

机器学习结合高光谱植被指数与 SPAD 值估算冬小麦氮含量

冯惠芬^{1,2,3}, 李映雪⁴, 吴芳⁵, 邹晓晨^{1,2,3*}

(1. 南京信息工程大学遥感与测绘工程学院, 南京 210044; 2. 自然资源部遥感导航一体化应用工程技术创新中心, 南京 210044;
3. 江苏省协同精密导航定位与智能应用工程研究中心, 南京 210044; 4. 南京信息工程大学应用气象学院, 南京 210044;
5. 兴化市气象局, 兴化 225700)

摘要: 冬小麦叶片氮含量与叶片光合作用和营养状况密切相关, 直接影响植株生长发育, 而茎秆中的氮含量与茎秆中纤维素、半纤维素和木质素的比例和含量密切相关, 直接影响茎秆质量及植株的抗倒伏能力。然而, 有关对冬小麦茎秆氮含量估算研究较为有限, 限制了从氮含量角度判断茎秆质量及对倒伏的预测能力。为精准估算冬小麦不同器官(叶片、茎秆)氮含量, 该研究通过 2 年田间试验, 获取冬小麦 4 个关键生育期(拔节期、抽穗期、开花期、灌浆期)和 3 种施氮水平条件下(N1、N2 和 N3)的冠层光谱反射率、叶片、茎秆氮含量及叶片 SPAD(soil and plant analyzer development, SPAD)值。分析了不同生育期和施氮水平条件下高光谱植被指数对叶片和茎秆氮含量的敏感性, 并结合 5 种常用的机器学习算法: 随机森林回归(random forest regression, RFR)、支持向量回归(support vector regression, SVR)、偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)、高斯过程回归(gaussian process regression, GPR)、深度神经网络回归(deep neural networks, DNN)构建冬小麦叶片和茎秆氮含量估算模型。结果表明: 高光谱植被指数对叶片和茎秆氮含量的敏感性受到生育期和施氮水平的影响。在灌浆期, 最佳植被指数双峰冠层植被指数 DCNI(double-peak canopy nitrogen index)对叶片氮含量的敏感性最高, $R^2=0.866$ 。对茎秆氮含量, 在抽穗期的敏感性最高, 最佳植被指数归一化叶绿素比值指数 NPQI(normalized phaeophytinization index)与氮含量相关系数 $R^2=0.677$ 。施氮水平的提升增加了光谱植被指数对茎秆氮含量的敏感性。结合 SPAD 值的机器学习算法提升了氮含量的估算精度, 对叶片氮含量, 在不同生育期和施氮水平条件下估算精度提升了 1%~7%, 其中在全生育期的归一化均方根误差 NRMSE 从 0.254 提升到 0.214, 抽穗期的 NRMSE 提升最大, 从 0.201 提升到 0.128。对茎秆氮含量, 全生育期的 NRMSE 从 0.443 提升到 0.400, 抽穗期的 NRMSE 提升最大, 从 0.323 提升到 0.268。在全生育期, 结合 SPAD 值的 DNN 模型对叶片($R^2=0.782$ 、NRMSE=0.214)和茎秆($R^2=0.802$ 、NRMSE=0.400)氮含量的估算精度最佳。研究说明, SPAD 值与光谱植被指数结合有利于提升冬小麦不同生育期和施氮水平条件下叶片和茎秆氮含量的估算精度。

关键词: 冬小麦; 机器学习; 叶片; 茎秆; 氮含量; SPAD; 高光谱植被指数

doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.202307198

中图分类号: S126

文献标志码: A

文章编号: 1002-6819(2024)-01-0235-11

冯惠芬, 李映雪, 吴芳, 等. 机器学习结合高光谱植被指数与 SPAD 值估算冬小麦氮含量[J]. 农业工程学报, 2024, 40(1): 235-245. doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.202307198 <http://www.tcsae.org>

FENG Huifen, LI Yingxue, WU Fang, et al. Estimating winter wheat nitrogen content using SPAD and hyperspectral vegetation indices with machine learning[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2024, 40(1): 235-245. (in Chinese with English abstract) doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.202307198 <http://www.tcsae.org>

0 引言

氮含量是农作物生长发育的重要营养元素, 直接影响到作物的产量和籽粒品质^[1], 也是农田精准管理的重要指标。及时、准确获取作物氮素含量是合理制定施氮措施的辅助依据。

传统的人工田间采样和室内测试分析获取氮含量不仅耗时、费力, 且具有一定的破坏性。高光谱遥感可以通过获取连续窄波段光谱信息实现对农作物生理生化参数的准确估算。在冬小麦氮含量估算中, 较为常用的是基于光谱反射率组合构建的光谱植被指数估算法。高光谱植被指数通过窄波段组合增强了光谱特征对氮含量的

敏感性并降低了其他因素的影响, 许多学者研发了冬小麦氮含量的敏感高光谱植被指数, 用于叶片或冠层氮含量的无损估算^[2-4]。除采用单一高光谱植被指数作为氮含量变化的指示器外, 多元回归方法可同时考虑多个敏感高光谱特征有利于提升氮含量的估算精度。近年来, 机器学习方法被较多应用于农业遥感领域, 如用于构建作物生理生化参数的遥感估算模型, 较为常用有: 偏最小二乘回归 PLSR^[5], 随机森林回归 RFR^[6], 高斯过程回归 GPR^[7]和支持向量回归 SVR^[8]等。除采用冠层光谱特征外, 作物生理生化参数如叶片相对叶绿素含量 SPAD 也常被用于估算农作物氮含量水平^[9], 而将二者相结合用于对冬小麦氮含量估算的研究则鲜有报道。

冬小麦氮含量在植株不同器官中的分布存在差异, 在不同生长阶段呈现不同特征^[10]。叶片中的氮是叶绿素的重要组成成分, 直接影响叶片光合作用和植株生长发育^[11]。茎秆中的氮是许多重要化合物的组分, 其含量关系到茎秆中纤维素、半纤维素和木质素的比例和含量, 进而直接影响到茎秆质量^[12]。然而, 目前对冬小麦氮含

收稿日期: 2023-07-20 修订日期: 2023-10-19

基金项目: 国家自然科学基金项目(41801243)

作者简介: 冯惠芬, 研究方向为农业遥感。Email: 1749411551@qq.com

*通信作者: 邹晓晨, 博士, 副教授, 研究方向为农业遥感。

Email: zouxiaochen902@126.com

量高光谱估算主要集中在叶片层或整个植株层^[13], 针对茎秆氮含量的估算研究鲜有报道。

利用高光谱估算农作物生理生化参数的精度除了受到光谱特征选择和估算模型的影响, 还受到作物生育期和施氮水平的影响。不同生育期和施氮水平条件下植株氮含量和冠层结构的差异直接影响到光谱指数的敏感性和模型的精度。

该研究在冬小麦的 4 个关键生育期和 3 种施氮水平条件下获取冠层光谱反射率、叶片 SPAD 值、叶片氮含量和茎秆氮含量, 通过分析高光谱植被指数在不同生育期和施氮水平条件对叶片和茎秆氮含量的敏感性, 利用机器学习算法将冬小麦 SPAD 值与光谱植被指数结合构建叶片和茎秆氮含量估算模型, 旨在形成不同生育期和施氮水平条件下对氮含量的有效估算方法。

1 材料与方法

1.1 研究区概况

研究区位于南京信息工程大学农业气象试验站(118°7'E, 32°2'N), 研究区海拔约 30 m, 全年平均温度为 13~22 °C。试验在 2011 和 2014 年 2 个年份开展, 其中 2011 年冬小麦供试验品种为徐麦 31 和宁麦 12, 2014 年为扬麦 13 和宁麦 13, 每个品种设置 3 个水平的施氮梯度, 分别为 0、150、300 kg/hm² (分别用 N1、N2、N3 表示)。试验区分为 18 个田块, 每个田块面积为 3 m×3 m。氮肥 60% 作为基肥, 40% 作为拔节肥, 试验田块施用磷肥 (P₂O₅) 150 kg/hm² 和钾肥 (K₂O) 150 kg/hm²。其他管理措施遵循当地冬小麦田间管理标准。

1.2 数据获取

1.2.1 冬小麦冠层光谱反射率测量

冬小麦冠层光谱反射率采用美国 ASD 公司 FieldSpec3 便携式光谱仪测量。冠层光谱测量选在晴朗无风天气进行, 测量时间为 10:00~14:00 之间。手持光谱仪在冠层大约 1 m 上方位置, 对每个田块测量 3 个样点, 每个样点测量 3 次, 在每个样点冠层光谱测量前先进行标准的白板测量 (假定标准白板反射率为 100%), 所测的光谱数据为冠层光谱反射率, 以多次测量的平均值作为田块的反射率。ASD 光谱仪的视场角为 25°, 测量的光谱范围为 350~2 500 nm, 光谱分辨率为 1 nm。原始光谱反射率数据通过邻近的 15 个数据点和二次多项式进行 Savitzky-Golay 滤波处理, 同时去除受到噪声和水汽影响较大的波段。最终保留 400~1 340、1 430~1 790 和 1 970~2 350 nm 波段的光谱数据。图 1 为冬小麦 4 个生育期和 3 种施氮水平条件下的平均光谱反射率。

