

基于光谱数据降维的农田土壤—作物全氮含量协同检测

张 瑶 崔云天 邓秋卓 吴孟璇 李民赞 田泽众

(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)

摘要:为了提高农田土壤—作物全氮一体化检测精度,以冬小麦冠层光谱为研究对象,定量分析了4种数据降维方法(保持邻域嵌入法(NPE)、t分布随机近邻嵌入法(t-SNE)、拉普拉斯映射法(LE)和局部线性嵌入法(LLE))在冠层光谱特征提取及作物、土壤全氮含量检测精度。分别采集了豫麦49-198、周麦27、矮抗58和西农509等4个品种的冬小麦在4个施氮水平下的作物冠层光谱反射率以及对应的作物、土壤全氮含量。选取波段400~900 nm的可见光与部分近红外波段分别进行NPE、t-SNE、LE以及LLE数据降维处理,随后在4组降维特征的基础上,建立了随机森林回归模型。对比全谱信息以及4组降维特征在作物、土壤全氮含量的预测性能表明,利用LLE-RF混合方法取得了最优的氮素预测效果,作物全氮含量预测决定系数 R^2 为0.915 0,预测均方根误差(RMSEP)为0.221 2 mg/kg;土壤全氮含量预测决定系数 R^2 为0.800 9;RMSEP仅为0.008 5 mg/kg,均优于原始全谱数据以及其他3组降维特征。实验结果表明,利用LLE降维后得到的特征光谱信息可有效地表征作物全氮含量以及土壤全氮含量。

关键词:冬小麦;土壤;全氮含量;协同检测;数据降维;光谱数据

中图分类号:TP79; S127 文献标识码:A 文章编号:1000-1298(2021)S0-0310-06

Integrated Detection of Soil – Crop Nitrogen Content in Agricultural Fields Based on Spectral Data Downscaling

ZHANG Yao CUI Yuntian DENG Qiuzhuo WU Mengxuan LI Minzan TIAN Zezhong

(Key Laboratory for Modern Precision Agriculture System Integration Research, Ministry of Education,
China Agricultural University, Beijing 100083, China)

Abstract: In order to improve the accuracy of integrated soil – crop total nitrogen detection in agricultural fields, the canopy spectra of winter wheat were used as a research object to quantify the accuracy of four data reduction methods (neighborhood preserving embedding (NPE), t-distribution stochastic neighbor embedding (t-SNE), Laplacian eigenmaps (LE) and locally linear embedding (LLE)) in canopy spectral feature extraction and crop and soil total nitrogen content detection. The canopy spectral reflectance and the corresponding crop and soil total N contents of four varieties of winter wheat, namely Yumai 49-198, Zhoumai 27, Aikang 58 and Xinong 509, were collected at four levels of N application, respectively. The NPE, t-SNE, LE and LLE were used to downscale the data in the visible and partial near-infrared bands from 400 nm to 900 nm, and subsequently, a random forest regression model was developed based on the four sets of downscaled features. Comparison of the full-spectrum information and the prediction performance of the four sets of downscaled features for crop and soil total nitrogen content showed that the hybrid LLE – RF method achieved the best nitrogen prediction results with an R^2 value of 0.915 0 for the coefficient of determination of crop total nitrogen content prediction and a root mean square error (RMSEP) of 0.221 2 mg/kg for crop total nitrogen prediction. The coefficient of determination R^2 for prediction of total soil nitrogen content was 0.800 9. The RMSEP was only 0.008 5 mg/kg, which were all better than that of the original full-spectrum data as well as the other three sets of downscaled features. The experimental results showed that the LLE downscaled spectral information can effectively characterize the crop total nitrogen content and soil total nitrogen content.

