

基于 LightGBM 的冬小麦产量估测与可解释性研究

王鹏新^{1,2} 王颖^{1,2} 田惠仁^{1,2} 王婕^{1,2} 刘峻明³ 权文婷⁴

(1. 中国农业大学信息与电气工程学院, 北京 100083;
2. 农业农村部农机作业监测与大数据应用重点实验室, 北京 100083;
3. 中国农业大学土地科学与技术学院, 北京 100193; 4. 陕西省气象局, 西安 710014)

摘要: 机器学习模型在作物长势监测和产量估测过程中,复杂模型的内部机制难以理解,为了在准确估测作物产量的同时给出合理解释,本文选取条件植被温度指数(VTCI)以及冬小麦产量数据,基于轻量级梯度提升机(LightGBM)开展关中平原冬小麦的产量估测研究,并将局部可解释性模型无关方法(LIME)、部分依赖图(PDP)和个体条件期望图(ICE)等全局和局部可解释性方法用于对模型估测结果的进一步解释。结果表明,与其他机器学习方法相比,经过网格搜索优化的 LightGBM 能够准确地估测冬小麦产量,估测单产与实测单产的决定系数 R^2 达到 0.32,均方根误差(RMSE)为 809.10 kg/hm²,平均相对误差(MRE)为 16.55%,达到极显著水平($P < 0.01$),表明该模型有较高的预测精度和泛化能力。进一步可解释性实验表明,网格搜索优化的 LightGBM 能够准确提取数据蕴含的信息,从全局角度来看,冬小麦4个生育期中拔节期 VTCI 对产量形成最为重要,抽穗-灌浆期和乳熟期次之,返青期则影响最小,这与先验知识相符合;从局部角度来看,局部可解释性方法基于冬小麦产量西高东低的空间特征能够进一步提供不同县(区)产量存在差异的原因,为关中平原的田间管理提供参考,对冬小麦的稳产增产具有应用价值。

关键词: 冬小麦; 估产; 可解释性; 条件植被温度指数; 机器学习

中图分类号: TP79 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2023)12-0197-10 OSID: 

Interpretability on Yield Estimation of Winter Wheat Based on LightGBM

WANG Pengxin^{1,2} WANG Ying^{1,2} TIAN Hui ren^{1,2} WANG Jie^{1,2} LIU Junming³ QUAN Wenting⁴

(1. College of Information and Electrical Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China
2. Key Laboratory of Agricultural Machinery Monitoring and Big Data Application,
Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Beijing 100083, China
3. College of Land Science and Technology, China Agricultural University, Beijing 100193, China
4. Shaanxi Provincial Meteorological Bureau, Xi'an 710014, China)

Abstract: Machine learning models have been applied for monitoring crop growth condition and estimating crop yield, it is difficult to understand the internal mechanisms of complex models. In order to estimate crop yields accurately and make understandable explanations at the same time, LightGBM was used to develop yield estimation models of winter wheat in the Guanzhong Plain, PR China by using vegetation temperature condition index (VTCI), and interpretable methods such as local interpretable model-agnostic explanation (LIME), submodular pick-LIME, partial dependence plot (PDP), and individual conditional expectation (ICE) at global and local scales were used for further interpretations of the yield estimation models. Compared with other models, the results of LightGBM optimized by grid search showed that the R^2 between the estimated and official yield records of winter wheat was 0.32, the RMSE was 809.10 kg/hm², and the MRE was 16.55%, which reached the extremely significant level ($P < 0.01$), indicating that the model had high prediction precision and strong generalization ability. The interpretability of the experiments showed that the model can extract the knowledge in the data. In global interpretation, VTCI at the jointing stage for yield formation was the most important, followed by VTCI at the heading to filling stage and VTCI at the dough stage, and VTCI at the turning green stage had

the least effect, which were consistent with prior knowledge. In local interpretation, based on the spatial characteristics of winter wheat yield that was high in the west and low in the east, the local interpretable methods further provided the reasons for the differences in the yield formation of different counties (districts), which provided references for field management in the Guanzhong Plain, PR China. These methods had application value for increasing and stabilizing the yield of winter wheat.

Key words: winter wheat; yield estimation; interpretability; vegetation temperature condition index; machine learning

0 引言

粮食是关乎国计民生和国家经济安全的重要战略物资。然而,近年来,随着碳排放量的攀升,全球气候持续变化,导致极端天气事件频繁发生,尤其是干旱对粮食产量和品质造成了不容忽视的负面影响^[1]。根据中国应急管理部发布的2021年全国自然灾害基本情况,干旱导致山西省、陕西省等24省(区、市) $2.068\ 9\times 10^7$ 人次受灾,农作物受灾面积 $3.426\ 2\times 10^6\ \text{hm}^2$,直接经济损失高达200.9亿元^[2]。我国作为粮食的生产和消费大国,结合农田的干旱情况开展作物产量估测研究并对不同县(区)产量存在差异的原因进行探索将有利于维护国家粮食安全^[3]。

目前,在区域级作物估产任务中,基于统计回归模型的作物估产方法得到广泛应用,包括线性模型方法和非线性模型方法。与线性模型方法相比,非线性模型方法可以将遥感技术与人工智能相结合,在能够表征作物长势的遥感指数和产量之间建立复杂非线性关系,因此受到研究者的青睐。在众多的遥感指数中,归一化植被指数(Normalized difference vegetation index, NDVI)由于能够定量描述作物长势,被广泛应用于作物生长阶段的动态监测。生物物理参数作为能够反映植物群体生长状况的重要指标,在作物长势监测和产量估测中同样发挥了重要作用^[4]。当然,作物产量形成过程极其复杂,水分胁迫带来的影响也不容忽视,干旱是引起水分胁迫最常见也是对作物产量影响较大的一种因素^[5]。其中,条件植被温度指数(Vegetation temperature condition index, VTCI)作为表征作物水分胁迫的指标,是在NDVI和地表温度(Land surface temperature, LST)的散点图呈三角形区域分布的条件下提出的^[6-7],可以反映某一地区近实时的干旱情况,在区域级的干旱监测中取得了广泛应用^[8-9]。同时,由于干旱与作物产量之间有着密切关系,因此VTCI也进一步用于产量估测^[10-11]。

