

张 晶, 张 珏, 王 辉, 等. 甜菜光谱与生长信息相关性分析[J]. 江苏农业科学, 2018, 46(3): 132–136.
doi:10.15889/j.issn.1002-1302.2018.03.034

甜菜光谱与生长信息相关性分析

张 晶¹, 张 珏^{1,2}, 王 辉¹, 田海清¹, 李 斐³

(1. 内蒙古农业大学机电工程学院, 内蒙古呼和浩特 010018; 2. 内蒙古师范大学物理与电子信息学院, 内蒙古呼和浩特 010022;
3. 内蒙古农业大学生态环境学院, 内蒙古呼和浩特 010019)

摘要:利用不同光谱预处理方法(卷积平滑、一阶微分、多元散射校正、标准正态变换)对甜菜光谱数据进行处理, 研究不同预处理方法对光谱与甜菜生长信息(SPAD 值、生物量、叶片含氮量)相关性的影响。结果表明:经多元散射校正预处理后的光谱数据与甜菜冠层叶片 SPAD 值相关性最高, 特别在 727 nm 附近, $r = -0.8027$; 通过一阶微分处理后的光谱数据与甜菜生物量、叶片含氮量相关性最高。研究结果为后续氮素预测模型的建立提供了理论依据。

关键词:甜菜; 光谱; 预处理; 反射率; 相关性

中图分类号: S566.301 **文献标志码:** A **文章编号:** 1002-1302(2018)03-0132-05

甜菜是世界第二大制糖原料, 由其制得的糖量占世界食糖总量的 20%。甜菜也是我国仅次于甘蔗的重要糖料作物, 其产糖量占我国食糖总产量的 10%, 在我国东北、华北和西北的许多农村经济中占有重要地位^[1]。

目前我国甜菜产区普遍存在单产偏低或单产高但含糖率低的问题, 造成这些问题的原因在于甜菜生长期没有合理地施肥, 尤其是氮肥对甜菜单产及其含糖率的影响很大^[2]。在作物生产中, 准确、快速、经济地测定作物的氮素营养状况, 可以及时、精确地指导田间氮肥用量, 以获得最大的经济效益和最小的环境污染程度^[3]。近年来, 随着科学技术水平的不断提高, 氮素营养诊断技术正从传统的实验室间接检测向现场直接无损检测方向发展^[4]。

近红外光谱技术是一种无损、无污染的分析技术, 具有光谱范围广、波段多、光谱分辨率高、数据量大等优点, 可以用来监测作物叶片和冠层生化组分的状况和变化, 被广泛应用于食品、农业等领域^[5]。国内外学者已经利用近红外光谱技术在小麦^[6]、水稻^[7]、棉花^[8]、油菜^[9]等作物上进行了深入研究。王人潮等认为, 诊断水稻氮素营养水平的叶片光谱敏感波段范围为 760~900、630~660、530~560 nm^[10]; Thomas 等发现, 甜椒叶片含氮量与 550~675 nm 波长间叶片的反射系数高度相关^[11]; 薛利红等认为, 通过光谱分析可以识别不同栽培措施和生长状况水稻群体^[12]; 景娟娟等研究了不同氮素水平下小麦光谱反射特征、导数光谱特征的变化规律^[13]。

氮肥的施加量会直接影响甜菜叶片的颜色、形态结构以及其他生长信息, 从而影响甜菜的光谱特性^[14]。因此, 研究甜菜冠层的高光谱特性与叶片的 SPAD 值、地上生物量和全

氮等生长信息的关系, 就可以估测甜菜体内的氮素含量, 从而科学地指导农事活动^[15]。

在获取光谱数据的过程中, 会受到环境及人员操作等外界因素的影响, 检测仪器在采集数据过程中也会受到杂散光、样本背景、电子噪音和仪器性能等因素的干扰, 使得获取的原始光谱数据存在大量噪声^[16]。为了提高光谱分析的准确度, 需要对原始光谱进行预处理。目前, 近红外光谱预处理中经常使用的预处理方法有平滑、微分、标准正态变量变化与多元散射校正等^[17-18]。