Key words: winter wheat; soil; total nitrogen content; integrated detection; data downscaling; spectral data

收稿日期:2021-07-15 修回日期:2021-09-15

基金项目:国家自然科学基金项目(41801245)、广西创新驱动发展专项资金项目(桂科 AA18118037-3)和中央高校基本科研业务费专项资金项目(2021AC026)

作者简介:张瑶(1988—),女,副教授,主要从事农业定量遥感应用研究,E-mail: zhangyao@cau.edu.cn

0 引言

氮素是植物生长过程中最为重要的营养元素之一,是组成多种光合色素的必备元素^[1]。农田氮素主要来源于人工施氮,合理化施氮在作物正常生长、产量品质提升、氮肥利用率提升、保护环境等方面起到了十分重要的作用。快速精确地获取作物与土壤全氮含量是施氮合理化的重要前提,也是农业可持续发展的必要条件^[2]。

与传统的标准化学分析方法相比^[3],基于光谱学原理的土壤、作物全氮获取方法在实时、便捷、低成本等方面均表现出了显著的优势,解决了实验室化学分析方法具有破坏性、时效性差等缺点。

近年来,国内外学者先后利用光谱分析技术对土壤、作物的全氮含量进行了预测研究,并取得了阶段性的成果。FEMANDEZ 等^[4]利用波长 660 nm 和 454 nm 的线性组合估测了冬小麦植株的全氮含量,用极少数的光谱波段完成对全氮含量的预测。WANG 等^[5]研究表明冬小麦中下层叶片光谱与全氮含量关系密切,可被用于全氮含量监测。MOLAN 等^[6]研究表明,土壤的反射光谱是土壤养分含量、理化性质的综合体现,可以进一步建立土壤反射光谱与养分含量的反演模型。然而现有研究多是针对作物、土壤单一目标进行全氮检测,对于农田土壤、作物全氮含量的协同检测研究相对较少。此外,利用土壤表面反射光谱信息进行土壤全氮含量检测,多是在裸土情况下进行。随着农田植被覆盖,土壤光谱检测极易受到环境作物的影响,在一定程度上

限制了其对全生育期土壤全氮含量检测的可能。

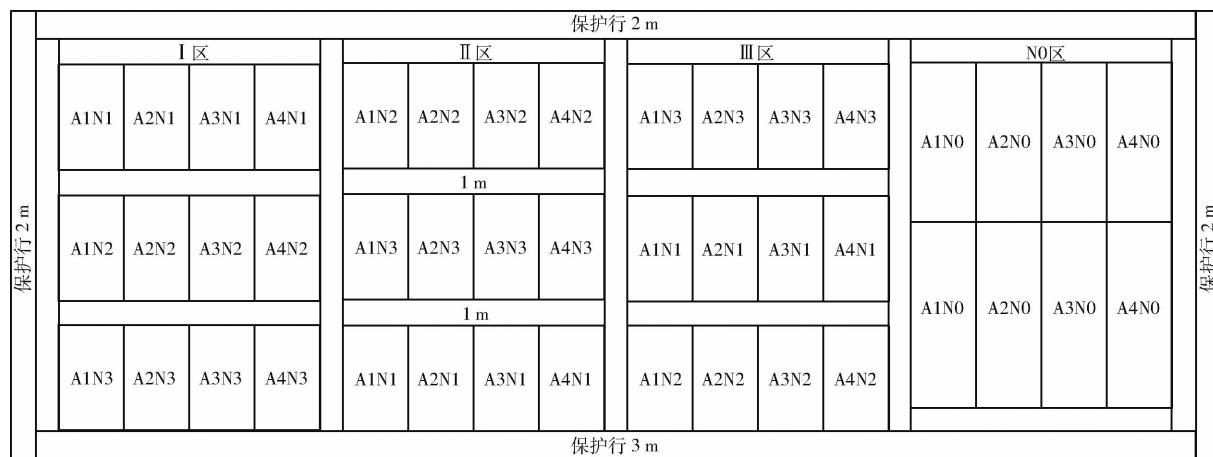
作物与土壤是一个完整的系统,土壤为作物供应所需的全氮营养,作物的长势在一定程度上体现土壤全氮含量的差异^[7]。DIKER 等^[8]和 CAMBOU 等^[9]通过对冠层反射光谱与植株含氮量、植株含氮量与土壤含氮量进行相关性研究,表明作物冠层光谱与土壤全氮含量之间存在间接关系。李广信等^[10]研究表明土壤氮素类型与冠层光谱存在一定的相关关系。因此利用作物冠层光谱,构建作物全氮含量、土壤全氮含量诊断模型,实现农田作物、土壤全氮协同检测具有可行性。