1.2.2 冬小麦叶片与茎秆氮含量测定

冬小麦叶片和茎秆氮含量的测定与光谱测量同步。每个田块取 30 cm×30 cm 样方内的叶片和茎秆组织, 用脱脂棉擦拭干净, 105 °C 杀青 30 min, 80 °C 下烘干、称重, 粉碎后采用标准的凯氏定氮法测定叶片氮含量 (leaf nitrogen content, LN) 和茎秆氮含量 (stem nitrogen content, SN)^[14]。

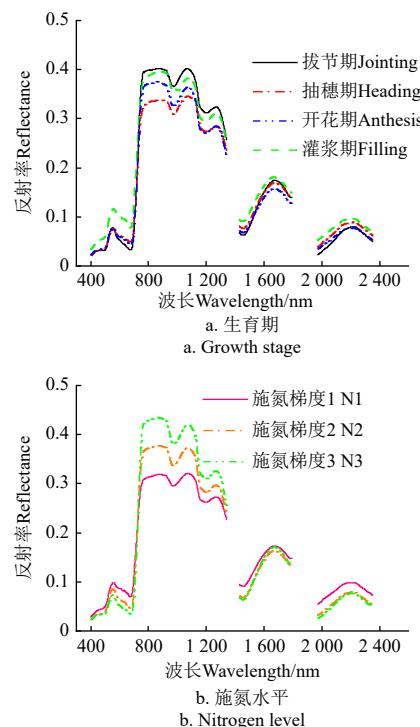


图 1 不同生育期和施氮水平冬小麦冠层反射率

Fig.1 Canopy reflectance of winter wheat at different growth stages and nitrogen treatments

1.2.3 冬小麦叶片 SPAD 数据获取

叶片 SPAD 值采用 SPAD-502 叶绿素仪测定。在每个田块随机选取 20 张叶片进行测量, 以平均值作为田块的 SPAD 值。在 2 个年份的试验中, 不同生育期田间采样次数略有差异, 在拔节期、抽穗期、开花期和灌浆期分别获得 34、36、54 和 36 个样本, 共计 160 个样本。图 2 为冬小麦 SPAD 值与叶片和茎秆氮含量的关系。

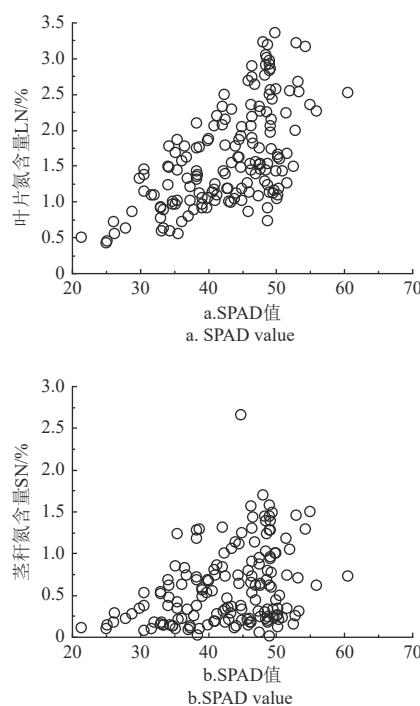


图 2 冬小麦叶片和茎秆氮含量与 SPAD 值之间的关系

Fig.2 Scattering plot of winter wheat leaf and stem nitrogen content and SPAD value

1.3 高光谱植被指数

选取25个常用的高光谱植被指数,名称和计算方式如表1所示。高光谱植被指数中有些对氮素和叶绿素含量敏感,有些对作物生长参数(如叶面积指数、生物量等)敏感。

表1 该研究中采用的高光谱植被指数

Table 1 Hyperspectral vegetation indices used in this study

植被指数 Vegetation index	计算公式 Formula	来源 References
DCNI	$(R_{720}-R_{700})/(R_{700}-R_{670})/(R_{720}-R_{670}+0.03)$	[3]
TCARI	$3*[(R_{700}-R_{670})-0.2(R_{700}-R_{550})(R_{700}-R_{670})]$	[15]
SR1	R_{800}/R_{550}	[16]
SR2	$R_{675}/(R_{700} \cdot R_{650})$	[17]
SR3	$R_{672}/(R_{550} \cdot R_{708})$	[18]
SR4	$R_{860}/(R_{550} \cdot R_{708})$	[18]
SR5	R_{750}/R_{550}	[19]
SR6	R_{550}/R_{850}	[20]
SR7	R_{415}/R_{710}	[21]
TCI	$1.2*(R_{700}-R_{550})-1.5*(R_{670}-R_{550})*sqrt(R_{700}/R_{670})$	[22]
TCARI/OSAVI	$TCARI=3*[(R_{700}-R_{670})-0.2(R_{700}-R_{550})(R_{700}-R_{670})]$ $OSAVI=1.16(R_{800}-R_{670})/(R_{800}+R_{670}+0.16)$	[23]
MCARI/MTVI2	$MCARI=(R_{700}-R_{670})-0.2*(R_{700}-R_{550})(R_{700}/R_{670})$ $MTVI2=1.5*(1.2(R_{800}-R_{550})-2.5(R_{670}-R_{550}))/sqrt((2(R_{800})^2-(6R_{800}-5sqrt(R_{670}))-0.5))$	[24]
MCARI	$[(R_{700}-R_{670})-0.2*(R_{700}-R_{550})]/(R_{700}/R_{670})$	[25]
NPQI	$(R_{415}-R_{435})/(R_{415}+R_{435})$	[26]
NDI2	$(R_{850}-R_{710})/(R_{850}-R_{680})$	[27]
TVI	$0.5*[120(R_{750}-R_{550})-200(R_{670}-R_{550})]$	[28]
NDI1	$(R_{780}-R_{710})/(R_{780}-R_{680})$	[29]
MTVI1	$1.2*[1.2*(R_{800}-R_{550})-2.5*(R_{670}-R_{550})]$	[30]
NDCI	$(R_{762}-R_{527})/(R_{762}+R_{527})$	[4]
REP	$700+40*((R_{670}+R_{780})/2-R_{700})/(R_{740}-R_{700})$	[31]
GNDVI	$(R_{750}-R_{550})/(R_{750}+R_{550})$	[32]
NDVI1	$(R_{780}-R_{550})/(R_{780}+R_{550})$	[33]
DVI	$R_{800}-R_{680}$	[34]
MTCI	$(R_{750}-R_{710})/(R_{710}-R_{680})$	[35]
PSNDc	$(R_{800}-R_{470})/(R_{800}+R_{470})$	[36]

注: DCNI 表示双峰冠层植被指数; TCARI 表示改进型叶绿素吸收植被指数; SR 表示简单比值指数; TCI 表示温度条件指数; OSAVI 表示优化土壤调节植被指数; MCARI 表示修正型叶绿素吸收植被指数; MTVI2 表示修正三角植被指数 2; NPQI 表示归一化叶绿素比值指数; NDI 表示归一化差异指数; TVI 表示三角植被指数; MTVI1 表示修正三角植被指数 1; NDCI 表示归一化差值叶绿素指数; REP 表示红边位置指数; GNDVI 表示绿色归一化差异植被指数; NDVI 表示归一化差值植被指数; DVI 表示差值植被指数; MTCI 表示陆地叶绿素指数; PSNDc 表示归一化色素差值指数。下同。

Note: DCNI represent Double-peak canopy nitrogen index; TCARI represent Transformed Chlorophyll Absorption in Reflectance Index; SR represent Simple ratio; TCI represent Temperature condition index; OSAVI represent Optimal soil adjusted vegetation index; MCARI represent Modified chlorophyll absorption in reflectance index; MTVI2 represent Modified triangular vegetation index 2; NPQI represent Normalized phaeophytinization index; NDI represent Normalized difference index; TVI represent Triangular vegetation index; MTVI1 represent Modified transformed vegetation index 1; NDCI represent Normalized difference cloud index; REP represent Red-edge position index; GNDVI represent Green Normalized difference vegetation index; NDVI represent Normalized difference vegetation index; DVI represent Difference vegetation index; MTCI represent The MERIS terrestrial chlorophyll index; PSNDc represent Pigment specific normalized difference c. Same below.

1.4 基于机器学习算法的模型建立

采用5种常用机器学习算法(包括随机森林回归、支持向量回归、偏最小二乘回归、高斯过程回归、深度神经网络回归),分别以高光谱植被指数单独或结合SPAD值作为输入,构建叶片和茎秆氮含量估算模型。为构建最佳估算模型,除对每种算法的参数进行优化外,还对输入特征进行优化,以部分或全部高光谱植被指数作为模型输入。在高光谱植被指数与氮含量敏感性分析基础上,在每个生育期和施氮水平条件下分别以敏感性最佳的5, 10, 15, 20, 25个高光谱植被指数或结合SPAD值作为输入构建模型。

1.4.1 随机森林回归算法

随机森林回归(RFR)是一个通过构建多个决策树

对样本进行训练并预测的分类器。利用bootstrap重抽样方法从原始样本中抽取多个样本,预测结果由多个决策树得出,并将新数据进行分类^[14, 37]。随机森林算法中包含两个重要参数n_estimators和max_features,分别表示随机森林中包含的决策树的数目和决策树的变量个数。在该研究中采用网格搜索方式确定最佳参数组合,其中n_estimators的搜索范围为5~1 000, max_features的搜索范围为1到训练特征数的2/3。