本试验拟研究多种光谱预处理方法, 并且通过分析各种预处理方法得到的光谱数据与甜菜生长信息的相关性, 最终确定最佳光谱预处理方法, 以便为后续的氮素预测模型研究提供有利的理论依据。

1 材料与方法

1.1 试验设计

本试验于 2014 年在内蒙古赤峰市松山区太平镇甜菜规模种植区域开展, 试验甜菜品种为 KWS1676, 甜菜幼苗在大棚内培育, 于 5 月中下旬移栽至试验田内, 收获时间在 9 月下旬至 10 月上旬。试验小区面积 40 m², 行距 50 cm, 株距 25 cm, 设 4 个重复试验, 试验小区按完全随机排列布置。本试验为单因素(N)试验, 共设 7 个氮肥水平(N₁、N₂、N₃、N₄、N₅、N₆、N₇), 施肥量依次为 0、15、32.5、76、108.5、163、217.5 kg/hm², 田间管理按常规方式进行。

1.2 冠层光谱测定

采用美国 ASD(全称 Analytical Spectral Devices)公司生产的 ASD Qualityspec 光谱仪测定甜菜冠层光谱信息, 该光谱仪的测量波长范围是 350~1 830 nm, 其中 350~1 000 nm 采样间隔为 1.4 nm, 光谱分辨率为 3 nm; 1 000~1 830 nm 光谱采样间隔为 2 nm, 光谱分辨率为 10 nm。光谱数据的采集选择晴朗、无云、无风时进行, 时间定在北京时间 10:00—14:00。数据采集时, 光纤探头垂直向下, 距离甜菜冠层的垂直高度依据样品冠层的大小及探头视场角确定, 使样品冠层恰能位于探头视场范围内。依据采样小区甜菜长势, 选择能

收稿日期: 2016-09-07

基金项目: 国家自然科学基金(编号: 41261084); 内蒙古自然科学基金(编号: 2016MS0346); 国家现代农业产业技术体系专项基金(编号: CARS-210402)。

作者简介: 张 晶(1992—), 女, 内蒙古乌兰察布人, 硕士研究生, 从事农牧业机械智能化研究。E-mail: 1005571822@qq.com。

通信作者: 田海清, 博士, 教授, 博士生导师, 从事农牧业机械智能化研究。E-mail: hqtian@126.com。

代表整个种植区内植株生长状况的样品,且每个试验小区在光谱采集前进行参考白板校正。图 1 为甜菜叶丛生长期在不同氮素水平下的冠层反射光谱曲线。

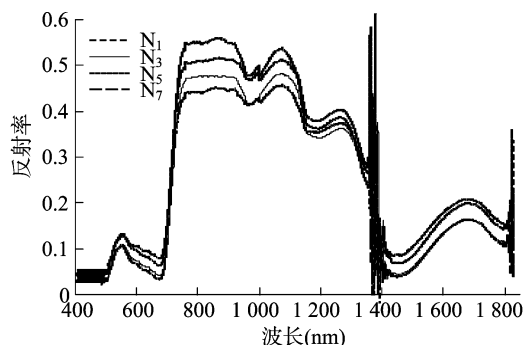


图1 不同氮素水平冠层光谱响应曲线

从图 1 可以看出,不同氮素水平下甜菜冠层光谱响应曲线的变化趋势相同,但光谱响应曲线的差异也较明显:在可见光(550~680 nm)波段,不同氮肥水平甜菜冠层的反射率都较低,而且与施氮水平呈负相关,在 550 nm 左右的反射率最高,表现出绿峰处的强反射特征;在 680~750 nm 红边处,各施氮处理对甜菜冠层光谱反射率略有影响;在近红外(750~1100 nm)波段,甜菜冠层的反射率随氮素的增加而增大。由光谱曲线的总变化趋势可知,近红外波段的反射率随施氮量的增大而提高,可见光波段的反射率随施氮量增加而降低,这主要与不同施氮处理下甜菜冠层叶绿素含量、叶面积覆盖度等生理生化指标有关。

