

采用 RNCA-PSO-ELM 的水稻叶绿素光谱特征分析与反演

江凯伦¹, 安吉庆¹, 赵雨薇¹, 罗俊盈¹, 曹英丽^{1,2*}

(1. 沈阳农业大学信息与电气工程学院, 沈阳 110866; 2. 辽宁省农业信息化工程技术中心, 沈阳 110866)

摘要: 为探索有效的水稻叶绿素光谱特征选择方法与含量反演建模, 解决东北粳稻叶绿素含量无人机遥感监测等问题, 该研究利用沈阳农业大学卡力玛水稻实验站 2018—2020 年无人机 (Unmanned Aerial Vehicle, UAV) 水稻冠层高光谱数据及地面样本数据, 设计了基于正则近邻成分分析的光谱特征选择方法, 优化了其损失函数与正则化参数, 获得水稻叶绿素不同含量的特征波段, 并以此为输入, 构建粒子群优化极限学习机叶绿素含量反演模型。结果表明: 正则近邻成分分析算法具有较好的特征选择能力, 其损失函数为均方误差损失函数、正则化参数值为 0.306 时, 特征选择效果最佳, 初选出权重非零的 16 个特征波段; 进一步以叶绿素极限学习机反演精度为判据, 优选出权重最高的 6 个特征波段: 710、716、508、798、532 和 708 nm; 应用粒子群优化算法优化了极限学习机模型的输入权值和阈值偏差, 粒子群算法正交试验种群规模 (POP)、惯性权重 (IW)、学习因子 (C1, C2) 和速度位置相关系数 (MC) 的优选结果分别为 50、1.5、1.3、3.5 和 0.6; 基于正则近邻成分分析-粒子群优化极限学习机叶绿素含量反演结果的 RMSE 和 R^2 分别为 9.549 mg/L、0.891。研究结果可为基于无人机平台的高通量作物监测提供理论依据, 并为筛选无人机高光谱波段实现作物长势参数快速估测提供参考。

关键词: 无人机; 高光谱; 水稻; 叶绿素含量; 正则近邻成分分析

doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.2022.08.021

中图分类号: S127; S511; S252.2

文献标志码: A

文章编号: 1002-6819(2022)-08-0178-09

江凯伦, 安吉庆, 赵雨薇, 等. 采用 RNCA-PSO-ELM 的水稻叶绿素光谱特征分析与反演[J]. 农业工程学报, 2022, 38(8): 178-186. doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.2022.08.021 http://www.tcsae.org

Jiang Kailun, An Jiqing, Zhao Yuwei, et al. Analysis and inversion of rice chlorophyll spectral characteristics using RNCA-PSO-ELM[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2022, 38(8): 178-186. (in Chinese with English abstract) doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.2022.08.021 http://www.tcsae.org

0 引言

东北地区是重要的粳稻主产区, 粳稻栽培过程的精准化管理对提高粮食产量、保证粮食安全具有重要意义。叶绿素含量是表征水稻生长状况的重要指标, 对其进行快速、无损、大尺度监测是精准农业的重要研究方向^[1-2]。无人机高光谱遥感技术具有效率高、成本低、灵活、通用性强等优点, 在作物状态监测、精准作业等农业生产环节发挥了重要作用, 设计轻便、快捷的机载叶绿素含量监测传感器, 对实现作物状态高效监测和水肥精准管理具有重要意义。

光谱响应特征对构建水稻叶绿素含量无人机监测模型至关重要。高光谱数据波段多、波段间相关性强, 存在大量冗余信息, 因此需要对全波段波长变量进行优选^[3]。近年来, 基于近邻成分分析 (Neighborhood Component Analysis, NCA)^[4]的降维与特征选择方法在诸多领域得到成功应用, 如语音识别^[5]、人脸识别^[6]、ECG 信号的情感分类^[7]等, 利用 NCA 对原始高维数据进行特征选择实

现降维, 可大幅度减小模型规模、提升模型精度和效率。NCA 算法可学习出每一个特征的权重值信息, 即特征重要程度的定量度量^[8]。然而 NCA 算法的目标函数容易过度拟合, 为解决这一问题, Yang 等^[9]提出了正则近邻成分分析 (Regularized Neighborhood Component Analysis, RNCA), 在目标函数中加入正则项, 对可学习的权重参数附加约束, 减小参数自由度, 达到防止过拟合的目的。近年来 RNCA 算法在 BCI (Brain Computer Interface, BCI) 信号特征选取与分类研究中取得了较好的效果, 已经在两个公共 MI (Motor imagery, MI) 数据集上得以验证^[10]。

基于无人机光谱遥感的作物营养监测模型中, 反向传播神经网络 (Backpropagation Neural Network, BPNN)^[11-12]、偏最小二乘 (Partial Least Squares, PLS)^[13-14]、支持向量机 (Support Vector Machines, SVM)^[11,15]、极限学习 (Extreme Learning Machines, ELM)^[16-17]等取得了较好的结果, 其中 ELM 模型具有精度高、速度快等优点, ELM 是含有单个或多个隐含层的前馈神经网络, 与传统的 BNNP 不同, ELM 隐含层中节点参数随机设定后, 不需要反向重复调整, 运算量减小, 可以更快地学习训练模型。然而, 由于 ELM 模型隐含层节点参数的随机性, 在实际应用中需要大量的隐含层节点才能达到目标精度, 且泛化能力不强^[18]。为了解决上述问题, 本研究利用粒子群优化 (Particle Swarm Optimization, PSO) 算法优化 ELM 的输入层权值和隐含层偏差, 从训练数据中自动学习出隐含层节点的数量, 以降低模型的复杂度和提高精度^[19]。

收稿日期: 2021-12-01 修订日期: 2022-03-24

基金项目: 辽宁省重点研发计划项目 (2020JH2/10200038); 国家重点研发计划项目 (2017YFD0300700)

作者简介: 江凯伦, 研究方向为无人机遥感与精准农业相关技术。

Email: 2019220024@stu.syau.edu.cn

*通信作者: 曹英丽, 博士, 教授, 博士生导师, 研究方向为无人机农业定量遥感机理模型。Email: caoyingli@163.com

本研究基于东北粳稻无人机遥感高光谱影像数据, 应用 RNCA 算法实现粳稻叶绿素光谱特征分析与特征波段选择, 优化 RNCA 损失函数和正则化参数提升特征选择性能; 构建粒子群 PSO 优化+极限学习机 ELM 的叶绿素含量反演模型, 以期为基于无人机平台的高通量作物监测提供理论依据, 并为筛选无人机高光谱波段实现作物长势参数快速估测提供参考。

