段,将组 2 与组 3 光谱一阶微分 STFT 数据对应参数代入模型进行叶片 Cu²⁺ 浓度反演,叶片 Cu²⁺ 浓度模型反演值与实测值对比见图 8。由图 8 可得,光谱一阶微分 STFT 参数建立的 MLR 预测模型组 2 实测值与预测值 R^2 为 0.509 5, RMSE 为 6.152 μg/g,组 3 R^2 为 0.275 1, RMSE 为 4.921 μg/g,与光谱一阶微分参数建立的 MLR 模型相比,精度略有提高,但组 3 反演效果仍不理想,仅不存在负值反演结果。

为进一步提高 STFT 参数模型反演精度,发挥 PLSR 模型的优势,选取组 1 Cu²⁺ 浓度梯度胁迫下玉米叶片一阶微分处理光谱的 STFT 变换虚拟光谱波段上特定波长随频域变化的 65 个全部能量幅值

表 4 一阶微分 STFT 参数反演线性模型选取编号及对应系数

参数编号	常数项	St28	St30	St38	St50	St52	St65
系数	-9.874	688.074	-100.587	409.331	3 085.58	-1 686.1	13 625.069

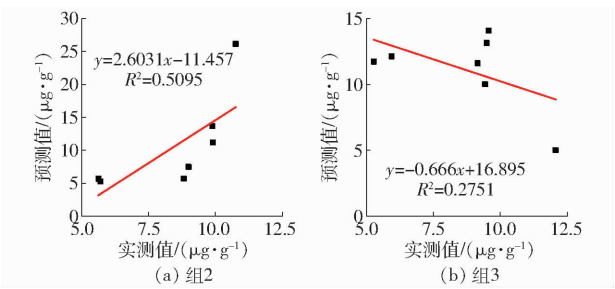
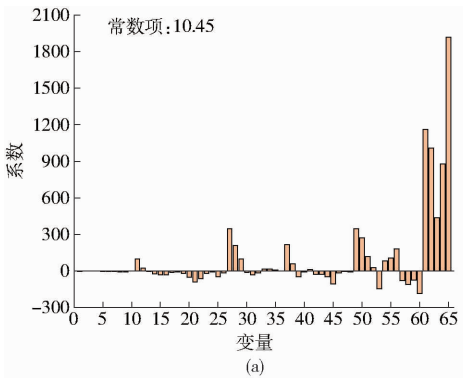


图 8 验证组光谱一阶微分 STFT 参数 MLR 模型反演预测值及实测值对比

Fig. 8 Comparison of spectral first-order differential STFT parameter MLR model inversion predicted value and measured value in verification group



用作 7 组自变量,7 个实测叶片 Cu^{2+} 浓度用作因变量,在 Matlab 中建立 PLSR Cu^{2+} 浓度预测模型。建立的 PLSR 线性回归模型自变量系数见图 9a,模型精度验证见图 9b。忽略验证组实际振幅峰值波段,仍以实验组建模参数波段为特征波段,依次选取组 2 与组 3 光谱响应一阶微分数据的 STFT 变换结果的对应波段全部能量幅值作为验证参数,代入 PLSR 模型进行叶片 Cu^{2+} 浓度含量反演,并将反演结果与验证组实测 Cu^{2+} 浓度进行线性拟合,拟合结果如图 10 所示。组 2 与组 3 R^2 分别为 0.880 6 与 0.733 1 ($P < 0.01$),RMSE 分别为 1.563、2.619 $\mu\text{g/g}$,相比 SPSS 软件建立的 6 自变量 MLR 模型,STFT 参数的

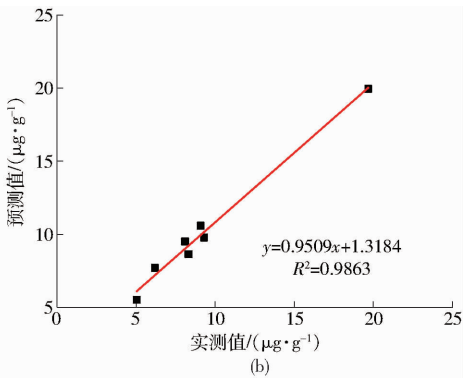


图 9 光谱一阶微分 STFT 参数 PLSR 模型系数及精度验证

Fig. 9 PLSR model coefficients and accuracy verification of spectral first-order differential STFT parameters