1.4.2 支持向量回归算法

支持向量回归模型(SVR)的基本思想是优化结构风险的最小化,即在数据逼近精度与逼近函数复杂性之间寻求折衷,以期获得最好的模型泛化能力^[38]。本研究采用径向基函数,需要优化的2个参数分别为惩罚系数C和核函数参数γ,采用网格搜索法确定2个参数的取值,其中,惩罚系数C的搜索范围为0.5~500,核函数参数γ的搜索范围为0.000 1~0.05。

1.4.3 偏最小二乘回归算法

偏最小二乘回归算法(PLSR)是通过从自变量因子中提取一组具有最佳预测能力的正交因子以实现变量预测的一种回归方法^[5]。该算法集有主成分分析、多元线性回归分析和典型相关分析。模型训练需要优化主成分的个数,该研究的主成分的优化范围为2到特征数的2/3。

1.4.4 高斯过程回归算法

高斯过程回归算法(GPR)是一种使用高斯过程先验对数据进行回归分析的非参数回归模型。GPR模型以通过拟合均值和协方差函数来找到所有训练数据的单独函数^[7],研究中采用径向基核函数,并采用共轭梯度法确定超参数。

1.4.5 深度神经网络回归算法

深度神经网络(DNN)是一个前馈式的人工神经网络,在其输入和输出变量之间有多个隐藏单元。该研究中,DNN常被用作一个多变量回归模型以建立输入和输出变量之间的关系^[39]。该研究中,需要确定隐藏层数量与每一层对应的神经元数量,使用两层具有相同神经元数的隐藏层,隐藏单位设定为训练数的2/3; Input_fn 设定为lambda,迭代次数为3 000次,激活函数使用ReLU,优化器使用Adam 算法。

1.5 估算模型精度评价

该研究中回归算法均基于python 3.6.13的环境,使用scikit-learn 0.23.2或tensorflow 2.1.0框架搭建。考虑到单一生育期中样本数量有限,所构建模型均使用留一法(leave-one-out)交叉验证。在交叉验证过程中,每个样本都有一次机会被作为测试集,对模型多次训练综合比较确定模型参数,这种方法被认为得出的结果与训练整个测试集的期望值最为接近^[40-41]。通过计算实测数据与模型预测数据的决定系数R²、均方根误差RMSE和归一化均方根误差NRMSE来评价模型预测精度,其计算公式如下:

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

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

$$NRMSE = \frac{RMSE}{\bar{y}} \quad (3)$$

式中 \hat{y}_i , y_i 和 \bar{y} 分别为叶片或茎秆氮含量的预测值、观测值和平均值。 R^2 值越接近 1, RMSE 和 NRMSE 的值越小, 表示模型的准确性和稳定性越好。

2 结果与分析

2.1 高光谱植被指数对冬小麦叶片和茎秆氮含量的敏感性

表 2 和表 3 为冬小麦在不同生育期和施氮水平条件下高光谱植被指数与叶片和茎秆氮含量的相关性。全生育期中, 高光谱植被指数对叶片氮含量的敏感性存在明显差异, 其中 DCNI 与叶片氮含量的敏感性最佳, R^2 为 0.480。植被指数与茎秆氮含量的敏感性较低, 其中最佳植被指数同样是 DCNI, 决定系数 R^2 为 0.262。在 4 个单一生育期中, 最佳植被指数与叶片氮含量的敏感性表

现出明显差异, 决定系数 R^2 在 0.438 和 0.866 之间, 其中在灌浆期植被指数的敏感性最高, 最佳植被指数 DCNI 的决定系数 R^2 为 0.866。在拔节期的敏感性最低, 最佳植被指数 SR4 的决定系数 R^2 为 0.438。除了抽穗期外, 最佳植被指数与茎秆氮含量的相关性要低于叶片氮含量。在抽穗期中, 最佳植被指数 NPQI 与茎秆氮含量的相关性最高, 决定系数 R^2 为 0.677, 其次在灌浆期, 最佳植被指数 SR4 的决定系数 R^2 为 0.629。同样, 植被指数对茎秆氮含量的敏感性在拔节期最低, 最佳植被指数 SR3 的决定系数 R^2 为 0.235。在 3 种单一施氮水平条件下, 最佳植被指数对叶片氮含量的敏感性 R^2 在 0.414 和 0.508 之间。最佳植被指数对茎秆氮含量的敏感性 R^2 在 0.249 和 0.382 之间, 在 N3 条件下 DVI 与茎秆氮含量的敏感性最高。

表 2 冬小麦不同生育期高光谱植被指数对叶片和茎秆氮含量的敏感性

Table 2 Sensitivity of hyperspectral vegetation indices to winter wheat stem nitrogen content

指数 Index	拔节期 Jointing		抽穗期 Heading		开花期 Anthesis		灌浆期 Filling	
	叶氮 LN	茎氮 SN						
DCNI	0.378	0.039	0.059	0.005	0.586	0.386	0.866	0.611
TCARI	0.023	0.072	0.248	0.333	0.298	0.452	0.605	0.362
SR1	0.385	0.194	0.087	0.229	0.372	0.059	0.683	0.479
SR2	0.388	0.056	0.007	0.064	0.622	0.285	0.841	0.605
SR3	0.094	0.235	0.233	0.384	0.182	0.444	0.608	0.414
SR4	0.438	0.136	0.065	0.179	0.565	0.200	0.784	0.629
SR5	0.395	0.207	0.079	0.218	0.360	0.050	0.674	0.459
SR6	0.330	0.166	0.057	0.192	0.303	0.061	0.661	0.352
SR7	0.004	0.033	0.212	0.201	0.148	0.283	0.054	0.023
TCI	0.022	0.175	0.257	0.404	0.209	0.418	0.533	0.331
TCARI/OSAVI	0.321	0.028	0.011	0.008	0.576	0.432	0.749	0.396
MCARI/MTVI2	0.260	0.008	0.038	0.001	0.486	0.311	0.771	0.424
MCARI	0.047	0.199	0.278	0.420	0.184	0.405	0.512	0.322
NPQI	0.006	0.187	0.525	0.677	0.150	0.325	0.012	0.008
NDI2	0.318	0.112	0.037	0.159	0.283	0.066	0.732	0.408
TVI	0.156	0.210	0.102	0.263	0.013	0.171	0.067	0.059
NDII	0.321	0.117	0.032	0.152	0.263	0.048	0.718	0.396
MTVI	0.158	0.195	0.113	0.279	0.006	0.146	0.048	0.042
NDCI	0.340	0.192	0.047	0.175	0.334	0.058	0.651	0.358
REP	0.288	0.096	0.059	0.195	0.300	0.067	0.743	0.426
GNDVI	0.348	0.183	0.055	0.188	0.303	0.046	0.656	0.366
NDVI1	0.342	0.175	0.062	0.201	0.306	0.051	0.663	0.373
DVI	0.174	0.198	0.113	0.278	0.001	0.118	0.012	0.015
MTCI	0.339	0.128	0.046	0.171	0.290	0.040	0.739	0.508
PSNDc	0.265	0.123	0.113	0.273	0.310	0.059	0.574	0.299

表 3 冬小麦不同施氮水平下高光谱植被指数对叶片和茎秆氮含量的敏感性

Table 3 Sensitivity of hyperspectral vegetation indices to winter wheat stem nitrogen content

指数 Index	全生育期 All		施氮梯度 1 N1		施氮梯度 2 N2		施氮梯度 3 N3	
	叶氮 LN	茎氮 SN						
DCNI	0.480	0.262	0.414	0.249	0.366	0.259	0.362	0.251
TCARI	0.315	0.201	0.208	0.143	0.449	0.211	0.463	0.276
SR1	0.153	0.034	0.322	0.130	0.001	0.003	0.002	0.002
SR2	0.360	0.181	0.371	0.197	0.147	0.127	0.262	0.187
SR3	0.223	0.189	0.156	0.142	0.503	0.243	0.382	0.278
SR4	0.240	0.095	0.370	0.197	0.026	0.044	0.104	0.059
SR5	0.155	0.035	0.322	0.122	0.001	0.004	0.003	0.002
SR6	0.190	0.053	0.318	0.123	0.024	0.015	0.001	0.002
SR7	0.021	0.047	0.248	0.140	0.006	0.008	0.156	0.181
TCI	0.252	0.173	0.144	0.128	0.508	0.224	0.443	0.244
TCARI/OSAVI	0.359	0.168	0.342	0.158	0.305	0.140	0.297	0.161
MCARI/MTVI2	0.388	0.160	0.370	0.177	0.353	0.152	0.199	0.073
MCARI	0.227	0.151	0.126	0.120	0.507	0.213	0.393	0.199
NPQI	0.085	0.095	0.228	0.144	0.195	0.107	0.197	0.167
NDI2	0.224	0.062	0.358	0.136	0.074	0.037	0.001	0.005
TVI	0.020	0.062	0.001	0.024	0.399	0.206	0.449	0.372
NDII	0.220	0.060	0.339	0.120	0.071	0.037	0.001	0.005
MTVI	0.016	0.059	0.001	0.022	0.414	0.213	0.446	0.383
NDCI	0.193	0.057	0.311	0.124	0.021	0.017	0.005	0.001
REP	0.213	0.054	0.347	0.131	0.066	0.031	0.001	0.009
GNDVI	0.184	0.050	0.310	0.112	0.016	0.013	0.002	0.001
NDVI1	0.182	0.048	0.313	0.116	0.015	0.012	0.001	0.002
DVI	0.006	0.046	0.001	0.013	0.370	0.199	0.422	0.382
MTCI	0.190	0.045	0.334	0.124	0.023	0.024	0.002	0.002
PSNDc	0.129	0.038	0.248	0.088	0.001	0.001	0.001	0.001