1.3 生长信息测定

1.3.1 植株 SPAD 值测定 采集甜菜冠层光谱信息后,采用便携式叶绿素仪 SPAD-502 测定甜菜叶片的 SPAD 值,为了提高测量的精度,对采样点的甜菜植株叶片进行 10~20 次测定,取其平均值作为该采样小区的 SPAD 值。

1.3.2 植株生物量测定 测定冠层光谱及 SPAD 值后,将甜菜样品地上茎叶部分、地下块根分开,使用电子天平分别测定鲜质量,之后放入牛皮纸袋,在烘箱内于 105℃ 杀青 30 min,再于 70℃ 烘至恒质量(即为干质量)。

1.3.3 植株叶片含氮量测定 采用微量凯氏定氮法测定植株氮含量。将植株样品粉碎,与浓硫酸、催化剂一同加热消化,使蛋白质充分分解。分解得到的氨与硫酸结合生成硫酸铵,之后碱化蒸馏游离,用硼酸吸收,最后用盐酸标准溶液滴定。计算氮素含量的公式如下:

$$X = [(V_1 - V_2) \times N \times 0.014] / [m \times (10/100)] \times F \times 100\% \quad (1)$$

式中: X 为样品中蛋白质的全氮含量, g/kg; V_1 为样品消耗硫酸或盐酸标准液的体积, mL; V_2 为盐酸标准溶液的体积, mL; N 为硫酸或盐酸标准溶液的当量浓度, mol/L; m 为样品的质量(g)或体积(mL); F 为氮换算为蛋白质的系数,为 6.25。

2 光谱数据预处理

2.1 平滑

光谱平滑预处理的目标是去除随机高频误差。如果原始光谱数据存在高频噪声,可以通过对一定窗口范围内的波长数进行拟合或者平均运算来获取该波长点的最佳估算值,以

减少噪声对该波长点数值的干扰,提高信噪比^[19]。

Savitzky-Golay 卷积平滑算法由 Savitzky 和 Golay 提出,采用该算法对原始光谱进行处理时,先采用最小二乘拟合系数建立滤波函数,再对移动窗口内的波长点数据进行多项式的最小二乘拟合^[20]。拟合的表达式如下:

$$\hat{x}_i = a_0 + a_1 \lambda_i + a_2 \lambda_i^2 \quad (2)$$

式中: \hat{x}_i 为平滑预处理后的光谱; a_0 、 a_1 、 a_2 为二次方程式系数。

$$\varepsilon = \sum_{j=1-n}^{i+n} (\hat{X}_j - X_j)^2 = \sum_{j=1-n}^{i+n} (a_0 + a_1 \lambda_j + a_2 \lambda_j^2 - X_j)^2 \quad (3)$$

式中: X_j 为第 j 列光谱值。

令 $\frac{\partial \varepsilon}{\partial a_i}$, 联立解方程组可得到二项式系数。

2.2 微分

一阶微分(first derivative)和二阶微分(second derivative)是光谱分析中使用较多的预处理方法,该方法可以减少由于光照角度、光程和样本表面不均匀等造成的光谱基线漂移,同时还可以有效地提高光谱分辨率和灵敏度。常用的光谱微分方法是直接差分法^[21]。使用差分法时,关键要选取适当的差分宽度,避免差分过程中引入较大的噪声。

一阶微分和二阶微分的计算公式如下:

$$FDR_{\lambda_j} = \frac{dR}{d\lambda} = \frac{R_{\lambda_{j+1}} - R_{\lambda_j}}{\Delta\lambda} \quad (4)$$

$$SDR_{\lambda_j} = \frac{d^2R}{d\lambda^2} = \frac{d}{d\lambda} \left[\frac{dR}{d\lambda} \right] = \frac{R_{\lambda_{j+2}} - 2R_{\lambda_{j+1}} + R_{\lambda_j}}{(\Delta\lambda)^2} \quad (5)$$