1 材料与方法

1.1 试验设计

试验于 2018—2020 年 6—9 月在沈阳农业大学卡力玛水稻实验站 (41°47'N; 122°71'E) 进行。水稻供试品种为沈稻 539, 4 个施氮梯度 (CK、N1、N2 和 N3)、3 次重复, 共 12 个小区, 每个小区 30 m×45 m。其中, CK 为对照组, 不施氮肥; N1 为当地标准施氮水平 (45 kg/hm²); N2 为低氮水平 (22.5 kg/hm²); N3 为高氮水平 (67.5 kg/hm²)。磷肥和钾肥按当地标准施用 (磷肥 51.75 kg/hm²、钾肥 18 kg/hm²)。

1.2 无人机高光谱影像数据采集

利用大疆 M600 PRO 六旋翼无人机搭载四川双力合浦 GaiaSky-mini 内置推扫式高光谱仪采集水稻冠层高光谱影像数据, 光谱传感器频率范围为 400~1 000 nm、重采样间隔 2.35 nm, 共产生 255 个波段, 去除光谱上下边界两个波段, 剩余 253 个有效波段。

无人机遥感数据及地面样本数据采集试验分别于水稻分蘖期、拔节期、孕穗期、抽穗期、开花期和灌浆期进行, 试验选择晴天或多云天气 (云少于 20%) 进行, 时间为上午 11:00 到下午 12:00 之间, 无人机飞行高度为 150 m, 一景影像对应地面面积为 1000 m², 每景照片获取时间约为 15 s。

高光谱遥感影像数据使用 ENVI5.3+IDL 软件进行数据提取和处理, 首先使用波谱角填图方法 (Spectral Angle Mapping, SAM) 消除干扰物体光谱的影响; 然后利用黑白校正进行高光谱反射率校准 (反射率校准方法如式 (1)); 最后利用感兴趣区 ROI (Region of Interest, ROI) 内平均光谱作为该区域样本的反射光谱。

$$\rho_i = \frac{DN_i - DN_1}{DN_2 - DN_1}(\rho_2 - \rho_1) + \rho_1 \quad (1)$$

式中 ρ 和 DN_i 分别为待转换地物的反射率和亮度值, DN_1 和 DN_2 为校准板的 DN 值, ρ_1 和 ρ_2 为校准板的反射率。

1.3 水稻样本采集与叶绿素含量测定

水稻冠层无人机高光谱影像获取试验同步地面样本采集, 每个小区内距边行 2 m, 四角分别选取 4 穴水稻作为该小区样本点; 每穴采集倒一叶、倒二叶或倒三叶约 50 个作为该样本点的冠层叶片, 放于密封袋并储存在 4 °C 的移动冰箱中; 同时, 使用手持差分 GPS 设备 (制造商: XAG, 型号: RTK, 精度: 厘米级) 测量该样本点的地理坐标, 与无人机采集的冠层高光谱遥感图像中像素 GPS 信息相对应, 以确定地面样本在遥感影像中的位置, 进一步获取该位置区域内的平均光谱作为该样本

点的高光谱数据, 根据团队前期研究结果, 水稻叶绿素敏感波段范围为 400~800 nm^[16-17], 因此, 本研究以该波段范围为研究对象, 使用 Savitzky-Golay 卷积平滑算法^[20]对样本光谱数据进行平滑, 减少噪声对叶绿素含量反演精度的影响。

水稻叶绿素含量的测定: 采集地面样本返回实验室后选择完全展开的叶子并剪成碎片、混合均匀, 称取 0.4 g 放入 200 mL 提取溶液 (丙酮、乙醇和蒸馏水体积比例为 9:9:2) 中, 置于 20 °C 的阴凉处; 待样品完全呈现白色后, 用恒平 754 UV 可见分光光度计进行比色。

分光光度计检测波长范围覆盖 190~1 000 nm, 步长为 0.1 nm, 由于叶绿素 a 和叶绿素 b 在 645 和 663 nm 处有最大吸收, 因此测量 645 和 663 nm 的吸光值 (OD), 然后推导出叶绿素含量, 计算公式如 (2)^[17]:

$$\text{Chl} = 5.134\text{OD}_{663} + 20.436\text{OD}_{645} \quad (2)$$

式中 Chl 是叶绿素含量 (mg/L), OD_{663} 和 OD_{645} 分别是 663 和 645 nm 处的吸光值。

在水稻不同生育期共进行 10 次样本采集与测试, 共收集有效数据 236 个, 概率分布如图 1 所示。

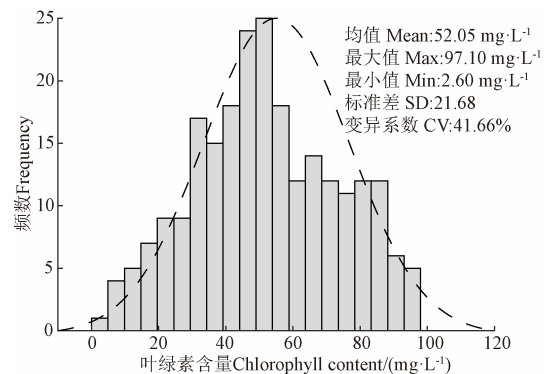


图 1 叶绿素含量概率密度图

Fig.1 Probability density map of chlorophyll content

由图 1 可知, 236 个水稻叶片叶绿素含量整体呈正态分布, 最大值、最小值和均值分别为 97.10 mg/L、2.60 mg/L 和 52.05 mg/L; 极差为 97.10 mg/L、标准差为 21.68、变异系数为 41.66%, 满足叶绿素含量反演建模需求。选取样本数据的 80% 作为训练集 (189 个样本)、20% 为测试集 (47 个样本) 和 5 折交叉验证。

1.4 叶绿素光谱特征选择方法

为解决水稻叶绿素含量高光谱反演建模中高维数据的冗余信息干扰问题, 利用正则近邻成分分析自动化学习投影矩阵, 实现高维特征空间的约减, 提取叶绿素光谱特征波段。

1.4.1 基于正则近邻成分分析的特征选择方法

正则近邻成分分析 (RNCA) 通过优化平均留一法平均留一回归精度的目标函数来评价特征空间中所有特征的权重^[1]。若用集合 $Q = (x_i, y_i) (i = 1, 2, \dots, n)$ 表示地面水稻样本叶绿素含量及对应高光谱, 其中 x_i 代表第 i 个样本的高光谱向量 (包含 400~800 nm 范围的 192 个波段反射率),

$x_i \in S^{n \times r}$, n 和 r 分别代表总样本数和光谱波段数; y_i 代表第 i 个样本的叶绿素含量。利用 RNAC 对 \mathcal{Q} 进行特征优选, 样本 x_i 选择 x_j 作为参考样本的概率为 p_{ij} , 如式 (3):

$$p_{ij} = \begin{cases} \frac{k(d_w(x_i, x_j))}{\sum_{j=1}^n k(d_w(x_i, x_j))}, & i \neq j \\ 0, & i = j \end{cases} \quad (3)$$