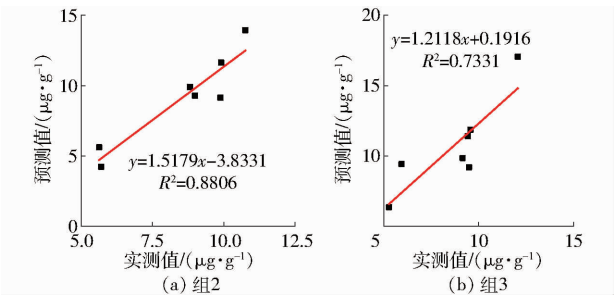


图 10 验证组光谱一阶微分 STFT 参数 PLSR 模型 Cu^{2+} 反演预测值与实测值对比

Fig. 10 Comparison of spectrum first-order differential STFT parameter PLSR model copper ions inversion predicted value and measured value in verification group

PLSR 多自变量模型反演精度进一步提高,且反演结果离散程度较其他参数和模型的反演结果,有了大幅降低。

4 结论

(1)随着 Cu^{2+} 胁迫浓度升高,受农作物“红边

蓝移”现象的影响,光谱一阶微分 STFT 能量峰值参数呈先降低、后升高趋势,且峰值参数频谱随 Cu^{2+} 浓度升高沿波段轴不断向短波方向迁移。峰值参数频谱的迁移状况与峰值参数可以作为判别玉米叶片光谱重金属胁迫程度的标志。

(2)相比一阶微分参数、一阶微分 STFT 分析参数的 6 自变量 MLR 模型,以及一阶微分参数 PLSR 模型,以峰值参数频谱的全部能量幅值为自变量、以实测玉米叶片 Cu^{2+} 浓度为因变量建立的多自变量光谱一阶微分 STFT 参数的 PLSR 模型 Cu^{2+} 浓度预测精度最高,且在对验证组两组参数进行反演时,预测值与实测值 R^2 分别为 0.880 6 和 0.733 1 ($P < 0.01$),RMSE 分别为 1.563、2.619 $\mu\text{g/g}$ 。由此可见,若验证样本组数量足够多,且本文建立的模型能够利用相同方式获取参数对玉米叶片 Cu^{2+} 浓度进行准确预测,则表明本文通过光谱 STFT 时频分析方法获取参数建立的 Cu^{2+} 浓度预测模型存在一定的普适性。