式中: λ_j 为第 j 波段; FDR_{λ_j} 为波段 j 和波段 $j+1$ 之间的光谱一阶微分; SDR_{λ_j} 为波段 j 和波段 $j+2$ 之间的光谱二阶微分; R_{λ_j} 、 $R_{\lambda_{j+1}}$ 、 $R_{\lambda_{j+2}}$ 分别为第 j 、 $j+1$ 、 $j+2$ 波段的原始光谱反射率; $\Delta\lambda$ 为波段 $j+1$ 和波段 j 之间的波长差距。

2.3 多元散射校正

多元散射校正(multiplicative scatter correction,简称 MSC)是由 Isaksson 和 Naes 提出的一种化学计量学算法。该算法通过对每个波长点的光谱数据进行散射校正,可以有效地消除散射影响,增强了与目标成分含量相关的光谱信息^[22]。首先要求建立一个待测样品的“理想光谱”,即对获得的样品光谱进行计算时,光谱的变化与样品中的成分含量满足直接的线性关系。然后以该光谱为标准要求对所有其他样品的近红外光谱进行修正。

在一般情况下,以所有光谱的平均光谱作为一个“理想光谱”。通过每条光谱与平均光谱进行最小二乘法^[23]拟合,可以很好地消除线性误差^[24]。具体计算过程如下:

(1) 计算样品平均光谱(理想光谱):

$$\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n} \quad (6)$$

(2) 线性回归,并用最小二乘法求取回归系数 a_i 、回归常数 b_i :

$$X_i = a_i \bar{X} + b_i \quad (7)$$

(3) 对每条光谱进行校正:

$$X_{i, MSC} = \frac{a_i X_i + b_i}{a_i} \quad (8)$$

式中: X_i 为样本光谱; n 为样本光谱的数量,个; \bar{X} 为平均光

谱; a_i 为回归系数; b_i 为回归常数; $X_{i,MSC}$ 为校正后的光谱值。

2.4 标准正态变换

标准正态变换 (standard normal variate transformation, 简称 SNV) 类似于多元散射校正, 为了减少样品由于固体颗粒的大小、表面散射以及光程变化造成的光谱误差, 标准正态变换对每条光谱进行单独校正^[25]。

利用标准正态变换预处理后的光谱值的计算公式如下:

$$X_{i,SNV} = \frac{X_{i,k} - X_i}{\sqrt{\frac{\sum_{k=1}^m (X_{i,k} - X_i)^2}{m-1}}} \quad (9)$$

式中: $X_{i,SNV}$ 为第 i 个样品标准正态变换后的光谱值; x_i 为第 i 个样品光谱的平均值; $k=1,2,\dots,m$, 其中 m 为波长数。

3 冠层光谱相关性分析

采用平滑、微分、多元散射校正和标准正态变换 4 种预处理

理方法对甜菜冠层的原始光谱数据进行预处理, 并将原始光谱数据和处理后的光谱数据分别与甜菜植株 SPAD 值、生物量以及叶片含氮量进行相关性分析, 其相关关系曲线分别如图 2、图 3、图 4 所示。

由图 2 可以看出, 各曲线上都有明显的蓝边和黄边特征光谱变化区, 但不同预处理下的冠层光谱反射率和 SPAD 值相关关系曲线差异较大。平滑后的光谱响应曲线与原始光谱曲线几乎相同, 但改善了原始光谱在 1 350 ~ 1 450 nm 波段存在的噪声影响。微分处理后的效果较好, 绿峰处的相关性达到 -0.668 78; 在 620 ~ 670 nm 波段范围内, 冠层光谱反射率与 SPAD 值呈极显著正相关, 特别在 645 nm 处, 相关性达到 0.682 03。标准正态变换和多元散射校正预处理效果最佳, 前者相关性在 726 nm 处达到 -0.799 68, 后者在 727 nm 处达到 -0.802 71。综上所述, 采用多元散射校正比较适合甜菜 SPAD 值的测定。