图3和图4分别表示冬小麦不同生育期和施氮水平条件下最佳植被指数与叶片和茎秆氮含量的线性关系。对叶片氮含量，在全生育期和4个单一生育期中，最佳植被指数与叶片含氮量成正相关。在3种施氮水平条件下，N1条件下最佳植被指数与叶片氮含量成正相关，N2和N3

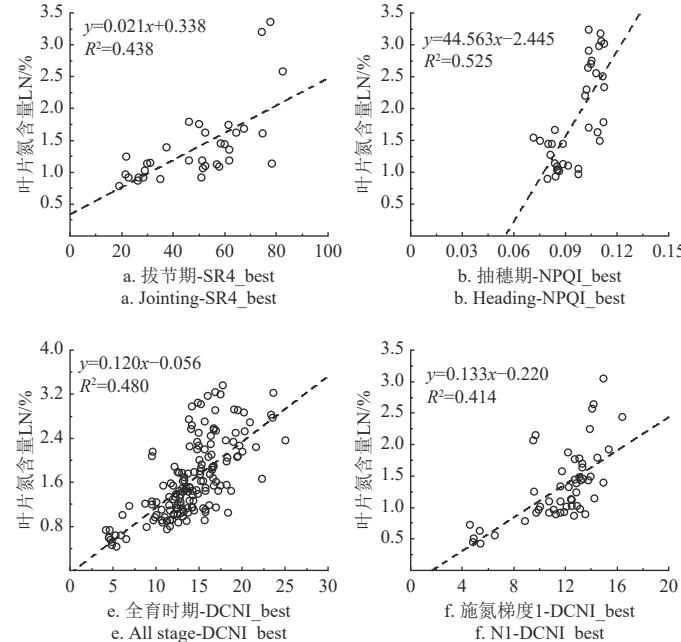


图3 冬小麦不同生育期和施氮水平条件下最佳植被指数与叶片氮含量关系
Fig.3 The relationship between best vegetation indices and winter wheat leaf nitrogen content at different growth stages and nitrogen treatments

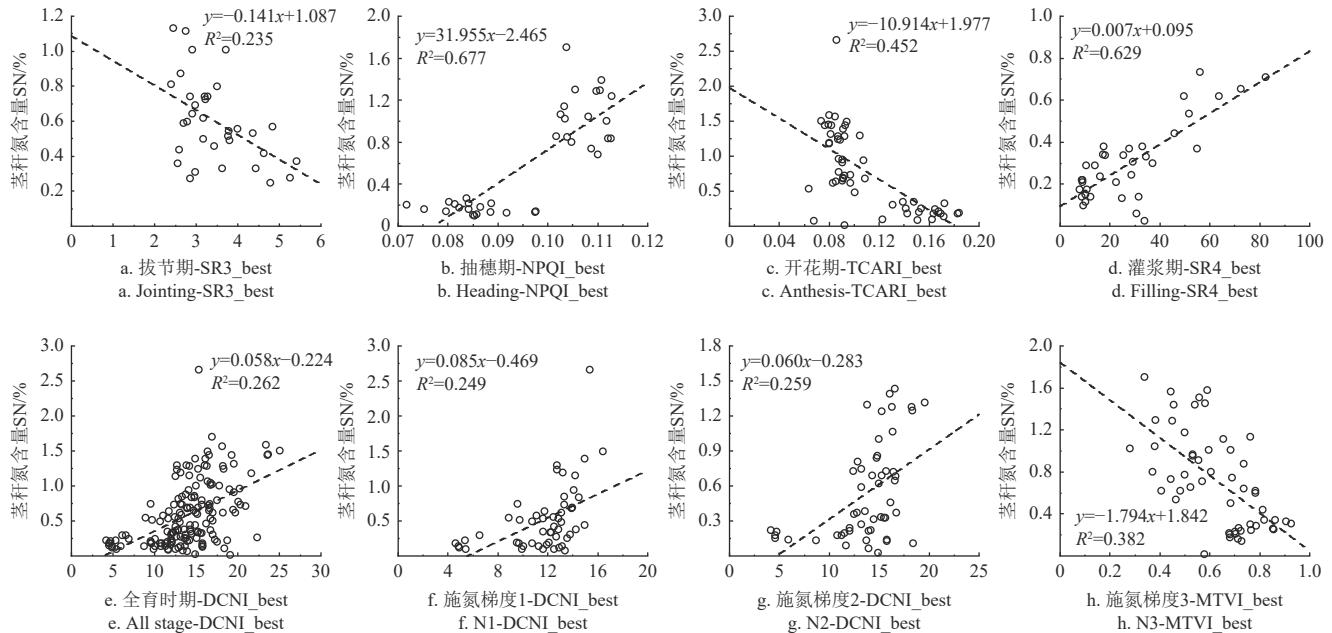


图4 冬小麦不同生育期和施氮水平条件下最佳植被指数与茎秆氮含量关系
Fig.4 The relationship between best vegetation indices and winter wheat stem nitrogen content at different growth stages and nitrogen treatments

2.2 基于高光谱植被指数的氮含量估算

表4和表5分别展示了冬小麦不同生育期和不同施氮水平条件下5种机器学习算法对叶片和茎秆氮含量的估算精度。从表中可以看出，5种算法都受到生育期和施氮水平的影响。对叶片氮含量，在全生育期中，最佳模型预测精度 R^2 为0.675，NRMSE为0.254。在4个单一生育期中，最佳模型预测精度 R^2 在0.767和0.872之

条件下为负相关。对茎秆氮含量，在全生育期中，最佳植被指数与茎秆氮含量成正相关。在4个单一生育期中，在抽穗期和灌浆期成正相关，在其他两个生育期为负相关。在3种施氮水平条件下，在N1和N2条件下最佳植被指数与茎秆氮含量成正相关，在N3条件下为负相关。

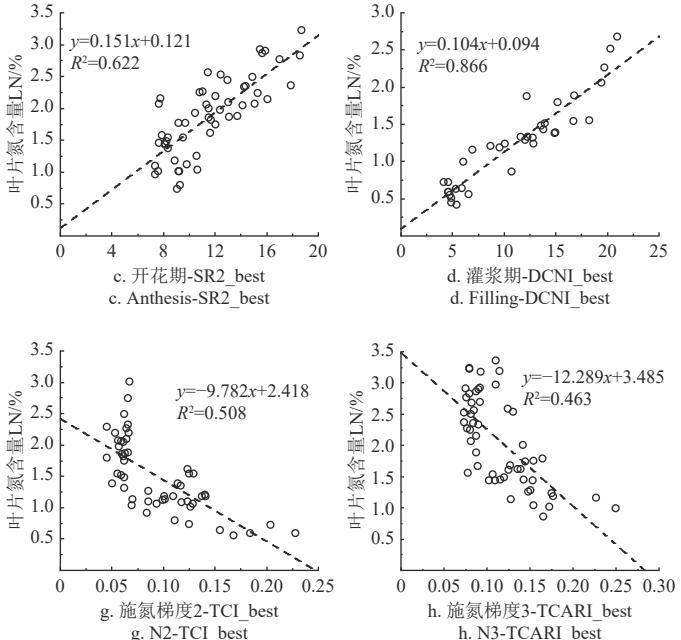


图3 冬小麦不同生育期和施氮水平条件下最佳植被指数与叶片氮含量关系
Fig.3 The relationship between best vegetation indices and winter wheat leaf nitrogen content at different growth stages and nitrogen treatments

间，NRMSE在0.155和0.201之间。其中开花期采用RFR算法的预测精度最高，NRMSE为0.155。在3种施氮水平条件下，最佳模型的预测精度 R^2 在0.697和0.842之间，NRMSE在0.159和0.271之间。在N3条件下模型的预测精度最高， R^2 为0.836，NRMSE为0.159。对茎秆氮含量，DNN算法构建的模型在不同生育期和施氮水平条件下都优于其他算法。在全生育期中，最佳模

型预测精度 R^2 为 0.723, NRMSE 为 0.443。在 4 个单一生育期中, 最佳模型预测精度 R^2 在 0.635 和 0.875 之间, NRMSE 在 0.244 和 0.358 之间。其中拔节期采用 PLSR 算法的预测精度最高, NRMSE 为 0.244。在 3 种施氮水

平条件下, 预测精度 R^2 在 0.670 和 0.855 之间, NRMSE 在 0.295 和 0.564 之间。其中, 预测精度随着施氮水平的增加而增加, 在 N3 条件下的预测精度最高, R^2 为 0.855, NRMSE 为 0.295。

表 4 冬小麦不同生育期高光谱植被指数对叶片和茎秆氮含量估算精度

Table 4 Estimation of winter wheat leaf and stem nitrogen content based on machine learning algorithms at different growth stages

器官 Organ	模型 Model	拔节期 Jointing			抽穗期 Heading			开花期 Anthesis			灌浆期 Filling		
		R^2	RMSE	NRMSE									
叶片 Leaf	RFR	0.582	0.388	0.279	0.738	0.397	0.215	0.767	0.292	0.155	0.842	0.231	0.185
	SVR	0.854	0.229	0.165	0.702	0.427	0.231	0.662	0.353	0.188	0.872	0.207	0.166
	PLSR	0.602	0.382	0.275	0.769	0.370	0.201	0.638	0.379	0.202	0.829	0.240	0.192
	GPR	0.713	0.319	0.230	0.612	0.480	0.260	0.594	0.383	0.204	0.827	0.241	0.194
	DNN	0.878	0.251	0.181	0.863	0.449	0.243	0.803	0.347	0.185	0.900	0.291	0.234
茎秆 Stem	RFR	0.185	0.222	0.372	0.815	0.210	0.342	0.549	0.379	0.495	0.700	0.099	0.326
	SVR	0.532	0.163	0.272	0.681	0.276	0.451	0.596	0.360	0.471	0.692	0.102	0.334
	PLSR	0.635	0.146	0.244	0.804	0.216	0.353	0.655	0.336	0.439	0.683	0.103	0.336
	GPR	0.531	0.163	0.273	0.760	0.241	0.393	0.503	0.398	0.520	0.655	0.107	0.350
	DNN	0.548	0.173	0.290	0.875	0.197	0.323	0.866	0.274	0.358	0.804	0.103	0.337

注: RFR 表示随机森林回归; SVR 表示支持向量回归; PLSR 表示偏最小二乘回归; GPR 表示高斯过程回归; DNN 表示深度神经网络回归。下同。

Note: RFR represent random forest regression; SVR represent support vector regression; PLSR represent partial least squares regression; GPR represent Gaussian process regression algorithm; DNN represent deep neural networks. Same below.