式中 d_w 为两个样本之间的距离, 计算公式如式 (4):

$$d_w(x_i, x_j) = \sum_{m=1}^r w_m^2 |x_{im} - x_{jm}| \quad (4)$$

式中 w_m 代表第 m 个特征的评估权重; k 为指数衰减核函数 $\exp(-z/\sigma)$, σ 表示核的宽度, 表示概率 p_{ij} 和加权距离 d_w 之间的衰减关系, 两个样本的 d_w 越小、 p_{ij} 越大。样本 x_i 对应的叶绿素含量 y_i 被正确预测的概率 p_i 为

$$p_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n p_{ij} I(y_i, y_j) \quad (5)$$

其中 $I(y_i, y_j)$ 是衡量 y_i 和 y_j 之间差异的函数, y_i 和 y_j 值越接近, $I(y_i, y_j)$ 返回的值越大, 根据公式 (5) 可得平均留一的正确预测概率 $F(w)$ 为

$$F(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i \quad (6)$$

RNCA 算法为了避免模型的过度拟合, 在公式 (6) 中加入正则化项, 公式 (6) 可改写为

$$F(W) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i - \lambda \sum_{m=1}^r W_m^2 \quad (7)$$

式中 λ 为正则化参数。RNCA 算法通过给定 λ 最大化 $F(W)$ 来学习特征权重向量 W :

$$\begin{aligned} W &= \arg \max_W F(W) \\ &= \arg \max_W \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i - \lambda \sum_{m=1}^r W_m^2 \right) \\ &= \arg \min_W \left(-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i + \lambda \sum_{m=1}^r W_m^2 \right) \\ &= \arg \min_W f(W) \end{aligned} \quad (8)$$

通过式 (8) 该优化问题转化为最小化目标函数 $f(W)$ 。由公式 (6) 可得 $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n p_{ij} = 1$, 在目标函数中添加常量 1 不影响 W 的求解结果。

$$\begin{aligned} W &= \arg \min_W \left(1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i + \lambda \sum_{m=1}^r W_m^2 \right) \\ &= \arg \min_W \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n p_{ij} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n p_{ij} I(y_i, y_j) + \lambda \sum_{m=1}^r W_m^2 \right) \\ &= \arg \min_W \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n p_{ij} (1 - I(y_i, y_j)) + \lambda \sum_{m=1}^r W_m^2 \right) \\ &= \arg \min_W \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n p_{ij} I(y_i, y_j) + \lambda \sum_{m=1}^r W_m^2 \right) \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $I(y_i, y_j)$ 为损失函数, y_i 和 y_j 值越接近, $I(y_i, y_j)$ 值越小, 当目标函数最小时对应的特征空间权重参数 W 最优, 本研究使用梯度下降算法 lbfgs^[3] 计算 W 。RNCA 在设定参数 λ 下获得特征空间权重, 通过保留权重较大的特征, 获得低维特征空间, 实现特征的初步筛选。

1.4.2 RNCA 损失函数与正则化参数的优选

目标函数中的损失函数 $I(y_i, y_j)$ 和正则化参数 λ 是 RNCA 特征选择算法的两个关键参数, 影响特征选择结果, 因此设计试验进行参数优选。试验设置常用的 4 种不同的损失函数和 100 个正则化参数 (按式 (14) 生成 λ 测试集), 通过 RNCA 特征选择性能, 测试并获取 l 、 λ 最优参数:

试验设置平均绝对误差损失函数 (MAD)、均方误差损失函数 (MSE)、支持向量机损失函数 ϵ -insensitive^[21]、自定义损失函数 (Custom) 共 4 种损失函数, 计算公式如下:

$$\text{MAD:} \quad l_1(y_i, y_j) = |y_i - y_j| \quad (10)$$

$$\text{MSE:} \quad l_2(y_i, y_j) = (y_i - y_j)^2 \quad (11)$$

$$\epsilon\text{-insensitive:} \quad l_3(y_i, y_j) = \max(0, |y_i - y_j| - \epsilon), \epsilon > 0 \quad (12)$$

$$\text{Custom:} \quad l_4(y_i, y_j) = 1 - \exp(-|y_i - y_j|) \quad (13)$$

正则化参数 λ 测试集生成方法如下:

$$\lambda_i = r + (i-1) \frac{u-d}{q-1} \cdot \frac{s_y^2}{n}, i=1, 2, \dots, q \quad (14)$$

其中 q 为测试的 λ 个数, r 和 u 统称为范围步长参数, s_y^2 表示叶绿素含量样本的方差。

分别计算 4 种损失函数 l 和不同正则化参数 λ 下的特征权重向量 W 。RNCA 特征选择性能通过水稻叶绿素含量和高光谱样本进行测试, 采用 5 折交叉验证 (样本集 \mathcal{Q} 划分训练集和测试集样本数分别为 $z=189$ 、 $v=47$ 个)。

首先 RNCA 在训练集中计算特征权重向量 W , 根据式 (4) 计算测试集每一个样本 $x_i (i=1, 2, \dots, v)$ 与训练集样本 $x_j (j=1, 2, \dots, z)$ 的距离 $d_w(x_i, x_j)$, 再利用式 (3) 计算 p_{ij} , 最后根据式 (15) 计算样本 x_i 叶绿素含量的预测值 \hat{y}_i :

$$\hat{y}_i = \sum_{j=1}^z p_{ij} y_{ij} \quad (15)$$

特征选择性能通过测试集叶绿素含量估测精度来评估, 均方根误差 (RMSE) 和决定系数 (R^2) 计算公式为

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - \bar{y})^2} \quad (16)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2}{tn}} \quad (17)$$

式中 \hat{y}_i , y_i 和 \bar{y} 分别为叶绿素含量的预测值、观测值、平均值; tn 为测试样本的数量。RMSE 值越低, R^2 值越高, 说明预测精度越高, RNCA 特征选择性能越好。

RNCA 的损失函数和正则化参数优选步骤如下:

1) 对 236 组样本标准化, 5 折交叉划分数据, 得到训练集、测试集, 根据公式 (14) 为 4 个待测试损失函数创建一个均匀分布的 λ 值数组, 本研究中, 测试个数 $q=100$, 步长范围参数 $r=0, u=4$, 共产生 100 个不同的 λ 值。每个损失函数需迭代 100 次。

2) 对于损失函数 MAD, 首先设定目标函数 $f(w)$ 的损失函数为 l_1 , 对于每个 λ 值, 通过训练集学习一组特征权重向量, 根据公式 (15) 计算并保存测试集的预测精度 (RMSE 和 R^2), 其他损失函数同理。