本文以冬小麦为研究对象,进一步探究冠层光谱与作物含氮量、土壤含氮量的关系。针对光谱数据波段多、冗余严重等特点^[11],探究不同数据降维方法对特征提取、建模精度的影响,以发现适用于作物全氮以及土壤全氮监测的光谱降维方法。

1 材料与方法

1.1 研究区概况

本试验在漯河市郾城区进行。试验采用随机区组设计,4 个供试品种为豫麦 49-198(A1)、周麦 27(A2)、矮抗 58(A3)和西农 509(A4),4 个施肥水平 N0(0 kg/hm²)、N1(120 kg/hm²)、N2(225 kg/hm²)、N3(330 kg/hm²),小区面积为 130 m²,行距 20 cm,重复 3 次。播种方式为机械播种,氮肥基追比为 6:4,基肥于播种前施入,追肥在拔节期施入,磷、钾肥于播种期作为基肥一次施入,其他栽培管理措施同一般高产田。田间小区如图 1 所示。



冠层光谱反射率。与光谱测量同步,每个小区在各个主要生育时期选取具有代表性小麦10株,装入档案袋,用于后续的实验室理化参数检测。采集的光谱反射率如图2所示。

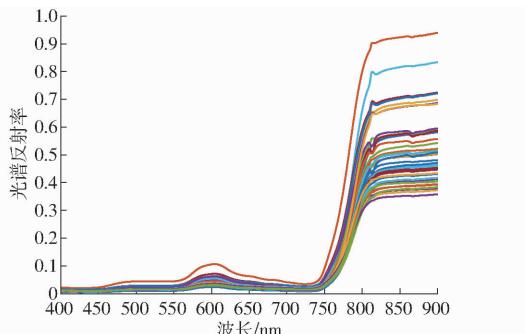


图2 作物冠层光谱反射率曲线

Fig. 2 Crop canopy spectral reflectance curves

1.3 植株全氮含量测定

叶片全氮含量测量采用瑞典FOSS公司的KjeltecTM 2300型全自动凯氏定氮仪完成。将采集的叶片样本在105℃下干燥至质量恒定,称取0.4g并混合6.2g催化剂(K_2SO_4 、 $SO_4 \cdot 5H_2O$ 按30:1混合研磨)加12mL浓硫酸进行硝化,冷却后利用凯氏定氮仪进行蒸馏,测得叶片全氮含量^[12]。

1.4 土壤全氮含量测定

土壤全氮含量测定同样采用全自动凯氏定氮仪(FOSS-2300型,FOSS公司,瑞典)。将采样后的土壤样本在60℃下干燥24 h,称取2.0 g并混合6.2 g催化剂(K_2SO_4 、 $SO_4 \cdot 5H_2O$ 按30:1混合研磨)加20mL浓硫酸进行硝化,冷却后利用凯氏定氮仪进行蒸馏,测得土壤全氮含量^[12]。

1.5 数据处理方法

1.5.1 数据降维方法

光谱数据以其波段多、数据量大等特点蕴含了丰富的地物信息,但同时也伴随着冗余度大、模型复杂等缺点。数据降维的程度与质量也影响着所建立模型的精准度,本研究将分别针对以下4种数据降维方法展开讨论。

局部线性嵌入法(Locally linear embedding,LLE)^[13]:局部线性在较小的邻域内认为数据是线性的,所以该方法是将数据用邻域内数据进行线性表示从而实现降维的一种方法,可以保留数据的流形结构。其原理为最小化原有数据与邻域线性表示的差值,获得权重系数 w_{ij} ,即

$$\Delta x = \sum_{i=1}^N \left(\left\| x_i - \sum_{j=1}^k w_{ij} x_j \right\|_2^2 \right) \quad (1)$$

设定数据降维后其邻域表示的权重系数不变,将该权重系数代入,即

$$\Delta y = \sum_{i=1}^N \left(\left\| y_i - \sum_{j=1}^k w_{ij} y_j \right\|_2^2 \right) \quad (2)$$