参 考 文 献

- [1] 李燕,杨可明,王敏,等.铜胁迫下玉米光谱变化的奇异性诊断指数与污染甄别[J].农业环境科学学报,2019,38(1):14-21.
LI Yan, YANG Keming, WANG Min, et al. Singularity diagnostic index pollution identification of corn spectral variations under copper stress[J]. Journal of Agro-Environment Science, 2019, 38(1): 14-21. (in Chinese)
- [2] 刘聪,杨可明,夏天,等.铜胁迫下玉米叶片光谱奇异性分析及污染评估[J].中国环境科学,2017,37(10):3952-3961.
LIU Cong, YANG Keming, XIA Tian, et al. Analysis on spectral singularity and pollution assessment of corn leaves under copper stress[J]. China Environmental Science, 2017, 37(10): 3952-3961. (in Chinese)
- [3] 杨可明,程龙,郭辉,等.铜胁迫下玉米叶片的HHT包络谱变化与污染预测模型[J/OL].农业机械学报,2018,49(7):168-176.
YANG Keming, CHENG Long, GUO Hui, et al. Changes of HHT envelope spectra and pollution prediction models on corn leaves polluted by copper stress[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2018, 49(7): 168-176. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?flag=1&file_no=20180721&journal_id=jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2018.07.021. (in Chinese)
- [4] 朱叶青,屈永华,刘素红,等.重金属铜污染植被光谱响应特征研究[J].遥感学报,2014,18(2):335-352.
ZHU Yeqing, QU Yonghua, LIU Suhong, et al. Spectral response of wheat and lettuce to copper pollution[J]. Journal of Remote Sensing, 2014, 18(2): 335-352. (in Chinese)
- [5] 李燕,杨可明,荣坤鹏,等.重金属铜胁迫下玉米的光谱特征及监测研究[J].光谱学与光谱分析,2019,39(9):2823-2828.
LI Yan, YANG Keming, RONG Kunpeng, et al. Spectral characteristics and identification research of corn under copper stress[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2019, 39(9): 2823-2828. (in Chinese)
- [6] 郭辉,杨可明,张超.铜胁迫下玉米叶片光谱谐波振幅特征与胁迫程度判别[J/OL].农业机械学报,2019,50(10):153-158.
GUO Hui, YANG Keming, ZHANG Chao. Harmonic amplitude characteristics of maize leaves reflectance and stress degree discrimination under copper stress[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2019, 50(10): 153-158. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?flag=1&file_no=20191017&journal_id=jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2019.10.017. (in Chinese)
- [7] SAMPSA K, JOUNI P, KARI K, et al. Lake water quality classification with airborne hyperspectral spectrometer and simulated MERIS data[J]. Remote Sensing of Environment, 2002, 79: 51-59.
- [8] KLOIBER S M, BREZONIK P L, OLMANSON L G, et al. A procedure for regional lake water clarity assessment using landsat multispectral data[J]. Remote Sensing of Environment, 2002, 82(1): 38-47.
- [9] 张秋霞,张合兵,张会娟,等.粮食主产区耕地土壤重金属高光谱综合反演模型[J/OL].农业机械学报,2017,48(3):148-155.
ZHANG Qiuxia, ZHANG Hebing, ZHANG Huijuan, et al. Hybrid inversion model of heavy metals with hyperspectral reflectance in cultivated soils of main grain producing areas[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017, 48(3): 148-155. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20170319&flag=1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2017.03.019. (in Chinese)
- [10] 刘厚田,张维平,于亚平,等.土壤中过量铜对水稻叶片光谱反射特性的影响[J].环境科学学报,1984,4(4):350-359.
LIU Houtian, ZHANG Weiping, YU Yaping, et al. Effect of excessive copper in soil on characteristics of spectral reflection of rice leaves[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 1984, 4(4): 350-359. (in Chinese)
- [11] 李苑溪,陈锡云,罗达,等.铜胁迫下玉米叶片反射光谱的红边位置变化及其与叶绿素的关系[J].光谱学与光谱分析,2018,38(2):546-551.
LI Yuanxi, CHEN Xiyun, LUO Da, et al. Effects of cuprum stress on position of red edge of maize leaf reflection hyperspectra and relations to chlorophyll content[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(2): 546-551. (in Chinese)
- [12] 高鹏,杨可明,荣坤鹏,等.铜胁迫下玉米叶片光谱MRSVD特征与污染预测模型[J].中国矿业大学学报,2019,48(4):928-934.
GAO Peng, YANG Keming, RONG Kunpeng, et al. Spectral MRSVD characteristics of corn leaves under copper stress and pollution model[J]. Journal of China University of Mining & Technology, 2019, 48(4): 928-934. (in Chinese)
- [13] 杨可明,汪国平,付萍杰,等.HHT时频分析土壤光谱的重金属铜离子污染信息提取模型[J].光谱学与光谱分析,2018,38(2):564-569.
YANG Keming, WANG Guoping, FU Pingjie, et al. A model on extracting the pollution information of heavy metal copper ion based on the soil spectral analyzed by HHT in time-frequency[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(2): 564-569. (in Chinese)
- [14] 姜雪芹,叶勤,林怡,等.基于谐波分析和高光谱遥感的土壤含水量反演研究[J].光学学报,2017,37(10):300-310.
JIANG Xueqin, YE Qin, LIN Yi, et al. Inverting study on soil water content based on harmonic analysis and hyperspectral remote sensing[J]. Acta Optica Sinica, 2017, 37(10): 300-310. (in Chinese)
- [15] 李旭青,李龙,庄连英,等.基于小波变换和BP神经网络的水稻冠层重金属含量反演[J/OL].农业机械学报,2019,50(6):226-232.