表 5 冬小麦不同施氮水平高光谱植被指数对叶片和茎秆氮含量估算精度

Table 5 Estimation of winter wheat leaf and stem nitrogen content based on machine learning algorithms at different nitrogen treatments

器官 Organ	模型 Model	全生育期 All			N1			N2			N3		
		R^2	RMSE	NRMSE									
叶片 Leaf	RFR	0.619	0.429	0.264	0.488	0.413	0.310	0.602	0.363	0.244	0.661	0.412	0.202
	SVR	0.590	0.447	0.276	0.426	0.446	0.334	0.631	0.350	0.235	0.667	0.409	0.200
	PLSR	0.626	0.425	0.262	0.610	0.364	0.273	0.658	0.338	0.227	0.563	0.479	0.235
	GPR	0.508	0.488	0.301	0.350	0.463	0.348	0.630	0.351	0.236	0.535	0.486	0.238
	DNN	0.675	0.413	0.254	0.697	0.362	0.271	0.842	0.239	0.160	0.836	0.326	0.159
茎秆 Stem	RFR	0.384	0.359	0.607	0.266	0.408	0.786	0.317	0.344	0.640	0.491	0.324	0.452
	SVR	0.423	0.352	0.594	0.403	0.374	0.720	0.415	0.320	0.596	0.601	0.288	0.402
	PLSR	0.481	0.331	0.559	0.223	0.421	0.811	0.499	0.305	0.569	0.639	0.280	0.390
	GPR	0.441	0.341	0.577	0.245	0.413	0.795	0.354	0.338	0.629	0.506	0.322	0.450
	DNN	0.723	0.262	0.443	0.670	0.293	0.564	0.779	0.208	0.388	0.855	0.211	0.295

2.3 高光谱植被指数与 SPAD 值结合的氮含量估算

表 6 和表 7 中分别展示了冬小麦不同生育期和施氮水平条件下高光谱植被指数与 SPAD 值结合的 5 种机器学习算法对叶片和茎秆氮含量的估算精度。结合 SPAD 与高光谱植被指数在不同生育期和施氮水平条件下估算精度提升了叶片氮含量的估算精度 (1% ~ 7%)。如表 5 和表 7 所示, 在全生育期中, 最佳模型的估算精度 NRMSE 从 0.254 提升到 0.214。如表 4 和表 6 所示, 在 4 个单一生育期中最佳模型的估算精度 NRMSE 从 0.155 和 0.201 之间提升到 0.128 和 0.157 之间。如表 5 和表 7 所示, 在 3 种施氮水平条件下的估算精度 NRMSE 从 0.159 和 0.271 之间提升到 0.135 和 0.227 之间。对茎秆氮含量, 结合 SPAD 和植被指数构建的模型在全生育期、抽穗期、开花期和灌浆期以及施氮水平 N1 条件下, 估算精度都有所提高, 在其他条件下的预测精度与单独使用植被指数保持一

致。如表 4 和表 6 所示, 其中在抽穗期的估算精度提升最大, NRMSE 从 0.323 降低到 0.268。

图 5 和图 6 中分别展示了不同生育期和施氮水平条件下高光谱植被指数与 SPAD 值结合构建的最佳估测模型估算叶片和茎秆氮素含量预测值与测量值的关系。对叶片氮含量, 在全生育期的估算精度 R^2 为 0.782, NRMSE 为 0.214。在 4 个单一生育期和 3 种施氮水平条件下的精度 R^2 在 0.772 和 0.914 之间, NRMSE 在 0.128 和 0.227 之间, 其中在抽穗期的估算精度最高, R^2 为 0.914, NRMSE 为 0.128。对茎秆氮含量, 在全生育期的估算精度 R^2 为 0.802, NRMSE 为 0.400。在 4 个单一生育期和 3 种施氮水平条件下的精度 R^2 在 0.634 和 0.919 之间, NRMSE 在 0.244 和 0.547 之间, 其中在拔节期的估算精度最高, R^2 为 0.634, NRMSE 为 0.224。施氮水平的提升, 提高了茎秆氮含量估算精度。

表 6 冬小麦不同生育期高光谱植被指数和 SPAD 值结合的叶片和茎秆氮素含量估算精度

Table 6 Estimation of winter wheat leaf and stem nitrogen content combined with SPAD and hyperspectral vegetation indices at different growth stages

器官 Organ	模型 Model	拔节期 Jointing			抽穗期 Heading			开花期 Anthesis			灌浆期 Filling		
		R^2	RMSE	NRMSE									
叶片 Leaf	RFR	0.654	0.351	0.253	0.914	0.236	0.128	0.778	0.287	0.153	0.856	0.220	0.177
	SVR	0.865	0.218	0.157	0.739	0.398	0.215	0.759	0.297	0.158	0.888	0.195	0.157
	PLSR	0.559	0.409	0.294	0.838	0.310	0.168	0.681	0.369	0.197	0.844	0.229	0.184
	GPR	0.505	0.422	0.304	0.684	0.432	0.234	0.607	0.377	0.201	0.862	0.216	0.174
	DNN	0.850	0.278	0.200	0.891	0.296	0.160	0.854	0.259	0.138	0.919	0.211	0.169
茎秆 Stem	RFR	0.205	0.216	0.362	0.838	0.196	0.321	0.561	0.374	0.489	0.705	0.101	0.330
	SVR	0.475	0.173	0.289	0.700	0.268	0.438	0.663	0.329	0.430	0.677	0.103	0.338
	PLSR	0.634	0.146	0.244	0.831	0.199	0.325	0.689	0.319	0.417	0.672	0.104	0.341
	GPR	0.550	0.159	0.267	0.839	0.195	0.318	0.641	0.338	0.442	0.611	0.114	0.372
	DNN	0.742	0.152	0.255	0.919	0.164	0.268	0.867	0.250	0.327	0.805	0.104	0.340

表7 冬小麦不同施氮水平下高光谱植被指数和SPAD值结合的叶片和茎秆氮素含量估算精度

Table 7 Estimation of winter wheat leaf and stem nitrogen content combined with SPAD and hyperspectral vegetation indices at different nitrogen treatments