近年来,机器学习方法在农业领域得到广泛应用,只需对模型进行输入便可得到输出结果,然而模型解决问题的思路往往被隐藏在复杂的结构中,整

个工作过程对使用者并不透明,因此这些模型也被称为“黑盒”模型,“黑盒”模型的可解性较差导致其在关键领域的进一步推广受到了限制。因此,深入探究“黑盒”模型做出决策的原因并对模型的预测机理进行解释说明,有利于模型实现更广泛、可信的应用。目前,可解释性可以分为事前可解释性和事后可解释性,前者是指本身具有可解释性的模型,后者则侧重于建模后对“黑盒”模型的解释^[12]。注意力机制在事前可解释性建模中发挥了作用,TIAN等^[13]提出一种基于注意力机制的长短期记忆网络(Long short-term memory neural network with an attention mechanism, ALSTM)构建冬小麦单产估测模型,该模型通过将注意力集中到影响输出值的输入序列的关键部分,实现准确的特征提取及可靠的作物产量估测。

根据给出解释的范围,事后可解释性可分为全局可解释性和局部可解释性。全局可解释性方法包括基于子模块挑选的局部可解释性模型无关方法(Submodular pick-local interpretable model-agonistic explanation, SP-LIME)、基于沙普利值的加性解释方法(Shapley additive explanation, SHAP)、部分依赖图(Partial dependence plot, PDP)及知识蒸馏等,能够为模型预测提供宏观解释^[14-16],在医疗、生态及农业等领域有着广泛的应用^[17-18]。谢晓苇等^[19]在不同城市场景对PM_{2.5}浓度模拟及时空特征分析研究中,通过使用PDP解释梯度提升决策树(Gradient boosting decision tree, GBDT)模型中不同场景因素对PM_{2.5}浓度的非线性作用影响,结果表明各类城市场景对PM_{2.5}浓度的作用并不稳定且有明显的时间特征差异,解释可进一步对不同场景下PM_{2.5}污染的治理提供支持。局部可解释性方法包括局部可解释性模型无关方法(Local interpretable model-agnostic explanation, LIME)、SHAP、个体条件期望(Individual conditional expectation, ICE)及回归激活图(Regression activation mapping, RAM)等,这些方法通常聚焦于具体样本的预测结果并给出解释^[20]。DIKSHIT等^[21]基于卷积神经网络(Convolutional neural network, CNN)及双向长短期记忆网络(Bidirectional long short-term memory,

BiLSTM) 提出可通过 CNN - BiLSTM 模型预测标准降水指数 (Standardized precipitation index, SPI), 并使用 SHAP 对澳大利亚 5 个城市的干旱情况展开分析, 发现气候变量在干旱预测任务是相当重要的, 同时, 通过 SHAP 建立对模型的信任, 在一定程度上提高了模型透明度。WOLANIN 等^[22]在印度主要小麦生产带的小麦产量估测任务中, 通过使用 RAM 对模型学到的特征进行可视化, 从而在提高模型预测性能的同时保证了模型的透明度和可解释性。目前, 在作物产量估测方面还缺少系统的基于全局和局部尺度的可解释性研究。

本文以陕西省关中平原为研究区域, 构建基于 VTCI 和 LightGBM 的冬小麦产量估测模型, 并通过全局可解释性方法 SP - LIME 及 PDP 分析不同特征对产量形成的重要性及影响, 通过局部可解释性方法 LIME 及 ICE 对冬小麦产量西高东低的空间特征进行探究, 挖掘不同县 (区) 冬小麦产量存在差异的

原因, 以期在准确估测冬小麦产量的同时, 提高模型的可解释性, 并为田间管理政策的制定提供依据。

1 材料与方法

1.1 研究区概况

关中平原位于陕西省中部, 南依秦岭, 北连黄土高原, 且有黄河的最大支流渭河横贯于其中, 主要覆盖陕西省宝鸡市、咸阳市、西安市、渭南市、铜川市和杨凌示范区 (图 1)。关中平原地处北纬 34°左右的暖温带, 属大陆性季风型气候, 年平均气温 6 ~ 13℃, 年平均降水量 550 ~ 700 mm, 该地的气候呈现出春季干燥, 夏季炎热多雨, 间有伏旱, 秋季降水较多, 容易出现秋淋天气, 冬季雨雪稀少, 寒冷干燥的特点。关中平原地形平坦, 海拔 460 ~ 850 m, 气候特点、地形地势以及主要由壤土覆盖的土壤条件等因素共同确定关中平原的种植模式为冬小麦与夏玉米轮作, 并促使其成为全省乃至全国的重点粮产区。

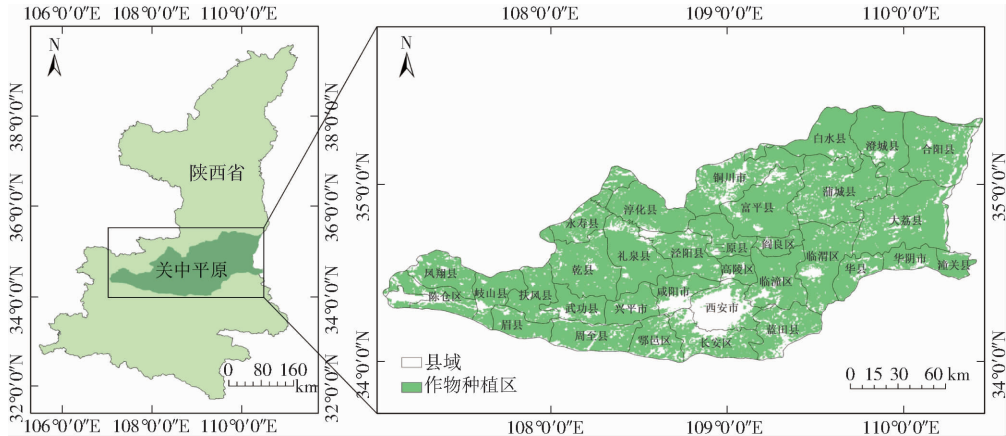


图 1 研究区域及作物种植区

Fig. 1 Location of study area and crop planting areas

1.2 数据来源与预处理

1.2.1 数据来源

本文使用的遥感数据为 2011—2021 年共 11 a 的中分辨率成像光谱仪 (Moderate-resolution imaging spectroradiometer, MODIS) 的日地表反射率产品 (MYD09GA) 及日地表温度产品 (MYD11A1)。关中平原各县 (区) 的产量数据来自于陕西省各市统计年鉴中记录的冬小麦单产数据, 降水量数据来自于陕西省气象局。

1.2.2 种植区提取

关中平原的土地根据利用类型可以分为农用地、建筑用地和未利用地^[23], 其中耕地在农用地中占据 90% 以上, 根据土地覆盖类型数据产品 (MCD12Q1) 所遵循的国际地圈生物圈计划中的土地分类方案, 可将农田/自然植被嵌入型对应的代码 14 近似作为冬小麦的种植区, 通过对其进行预处理