3) 绘制不同损失函数下 RMSE、 R^2 与 λ 值的关系曲线, 选择预测精度最高的损失函数 l_{best} 和正则化参数值 λ_{best} 。

RNCA 算法可以有效的评估出每个特征波段的权重, 保留原始特征结构, 根据权重的大小进行特征选择。但从 RNCA 算法理论上, 其计算成本主要取决于最优化过程的梯度计算, 当输入数据量增加 k 倍时, 计算复杂度增加 k^2 倍, 当数据集过大时, 该算法的计算速度较慢。

1.5 叶绿素含量的 PSO-ELM 反演建模

本文使用具有粒子群优化的极限学习机作为叶绿素含量反演模型。PSO 算法用于优化 ELM 的输入层权值和隐含层偏差, 从而计算输出权值矩阵。本研究考虑的 PSO 算法参数主要包括种群规模 (POP)、惯性权重 (IW)、学习因子 (C1, C2) 和速度位置相关系数 (MC)。研究证明, 相比于传统的极限学习机反演算法, 基于粒子群优化的极限学习机在隐含层节点数目以及网络泛化能力上更具有优势^[2]。模型采用 5 折交叉验证, 用均方根误差 (RMSE) 和决定系数 (R^2) 来评估叶绿素含量的高光谱反演精度。

2 结果与分析

2.1 RNCA 损失函数与正则化参数优选结果分析

在 RNCA 中, 测试了 4 种不同的损失函数 (MAD、MSE、 ϵ -insensitive、Custom) 和 100 个正则化参数下 RNCA 的特征选择性能。不同损失函数 RMSE 和 R^2 随 λ 变化如图 2; 不同损失函数的 λ_b 值以及对应的预测精度如表 1。

MAD 和 ϵ -insensitive 的 RMSE、 R^2 曲线接近重合 (图 2), 当 λ 值大于 0.02, 随着迭代次数增加, 两者的预测精度逐渐减小, λ_b 值也接近相等, 分别为 0.005、0.009, RMSE、 R^2 分别为 14.537 mg/L、0.708 和 14.449 mg/L、0.711; 从式 (10) 和式 (12) 可以看出, 当两个响应值 (y_i 和 y_j) 的差值增加时, MAD 和 ϵ -insensitive 函数值呈线性递增, 说明 MAD 和 ϵ -insensitive 受极端值的影响较小, 当差值小于 ϵ , ϵ -insensitive 会忽略差值, 函数值为 0, 说明 ϵ -insensitive 敏感度比 MAD 更低。Custom 的 λ_b 为 0, 在 λ 值线性增加过程中, RMSE 没有明显变化, 但 λ 在 0~0.17 范围内, R^2 变化明显, 这是因为 y_i 与 y_j 差值增加会使其对异常值的敏感程度降低, 函数损失值会逐渐趋近于 1, 并保持在该值附近。MSE 的精度变化曲线在 λ 迭代过程中逐渐趋近平稳, 在 $\lambda=0.306$ 时精度达最高,

RMSE、 R^2 分别为 13.901 mg/L、0.734; 当 y_i 与 y_j 之间的差值增加时, MSE 函数值呈二次增长, 这使得它对异常值非常敏感, RNCA 使用该损失函数时, 可以识别更多相关的特征。

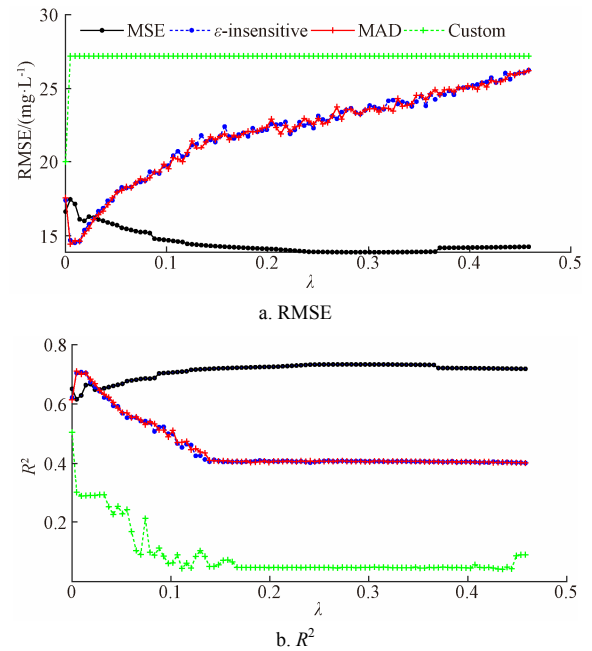


图 2 不同损失函数 RMSE 和 R^2 随正则化参数 λ 变化曲线
Fig.2 Curves of different loss functions RMSE and R^2 with regularization parameter λ

表 1 4 种损失函数下的 RNCA 回归结果

损失函数 Loss function	λ_b	RMSE/(mg·L ⁻¹)	R^2
MAD	0.005	14.449	0.711
MSE	0.306	13.901	0.734
ϵ -insensitive	0.009	14.537	0.708
Custom	0.000	19.985	0.505

注: λ_b 为损失函数回归精度最高时对应的正则化参数 λ 值。

Note: It is the corresponding regularization parameter value when the loss function regression has the highest accuracy

根据对应 λ_b , 4 种损失函数下 RNCA 所学习出的特征权重如图 3。其中, RNCA-MSE 权重非零的特征共 16 个, 主要分布在 415~534 nm、680~800 nm 波段。RNCA-MAD、RNCA- ϵ -insensitive、RNCA-Custom 非零权重个数分别为 188、170、191, 主要集中在 500、700 和 800 nm 附近。除 MSE 外, 其他 3 种损失函数的 λ_b 值均偏小, 这会给更多的特征分配权重, 削弱了正则化的作用, 增加模型过拟合风险。

RNCA-MSE ($\lambda_{best}=0.306$) 表现出更佳的特征选择性能, 预测精度最高, RMSE、 R^2 分别为 13.901 mg/L、0.734, 说明该方法提取的 16 个光谱特征波段, 与东北粳稻叶绿素含量存在密切关系。因此, 在本研究中, 损失函数与正则化参数优选结果为: l_{best} 为 MSE, λ_{best} 为 0.306; RNCA-MSE 的计算的 16 光谱波段作为特征初步筛选结果。

2.2 光谱特征波段优选结果分析

基于 2.1 节分析结果 RNCA-MSE 初步筛选出 16 个水稻叶绿素含量高光谱特征波段, 进一步应用 RNCA-ELM 模型进行特征优选。首先, 将 16 个特征根据权重从大到

小排序, 若优选的特征 $F(n_f)$ 为前 n_f 个特征波段的组合 ($n_f=1,2,\dots,16$), 选择不同特征数的高光谱数据训练 ELM 模型, 通过 5 折交叉验证法评价模型性能; 其次, 根据