由图 3 可以看出, 原始光谱在 1 370 nm 附近存在较大的

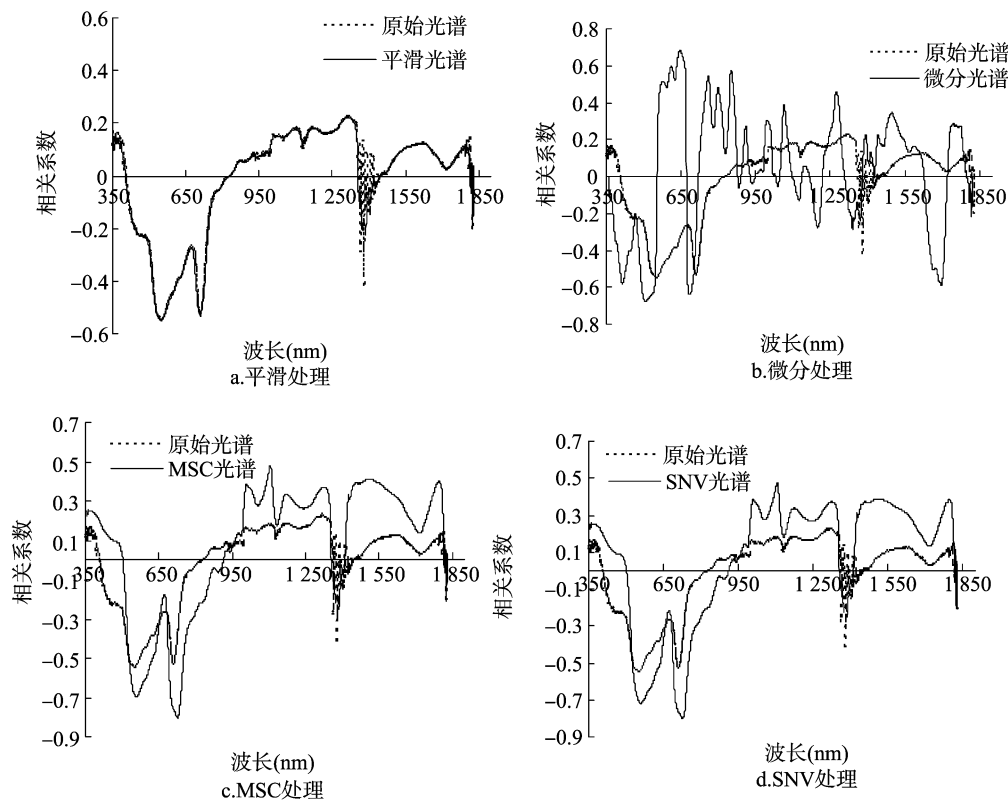


图2 不同预处理下 SPAD 值与光谱的相关性

噪声, 经过平滑处理后得到改善, 但是曲线相关度不高。经标准正态变换和多元散射校正预处理后的光谱曲线在 706 nm 处的相关性最高, 二者在红边位置 (680 ~ 750 nm) 和近红外 (850 ~ 950 nm) 处, 冠层光谱反射率与生物量呈显著正相关。微分处理曲线上有很明显的蓝边、黄边和红边等特征光谱变化区, 绿峰处反射率与生物量的相关度可达到 -0.599 98; 红边位置 (680 ~ 750 nm) 的反射率与生物量呈显著正相关。因此可知, 微分光谱预处理方法比较适用于甜菜植株生物量的测定。

由图 4 可以看出, 经过平滑处理后的光谱曲线少了很多毛刺, 特别在 1 365 ~ 1 372 nm 附近表现得尤为明显, 相关度

为 0.061 63 ~ 0.087 08, 且光谱曲线有明显的黄边、红边特征光谱区。标准正态变换和多元散射校正预处理后的曲线图相似, 前者在 718 nm 处的相关度为 0.647 43, 而后者可达到 -0.654 784。微分处理后光谱曲线有明显的蓝边和红边特征光谱区, 在 480 ~ 550 nm 波段, 冠层光谱反射率与叶片含氮量呈显著正相关, 绿峰处的相关度可达到 0.667 88; 而在 795 nm 处的相关度为 -0.717 41。因此可见, 微分光谱比较适用于甜菜冠层叶片含氮量的测定。