并与研究区域的边界矢量图相叠加获取关中平原冬小麦种植区分布图 (图 1)。

1.2.3 时间序列 VTCI 的生成

对于时间序列 VTCI 的生成, 首先使用 MRT (MODIS reprojection tools) 工具对 MYD09GA 进行预处理, 通过对预处理后数据的进一步计算得到日 NDVI, 同时通过 MRT 对 MYD11A1 进行预处理获得日 LST, 并对日 NDVI 和日 LST 多次使用最大值、最小值合成技术获得多年旬尺度 NDVI 和 LST 最大值合成产品及多年旬尺度 LST 最大-最小值合成产品, 基于以上产品即可确定 VTCI 的冷、热边界。旬尺度 VTCI 计算公式为^[6-7]

$$VTCI = \frac{L_{\max}(N_i) - L(N_i)}{L_{\max}(N_i) - L_{\min}(N_i)} \quad (1)$$

其中 $L_{\max}(N_i) = a + bN_i$ (2)

$L_{\min}(N_i) = a' + b'N_i$ (3)

式中 $VTCI$ ——条件植被温度指数
 N_i ——研究区域某一像素的 NDVI 值
 $L(N_i)$ ——研究区域某一像素的 NDVI 取值
为 N_i 时的地表温度
 $L_{\max}(N_i)、L_{\min}(N_i)$ ——研究区域 NDVI 等于
 N_i 的所有像素地表
温度最大值和最小
值,也称为热边界、冷
边界
 $a、b、a'、b'$ ——由研究区域 NDVI 和 LST 散点
图确定的待定系数

根据冬小麦的生长特点对生育期进行划分,3月上旬至3月中旬为返青期,3月下旬至4月中旬为拔节期,4月下旬至5月上旬为抽穗-灌浆期,5月中旬至5月下旬为乳熟期。生育期的 VTCI 通过对各生育期内的多旬 VTCI 取平均值获得。关中平原各县(区)的 VTCI 通过计算该县(区)冬小麦种植区包含的所有像素的 VTCI 平均值获得。

1.3 研究方法
1.3.1 LightGBM 模型

轻量级梯度提升机 (Light gradient boosting machine, LightGBM)是由 KE 等^[24]提出的一种梯度提升框架,适用于解决回归、分类等各种复杂机器学习任务。与 GBDT 等模型相比,LightGBM 的性能在效率和空间上均有改善,这是因为其集成了基于梯度的单边采样和互斥特征绑定。前者通过在保留较大梯度实例的同时对较小梯度实例进行随机采样减少计算量,提升模型效率;后者则基于高维数据的稀疏性,将互斥特征进行融合绑定,从而在确保信息不丢失的同时减少特征维度。此外,LightGBM 将直方图算法作为决策树中节点的分裂策略,通过该方法可以查找到能够提供最大信息增益的特征并对其进行切分;同时,采用带有深度限制的按叶子生长策略选择所有叶子中分裂增益最大的叶子进行分裂,可在保证高效的同时有效防止过拟合,LightGBM 模型的结构及实验主要流程见图 2。

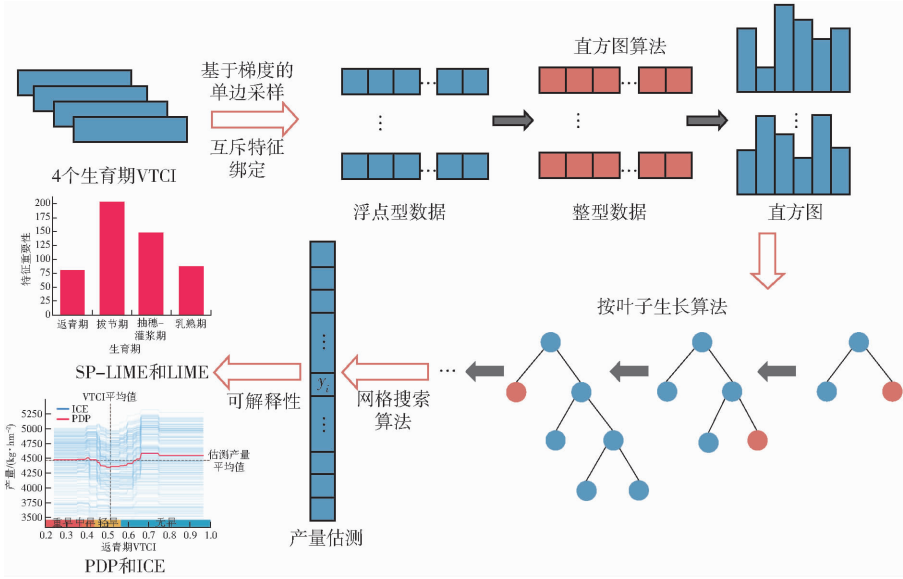


图 2 LightGBM 模型结构及实验流程图

Fig. 2 Model structure of LightGBM and workflow of experiment

本研究使用 Python 机器学习库 Scikit-learn 提供的 LightGBM 构建回归模型,模型输入为 4 个生育时期的 VTCI,目标变量 y 为各县(区)冬小麦单产数据。将 2011—2021 年 4 个生育时期的 VTCI 和单产数据按照比例 9:1 划分为训练集和测试集,使用网格搜索算法对模型进行优化,该方法通过对不同超参数的不同取值进行排列组合构建参数空间,并对参数空间中的所有节点进行遍历,将误差最小的参数组合确定为模型的最优参数组合。此外,通过 10 折交叉验证进一步评估网格搜索优化的 LightGBM 模型的鲁棒性,将 2011—2021 年 VTCI 和冬小麦单产数据随机分为 10 组,其中 9 组

子集作为训练集,余下 1 组作为测试集,通过计算每组测试集的 决定系数 (Coefficient of determination, R^2) 和 均方根误差 (Root mean squared error, RMSE) 评估 网格搜索优化的 LightGBM 模型的性能。

1.3.2 RF 模型

选择随机森林 (Random forests, RF) 模型作为本次实验的对照组。RF 是一种基于决策树的集成算法,可通过对若干棵回归决策树的输出结果进行平均得到产量估测值,具有随机选取数据集和特征的特点,可以避免过拟合^[25]。同样地,对 RF 模型使用网格搜索法确定其超参数的最优值。