式中 x —降维前数据

y —降维后数据

N —样本总数

k —邻域内样本总数

Δx —原有数据与邻域线性表示的差值

Δy —降维后数据与其邻域线性表示的差值

最小化该函数,得到降维数据。

保持邻域嵌入法(Neighborhood preserving embedding,NPE)^[14]:与LLE方法类似,是一种注重于保留数据流形结构的数据降维方法,是LLE算法的线性逼近,通过重构权重矩阵来表征其局部线性结构,可以很好地反映数据的流形结构,与LLE类似,该算法首先最小化原有数据与邻域线性表示的差值,利用式(1)获得权重系数 w_{ij} 。

通过求解广义特征向量问题来计算线性降维的线性映射,即

$$XMX^T \alpha = \lambda X \alpha \quad (3)$$

其中 $M = (\mathbf{I} - \mathbf{W})^T(\mathbf{I} - \mathbf{W})$ (4)

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_m)$$

最终得到降维后的数据

$$y_i = A^T x_i \quad (5)$$

式中 λ —特征值

X —数据向量 α —特征向量

W —由权重系数 w_{ij} 构成的矩阵

I —对角矩阵

A —特征值按由大到小排列后计算出的特征向量排列矩阵

t分布随机近邻嵌入法(t-distribution stochastic neighbor embedding,t-SNE)^[15]是一种基于高斯随机近邻嵌入法的降维方法,将代表两点之间相似度的部分用t分布概率代替,可以兼顾数据局部与全局的关系。其基本原理为,通过优化目标函数C获取降维后的数据 y ,即

$$C = \sum_i \sum_j p_{j|i} \lg \frac{p_{j|i}}{q_{j|i}} \quad (6)$$

其中 $p_{j|i} = \frac{S(x^i, x^j)}{\sum_{k \neq i} S(x^i, x^k)}$ (7)

$$q_{j|i} = \frac{S(y^i, y^j)}{\sum_{k \neq i} S(y^i, y^k)} \quad (8)$$

式中 q —降维后数据相似度的概率

p —降维前数据相似度的概率

拉普拉斯映射法(Laplacian eigenmaps,LE)^[16]:

是一种通过建立数据相似关联图来构建数据局部关系的降维方法, 它运用图拉普拉斯的概念对高维特征集进行计算, 并且得到其低维流形表示, 从而将高维数据映射到低维空间。LE 方法首先计算两个样本之间的距离权重, 组成一个权重矩阵 \mathbf{W} , 其第 i, j ($i \neq j$) 个元素权重 W_{ij} 定义为

$$W_{ij} = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\|x_i - x_j\|_2^2}{t}\right) & (\|x_i - x_j\|_2^2 = 0) \\ 0 & (\|x_i - x_j\|_2^2 \neq 0) \end{cases} \quad (9)$$

之后通过最小化该目标函数得到降维结果 Δy 为

$$\Delta y = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N W_{ij} \|y_i - y_j\|_2^2 \quad (10)$$

式中 t ——高斯函数方差, 默认取 2

1.5.2 模型算法构建

随机森林算法 (Random forest, RF) 是一种基于集成学习算法的机器学习算法^[17], 是由多个随机机构成的弱分类器组合而成的强分类器, 是一种十分高效、不易过拟合、受离群点干扰弱且抗干扰能力强的分类回归算法。