预测精度最高的 ELM 模型所对应的输入特征数, 确定最终的特征选择结果。不同特征下叶绿素含量 ELM 反演模型的 RMSE 和 R^2 结果如图 4 所示。

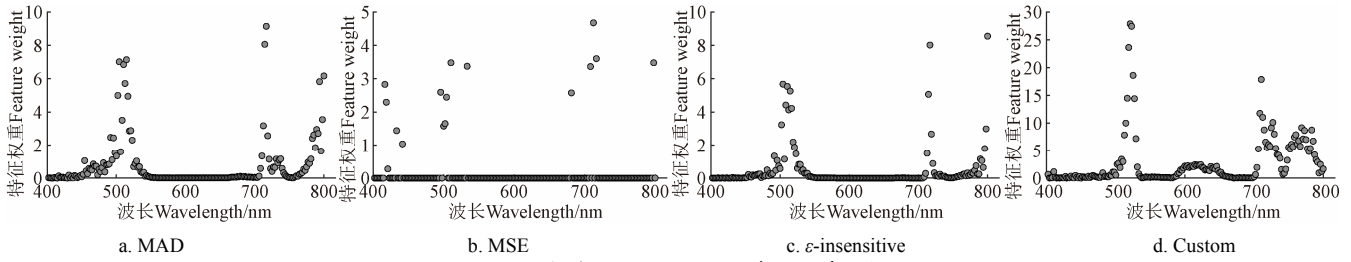


图 3 不同损失函数下 RNCA 学习的特征权重

Fig.3 Feature weight values obtained under different loss functions

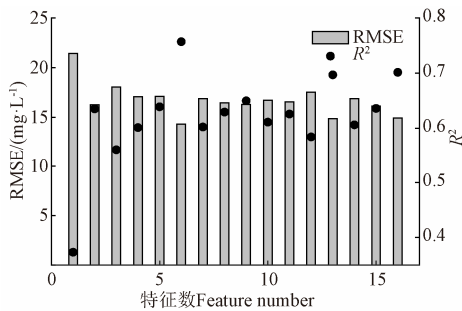


图 4 不同特征数的叶绿素含量 ELM 反演精度

Fig.4 ELM inversion accuracy of chlorophyll content with the same characteristic number

图 4 结果表明, 当特征数 $n_f = 6$, 即 $F(6)$ 作为 ELM 模型的输入时, 模型的预测精度最高, RMSE、 R^2 分别为 14.314 mg/L、0.757; 其次是特征数为 13 和 16, 模型的 RMSE、 R^2 分别为 14.863 mg/L、0.697 和 14.934 mg/L、0.702; 当特征数为 1 时模型精度最低。

因此 RNCA 最终特征优选结果为: 710、716、508、798、532 和 708 nm, 各波段权重如图 5, 其中 710 nm 的特征波段权重最大, 为 4.677, 其余 5 个特征波段的权重相接近, 约 3.5。

为进一步验证本研究光谱特征选取算法, 试验利用连续投影法 (Successive Projections Algorithm, SPA) 进行高光谱特征选择, 再以两种算法选择的特征为输入, 构建水稻叶绿素含量反演模型, 根据反演精度测试特征选取效果。SPA 是通过最小化共线性的前向特征变量来选择特征, 根据投影向量的大小选择波段建立多元线性回归选出特征子集^[16-17], SPA 特征波段提取结果为 465、540、689、712、731 和 783 nm, 结果如图 6 所示。

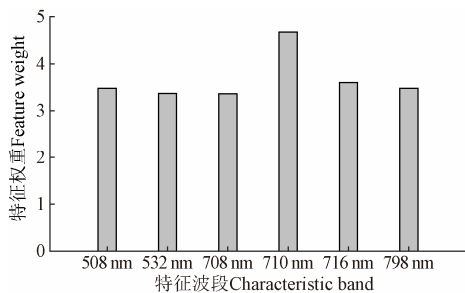


图 5 优选特征波段的权重

Fig.5 The weight of the preferred feature bands

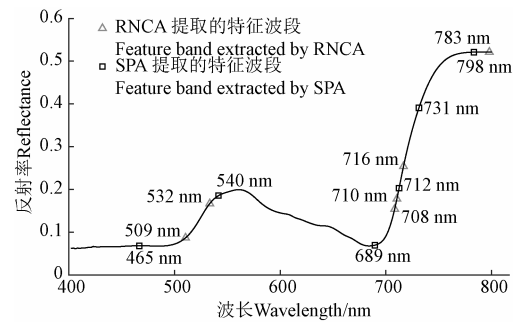


图 6 RNCA 和 SPA 提取的特征波段

Fig.6 Selection of characteristic bands of RNCA and SPA

本研究结果表明, 叶绿素含量最敏感的波段为 710 nm; RNCA 和 SPA 算法的光谱特征提取结果在 783 和 798 nm、710 和 712 nm 基本重叠; 相比 SPA 算法, RNCA 算法提取的特征波段主要集中在红边位置, 与前人研究结论吻合^[22], 利用本研究算法提取的特征波段可有效的反演叶绿素含量。

2.3 PSO-ELM 叶绿素含量反演结果分析

试验分别以 RNCA、SPA 特征选择结果为输入, 基于 ELM 构建水稻叶绿素含量反演模型, 对比分析 RNCA-ELM、SPA-ELM、RNCA-PSO-ELM、SPA-PSO-ELM 共 4 种模型反演结果。

研究采用正交试验来确定 PSO-ELM 模型的最佳参数, 以决定系数 (R^2) 作为参数设置的评价指标^[16]。粒子群迭代次数为 200, 每个参数设置 5 个取值梯度, PSO-ELM 正交试验结果如表 2。

由表 2 可以看出, 不同参数梯度下, 整体上 $R^2_{(RNCA)}$ 高于 $R^2_{(SPA)}$, 表明 RNCA 特征选择方法相比 SPA 更适用于 PSO-ELM 模型。为了获得最佳参数, 对表 2 中的决定系数统计分析, 结果如表 3。

若 R_{ij} 代表参数 j 的第 i 个取值梯度的 R^2 之和。以 RNCA 的正交阵列测试结果为例说明: R_{11} 是参数 POP 的第一个取值梯度 40 对应的 R^2 之和; R_{12} 是第二个参数 IW 的第一个取值梯度 0.2 对应的 R^2 之和, 计算公式如下:

$$\begin{cases} R_{11} = R^2_{(RNCA,1)} + R^2_{(RNCA,2)} + R^2_{(RNCA,3)} + R^2_{(RNCA,4)} + R^2_{(RNCA,5)} \\ R_{12} = R^2_{(RNCA,1)} + R^2_{(RNCA,6)} + R^2_{(RNCA,11)} + R^2_{(RNCA,16)} + R^2_{(RNCA,21)} \end{cases} \quad (18)$$