1.3.3 可解释性方法

1.3.3.1 LIME 和 SP-LIME

局部可解释性模型无关方法 (Local interpretable model-agnostic explanation, LIME) 是通过在局部训练一个代理模型对复杂模型进行近似,并对某个具体实例进行解释。LIME 的工作原理是^[14]:首先,对关注的实例进行扰动,在其附近取新的样本点,与“黑盒”模型的相应预测构建为新的数据集;其次,在新数据集上训练一个可解释的模型得到“黑盒”模型的局部近似,以此来探索输入的变化对模型预测带来的影响^[26]。局部解释的表达式为

$$e(x) = \arg \min_{g \in G} L(f, g, \pi_x(z)) + \Omega(g) \tag{4}$$

其中
$$\pi_x(z) = \exp \left(-\frac{D^2(x, z)}{\sigma^2} \right) \tag{5}$$

式中 x ——某实例 4 个生育期的 VTCI
 z ——对 x 进行随机扰动得到的新样本
 f ——需要被解释的“黑盒”模型,如本文的网格搜索优化的 LightGBM 模型
 g ——简单的可解释模型
 L ——最小化损失函数,衡量模型 g 与模型 f 的接近程度
 $\Omega(g)$ ——模型 g 的复杂度
 G ——所有可解释模型的集合
 $D(x, z)$ —— z 到 x 的距离函数
 σ ——指数平滑核的宽度
 π_x —— z 与 x 之间的距离

单个实例的解释难以代表模型的整体情况,因此 RIBEIRO 等^[14]还提出通过基于子模块挑选的局部可解释性模型无关方法 (Submodular pick-LIME, SP-LIME) 建立对整个模型的解释和信任。SP-LIME 能够通过多个实例的局部解释构建解释矩阵,并对每个特征的全局重要性进行计算,计算式为

$$I_j = \sqrt{\sum_{i=1}^n W_{ij}} \tag{6}$$

式中 I_j ——第 j 个生育时期的 VTCI 在解释空间中的全局重要性
 W_{ij} ——解释矩阵中第 i 个实例的第 j 个生育期 VTCI 的局部重要性
 n ——数据集中样本个数

1.3.3.2 PDP 和 ICE

部分依赖图 (Partial dependence plot, PDP) 是通过反映 1 个或 2 个特征对“黑盒”模型预测结果的边际效应,对感兴趣特征和模型输出结果之间具体关系进行显示的一种全局可解释性方法。部分依赖函数的定义为^[16]

$$h_{x_s}(x_s) = E_{x_c} [h(x_s, x_c)] = \int h(x_s, x_c) dP(x_c) \tag{7}$$

式中 h_{x_s} ——感兴趣的 S 生育期 VTCI 的实际值对产量估测值的平均边际效应
 x_s ——感兴趣的 S 生育期 VTCI 的实际值
 x_c ——不被关注的 C 生育期的实际值
 $E_{x_c} [h(x_s, x_c)]$ ——当 x_s 固定而 x_c 在边际分布上变化时,偏函数 $h(x_s, x_c)$ 的期望
 $P(x_c)$ ——概率分布函数

给定 x_s 对于产量估测结果的平均边际效应 h_{x_s} 通过在训练数据上计算平均值获得

$$h_{x_s}(x_s) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_s, x_c^{(i)}) \tag{8}$$

式中 $x_c^{(i)}$ ——第 i 个实例中不被关注的 C 生育期 VTCI 的实际值

PDP 的计算虽然直观且容易实现,但只显示平均边际效应会导致特征之间的异质效应被隐藏。基于此, GOLDSTEIN 等^[20]提出了个体条件期望 (Individual conditional expectation, ICE), ICE 能够反映单个样本的特征与预测结果之间的关系,并对 PDP 可能遗漏或误解的信息进行补充,例如当数据之间出现相互抵消的情况时, PDP 将表现为一条水平线^[17], 而 ICE 能够展示数据的异质关系。ICE 是典型的局部可解释性方法,通常与 PDP 结合起来使用。

1.3.4 模型性能评估指标

通过计算单产估测模型估测单产与实际单产之间的 R^2 、RMSE、平均相对误差 (Mean relative error, MRE) 及 P 值对模型的估产精度进行评估。

2 结果与分析

2.1 模型确定及精度评价

通过网格搜索算法,分别确定 LightGBM 模型及 RF 模型的最优参数组合 (表 1)。对于 LightGBM 模型,该参数组合能够通过控制树模型的最大深度及迭代次数等参数,防止模型发生过拟合,也可以调节模型的训练时间,保证获得较为稳定的模型。对于 RF 模型,该参数组合能够控制决策树的叶子节点最少需要的样本个数及分枝时父节点最少需要的样本个数,在平滑模型的同时控制模型复杂度。

此外,采用 10 折交叉验证进一步评估网格搜索优化的 LightGBM 模型鲁棒性,通过计算获得每组测试集的 R^2 和 RMSE,在 10 个子集中, R^2 范围为 0.14~0.30, RMSE 范围为 580.80~985.12 kg/hm²,表明模型具有较好的鲁棒性,然而不同子集间交叉验证结果的差异还

表 1 LightGBM 模型及 RF 模型的参数空间及最优值

Tab.1 Parameter spaces of LightGBM and RF and optimal parameters

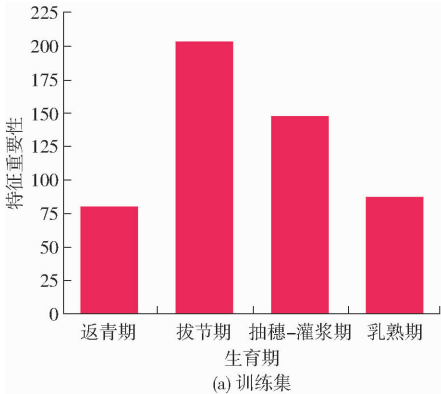
模型	参数	范围	最优值
LightGBM	max_depth	[2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]	8
	n_estimators	[5, 15, 25, 50, 100, 300, 500]	25
	learning_rate	[0.001, 0.01, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4]	0.1
	reg_alpha	[0, 0.001, 0.01, 0.1, 1, 100]	0.001
	reg_lambda	[0, 0.001, 0.01, 0.1, 1, 100]	1
	min_child_weight	[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]	2
	colsample_bytree	[0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0]	0.9
	subsample	[0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0]	0.9
RF	max_depth	[2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]	8
	n_estimators	[5, 15, 25, 50, 100, 300, 500]	50
	min_samples_leaf	[1, 2, 3, 4, 5]	1
	min_samples_split	[1, 2, 3, 4, 5]	3
	criterion	[“absolute error”, “squared error”]	“squared error”