数据降维算法与回归模型均采用 Matlab 2019b 软件进行建立。

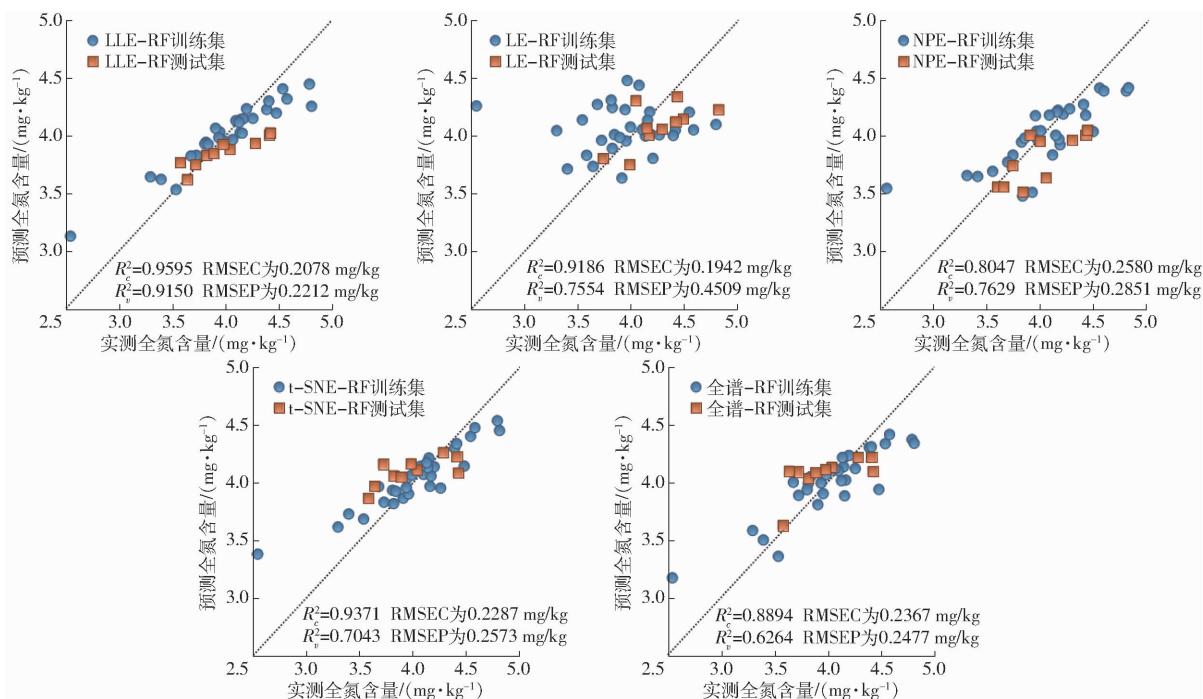


Fig. 3 Crop nitrogen content modelling accuracy

2.3 结果分析

RF 作为一种精确度较高、运算速率较快的机器学习算法, 在光谱数据建模方面有着十分广阔前景。其对于光谱数据的多维度描述可以更加全面地解决光谱数据复杂性较高的问题。

2 结果与分析

2.1 数据降维

由于光谱数据的复杂性, 光谱数据内部存在线性成分与非线性成分, 以此为基准寻找多元化的数据降维方法。以实验为基础, 首先将波段 400 ~ 900 nm 的光谱数据分别使用 4 种不同的方式进行降维处理, 以交叉验证的方法^[18], 确定各降维方法降维后的数据维度如表 1 所示。

表 1 降维后数据维度

Tab. 1 Dimensionality of data after dimensionality reduction

降维方法	NPE	t-SNE	LE	LLE	原始数据
数据维度	12	18	8	18	500

2.2 作物、土壤全氮含量预测模型构建

划分后建模集与预测集比例为 3:1, 并采用随机森林回归模型 (RF) 进行建模。选择决定系数 (R^2) 和均方根误差 (RMSE) 测定模型精度。采用局部线性嵌入法、保持邻域嵌入法、t 分布随机近邻嵌入法、拉普拉斯映射法 4 种数据降维方法及原始数据的 RF 作物与土壤全氮含量建模效果如图 3、4 所示。

在 NPE、t-SNE、LE、LLE 4 种降维方法中, LLE 方法将数据缩减到 18 个维度上, 无论是作物全氮还是土壤全氮, 建立 RF 模型后在测试集上的预测误差均方根 (RMSEP) 最小, 决定系数 (R^2) 最接近于 1, 作物全氮 RMSEP 仅 0.2212 mg/kg, R^2_v 为