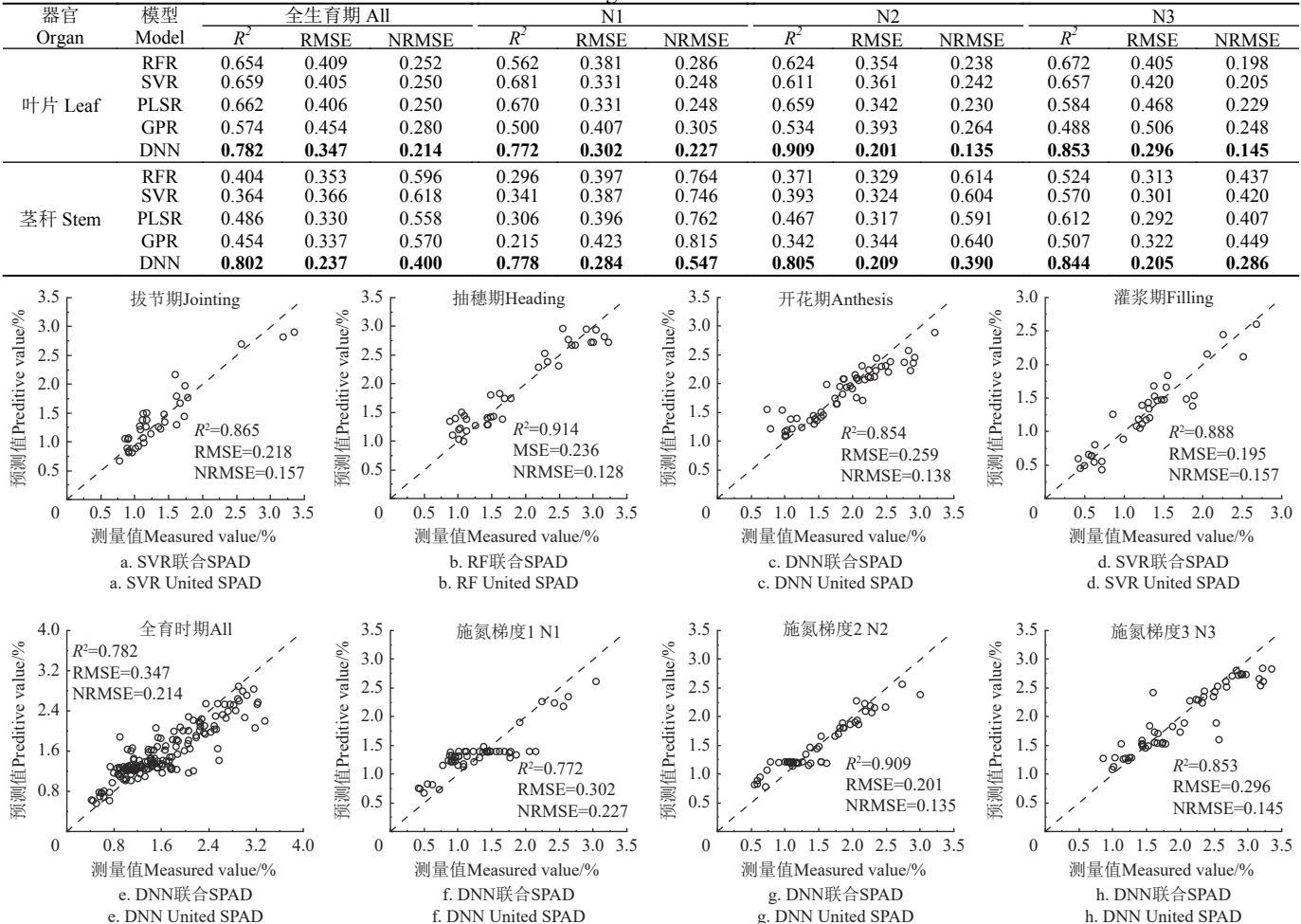


图5 冬小麦不同生育期和施氮水平条件下叶片氮含量估测最佳模型的估算值与测量值比较

Fig.5 Combining SPAD for winter wheat leaf nitrogen content estimation at different growth stages and nitrogen treatments

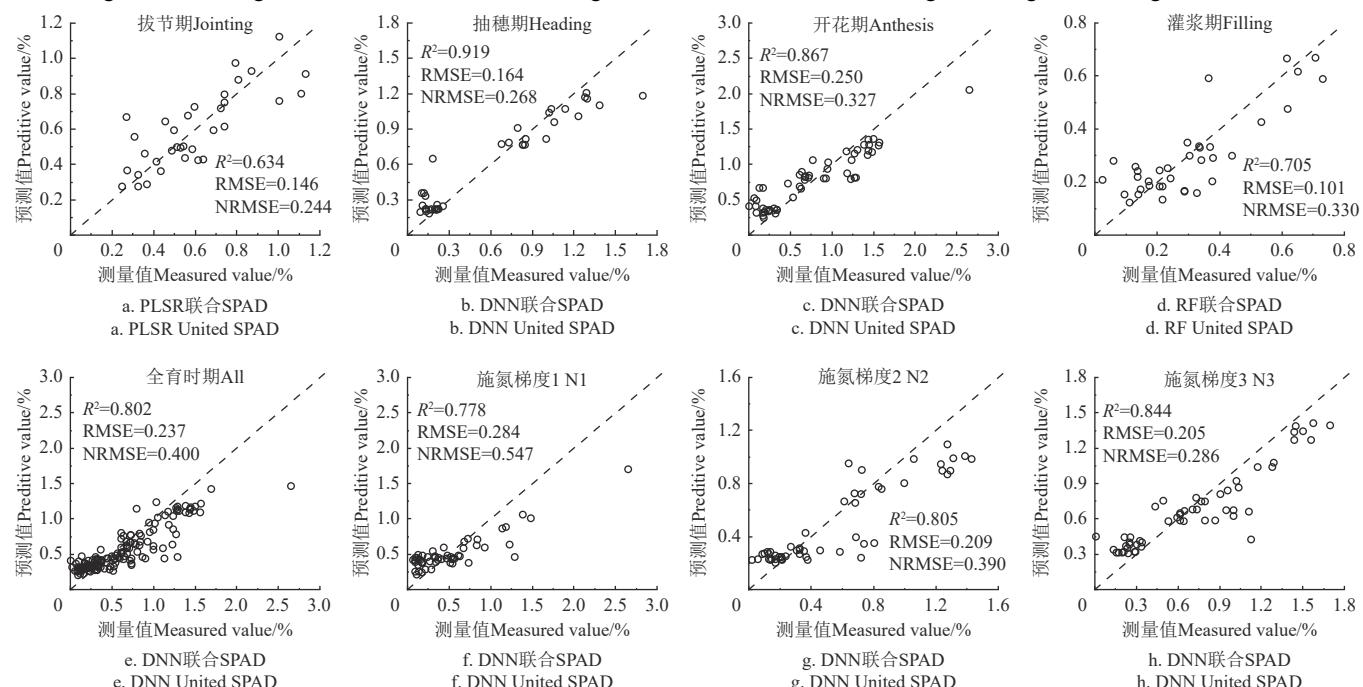


图6 冬小麦不同生育期和施氮水平条件下茎秆氮含量估测最佳模型的估算值与测量值比较

Fig.6 Combining SPAD for winter wheat stem nitrogen content estimation at different growth stages and nitrogen treatments

3 讨 论

该研究评估了高光谱植被指数在冬小麦不同生育期和施氮水平条件下对叶片和茎秆氮含量的敏感性，并结合 SPAD 量测值提升了氮含量的估算精度。这是目前为数不多关于高光谱估算冬小麦茎秆氮含量的研究，为进一步从氮含量角度监测茎秆质量和倒伏风险提供了支持。

高光谱植被指数对冬小麦氮含量的敏感性受到生育期和施氮水平的影响^[42-43]，并且在单一生育期中的敏感性要优于全生育期的敏感性^[44]。该研究中，全生育期中的最佳光谱指数与叶片氮含量的敏感性 $R^2=0.480$ ，略低于杨福芹等^[44]报道的最佳光谱指数的敏感性 ($R^2=0.65$)，但略高于李粉玲等^[13]模拟 GF-1 卫星宽波段最佳光谱指数的敏感性 ($R^2=0.45$)。在 4 个单一生育期中，最佳光谱指数与叶片氮含量的敏感性 ($R^2=0.438 \sim 0.866$) 与杨福芹等^[44]在 3 个单一生育期中报道结果 ($R^2=0.49 \sim 0.70$) 一致。有研究表明在灌浆期的光谱指数 DCNI 对叶片氮含量的敏感性最高^[43]，这与该研究的结果一致 ($R^2=0.866$)，略高于王仁红等^[2]报道的最佳光谱指数的敏感性 ($R^2=0.83$)，而在拔节期光谱指数对叶片氮含量的敏感性最低，这也与 LIU 等^[43]人的报道一致，主要原因是在灌浆期红光波段和红边波段的反射率对叶片氮含量的敏感性最高而在拔节期最低。对茎秆氮含量，在抽穗期对光谱指数的敏感性最高，可能的原因是叶片与茎秆的氮累积和转运效率在不同生育期中不同^[12]，因此对光谱的敏感性也存在差异。总的来讲，在不同生育期和施氮水平中，最佳光谱指数对叶片氮含量的敏感性 ($R^2=0.414 \sim 0.866$) 要高于茎秆的氮含量的敏感性 ($R^2=0.235 \sim 0.677$)，其中一个主要原因是叶片氮含量要高于茎秆氮含量，另外一个重要原因是相比于茎秆，叶片层对冠层光谱反射率的影响更大，对叶片氮含量也更敏感，特别是在拔节期后叶面积指数较高时，通过冠层光谱直接测量的茎秆信号相对较弱。然而在冬小麦整个生育期中，叶片与茎秆之间氮累积和转运的复杂生理关系，固可用叶片光谱特征间接反映茎秆氮含量水平，弥补了在拔节期后茎秆光谱贡献较小的不足。在 3 种施氮水平条件下，施氮水平增加提升了植株氮含量（图 4），增强了光谱指数对氮含量的敏感性。

基于机器学习算法构建的氮含量估算模型在单一生育期中同样优于在全生育期中的估算精度。主要原因是不同生育期中氮含量及冠层结构存在差异，直接影响了冠层光谱特征对氮含量的敏感性^[45]。在 3 种施氮水平条件下，机器学习算法构建的模型精度随着施氮水平的增加而提升。主要原因是施氮水平的增加提升了茎秆氮含量（图 3），从而提高了光谱对其含量估算的可能性。在该研究中，最佳模型在全生育期中对叶片氮含量的估算精度为 $R^2=0.675$ 和 NRMSE=0.254。在单一生育期中的估算精度 ($R^2=0.767 \sim 0.872$ 、RMSE=0.207~0.370) 与 WANG 等^[46]利用高光谱数据与机器学习算法在不同生育期估算叶片氮含量的精度一致 ($R^2=0.67 \sim 0.91$ 、RMSE=

0.14~0.39)，略高于卫星遥感数据^[43]的估算精度 ($R^2=0.51 \sim 0.65$ 、RMSE=0.17~0.44)，并高于杨福芹等^[44]报道的对整个植株氮含量的估算精度 ($R^2=0.46 \sim 0.86$)。