较为明显,这是由于数据中的高产样本偏少所致。

通过评估指标对各估产模型的性能进行评估(表 2),可以发现,不同模型在测试集上表现为: R^2 范围为 0.22 ~ 0.32, RMSE 范围为 809.10 ~ 845.38 kg/hm²,MRE 范围为 16.55% ~ 17.41%,且均达到极显著水平($P < 0.01$)。其中,经过网格搜索优化的 LightGBM 模型精度最高,性能最好,这是因为该模型一方面通过网格搜索优化可以确定使损失最小的最优参数组合,另一方面通过按叶子生长算法对分裂增益最大的叶子节点进行分裂也可以减少更多的损失,因此该模型与其他模型相比优势更

表 2 不同模型在测试集上的性能对比
Tab.2 Accuracy of different machine learning models on test set

模型	R^2	RMSE/ (kg·hm ⁻²)	MRE/%	P
RF	0.27	814.62	16.67	<0.01
LightGBM	0.22	845.38	17.41	<0.01
网格搜索优化的 RF	0.28	812.55	16.77	<0.01
网格搜索优化的 LightGBM	0.32	809.10	16.55	<0.01



为明显,为本文的最优模型,后续的可解释性分析将基于该模型展开。

2.2 模型可解释性

2.2.1 全局可解释性

2.2.1.1 基于 SP-LIME 的全局解释

基于 SP-LIME 计算网格搜索优化的 LightGBM 模型训练集和测试集中各个特征的全局重要性,如图 3 所示。可以看出,在训练集和测试集上,4 个生育期 VTCI 对产量形成的重要程度均表现为:拔节期 VTCI 最重要,抽穗-灌浆期次之,乳熟期 VTCI 重要性和返青期 VTCI 的重要性较小。该解释与冬小麦的自然生长规律也相符合:对于冬小麦来说,拔节期是从营养生长向生殖生长转变的关键时期,叶片的生长、小花的分化、发育以及籽粒形成都处于该时期,因此该时期冬小麦受到的水分胁迫对于小麦穗数、穗粒数非常关键,对产量形成有着决定性作用;而在抽穗-灌浆期,小麦会经历开花、授粉、受精、结实、灌浆等环节,需要吸收大量营养物质,小麦颗粒是否饱满与这个时期土壤的水分含量有着相当大的关系;乳熟期的冬小麦则基本完成生长,处于物质积

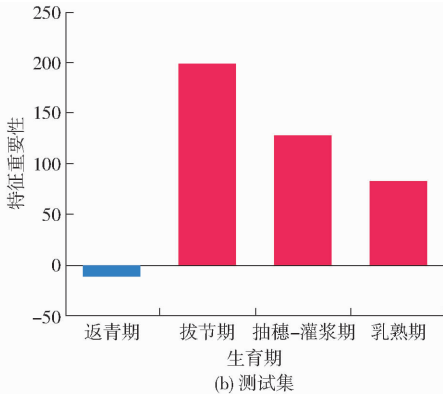


图 3 SP-LIME 对网格搜索优化的 LightGBM 模型训练集和测试集的全局解释
Fig.3 Global explanations of training set and test set of LightGBM based on grid search optimization of SP-LIME

累阶段,因此表现出重要性相比于另外 2 个时期较低的情况;而在返青期,冬小麦主要在巩固冬前分蘖,控制无效分蘖,对水分较不敏感,因此重要性最小。

2.2.1.2 基于 PDP 的全局解释

PDP 对网格搜索优化的 LightGBM 模型的全局解释见图 4,通过各生育期 VTCI 增长时冬小麦产量发生的变化可以看出:在返青期,产量随 VTCI 的增加变化不明显,样本整体在产量估测值的平均值处小范围波动,表明返青期冬小麦对土壤水分的要求并不高,这可能是因为该阶段的麦田地温偏低,因此冬小麦的生长较为缓慢。在拔节期,当 VTCI 在 0.39~0.57 范围时,产量随着 VTCI 的增长稳定增加,样本整体逐渐转变为高于产量估测值的平均值,反映了随着水分胁迫的缓解,拔节期冬小麦开始快速生长,进行干物质积累;在抽穗-灌浆期,当 VTCI

在 0.45 左右时产量有小幅增加,在 0.48~0.50 时有突然明显下降,这可能是因为冬小麦的生长在受到干旱胁迫复水后虽已有一定程度的恢复,但之前的水分亏缺对细胞扩张仍有影响,所以冬小麦需要一定时间的适应^[27],之后,冬小麦开始稳健生长,当 VTCI 达到该生育期 VTCI 的平均值时,样本整体达到高于产量估测值的平均值以上的水平。在乳熟期,当 VTCI 低于 0.40 时,样本整体水平明显低于产量估测值的平均值,表明冬小麦的生长受到水分胁迫的影响明显,当 VTCI 达到 0.40~0.45 时,产量随 VTCI 的增高而上升,而在 0.53 左右时又有较为明显的下降,这可能是因为乳熟期的冬小麦生长发育已基本完成,经过近 3 个月的干物质积累后,冬小麦穗粒变重,在降水增多时发生倒伏,造成收获困难及减产^[28]。