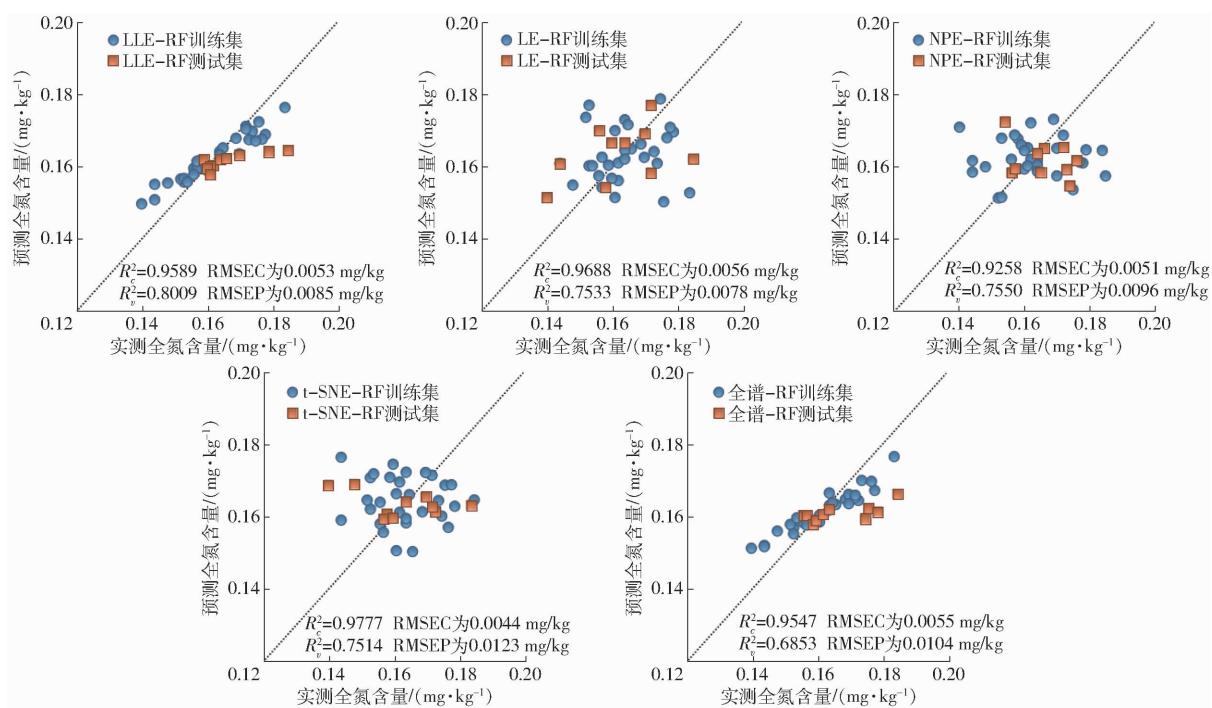


图4 土壤全氮含量建模精度

Fig. 4 Soil nitrogen content modelling accuracy

0.915 0, 土壤全氮 RMSEP 仅 0.008 5 mg/kg, R_p^2 为 0.800 9, 小于原始数据的 RMSEP 原因可能在于: 基于流形学习方法的 LLE 算法可以更好地表达数据内部的流形结构, 这同样与光谱数据的复杂性特征相契合, 可以在一定程度上取得很好的降维效果。

已有文献中, LLE 数据降维方法在土壤中 Cu 元素含量的反演^[19]、马铃薯损伤检测^[20]、猪肉品质分级^[21]等方面取得了一定成效, 在本实验中冬小麦作物与土壤的全氮反演中也取得了一定的效果, 为以后的作物长势分析与预测提供了一种新思路。

3 结束语

波段 400~900 nm 的冠层光谱可有效地表征作

物全氮含量以及土壤全氮含量。为减少数据量以提升运算速率, 通过采用数据降维方法进行数据降维, 在达到数据降维目的的同时提高建模精度。在降维的基础上建立 RF 回归模型进行预测。通过 4 种数据降维方法 (NPE、t-SNE、LE、LLE) 的效果对比, 筛选出最适合冬小麦、土壤全氮含量一体化监测的数据降维方法为 LLE。当其主成分数选择 18 时, 其作物全氮含量预测决定系数 (R_p^2) 为 0.915 0, RMSEP 仅为 0.221 2 mg/kg, 土壤全氮含量预测 R^2 为 0.800 9, RMSEP 仅为 0.008 5 mg/kg, 均低于原始数据的 RMSEP。本研究为农田土壤、作物全氮含量协同检测提供了思路。