不同预处理方法与甜菜冠层的 SPAD 值、生物量和叶片含氮量最大相关系数如表 1 所示。可见利用多元散射校正进

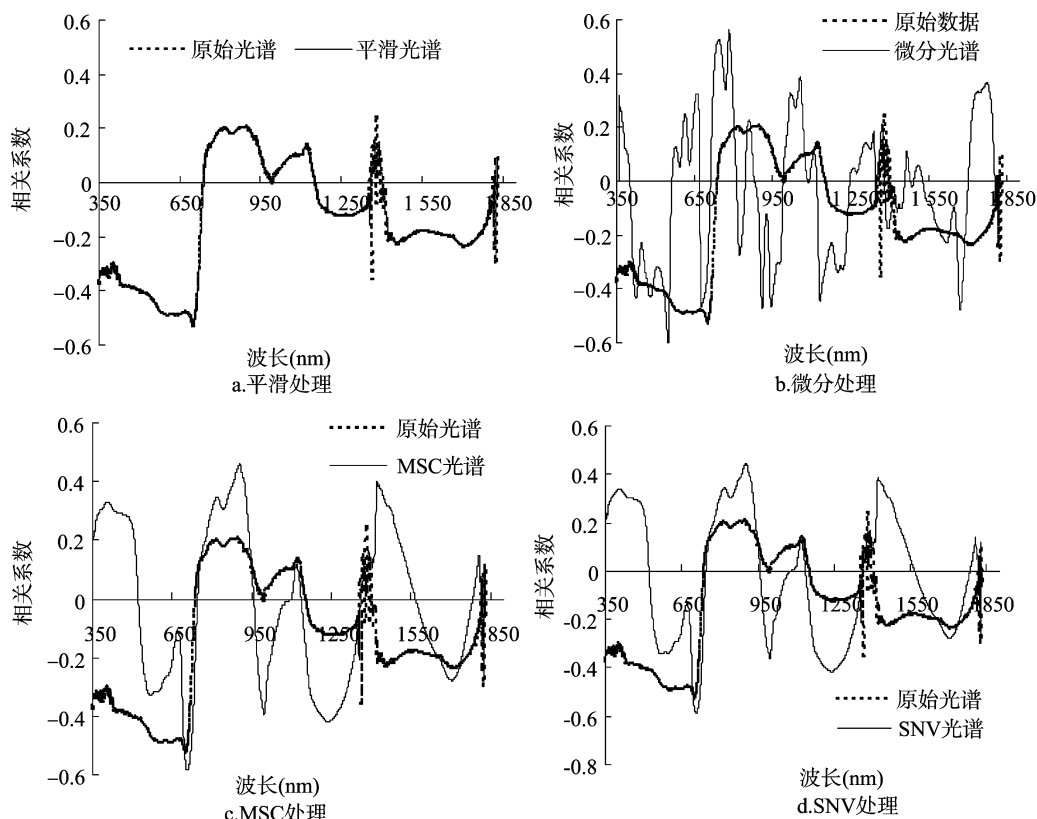


图3 不同预处理下生物量与光谱的相关性

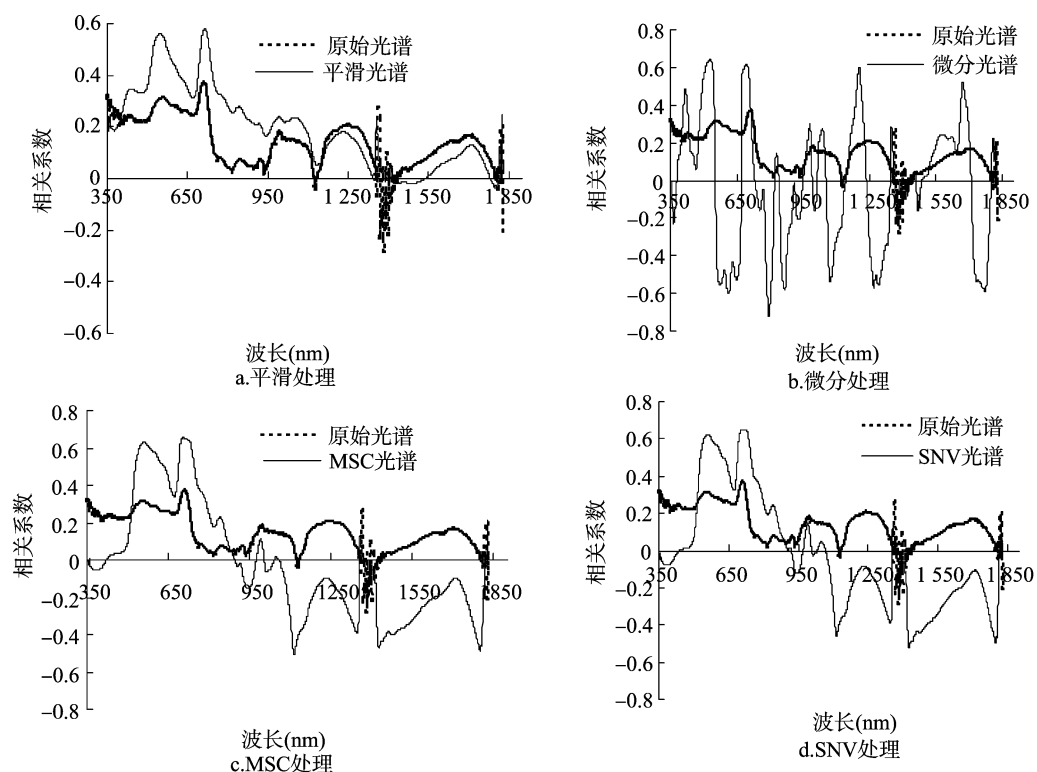


图4 不同预处理下叶片含氮量与光谱相关性

行光谱预处理得到的光谱数据与甜菜植株 SPAD 值相关度最高。另外,经过多元散射校正去噪后的光谱曲线更加收敛紧

凑,可以有效消除散射影响所导致的基线线性平移和倾斜偏移现象。对于生物量和叶片含氮量,通过一阶微分得到的光

表 1 不同预处理方法下甜菜光谱和 SPAD 值、生物量、冠层叶片含氮量最大相关系数

处理方法	生物量		SPAD 值		叶片含氮量	
	Max 相关系数	对应波长 (nm)	Max 相关系数	对应波长 (nm)	Max 相关系数	对应波长 (nm)
原始光谱	-0.530 62	698	-0.550 89	550	0.368 99	710
一阶微分	-0.599 98	548	0.682 03	645	-0.717 41	795
平滑	-0.530 62	698	-0.535 73	537	0.583 15	714
多元散射校正	-0.583 59	707	-0.802 71	727	0.654 78	707