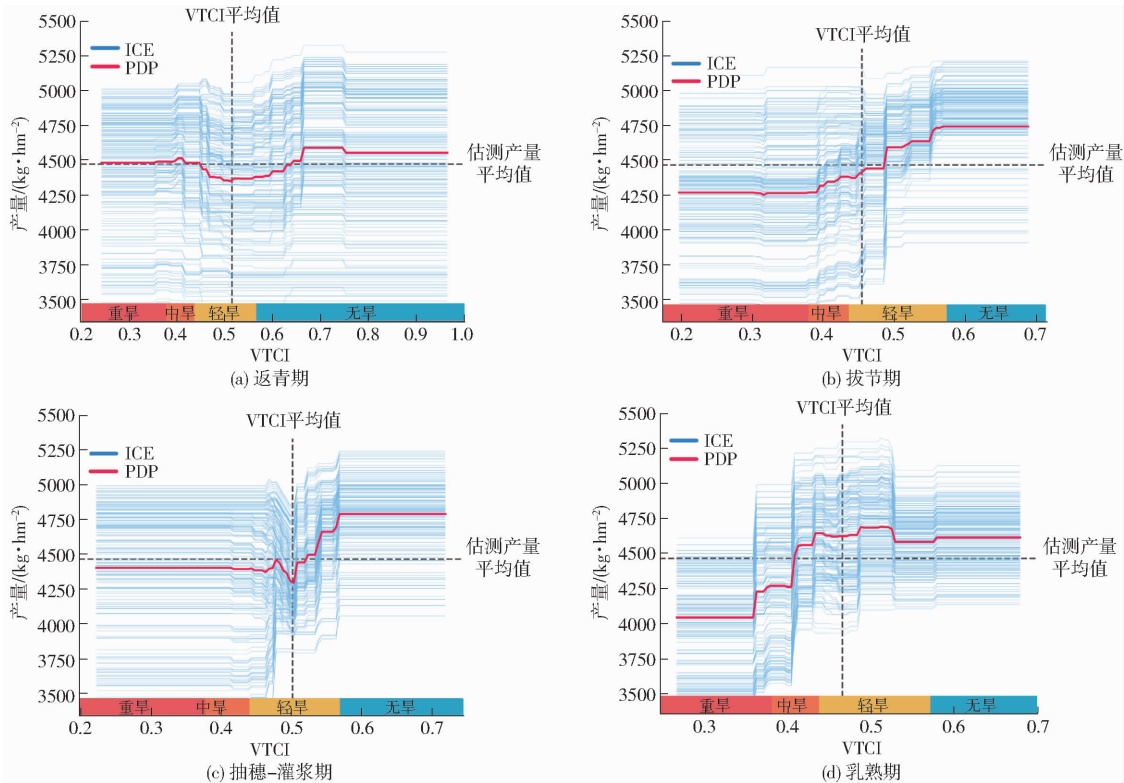


图 4 PDP 和 ICE 对网格搜索优化的 LightGBM 模型 4 个生育期 VTCI 的全局、局部解释

Fig.4 Global explanations of PDP and local explanations of ICE at four growth stages of LightGBM based on grid search optimization

2.2.2 局部可解释性

2.2.2.1 基于 LIME 的局部解释

基于关中平原冬小麦产量西高东低的空间特征^[29],通过 LIME 对具有代表性的岐山县(关中西部)、长安区(关中中部)以及澄城县(关中东部)3 县(区)的 4 个生育期 VTCI 对产量形成的重要性进行局部解释。2021 年岐山县实际产量为 5 999.99 kg/hm²,估测产量为 5 016.25 kg/hm²,根据图 5a 中各特征的重要性发现,在 4 个生育期中,拔节期和抽穗-灌浆期的重要性最高,返青期重要性

最低,与 SP-LIME 给出的全局解释一致(图 3)。对于关中平原中部的长安区,其实际产量为 5 025.07 kg/hm²,估测产量为 4 843.85 kg/hm²,由图 5b 可看出,2021 年长安区产量形成的关键特征仍然为拔节期 VTCI,其次是返青期,最后则是乳熟期,而抽穗-灌浆期的重要性最低。2021 年位于关中平原东部的澄城县实际产量为 3 824.98 kg/hm²,估测产量为 3 876.68 kg/hm²,由图 5c 可看出各特征的重要性为乳熟期占据第 1 位,抽穗-灌浆期和拔节期次之,返青期重要性最低。根据 3 县(区)的

LIME 局部解释可以得出,2021 年岐山县冬小麦高产与拔节期和抽穗-灌浆期的 VTCI 有密切关系,这 2 个时期的冬小麦生长发育对最终产量的形成至关重要,这是因为岐山县在这 2 个时期的水分充足,尤其是抽穗-灌浆期,降水量约为 95 mm,高于该地过去 5 年平均降水量(44.66 mm)。2021 年长安区与之相比,抽穗-灌浆期的降水量约为 64 mm,虽高于该地过去 5 年的平均降水量(42.46 mm),但仅为岐山县降水量的 2/3,因此抽穗-灌浆期水分不够充足可能是导致长安区产量低于岐山县的原因,基于此,当地政府可以加强抽穗-灌浆期的田

间管理,提升农业节水灌溉水平,从而促进冬小麦稳产、增产。对于澄城县,LIME 给出的特征重要性与岐山县差异较大,可以看出,拔节期和抽穗-灌浆期,冬小麦并没有得到充足的生长,结合气象数据,该年澄城县的降水量均低于同期岐山县与长安区的降水量,这可能是造成冬小麦低产的主要原因。基于此,当地政府可以针对不同地区的冬小麦,采取灌溉措施满足拔节期和抽穗-灌浆期冬小麦对水分的需求,对于无灌溉条件的旱作小麦,可通过整理土地或在土地表面增加覆盖物提高土壤的蓄水、保水能力。

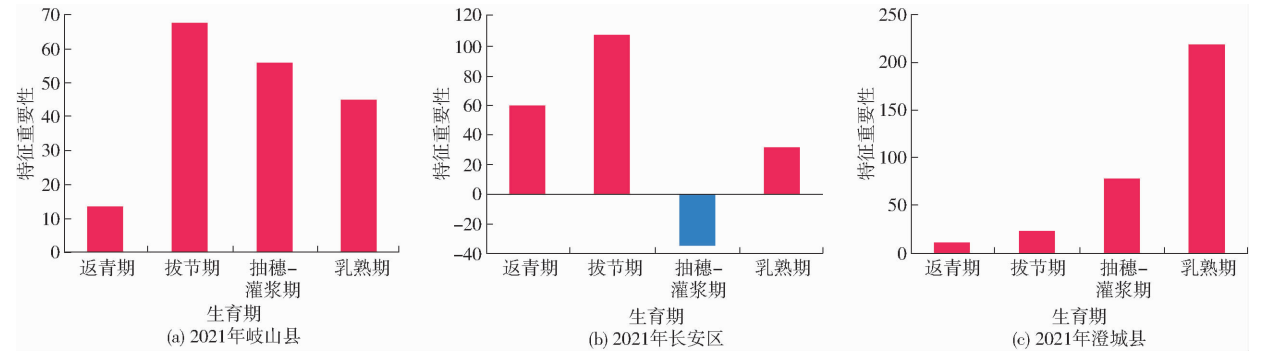


图5 岐山县、长安区及澄城县的 LIME 局部解释

Fig. 5 Local explanations of LIME in Qishan County, Changan District and Chengcheng County