表 2 PSO-ELM 的正交试验结果

Table 2 Orthogonal test results of Particle Swarm-Extreme Learning Machine

编号 No.	POP	IW	C1	C2	MC	$R^2_{(RNCA)}$	$R^2_{(SPA)}$
1	40	0.2	1.1	1.1	0.02	0.779	0.733
2	40	0.8	1.3	1.3	0.06	0.803	0.737
3	40	1.5	1.65	1.65	0.2	0.832	0.696
4	40	0.8~0.2	2.6	2.6	0.6	0.819	0.773
5	40	0.2~1.5	3.5	3.5	1	0.817	0.731
6	50	0.2	1.3	1.65	0.6	0.846	0.714
7	50	0.8	1.65	2.6	1	0.792	0.747
8	50	1.5	2.6	3.5	0.02	0.858	0.709
9	50	0.8~0.2	3.5	1.1	0.06	0.816	0.782
10	50	0.2~1.5	1.1	1.3	0.2	0.828	0.716
11	60	0.2	1.65	3.5	0.06	0.812	0.715
12	60	0.8	2.6	1.1	0.2	0.767	0.776
13	60	1.5	3.5	1.3	0.6	0.833	0.728
14	60	0.8~0.2	1.1	1.65	1	0.786	0.743
15	60	0.2~1.5	1.3	2.6	0.02	0.827	0.634
16	70	0.2	2.6	1.3	1	0.829	0.738
17	70	0.8	3.5	1.65	0.02	0.777	0.760
18	70	1.5	1.1	2.6	0.06	0.815	0.751
19	70	0.8~0.2	1.3	3.5	0.2	0.805	0.745
20	70	0.2~1.5	1.65	1.1	0.6	0.837	0.720
21	80	0.2	3.5	2.6	0.2	0.830	0.750
22	80	0.8	1.1	3.5	0.6	0.823	0.726
23	80	1.5	1.3	1.1	1	0.834	0.761
24	80	0.8~0.2	1.65	1.3	0.02	0.822	0.692
25	80	0.2~1.5	2.6	1.65	0.06	0.823	0.749

注： $R^2_{(RNCA)}$ 、 $R^2_{(SPA)}$ 分别代表 RNCA 和 SPA 所选特征作为输入的模式决定系数。

Note: $R^2_{(RNCA)}$ 、 $R^2_{(SPA)}$ represent the model determination coefficients of the selected features of RNCA and SPA as input, respectively.

式中 $R^2_{(RNCA,n)}$ 表示编号为 n 的 $R^2_{(RNCA)}$ 值 (表 2)，即 $R_{11}=4.050$ ， $R_{12}=4.096$ ，对应表 3 中 RNCA 的 POP、IW

的第一个取值梯度 R^2 之和。同理计算其他 R_{ij} 值，结果列于表 3。第一列中 $R_{i1}(i=1,2,\dots,5)$ 之间的差异反应了不同种群大小对反演模型精度的影响， $R_{21}>R_{11}$ 表明正交试验中 POP=50 对应的 R^2 最大。同理，对应 IW、C1、C2 和 MC 的 R^2 分别在 R_{32} 、 R_{23} 、 R_{54} 和 R_{54} 处最大。因此，最佳参数为 POP = 50，IW = 1.5，C1 = 1.3，C2 = 3.5，MC = 0.6，利用该组参数建立 PSO-ELM 水稻叶绿素含量反演模型。同理获得 SPA-PSO-ELM 模型的最佳参数为 POP = 70，IW = 0.8，C1 = 2.6，C2 = 1.1，MC = 0.06。

表 3 PSO-ELM 正交阵列测试结果

Table 3 Test results of the PSO-ELM orthogonal array

特征选择方法 Feature selection methods	取值梯度 Value gradient	POP	IW	C1	C2	MC
RNCA	1	4.050	4.096	4.032	4.034	4.063
	2	4.139	3.962	4.115	4.113	4.069
	3	4.025	4.171	4.093	4.064	4.061
	4	4.063	4.048	4.096	4.083	4.158
	5	4.133	4.132	4.073	4.114	4.059
SPA	1	3.670	3.649	3.669	3.772	3.527
	2	3.668	3.747	3.591	3.611	3.734
	3	3.595	3.645	3.569	3.662	3.683
	4	3.714	3.735	3.745	3.655	3.662
	5	3.677	3.550	3.751	3.625	3.719

RNCA-ELM、SPA-ELM、RNCA-PSO-ELM、SPA-PSO-ELM 模型的叶绿素反演结果如图 7。

图 7 表明，RNCA-PSO-ELM 的模型精度最高，拟合效果最佳，RMSE、 R^2 分别为 9.549 mg/L、0.891；其次是 SPA-PSO-ELM 模型，RMSE、 R^2 分别为 11.206 mg/L、0.821，RNCA-ELM 和 SPA-ELM 的 RMSE、 R^2 分别为 14.314 mg/L、0.757 和 16.016 mg/L、0.693。可以看出，ELM 模型经过 PSO 优化后精度得到明显提升，本文方法有效克服了传统 ELM 模型由于随机产生权重和隐含层阈值而导致的泛化能力差和校准精度低的问题。

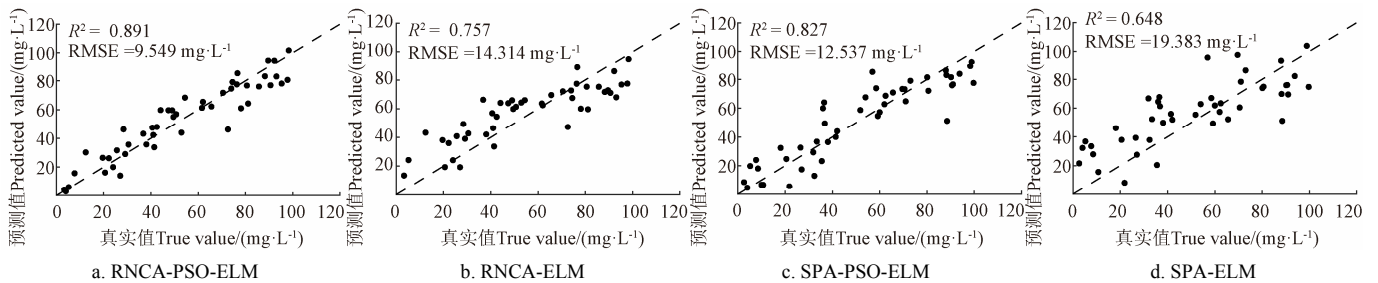


图 7 不同模型的水稻冠层叶绿素含量反演结果
Fig.7 Inversion results of chlorophyll content in rice canopy from different models

本文提出的 RNCA-PSO-ELM 的水稻叶绿素含量反演结果优于本团队前期构建的 PSO-ELM^[23]反演精度；另外，叶绿素实测数据平均值高于文献[23]，是由于本文对试验进行了方法优化：样本改为田间即时处理，减少了样品离体时间；优化裁剪、研磨、萃取、过滤等环节，