参 考 文 献

- [1] 何勇, 赵春江, 吴迪, 等. 作物-环境信息的快速获取技术与传感仪器 [J]. 中国科学: 信息科学, 2010, 40(增刊): 1~20.
- [2] 魏昌龙, 赵玉国, 李德成, 等. 基于相似光谱匹配预测土壤有机质和阳离子交换量 [J]. 农业工程学报, 2014, 30(1): 81~88.
- [3] WEI Changlong, ZHAO Yuguo, LI Decheng, et al. Prediction of soil organic matter and cation exchange capacity based on spectral similarity measuring [J]. Transactions of the CSAE, 2014, 30(1): 81~88. (in Chinese)
- [4] THENG B K G, TATE K R. Interactions of clays with soil organic constituents [J]. Clay Research, 1989, 8: 1~10.
- [5] FEMANDEZ S, VIDAL D, SIMON E, et al. Radiometric characteristics of *Triticum aestivum* cv, Astral under water and nitrogen stress [J]. International Journal of Remote Sensing, 1994, 15(9): 1867~1884.
- [6] WANG Chao, FENG Meichen, YANG Wude, et al. Extraction of sensitive bands for monitoring the winter wheat (*Triticum aestivum*) growth status and yields based on the spectral reflectance [J]. PLoS ONE, 2017, 12(1): e0167679.
- [7] MOLAN Y E, REFAHI D, TARASHTI A H. Mineral mapping in the Maherabad area, eastern Iran, using the HyMap remote sensing data [J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2014, 27: 117~127.
- [8] PAN Yuchun, WANG Jihua, LU Anxiang, et al. Estimation of soil nitrogen accumulation based on remotely-sensed monitoring of winter-wheat growth status [J]. Transactions of the CSAE, 2007, 23(9): 58~63. (in Chinese)
- [9] DIKER K, BAUSCH W C. Radiometric field measurements of maize for estimating soil and plant nitrogen [J]. Biosystems Engineering, 2003, 86(4): 411~420.
- [10] CAMBOU A, CARDINAEL R, KOUAKOUE E, et al. Prediction of soil organic carbon stock using visible and near infrared