2.2.2.2 基于 ICE 的局部解释

ICE 对网格搜索优化的 LightGBM 模型的局部解释见图 4,可以看出,对于大部分实例,4 个生育期 VTCI 发生变化时产量估测值的波动情况基本与 PDP 的全局解释一致,这也证明 PDP 能够较好地反映样本的整体情况,并没有明显遗漏或误解,可以提供可信的解释。从局部角度来说,当返青期 VTCI 增加时,大部分实例的产量变化情况并不明显,仅在 VTCI 达到 0.62 时,产量会有小幅增长,但对一些低产实例,水分胁迫的缓解对产量没有明显影响,因此在田间管理中可考虑通过适当追肥等方式促进小麦的生长。在拔节期,当绝大部分实例的 VTCI 达到 0.39 时,产量估测值有明显上升,并逐渐突破产量估测值的平均值,这表明该时期的冬小麦对水分胁迫较为敏感,灌溉是促进该时期冬小麦生长的直接方式,同时曲线表现出较为明显的阶梯状,表明在灌溉后需注意给予冬小麦吸收水分的时间。在抽穗-灌浆期,小部分低产实例表现出不同于 PDP 的局部解释,在 VTCI 达到 0.48 左右时,产量估测值并没有下降,反而有明显上升,这表明对于一些低产县(区),灌溉能够在较大程度上促进其产量形成,因此在田间管理中需注意即使旱情有所缓解,也应及时给冬小麦补充水分。对于乳熟期冬小麦,几乎全部实例的 ICE 有着与 PDP 相同的变化规律,在

VTCI 为 0.37 及 0.40 时,产量估测值会有两次明显增长,这也再次表明,当乳熟期干旱情况较为严重时,通过田间管理缓解冬小麦受到的水分胁迫对于该时期冬小麦干物质的积累有着重要意义。

3 讨论

本文基于网格搜索优化的 LightGBM 模型对关中平原不同县(区)的冬小麦产量进行估测,结果表明,与其他估产模型相比,该模型能够更好地反映生育期 VTCI 与产量之间的复杂非线性关系。然而,冬小麦产量形成往往是多种自然因素共同作用的结果,因此在未来研究中,还可加入叶面积指数以及气象数据等与作物生长相关的参数扩充数据规模并开展进一步实验,也可以将样点类型(如灌溉样点或旱作样点)纳入考虑范围。同时,部分县(区)的产量估测结果由于样本分布不均衡表现出高产低估情况,因此后续还可尝试通过合成少数过采样技术对数据进行预处理,或基于深度学习方法构建估产模型,利用过采样技术对数据集进行平衡。

为进一步提高模型的可解释性,结合全局及局部尺度的解释方法对网格搜索优化的 LightGBM 模型进行可解释性分析,结果表明,在全局解释中,冬小麦产量形成的整体规律与先验知识相符合,这验证了模型的合理性;在局部解释中,不同样本各个特

征对产量形成的重要性及边际效应反映了不同县(区)冬小麦产量存在差异的原因,这不同于以往研究只是停留在探索特征重要性的层面,而是可以通过具体样本的局部解释,进一步调整某县(区)的田间管理政策,从而促进产量提高。然而,本文主要是对关中平原西部、中部、东部具有代表性样本进行可解释性分析,因此在未来研究中还可通过可解释性方法探索不同分区及不同年份冬小麦产量具有的特征。目前,已有学者通过 RAM 对印度小麦带 2003 年、2006 年及 2012 年不同区域的估产结果开展可解释性分析^[21],但仍缺少对连续年份的分析,后续可尝试通过回归激活图 RAM 进行年际间的研究。

4 结论

(1) 网格搜索优化的 LightGBM 模型能够从生育期尺度的 VTCI 中提取到冬小麦生长发育期间受

到的水分胁迫和产量之间的复杂非线性关系。结果显示,冬小麦估测单产与实际单产的 R^2 为 0.32, RMSE 为 809.10 kg/hm², MRE 为 16.55%,并通过显著性检验($P < 0.01$),表明该模型可以用于估测冬小麦产量。

(2) 从全局可解释性来讲,拔节期和抽穗-灌浆期的 VTCI 对冬小麦的生长发育起到了关键作用,乳熟期 VTCI 较低时对产量的影响也较为明显,返青期 VTCI 对产量的影响则最小,以上特点与先验知识相符合,这也表明可解释性方法可以作为选择可信模型的依据。

(3) 从局部可解释性来讲,作物复杂的生长发育过程可能会导致具体实例的解释不同于全局解释,通过局部可解释性方法对其进行分析将有助于决策者针对不同县(区)的田间情况调整灌溉政策或节水措施。

参 考 文 献

[1] LESK C, ROWHANI P, RAMANKUTTY N. Influence of extreme weather disasters on global crop production[J]. Nature, 2016, 529(7584): 84–87.

[2] 中华人民共和国应急管理部. 应急管理部发布 2021 年全国自然灾害基本情况[EB/OL]. (2022-01-23)[2022-12-3]. https://www.mem.gov.cn/xw/yjglbgzdt/202201/t20220123_407204.shtml.

[3] 王鹏新, 田惠仁, 张悦, 等. 基于深度学习的作物长势监测和产量估测研究进展[J]. 农业机械学报, 2022, 53(2): 1–14. WANG Pengxin, TIAN Huiren, ZHANG Yue, et al. Crop growth monitoring and yield estimation based on deep learning: state of the art and beyond[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2022, 53(2): 1–14. (in Chinese)

[4] 王鹏新, 王婕, 田惠仁, 等. 基于遥感多参数和门控循环单元网络的冬小麦单产估测[J]. 农业机械学报, 2022, 53(9): 207–216. WANG Pengxin, WANG Jie, TIAN Huiren, et al. Yield estimation of winter wheat based on multiple remotely sensed parameters and gated recurrent unit neural network[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2022, 53(9): 207–216. (in Chinese)

[5] 丁彤彤, 李朴芳, 曹丽, 等. 干旱胁迫下不同基因型小麦干物质转运对产量形成的影响[J]. 干旱地区农业研究, 2021, 39(6): 62–72. DING Tongtong, LI Pufang, CAO Li, et al. Effects of dry matter translocation on yield formation of wheat with different genotypes under drought stress[J]. Agricultural Research in the Arid Areas, 2021, 39(6): 62–72. (in Chinese)

[6] 王鹏新, 龚健雅, 李小文. 条件植被温度指数及其在干旱监测中的应用[J]. 武汉大学学报(信息科学版), 2001, 26(5): 412–418. WANG Pengxin, GONG Jianya, LI Xiaowen. Vegetation temperature condition index and its application for drought monitoring[J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University, 2001, 26(5): 412–418. (in Chinese)

[7] 孙威, 王鹏新, 韩丽娟, 等. 条件植被温度指数干旱监测方法的完善[J]. 农业工程学报, 2006, 22(2): 22–26. SUN Wei, WANG Pengxin, HAN Lijuan, et al. Further improvement of the approach to monitoring drought using vegetation and temperature condition indexes from multi-years' remotely sensed data[J]. Transactions of the CSAE, 2006, 22(2): 22–26. (in Chinese)

[8] 李艳, 王鹏新, 刘峻明, 等. 基于条件植被温度指数的冬小麦主要生育时期干旱监测效果评价Ⅲ——干旱对冬小麦产量的影响评估[J]. 干旱地区农业研究, 2014, 32(5): 218–222. LI Yan, WANG Pengxin, LIU Junming, et al. Evaluation of drought monitoring effects in the main growth and development stages of winter wheat using vegetation temperature condition index Ⅲ—impact evaluation of drought on wheat yield[J]. Agricultural Research in the Arid Areas, 2014, 32(5): 218–222. (in Chinese)

[9] PATEL N R, PARIDA B R, VENUS V, et al. Analysis of agricultural drought using vegetation temperature condition index (VTCI) from Terra/MODIS satellite data[J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2012, 184(12): 7153–7163.