标准正态变换	-0.586 76	706	-0.799 68	726	0.647 43	718

谱数据与二者的相关度最高,而且微分光谱曲线上有较多的波峰和波谷,说明微分预处理可以更好地提取与生物量和叶片含氮量相关的光谱。

4 结论

本研究采用 4 种预处理方法(卷积平滑、一阶微分、多元散射校正、标准正态变换)对甜菜冠层光谱数据进行预处理,并对预处理后的光谱数据分别与甜菜的 SPAD 值、生物量以及叶片含氮量进行相关性分析。

(1)在甜菜 SPAD 值与光谱反射率的相关性分析中,采用多元散射校正预处理后的光谱相关性最好,尤其在 727 nm 附近,相关性最明显。

(2)在甜菜生物量与冠层光谱的相关性分析中,4 种预处理后的光谱数据与甜菜生物量的相关性都达到了显著水平,其中一阶微分的预处理效果最好,多元散射校正和标准正态变换次之。

(3)在甜菜叶片含氮量与光谱反射率的相关性分析中,一阶微分光谱的相关性最高,且其相应的相关性曲线存在较多的波峰和波谷,表明微分变换有利于提取更多与叶片含氮量相关的光谱信息,采用多元散射校正和标准正态变换处理后的光谱相关性次之。

参考文献:

[1]姚文秋. 现代甜菜产业技术[M]. 北京:中国农业大学出版社, 2014:11-13.

[2]王秋红,周建朝,王孝纯. 采用 SPAD 仪进行甜菜氮素营养诊断技术研究[J]. 中国农学通报,2015,31(36):92-98.