- reflectance spectroscopy (VNIRS) in the field [J]. Geoderma, 2016, 261(2): 151–159.
- [10] 李广信, 王超, 冯美臣, 等. 冬小麦冠层光谱与土壤供氮状况相关性研究 [J]. 农业机械学报, 2017, 48(5): 275–281.
LI Guangxin, WANG Chao, FENG Meichen, et al. Correlation between soil nitrogen situation and canopy spectra of winter wheat [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017, 48(5): 275–281. (in Chinese)
- [11] 马永杰, 郭俊先, 郭志明, 等. 基于近红外透射光谱及多种数据降维方法的红富士苹果产地溯源 [J]. 现代食品科技, 2020, 36(6): 303–309.
MA Yongjie, GUO Junxian, GUO Zhiming, et al. Origin tracing of red Fuji apple based on near infrared transmission spectrum and various dimension reduction methods [J]. Modern Food Science and Technology, 2020, 36(6): 303–309. (in Chinese)
- [12] 张瑶, 李民赞, 郑立华, 等. 基于近红外光谱分析的土壤分层氮素含量预测 [J]. 农业工程学报, 2015, 31(9): 121–126.
ZHANG Yao, LI Minzan, ZHENG Lihua, et al. Prediction of soil total nitrogen content in different layers based on near infrared spectral analysis [J]. Transactions of the CSAE, 2015, 31(9): 121–126. (in Chinese)
- [13] LIU X, TOSUN D, WEINER M W, et al. Locally linear embedding (LLE) for MRI based Alzheimer's disease classification [J]. Neuro Image, 2013, 83: 148–157.
- [14] YUAN X, GE Z, YE L, et al. Supervised neighborhood preserving embedding for feature extraction and its application for soft sensor modeling: supervised neighborhood preserving embedding [J]. Journal of Chemometrics, 2016, 30(8): 430–441.
- [15] MAATEN L V D, HINTON G. Visualizing data using t-SNE [J]. Journal of Machine Learning Research, 2008, 9: 2579–2605.
- [16] BELKIN M, NIYOGI P. Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation [J]. Neural Computation, 2003, 15(6): 1373–1396.
- [17] BREIMAN L. Random forests [J]. Machine Learning, 2001, 45(1): 5–32.
- [18] 李民赞. 光谱分析技术及其应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2006.
- [19] 吕杰, 郝宇燕, 崔晓临. 利用可见光近红外的尾矿区农田土壤 Cu 含量反演 [J]. 农业工程学报, 2015, 31(9): 265–270.
LÜ Jie, HAO Ningyan, CUI Xiaolin. Inversion model for copper content in farmland of tailing area based on visible-near infrared reflectance spectroscopy [J]. Transactions of the CSAE, 2015, 31(9): 265–270. (in Chinese)
- [20] 汪成龙, 李小昱, 武振中, 等. 基于流形学习算法的马铃薯机械损伤机器视觉检测方法 [J]. 农业工程学报, 2014, 30(1): 245–252.
WANG Chenglong, LI Xiaoyu, WU Zhenzhong, et al. Machine vision detecting potato mechanical damage based on manifold learning algorithm [J]. Transactions of the CSAE, 2014, 30(1): 245–252. (in Chinese)
- [21] 贾渊, 李振江, 彭增起. 结合 LLE 流形学习和支持向量机的猪肉颜色分级 [J]. 农业工程学报, 2012, 28(9): 147–152.
JIA Yuan, LI Zhenjiang, PENG Zengqi. Pork color grading based on LLE manifold learning and support vector machine [J]. Transactions of the CSAE, 2012, 28(9): 147–152. (in Chinese)

(上接第 251 页)

- [15] LI C, PENG X, JING T, et al. A learning-based approach for leaf detection in traffic surveillance video [J]. Multidimensional Systems & Signal Processing, 2017(11): 1–10.
- [16] ALVARO F, SOOK Y, SANG K, et al. A robust deep-learning-based detector for real-time tomato plant diseases and pests recognition [J]. Sensors, 2017, 17(9): 2022.
- [17] DENG L, WANG Y, HAN Z, et al. Research on insect pest image detection and recognition based on bio-inspired methods [J]. Biosystems Engineering, 2018, 169: 139–148.
- [18] INKYU S, ZONGYUAN G, FERAS D, et al. DeepFruits: a fruit detection system using deep neural networks [J]. Sensors, 2016, 16(8): 1222.
- [19] REN S, HE K, GIRSHICK R, et al. Faster R-CNN: towards real-time object detection with region proposal networks [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis & Machine Intelligence, 2015, 39(6): 1137–1149.
- [20] HE K, ZHANG X, REN S, et al. Deep residual learning for image recognition [C] // 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). IEEE, 2016.
- [21] MANDAL R, CONNOLLY R M, SCHLACHERZ T A, et al. Assessing fish abundance from underwater video using deep neural networks [C] // 2018 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), 2018: 1–6.
- [22] ABADI M. TensorFlow: learning functions at scale [J]. ACM SIGPLAN Notices, 2016, 51(9): 1.
- [23] GUPTA S, ARBELAEZ P, GIRSHICK R, et al. Indoor scene understanding with RGB-D images: bottom-up segmentation, object detection and semantic segmentation [J]. International Journal of Computer Vision, 2015, 112(2): 133–149.
- [24] LONG M, WANG J, DING G, et al. Transfer feature learning with joint distribution adaptation [C] // 2013 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV). IEEE Computer Society, 2013.
- [25] HE K, ZHANG X, REN S, et al. Spatial pyramid pooling in deep convolutional networks for visual recognition [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis & Machine Intelligence, 2014, 37(9): 346–361.
- [26] GIRSHICK R. Fast R-CNN [C] // 2015 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV). IEEE Computer Society, 2015.