使得试验叶绿素含量数据更接近田间真实情况。

对每个小区划分大小相等的 6×3 个 ROI，以 ROI 内的所有光谱平均值作为其光谱值，利用最优模型 RNCA-PSO-ELM 进行水稻叶绿素含量反演制图，专题图如图 8 所示。试验区域内叶绿素含量最小值为

3.807 mg/L, 最大为 96.499 mg/L, 零氮 (CK)、标准施氮 (N1)、低氮 (N3)、高氮 (N3) 4 个区域预测的叶绿素含量平均值分别为 34.365、47.805、45.249、51.528 mg/L, 可以看出, 不同施氮水平的水稻在相同生长环境下的叶绿素含量具有一定的结果差异, 叶绿素水平随着施氮量提高而增加, 与实际施氮水平趋势一致, 定性验证了该模型的有效性。根据制图可实现大面积的水稻无损叶绿素含量检测, 对作物精准施肥、营养监测具有重要意义。

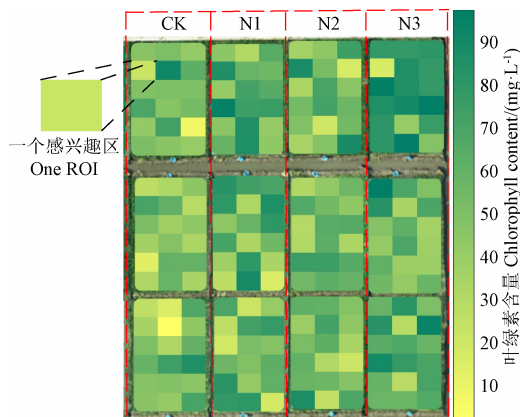


图 8 试验小区叶绿素含量预测制图

Fig.8 Prediction and mapping of chlorophyll content in experimental plots

3 结论

本研究利用多年累积的无人机水稻冠层高光谱数据和地面样本数据, 分析了东北粳稻叶绿素含量的光谱响应特性、测试了 RNCA 特征选择性能、构建了水稻冠层叶绿素含量反演模型, 具体研究结论如下:

1) 水稻叶绿素含量光谱响应特性分析中, 引入正则邻近成分分析 (RNCA) 方法, 实现了光谱特征波段的选择, 当正则化参数 $\lambda = 0.306$ 、损失函数为 MSE 时 RNCA 特征选择性能最优。

2) 基于 RNCA 方法, 获得东北粳稻叶绿素含量光谱特征波段为 710、716、508、798、532 和 708 nm, 为叶绿素含量反演建模提供了输入特征。

3) 应用正交试验优化 PSO 种群规模、惯性权重、学习因子和速度位置相关系数等参数, 基于 PSO 算法优化 ELM 的输入层权值和隐含层偏差, 提高了模型的精度和稳定性。

4) 构建的 4 种水稻叶绿素含量反演模型中, RNCA-PSO-ELM 模型的叶绿素含量反演精度最高, RMSE 和 R^2 分别为 9.549 mg/L、0.891, 可为基于无人机遥感的水稻叶绿素快速诊断提供理论支撑。

[参 考 文 献]

[1] 刘涛, 张寰, 王志业, 等. 利用无人机多光谱估算小麦叶面积指数和叶绿素含量[J]. 农业工程学报, 2021, 37(19): 65-72.

Liu Tao, Zhang Huan, Wang Zhiye, et al. Estimation of the

leaf area index and chlorophyll content of wheat using UAV multi-spectrum images[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2021, 37(19): 65-72. (in Chinese with English abstract)

[2] 陈鹏, 冯海宽, 李长春, 等. 无人机影像光谱和纹理融合信息估算马铃薯叶片叶绿素含量[J]. 农业工程学报, 2019, 35(11): 63-74.

Chen Peng, Feng Haikuan, Li Changchun, et al. Estimation of chlorophyll content in potato using fusion of texture and spectral features derived from UAV multispectral image [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2019, 35(11): 63-74. (in Chinese with English abstract)

[3] 刘爽, 于海业, 朴兆佳, 等. 基于高光谱技术反演大豆生理信息的特征波长提取方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(11): 3542-3548.

Liu Shuang, Yu Haiye, Piao Zhaojia, et al. Study on extracting characteristic wavelength of soybean physiological information based on hyperspectral technique[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(11): 3542-3548. (in Chinese with English abstract)

[4] Goldberger J, Hinton G E, Roweis S, et al. Neighbourhood components analysis[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2004, 17(4):977-985.

[5] Singh-Miller N, Collins M, Hazen T J. Dimensionality reduction for speech recognition using neighborhood components analysis[C]//Interspeech2007: 1158-1161.

[6] Wang F, Zhang H, Wang K, et al. Fast neighbourhood component analysis with spatially smooth regulariser for robust noisy face recognition[J]. Biometrics Iet, 2014, 3(4): 278-290.

[7] Ferdinando H, Seppänen T, Alasaarela E. Emotion recognition using neighborhood components analysis and ECG/HRV-based features[C]//International Conference on Pattern Recognition Applications and Methods. Springer, Cham, 2017: 99-113.

[8] Raghu S, Sriraam N. Classification of focal and non-focal EEG signals using neighborhood component analysis and machine learning algorithms[J]. Expert Systems with Applications, 2018, 113: 18-32.

[9] Yang Z, Laaksonen J. Regularized neighborhood component analysis[C]//Scandinavian conference on image analysis. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007: 253-262.

[10] Malan N S, Sharma S. Feature selection using regularized neighbourhood component analysis to enhance the