[3]夏文豪,刘 涛,关 钰,等. 硝酸盐反射仪和 SPAD 法对玉米氮素营养诊断的比较[J]. 中国生态农业学报,2016,24(10):1339-1346.

[4]李岚涛,张 萌,任 涛,等. 应用数字图像技术进行水稻氮素营养诊断[J]. 植物营养与肥料学报,2015,21(1):259-268.

[5]石吉勇,邹小波,赵杰文,等. 近红外光谱技术快速无损诊断黄爪植株氮、镁元素亏缺[J]. 农业工程学报,2011,27(8):283-287.

[6]王丽爱,马 昌,周旭东,等. 基于随机森林回归算法的小麦叶片 SPAD 值遥感估算[J]. 农业机械学报,2015,46(1):259-265.

[7]孙玉焕,杨志海. 水稻氮素营养诊断方法研究进展[J]. 安徽农业科学,2008,36(19):8035-8037,8049.

[8]黄春燕,王登伟,曹连莆,等. 棉花地上鲜生物量的高光谱估算模型研究[J]. 农业工程学报,2007,23(3):131-135.

[9]孔汶汶,刘 飞,邹 强,等. 基于近红外光谱技术的油菜叶片丙二醛含量快速检测方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2011,31(4):988-991.

[10]王人潮,黄敬峰. 水稻遥感估产[M]. 北京:中国农业出版社, 2002:28-38.

[11]Thomas J R, Gausman H W. Leaf reflectance vs. leaf chlorophyll and carotenoid concentration for eight crops[J]. Agronomy Journal, 1976,69(5):799-802.

[12]薛利红,曹卫星,罗卫红. 不同栽培措施下拔节期水稻冠层反射光谱特征及其模糊聚类分析[J]. 中国水稻科学,2004,18(2):151-155.

[13]景娟娟,王纪华,王锦地,等. 不同氮素营养条件下的冬小麦生理及光谱特性[J]. 遥感信息,2003,21(2):28-31.

[14]王树堂,黄立功,张成建,等. 氮素对甜菜代谢、品质和产量的影响[J]. 农业科技通讯,2012,5(5):184-185,190.

[15]李向阳,刘国顺,杨永锋,等. 烤烟叶片高光谱参数与多种生理生化指标关系研究[J]. 中国农业科学,2007,40(5):987-994.

[16]李晓飞. 小波分析在光谱数据去噪处理中的应用[D]. 上海:上海交通大学,2009:1-2.

[17]褚小立,袁洪福,陆婉珍. 近红外分析中光谱预处理及波长选择方法进展与应用[J]. 化学进展,2004,16(4):528-542.

[18]尼 珍,胡昌勤,冯 芳. 近红外光谱分析中光谱预处理方法的作用及其发展[J]. 药物分析杂志,2008,28(5):824-829.

[19]王 欣. 近红外分析中光谱预处理方法的研究与应用进展[J]. 科技资讯,2013(15):2.

[20]Zhao A X, Tang X J, Zhang Z H, et al. Optimizing Savitzky-Golay parameters and its smoothing pretreatment for FTIR gas spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016,36(5):1340-1344.

[21]Medeghini L, Mignardi S, De Vito C, et al. Evaluation of a FTIR data pretreatment method for principal component analysis applied to archaeological ceramics [J]. Microchemical Journal, 2016, 125: 224-229.

[22]王志辉,丁丽霞. 基于叶片高光谱特性分析的树种识别[J]. 光谱学与光谱分析,2010,30(7):1825-1829.

[23]孙 祥,杨信廷,刘燕德,等. 基于最小二乘法的暂培箱温度调控模型[J]. 江苏农业科学,2016,44(3):426-430.

[24]王动民,纪俊敏,高洪智. 多元散射校正预处理波段对近红外光谱定标模型的影响[J]. 光谱学与光谱分析,2014,34(9):2387-2390.

[25]王伟明,董大明,郑文刚,等. 梨果糖浓度近红外漫反射光谱检测的预处理方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2013,33(2):359-362.