- LI Xuqing, LI Long, ZHUANG Lianying, et al. Inversion of heavy metal content in rice canopy based on wavelet transform and BP neural network[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2019, 50(6): 226–232. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?file_no=20190625&flag=1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2019.06.025. (in Chinese)
- [16] 徐永海, 赵燕. 基于短时傅里叶变换的电能质量扰动识别与采用奇异值分解的扰动时间定位[J]. 电网技术, 2011, 35(8): 174–180.
- XU Yonghai, ZHAO Yan. Identification of power quality disturbance based on short-term Fourier transform and disturbance time orientation by singular value decomposition[J]. Power System Technology, 2011, 35(8): 174–180. (in Chinese)
- [17] 赵凤展, 杨仁刚. 基于短时傅里叶变换的电压暂降扰动检测[J]. 中国电机工程学报, 2007, 27(10): 28–34.
- ZHAO Fengzhan, YANG Ren'gang. Voltage sag disturbance detection based on short time Fourier transform[J]. Proceedings of the CSEE, 2007, 27(10): 28–34. (in Chinese)
- [18] 晁娇. 基于短时傅里叶变换的雷达信号脉内特征自动识别研究[J]. 现代信息科技, 2019, 3(1): 50–53.
- CHAO Jiao. An auto recognition method for in-pulse features of radar signal based on STFT[J]. Modern Information Technology, 2019, 3(1): 50–53. (in Chinese)
- [19] 同晓荣. 基于短时傅里叶时频分析的声信号盲分选仿真系统研究[J]. 系统仿真学报, 2019, 31(2): 353–359.
- TONG Xiaorong. Blind separation simulation system of sound signals based on time-frequency analysis of short time Fourier transformation[J]. Journal of System Simulation, 2019, 31(2): 353–359. (in Chinese)
- [20] 张博, 刘秀波, 马帅, 等. 基于时频分析的高速铁路路基局部变形识别方法[J]. 铁道建筑, 2019, 59(12): 95–98.
- ZHANG Bo, LIU Xiubo, MA Shuai, et al. Local deformation identification method for high speed railway subgrade based on time-frequency analysis[J]. Railway Engineering, 2019, 59(12): 95–98. (in Chinese)
- [21] LIU K, MA P, AN J, et al. Endpoint detection of distributed fiber sensing systems based on STFT algorithm[J]. Optics & Laser Technology, 2019, 114: 122–126.
- [22] NARASIMHAN S, NAGARAJAIAH S. A STFT semiactive controller for base isolated buildings with variable stiffness isolation systems[J]. Engineering Structures, 2005, 27(4): 514–523.
- [23] CHIKKERUR S, CARTWRIGHT A N, GOVINDARAJU V. Fingerprint enhancement using STFT analysis[J]. Pattern Recognition, 2007, 40(1): 198–211.
- [24] 张超, 杨可明, 王敏, 等. 铜铅胁迫下玉米叶片弱光谱信息的 LD-CR-SIDSCA_(tan)探测模型[J]. 光谱学与光谱分析, 2019, 39(7): 2091–2099.
- ZHANG Chao, YANG Keming, WANG Min, et al. LD-CR-SIDSCA_(tan) detection model for the weak spectral information of maize leaves under copper and lead stresses[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2019, 39(7): 2091–2099. (in Chinese)
- [25] 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.
- [26] 顾艳文, 李帅, 高伟, 等. 基于光谱参数对小白菜叶片镉含量的高光谱估算[J]. 生态学报, 2015, 35(13): 4445–4453.
- GU Yanwen, LI Shuai, GAO Wei, et al. Hyperspectral estimation of the cadmium content in leaves of *Brassica rapa chinensis* based on the spectral parameters[J]. Acta Ecologica Sinica, 2015, 35(13): 4445–4453. (in Chinese)
- [27] 李忠盼, 赵冬青, 向民志, 等. 一种加速 GNSS 信号捕获的短时傅里叶变换算法[J]. 测绘科学技术学报, 2019, 36(1): 23–27.
- LI Zhongpan, ZHAO Dongqing, XIANG Minzhi, et al. A short-time Fourier transform algorithm for accelerating GNSS signal acquisition[J]. Journal of Geomatics Science and Technology, 2019, 36(1): 23–27. (in Chinese)
- [28] HONG Y, SHEN R, CHENG H, et al. Estimating lead and zinc concentrations in peri-urban agricultural soils through reflectance spectroscopy: effects of fractional-order derivative and random forest[J]. Science of the Total Environment, 2019, 651(2): 1969–1982.
- [29] 李欢, 聂斌, 杜建强, 等. 融合 softmax 的偏最小二乘法及中药数据分析研究[J]. 计算机应用研究, 2019, 36(12): 3740–3743.
- LI Huan, NIE Bin, DU Jianqiang, et al. Partial least squares fusion of softmax and data analysis of traditional Chinese medicine[J]. Computer Application Research, 2019, 36(12): 3740–3743. (in Chinese)
- [30] 郭辉, 杨可明, 张文文, 等. 铜铅离子胁迫下玉米污染程度的光谱识别[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(1): 212–217.
- GUO Hui, YANG Keming, ZHANG Wenwen, et al. Spectra recognition of corn pollution degree under copper and lead ion stress[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(1): 212–217. (in Chinese)
- [31] 邹红玉, 郑红平. 浅述植被“红边”效应及其定量分析方法[J]. 遥感信息, 2010(4): 112–116.
- ZOU Hongyu, ZHENG Hongping. The effect and method of quantitative analysis of “Red Edge” of vegetation[J]. Remote Sensing Information, 2010(4): 112–116. (in Chinese)
- [32] 刘素红, 刘新会, 侯娟, 等. 植物光谱应用于白菜铜胁迫响应研究[J]. 中国科学(E辑: 技术科学), 2007, 37(5): 693–699.
- LIU Suhong, LIU Xinhui, HOU Juan, et al. Study on response to Cd stress of *Brassica campestris* with reflectance spectroscopy[J]. Science China Technological Sciences, 2007, 37(5): 693–699. (in Chinese)