[10] 田苗, 王鹏新, 张树誉, 等. 基于条件植被温度指数的冬小麦产量预测[J]. 农业机械学报, 2014, 45(2): 239–245. TIAN Miao, WANG Pengxin, ZHANG Shuyu, et al. Winter wheat yield forecasting based on vegetation temperature condition index[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2014, 45(2): 239–245. (in Chinese)

- [11] 王鹏新, 冯明悦, 孙辉涛, 等. 基于主成分分析和 Copula 函数的干旱影响评估研究[J]. 农业机械学报, 2016, 47(9): 334 – 340.
WANG Pengxin, FENG Mingyue, SUN Huitao, et al. Drought impact assessment based on principal component analysis and Copula function[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2016, 47(9): 334 – 340. (in Chinese)
- [12] 纪守领, 李进锋, 杜天宇, 等. 机器学习模型可解释性方法, 应用与安全研究综述[J]. 计算机研究与发展, 2019, 56(10): 2071 – 2096.
JI Shouling, LI Jinfeng, DU Tianyu, et al. Survey on techniques, applications and security of machine learning interpretability [J]. Journal of Computer Research and Development, 2019, 56(10): 2071 – 2096. (in Chinese)
- [13] TIAN H R, WANG P X, TANSEY K, et al. A deep learning framework under attention mechanism for wheat yield estimation using remotely sensed indices in the Guanzhong Plain, PR China[J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2021, 102: 102375.
- [14] RIBEIRO M T, SINGH S, GUESTRIN C. “Why should I trust you?”: explaining the predictions of any classifier[J]. arXiv Preprint, arXiv: 1602.04938, 2016.
- [15] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions[J]. arXiv Preprint, arXiv: 1705.07874, 2017.
- [16] FRIEDMAN J H. Greedy function approximation: a gradient boosting machine[J]. Annals of Statistics, 2001, 29(5): 1189 – 1232.
- [17] ZHANG Y, XIE C, XUE L, et al. A post-hoc interpretable ensemble model to feature effect analysis in warfarin dose prediction for Chinese patients[J]. IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics, 2021, 26(2): 840 – 851.
- [18] PARK S, YANG J S. Interpretable deep learning LSTM model for intelligent economic decision-making[J]. Knowledge-Based Systems, 2022, 248: 108907.
- [19] 谢晓苇, 李代超, 卢嘉奇, 等. 基于移动监测数据的不同城市场景下 PM_{2.5} 浓度精细模拟与时空特征解析[J]. 地球信息科学学报, 2022, 24(8): 1459 – 1474.
XIE Xiaowei, LI Daichao, LU Jiaqi, et al. Fine simulation and analysis of temporal and spatial characteristics of PM_{2.5} concentration distribution in different urban scenarios based on mobile monitoring data[J]. Journal of Geo-information Science, 2022, 24(8): 1459 – 1474. (in Chinese)
- [20] GOLDSTEIN A, KAPELNER A, BLEICH J, et al. Peeking inside the black box: visualizing statistical learning with plots of individual conditional expectation[J]. Journal of Computational and Graphical Statistics, 2015, 24(1): 44 – 65.
- [21] DIKSHIT A, PRADHAN B. Interpretable and explainable AI (XAI) model for spatial drought prediction[J]. Science of the Total Environment, 2021, 801: 149797.
- [22] WOLANIN A, MATEO-GARCÍA G, CAMPS-VALLS G, et al. Estimating and understanding crop yields with explainable deep learning in the Indian Wheat Belt[J]. Environmental Research Letters, 2020, 15(2): 024019.
- [23] 孙善良, 张小平. 陕西省土地利用转型时空演变及其生态环境效应分析[J]. 水土保持研究, 2021, 28(6): 356 – 363, 370.
SUN Shanliang, ZHANG Xiaoping. Analysis on the spatiotemporal evolution of land use transformation and its ecological environment effect in Shaanxi Province [J]. Research of Soil and Water Conservation, 2021, 28(6): 356 – 363, 370. (in Chinese)
- [24] KE G, MENG Q, FINLEY T, et al. LightGBM: a highly efficient gradient boosting decision tree[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2017, 30: 3146 – 3154.
- [25] LEO B. Random forests[J]. Machine Learning, 2001, 45(1): 5 – 32.
- [26] CHRISTOPH M, GIUSEPPE C, BERND B. Interpretable machine learning—a brief history, state-of-the-art and challenges [J]. arXiv Preprint, arXiv: 2010.09337, 2020.
- [27] 倪胜利, 李兴茂, 王亚翠, 等. 旱后复水对冬小麦生长发育及水分利用效率的影响[J]. 灌溉排水学报, 2018, 37(11): 20 – 25.
NI Shengli, LI Xingmao, WANG Yacui, et al. Physiological development and water use efficiency of winter wheat after re-watering following drought stresses at different growth stages[J]. Journal of Irrigation and Drainage, 2018, 37(11): 20 – 25. (in Chinese)
- [28] 杨浩, 杨贵军, 顾晓鹤, 等. 小麦倒伏的雷达极化特征及其遥感监测[J]. 农业工程学报, 2014, 30(7): 1 – 8.
YANG Hao, YANG Guijun, GU Xiaohe, et al. Radar polarimetric response features and remote sensing monitoring of wheat lodging[J]. Transactions of the CSAE, 2014, 30(7): 1 – 8. (in Chinese)
- [29] TIAN H R, WANG P X, TANSEY K, et al. An IPSO BP neural network for estimating wheat yield using two remotely sensed variables in the Guanzhong Plain, PR China[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2020, 169: 115180.