- classification performance of motor imagery signals[J]. *Computers in Biology and Medicine*, 2019, 107: 118-126.
- [11] 纪伟帅, 陈红艳, 王淑婷, 等. 基于无人机多光谱的华北平原花铃期棉花叶片 SPAD 建模方法研究[J]. *中国农学通报*, 2021, 37(22): 143-150.
- Ji Weishuai, Chen Hongyan, Wang Shuting, et al. Modeling method of cotton leaves SPAD at flowering and boll stage in north China plain based on UAV multi-spectrum[J]. *Chinese Agricultural Science Bulletin*, 2021, 37(22): 143-150. (in Chinese with English abstract)
- [12] 张新乐, 于滋洋, 李厚萱, 等. 东北水稻叶片 SPAD 遥感光谱估算模型研究[J]. *中国农业大学学报*, 2020, 25(1): 66-75.
- Zhang Xinle, Yu Ziyang, Li Houxuan, et al. Remote sensing estimation model of SPAD for rice leaves in northeast China[J]. *Journal of China Agricultural University*, 2020, 25(1): 66-75. (in Chinese with English abstract)
- [13] 赵茂程, 杨君荣, 陆丹丹, 等. 基于高光谱成像的青梅酸度检测方法[J]. *农业机械学报*, 2017, 48(9): 318-323.
- Zhao Maocheng, Yang Junrong, Lu Dandan, et al. Detection methods of greengage acidity based on hyperspectral imaging[J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2017, 48(9): 318-323. (in Chinese with English abstract)
- [14] 李鑫星, 周婧, 唐红, 等. 基于紫外光谱的水产养殖水质总氮含量快速检测研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(1): 195-201.
- Li Xinxing, Zhou Jing, Tang Hong, et al. Rapid determination of total nitrogen in aquaculture water based on ultraviolet spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2020, 40(1): 195-201. (in Chinese with English abstract)
- [15] 董超, 赵庚星, 宿宝巍, 等. 基于无人机多光谱影像的冬小麦返青期变量施氮决策模型研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2019, 39(11): 3599-3605.
- Dong Chao, Zhao Gengxing, Su Baowei, et al. Decision model of variable nitrogen fertilizer in winter wheat returning green stage based on UAV multi-spectral images[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2019, 39(11): 3599-3605. (in Chinese with English abstract)
- [16] Cao Y, Jiang K, Wu J, et al. Inversion modeling of japonica rice canopy chlorophyll content with UAV hyperspectral remote sensing[J]. *PLoS One*, 2020, 15(9): e0238530.
- [17] 于丰华, 曹英丽, 许童羽, 等. 基于高光谱遥感处方图的寒地分蘖期水稻无人机精准施肥[J]. *农业工程学报*, 2020, 36(15): 103-110.
- Yu Fenghua, Cao Yingli, Xu Tongyu, et al. Precision fertilization by UAV for rice at tillering stage in cold region based on hyperspectral remote sensing prescription map[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE)*, 2020, 36(15): 103-110. (in Chinese with English abstract)
- [18] Zeng J, Roy B, Kumar D, et al. Proposing several hybrid PSO-extreme learning machine techniques to predict TBM performance[J]. *Engineering with Computers*, 2021, 29(2):1-17.
- [19] Ding L, Zhang X, Wu D, et al. Application of an extreme learning machine network with particle swarm optimization in syndrome classification of primary liver cancer[J]. *Journal of Integrative Medicine*, 2021, 19(5): 395-407.
- [20] 鲁一冰, 刘文清, 张玉钧, 等. 一种自适应层进式 Savitzky-Golay 光谱滤波算法及其应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2019, 39(9): 2657-2663.
- Lu Yibing, Liu Wenqing, Zhang Yujun, et al. An adaptive hierarchical savitzky-golay spectral filtering algorithm and its application[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2019, 39(9): 2657-2663. (in Chinese with English abstract)
- [21] 张莉, 周伟达, 焦李成. 尺度核函数支撑矢量机[J]. *电子学报*, 2002(4): 527-536.
- Zhang Li, Zhou Weida, Jiao Licheng. Scaling kernel function support vector machines[J]. *Acta Electronica Sinica*, 2002(4): 527-536. (in Chinese with English abstract)
- [22] 曹英丽, 江凯伦, 刘亚帝, 等. 基于高光谱红边位置提取的水稻叶绿素反演研究[J]. *沈阳农业大学学报*, 2021, 52(6): 718-728.
- Cao Yingli, Jiang Kailun, Liu Yadi, et al. Inversion of rice chlorophyll based on hyperspectral red edge location extraction[J]. *Journal of Shenyang Agricultural University*, 2021, 52(6): 718-728. (in Chinese with English abstract)
- [23] 于丰华, 冯帅, 赵依然, 等. 粳稻冠层叶绿素含量 PSO-ELM 高光谱遥感反演估算[J]. *华南农业大学学报*, 2020, 41(6): 59-66.
- Yu Fenghua, Feng Shuai, Zhao Yiran, et al. UAV hyper-spectral remote sensing inversion modeling of chlorophyll content in japonica rice canopy based on PSO-ELM[J]. *Journal of South China Agricultural University*, 2020, 41(6): 59-66. (in Chinese with English abstract)

Analysis and inversion of rice chlorophyll spectral characteristics using RNCA-PSO-ELM

Jiang Kailun¹, An Jiqing¹, Zhao Yuwei¹, Luo Junying¹, Cao Yingli^{1,2*}

(1. College of Information and Electrical Engineering, Shenyang Agricultural University, Shenyang 110866, China; 2. Liaoning Engineering Research Center for Information Technology in Agriculture, Shenyang 110866, China)

Abstract: This study aims to explore the effective spectral feature selection and inversion modeling of rice chlorophyll content. Taking the Japonica rice as the research object, the Unmanned Aerial Vehicle (UAV) sensing was used to monitor the chlorophyll content at Shenyang Agricultural University Karima Rice Experiment Station in Northeast China in 2018-2020. The rice canopy hyperspectral data was also collected for the ground sample. A spectral feature selection was designed using the Regular Neighbor Component Analysis (RNCA), which was newly developed by the nearest NCA. A regularization term was then added to the loss function to reduce the risk of over-fitting. Different types of loss functions and regularization parameters were then tested to improve the feature extraction of RNCA. As such, the feature information was obtained from the hyperspectral to better predict the chlorophyll content of the rice plant. Subsequently, a chlorophyll inversion model was established using the input features. Extreme learning was also applied to build the model, due to its high accuracy and speed. Among them, the Extreme Learning Machine (ELM) was a feed-forward neural network with single or multiple hidden layers. Unlike the traditional back-propagation neural network, there was no need for reverse repetition, particularly after the parameters of the nodes were randomly set in the hidden layer of the ELM. Therefore, the amount of calculation was greatly reduced to learn and train the model faster than before. Furthermore, Particle Swarm Optimization (PSO) was selected to optimize the weights of the input layer and hidden layer deviations of ELM. The number of hidden layer nodes was automatically learned from the training data, instead of the randomness of the hidden layer node parameters of the ELM model. The generalization of the model was improved to reduce the number of hidden layer nodes for the target accuracy in practical applications. The results show that the RNCA presented the better feature selection. The best feature selection was achieved to initially select the 16 non-zero weight feature bands, particularly with the Mean Square Error (MSE) loss function and the regularization parameter of 0.306. According to the inversion accuracy of the chlorophyll ELM, the six characteristic bands with the highest weight were also selected: 710, 716, 508, 798, 532, and 708 nm, which were closely related to the chlorophyll content of rice. After that, the PSO was used to optimize the input weight and threshold deviation of the ELM model. An optimal combination was achieved, where the population size for the PSO orthogonal test, inertia weight, learning factors C1, C2, and velocity-position correlation coefficient were 50, 1.5, 1.3, 3.5, and 0.6, respectively. The RMSE and R^2 of the chlorophyll inversion were 9.549 mg/L and 0.891 using RNCA-PSO-ELM, respectively. The findings can provide theoretical support to design the chlorophyll content sensor for the field-scale airborne rice

Keywords: UAV; hyperspectrum; rice; chlorophyll content; canonical neighbor component analysis