结合 SPAD 与高光谱植被指数的机器学习模型提高了氮含量的估算精度。不同生育期的提升精度存在一定差异，其中在抽穗期的精度提升最大（叶片和茎秆氮含量的估算精度分别提升了 7% 和 5%），其主要原因是 SPAD 值与氮含量的关系受到冬小麦生育期的影响^[47]。

该研究采用近地测量获取冬小麦冠层光谱数据，但研究结果有望推广到无人机或卫星遥感观测平台。该研究的局限性在于仅获取了 2 个年份的试验数据，由于样本数量的限制，采用交叉验证法进行模型精度评价，虽然该方法被广泛用于模型验证，并被认为得出的结果与训练整个测试集的期望值最为接近，但交叉验证法对模型泛化能力的直接验证不足。试验获取的冬小麦全生育期的样本数量为多个生育期的总和，比较不同模型在单一不同生育期和施氮水平条件下的精度时，样本数量差异对模型精度的影响需要进一步评估。在未来的研究中，将通过多平台（无人机和卫星）获取光谱数据，结合更多年份冬小麦生长季的田间试验，进一步开发和验证冬小麦茎秆氮含量遥感估算方法。

4 结 论

该研究评估了冬小麦不同生育期和施氮水平条件高光谱植被指数对叶片和茎秆氮含量的敏感性，结合 SPAD 值与 5 种机器学习算法构建叶片和茎秆氮含量估算模型，为高光谱无损估算冬小麦氮含量提供了理论基础。该研究有以下主要结论：

1) 高光谱植被指数对冬小麦氮含量的敏感性受到生育期和施氮水平的影响。对叶片氮含量，在灌浆期的敏感性最高，最佳植被指数 DCNI 的敏感性 $R^2=0.866$ 。对茎秆氮含量，在抽穗期的敏感性最高，最佳光谱指数 NPQI 的敏感性 R^2 为 0.677。施氮水平的提高增强了植被指数的敏感性。

2) 结合 SPAD 值的机器学习算法提升了氮含量的估算精度。在全生育期，结合 SPAD 值的 DNN 模型对叶片 ($R^2=0.782$ 和 NRMSE=0.214) 和茎秆 ($R^2=0.802$ 和 NRMSE=0.400) 氮含量的估算精度最佳，估算精度都提升了 4%。在单一生育期中，在抽穗期的精度提升最大，叶片和茎秆氮含量的估算精度分别提升了 7% 和 5%。

[参 考 文 献]

- [1] 杨福芹, 戴华阳, 冯海宽, 等. 基于赤池信息准则的冬小麦植株氮含量高光谱估算[J]. 农业工程学报, 2016, 32(23): 161-167.
- YANG Fuqin, DAI Huayang, FENG Haikuan, et al. Hyperspectral estimation of plant nitrogen content based on Akaike's information criterion[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2016, 32(23): 161-167. (in Chinese with English abstract)

- [2] 王仁红, 宋晓宇, 李振海, 等. 基于高光谱的冬小麦氮素营养指数估测[J]. 农业工程学报, 2014, 30(19): 191-198.
WANG Renhong, SONG Xiaoyu, LI Zhenhai, et al. Estimation of winter wheat nitrogen nutrition index using hyperspectral remote sensing[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2014, 30(19): 191-198. (in Chinese with English abstract)
- [3] CHEN P F, HABOUDANE D, TREMBLAY N, et al. New spectral indicator assessing the efficiency of crop nitrogen treatment in corn and wheat[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2010, 114(9): 1987-1997.
- [4] RAJEEV R, CHOPRA U K, SAHOO R N, et al. Assessment of plant nitrogen stress in wheat *Triticum aestivum* L. through hyperspectral indices[J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2012, 33(20): 6342-6360.
- [5] 尼加提·卡斯木, 师庆东, 王敬哲, 等. 基于高光谱特征和偏最小二乘法的春小麦叶绿素含量估算[J]. 农业工程学报, 2017, 33(22): 208-216.
NIJAT Kasim, SHI Qingdong, WANG Jingzhe, et al. Estimation of spring wheat chlorophyll content based on hyperspectral features and PLSR model[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2017, 33(22): 208-216. (in Chinese with English abstract)
- [6] 王玉娜, 李粉玲, 王伟东, 等. 基于无人机高光谱的冬小麦氮素营养监测[J]. 农业工程学报, 2020, 36(22): 31-39.
WANG Yuna, LI Fenling, WANG Weidong, et al. Nitrogen nutrition monitoring of winter wheat based on UAV hyperspectral[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2020, 36(22): 31-39. (in Chinese with English abstract)
- [7] FU Y Y, YANG G J, LI Z H, et al. Winter wheat nitrogen status estimation using UAV-Based RGB imagery and gaussian processes regression[J]. *Remote Sensing*, 2020, 12(22): 3778.
- [8] DING F, CHEN Z, LI C C, et al. Estimation of nitrogen content in winter wheat based on Multi-Source data fusion and machine learning[J]. *Robotics& Machine Learning Daily News*, 2022, 11: 6-7.
- [9] 王磊, 卢艳丽, 白由路. 主要粮食作物基于SPAD的氮素营养诊断方法研究进展[J]. 植物营养与肥料学报, 2022, 28(3): 546-554.
WANG Lei, LU Yanli, BAI Youlu. Research progress on nitrogen nutrition diagnosis methods based on SPAD in major food crops[J]. *Plant Nutrition and Fertilizer Science*, 2022, 28(3): 546-554. (in Chinese with English abstract)
- [10] JESSICA B, PIERRE M, BRUNO A. Dynamics of light and nitrogen distribution during grain filling within wheat canopy[J]. *Plant Physiology*, 2008, 148(3): 1707-1720.
- [11] FENG W, YAO X, ZHU Y, et al. Monitoring leaf nitrogen status with hyperspectral reflectance in wheat[J]. *European Journal of Agronomy*, 2008, 28(3): 394-404.
- [12] LI C, CHANG Y, LUO Y, et al. Nitrogen regulates stem lodging resistance by breaking the balance of photosynthetic carbon allocation in wheat[J]. *Field Crops Research*, 2023, 296: 108908.
- [13] 李粉玲, 常庆瑞, 申健, 等. 基于GF-1卫星数据的冬小麦叶片氮含量遥感估算[J]. 农业工程学报, 2016, 32(9): 157-164.
LI Fenling, CHANG Qingrui, SHEN Jian, et al. Remote sensing estimation of winter wheat leaf nitrogen content based on GF-1 satellite data[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2016, 32(9): 157-164. (in Chinese with English abstract)
- [14] 崔日鲜, 刘亚东, 付金东. 基于机器学习和可见光光谱的冬小麦叶片氮积累量估算[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(6): 1837-1842.
CUI Rixian, LIU Yadong, FU Jindong. Estimation of leaf nitrogen accumulation of winter wheat based on machine learning and visible light spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, 36(6): 1837-1842. (in Chinese with English abstract)
- [15] HABOUDANE D, MILLER J R, TREMBLAY N, et al. Integrated narrow-band vegetation indices for prediction of crop chlorophyll content for application to precision agriculture[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2002, 81(2): 416-426.
- [16] BUSCHMAN C, NAGEL E. In vivo spectroscopy and internal optics of leaves as a basis for remote sensing of vegetation[J]. *International Journal of Remote Sensing*, 1993, 14: 711-722.
- [17] CHAPPELLE E W, KIM M S, MCMURTREY J E. Ratio analysis of reflectance spectra (RARS): An algorithm for the remote estimation of the concentrations of chlorophyll a, chlorophyll b and the carotenoids in soybean leaves[J]. *Remote Sensing of Environment*, 1992, 39(3): 239-247.
- [18] DATT B. Remote sensing of chlorophyll a, chlorophyll b, chlorophyll a + b and total carotenoid content in eucalyptus leaves[J]. *Remote Sensing of Environment*, 1998, 66(2): 111-121.
- [19] GITELSON A A, KAUFMAN Y J, MERZLYAK M N. Use of a green channel in remote sensing of global vegetation from EOS-MODIS. *Remote Sensing of Environment*, 1996, 58: 289-298.
- [20] SCHEPERS J S, BLACKMER T M, WILHELM W W, et al. Transmittance and reflectance measurements of corn leaves from plants with different nitrogen and water supply[J]. *Journal of Plant Physiology*, 1996, 148(5): 523-529.
- [21] READ J J, TARPLEY L, MCKINION J M, et al. Narrow waveband reflectance ratio for remote estimation of nitrogen status in cotton[J]. *Journal of Environmental Quality*, 2002, 31(5): 1442-1452.
- [22] HABOUDANE D, TREMBLAY N, MILLER J R, et al.

- Remote estimation of crop chlorophyll content using spectral indices derived from hyperspectral data[J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2008, 46(2): 423-437.
- [23] HABOUDANE D, MILLER J R, TREMBLAY N, et al. Integrated narrowband vegetation indices for prediction of crop chlorophyll content for application to precision agriculture[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2002, 81: 416-426.
- [24] ZARCO-TEJADA P J, MILLER J R, MORALES A, et al. Hyperspectral indices and model simulation for chlorophyll estimation in open-canopy tree crops[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2004, 90(4): 463-476.
- [25] DAUGHTRY C S T, WALTHALL C L, KIM M S, et al. Estimating corn leaf chlorophyll concentration from leaf and canopy reflectance. *Remote Sensing of Environment*, 2000, 74(2): 229-239.
- [26] BARNES J D, BALAGUER L, MANRIQUE E, et al. A reappraisal of the use of DMSO for the extraction and determination of chlorophylls a and b in lichens and higher plants[J]. *Environmental and Experimental Botany*, 1992, 32(2): 85-100.
- [27] DATT B. A new reflectance index for remote sensing of chlorophyll content in higher plants: Tests using eucalyptus leaves[J]. *Journal of Plant Physiology*, 1999, 154(1): 30-36.
- [28] BROGE N H, LEBLANC E. Comparing prediction power and stability of broadband and hyperspectral vegetation indices for estimation of green leaf area index and canopy chlorophyll density[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2000, 76(2): 156-172.
- [29] DATT B. A new reflectance index for remote sensing of chlorophyll content in higher plants: Tests using eucalyptus leaves[J]. *Journal of Plant Physiology*, 1999(154): 30-36.
- [30] HABOUDANE D, MILLER J R, PATTEY E, et al. Hyperspectral vegetation indices and novel algorithms for predicting green LAI of crop canopies: Modeling and validation in the context of precision agriculture[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2004, 90(3): 337-352.
- [31] GUYOT G, BARET F. High spectral resolution: Determination of spectral shifts between the red and the near infrared[J]. *International Archives of Photogrammetry and Remote Sensing*, 1988(11): 750-760.
- [32] RAJEEV R, CHOPRA U K, SAHOO R N, et al. Assessment of plant nitrogen stress in wheat *Triticum aestivum* L. through hyperspectral indices[J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2012, 33(20): 6342-6360.
- [33] GITELSON A, KAUFMAN Y, MERZLYAK M. Use of a green channel in remote sensing of global vegetation from EOS-MODIS[J]. *Remote Sensing of Environment*, 1996, 58(3): 289-298.
- [34] JORDAN C F. Derivation of leaf area index from quality of light on the forest floor[J]. *Ecology*, 1969, 50(4): 663-666.
- [35] DASH J, CURRAN P J. The MERIS terrestrial chlorophyll index[J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2004, 25(23): 257.
- [36] BLACKBURN G A. Quantifying chlorophylls and carotenoids at leaf and canopy scales: An evaluation of some hyperspectral approaches[J]. *Remote Sensing of Environment*, 1998, 66: 273-285.
- [37] 岳继博, 杨贵军, 冯海宽. 基于随机森林算法的冬小麦生物量遥感估算模型对比[J]. *农业工程学报*, 2016, 32(18): 175-182.
- YUE Jibo, YANG Guijun, FENG Haikuan. Comparison of remote sensing estimation model of winter wheat biomass based on random forest algorithm[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE)*, 2016, 32(18): 175-182. (in Chinese with English abstract)
- [38] 黄双萍, 洪添胜, 岳学军, 等. 基于高光谱的柑橘叶片氮素含量多元回归分析[J]. *农业工程学报*, 2013, 29(5): 132-138.
- HUANG Shuangpin, HONG Tiansheng, YUE Xuejun, et al. Multiple regression analysis of nitrogen content in citrus leaves based on hyperspectral[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE)*, 2013, 29(5): 132-138. (in Chinese with English abstract)
- [39] JIN X L, LI Z H. Deep neural network Algorithm for estimating maize biomass based on simulated Sentinel 2A vegetation indices and leaf area index[J]. *The Crop Journal*, 2020, 8(1): 87-97.
- [40] LIU J, HUFFMAN T, QIAN B, et al. Crop yield estimation in the Canadian Prairies using Terra/MODIS-derived crop metrics[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 2020, 13: 2685-2697.
- [41] ANDREATTA D, GIANELLE D, SCOTTON M, et al. Estimating grassland vegetation cover with remote sensing: A comparison between Landsat-8, Sentinel-2 and planet scope imagery[J]. *Ecological Indicators*, 2022, 141: 109102.
- [42] WANG L A. Estimation of leaf nitrogen concentration in wheat using the MK-SVR algorithm and satellite remote sensing data[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2017, 140: 327-337.
- [43] LIU H Y, ZHU H C, WANG P. Quantitative modelling for leaf nitrogen content of winter wheat using UAV-based hyperspectral data[J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2017, 38(8-10): 2117-2134.
- [44] 杨福芹, 冯海宽, 李振海, 等. 北京地区冬小麦不同生育期植株氮营养高光谱诊断[J]. 山西农业大学学报(自然科学版), 2020, 40(5): 99-108.
- YANG Fuqin, FENG Haikuan, LI Zhenhai, et al. Hyperspectral diagnosis of nitrogen nutrition in winter wheat plants at different growth stages in Beijing[J]. *Journal of Shanxi Agricultural University (Natural Science Edition)*, 2020, 40(5): 99-108. (in Chinese with English abstract)
- [45] LI C C, LI X Y, MENG X P, et al. Hyperspectral estimation of

- nitrogen content in wheat based on fractional difference and continuous wavelet Transform[J], Agriculture, 2023, 13: 1017.
- [46] WANG L, CHEN S S, LI D, et al. Estimation of paddy rice nitrogen content and accumulation both at leaf and plant levels from UAV hyperspectral imagery[J]. *Remote Sensing*, 2021, 13(15): 2956.
- [47] 殷星, 侯振安, 治军, 等. 应用多酚-叶绿素仪监测棉花氮素营养状况研究[J]. *植物营养与肥料学报*, 2021, 27(7): 1198-1212.
- YIN Xing, HOU Zhenan, YE Jun, et al. Study on the application of polyphenol-chlorophyll meter to monitor the nitrogen nutrition status of cotton[J]. *Plant Nutrition and Fertilizer Science*, 2021, 27(7): 1198-1212. (in Chinese with English abstract)

Estimating winter wheat nitrogen content using SPAD and hyperspectral vegetation indices with machine learning

FENG Huifen^{1,2,3}, LI Yingxue⁴, WU Fang⁵, ZOU Xiaochen^{1,2,3}✉

(1. School of Remote Sensing and Surveying Engineering, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China; 2. Technology Innovation Center of Integration Applications in Remote Sensing and Navigation, Ministry of Natural Resources, P.R. China, Nanjing 210044, China; 3. Jiangsu Engineering Center for Collaborative Navigation/Positioning and Smart Applications, Nanjing 210044, China; 4. School of Applied Meteorology, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China; 5. Xinghua Meteorological Bureau, Xinghua 225700, China)

Abstract: Leaf nitrogen content is closely related to leaf photosynthesis and the nutritional status of winter wheat plants, which directly affects the plant growth and development. While the stem nitrogen content is closely related to the proportion and content of cellulose, hemicellulose and lignin in stems, which directly affects stem quality and plant lodging resistance. However, it is still lacking on the direct estimation of stem N content in winter wheat. It is very necessary to evaluate the stalk quality and predict lodging from the perspective of stem nitrogen content. In this study, a 2-year field experiment was conducted to accurately estimate the nitrogen content in different plant organs (leaves and stems) of winter wheat. Winter wheat canopy spectral reflectance, leaf and stem nitrogen content, and leaf SPAD (Soil and Plant Analyzer Development) values were obtained at four growth stages (jointing, heading, anthesis and filling) and three nitrogen application levels (N1, N2 and N3). A systematic analysis was made to determine the sensitivity of hyperspectral vegetation indices to leaf and stem nitrogen contents at different growth stages and nitrogen application levels. Five commonly-used machine learning algorithms were used to estimate the leaf and stem nitrogen contents of winter wheat, including random forest regression (RFR), support vector regression (SVR), partial least squares regression (PLSR), Gaussian process regression (GPR) and deep neural networks (DNN). The hyperspectral vegetation indices only or combined with SPAD were used as the inputs to construct the nitrogen estimation models for leaves and stems. The results showed that the sensitivity of hyperspectral vegetation indices to the nitrogen content in leaves and stems was influenced by the growth stage and nitrogen application level. In the filling stage, the best vegetation index DCNI (Double-peak canopy nitrogen index) shared the highest sensitivity to leaf nitrogen content, where the determination coefficient R^2 was 0.866. The sensitivity to stem nitrogen content was the highest at the heading stage, and the R^2 between the best vegetation index NPQI (Normalized phaeophytinization index) and nitrogen content was 0.677. The sensitivity of the spectral vegetation index to the stem nitrogen content increased with the increasing nitrogen application level. The machine learning combined with the SPAD value and vegetation indices was improved the estimation accuracy of the nitrogen content, compared with only the vegetation index. In leaf nitrogen content, the estimation accuracy increased by 1%-7% under different growth stages and nitrogen application levels. The normalized root mean square error (NRMSE) increased from 0.254 to 0.214 during the whole growth stage. In a single growth period, the NRMSE increased from 0.201 to 0.128 at the heading stage, indicating the most increase. In the stem nitrogen content, the NRMSE increased from 0.443 to 0.400 during the whole growth stage. There was the most increase during the heading stage with the values ranging from 0.323 to 0.268. In the whole growth period, the DNN model combined with the SPAD value was achieved the best accuracy to estimate the nitrogen content of leaves ($R^2=0.782$ and $NRMSE=0.214$) and stems ($R^2=0.802$ and $NRMSE=0.400$). The combination of the SPAD value and spectral vegetation index can be expected to improve the accuracy of the nitrogen content in the leaves and stems of winter wheat at different growth stages and nitrogen application levels.

Keywords: winter wheat; machine learning; leaf ; stem; nitrogen content; SPAD; hyperspectral vegetation index