文章编号: 0253-2239(2008)08-1618-05

# 作物和杂草叶片的可见-近红外反射光谱特性

吴 迪<sup>1</sup> 黄凌霞<sup>2</sup> 何 勇<sup>1</sup> 潘家志<sup>1</sup> 张 赟<sup>1</sup> (<sup>1</sup>浙江大学生物系统工程与食品科学学院,浙江杭州 310029) <sup>2</sup>浙江大学动物科学学院,浙江杭州 310029</sup>)

摘要 为了进行快速实时的杂草识别,研究了作物和杂草叶片的可见-近红外反射光谱特性。选择了两种常见的 田间作物大豆(Glycine max)和玉米(Zea mays),以及铁苋菜(Acalypha australis L.)和田字草(Marsilea quadrifolia L.)两种杂草作为研究对象,每种各 30 个样本,共 120 个样本。采用 ASD Fieldspec 便携式光谱仪进行光谱采集。 在对 400~1000 nm 的光谱数据进行平滑和一阶求导预处理、。通过主成份分析,去除了一个奇异样本。最后用 79 个样本组成的建模集进行偏最小二乘法建模,对剩余的 40 个样本进行预测。预测模型结果的相关性达到 0.986, 识别率达到 100%。说明研究中选用的作物和杂草叶片的可见-近红外反射光谱特性之间有较大的区别,可以用于 进行杂草和作物的区分。

关键词 光谱学;杂草识别;可见-近红外反射光谱;偏最小二乘法 中图分类号 S123;TH744.1 **文献标识码** A doi:10.3788/AOS20082808.1618

# Visible-Near Infrared reflection Spectroscopy for Crop-Weed Discrimination

Wu Di<sup>1</sup> Huang Lingxia<sup>2</sup> He Yong<sup>1</sup> Pan Jiazhi<sup>1</sup> Zhang Yun<sup>1</sup>

<sup>1</sup> College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, Hangzhou, Zhejiang 310029, China <sup>2</sup> College of Animal Sciences, Zhejiang University, Hangzhou, Zhejiang 310029, China

**Abstract** Visible and near infrared reflection spectroscopy (Vis-NIRS) was studied as a fast and promising techniques for weed detection. Two kinds of weeds [threeseeded mercury (Acalypha australis L.) and quatrefoil duckweed (Marsilea quardrifolia L.)] and two kinds of crops [soybean (Glycine mas) and corn (Zea mays)] were investigated. A total 120 samples (30 for each species) of the plant leaves were prepared. The spectra were acquired by an ASD Fieldspec handhel spectrometer. After data pre-processing and principle component analysis on spectra from 400 to 1000 nm, one influential outliner was detected. After full-cross calibration of the 79 samples using partial least squares regression, the remaining 40 samples were predicted by the established model. Correlation coefficient of prediction set was 0. 987. 100% recognition rate was obtained based on artificial thresholds. So, Vis-NIR spectroscopy is an available alternative for recognizing crops from weeds.

Key words spectroscopy; weed recognition; visible-near infrared reflection spectroscopy; partial least squares

1 引 言

传统的单一的除草剂使用方式<sup>[1,2]</sup>导致了过多 的化学药剂使用和农产品中的残留。在作物生长早 期对杂草有选择性地使用除草剂,在经济上和环境 上都是十分的重要,关键在于如何快速识别杂草。

可见-近红外光谱分析技术,可以充分利用全谱 段或多波长下的光谱数据进行定性或定量分析,是 一种快速、无损、低成本、无污染的分析技术,已广泛 应用于农业、食品、医学等领域<sup>[3~8]</sup>。Zwiggelaar的 研究指出,可以用杂草和作物在特定波段内的光谱 反射率来区分它们,并有几项研究重点讨论了不同 种类植物叶片的光学特性<sup>[9]</sup>。Koger等介绍了用小 波方法分析高光谱反射率信号,以检测豆苗地中杂 草,并且达到了 83% 的正确率<sup>[10]</sup>。Smith 和 Blackshaw试验了7种离体植物在 350~2500 nm 的反射率,用高光谱遥感识别这5种作物和2种杂

基金项目:国家 863 计划(2007AA10Z210)和国家自然科学基金(30671213)资助课题。

作者简介:吴 迪(1984-),男,博士研究生,主要从事光谱与多光谱检测技术、数字农业等方面的研究。

E-mail: ilkb8mvp@yahoo.com.cn

**导师简介:**何 勇(1963-),男,教授,博士生导师,主要从事光谱与多光谱检测技术、数字农业等方面的研究。 E-mail: yhe@zju. edu. cn

收稿日期: 2007-10-08; 收到修改稿日期: 2008-02-05

草<sup>[11]</sup>。Slaughter 等用 400~2500 nm 的可见-红外 波段识别西红柿和茄属杂草,建立了一个可见光区 的窄波段的光谱识别模型,正确率达到 95%<sup>[12]</sup>。但 是,除了图像处理技术外,国内使用可见-近红外反射 光谱检测杂草的研究不多见<sup>[13]</sup>。所以,使用可见-近 红外反射光谱技术以区分作物和杂草,开发可以在农 田中使用的检测设备是很有前途的、可行的方法。

本文研究了4种作物与杂草的可见-近红外反 射光谱特性。并应用偏最小二乘回归法(Partial least squares, PLS)进行了种类识别。探究是否能 够通过作物和杂草叶片的可见-近红外反射光谱特 性的不同进行区分。

# 2 材料与方法

## 2.1 植物与样品准备

作物样品选用中国东南部常见的豆苗(Glycine max) 和 玉 米 (Zea mays)。铁 苋 菜 (Acalypha australis L.)和田字草(Marsilea quadrifolia L.)则 是两种中国东南部最常见的杂草。实验于 2005 年 5月20日在浙江大学华家池校区的实验田中进行。 由于田间的豆苗、玉米、铁苋菜和田字草的冠层上 方,顶端展开叶占据了主要范围。作物或杂草的其 它部分的光谱信息很难被采集到。通过采集这些植 物顶端的叶片能够代表其特征。由于外界环境会对 光谱采集产生影响,为了研究不同对象间的光谱特 征差异,需准确地研究作物和杂草的光谱特性。将 叶片采集后立即到室内完成光谱采集。采集好的叶 片样本先保存在密封的塑料薄膜口袋中,放入装有 冰块的盒子,然后拿到实验室保存在(4±1)℃的低 温环境中。在获取光谱之前,所有叶片先恢复到 25 ℃的室温。为保持叶片的水分,整个光谱采集在 叶片采摘后3h内完成,减少光谱变化。

## 2.2 叶片光谱反射率测定

实验使用美国 Analytical Spectral Device 公司 的 Handheld FieldSpec 光谱仪,光谱测定范围 325~1075 nm,采样间隔为1.5 nm。光谱的采集操 作通过 Fieldspec HH RS2 操作软件在 Windows XP 操作系统进行,数据按间隔 1 nm 保存。由于外 界复杂的环境会对光谱采集造成一定的影响,因此 选用在室内避光的环境内进行。先把叶片样本平整 地铺在一个直径为120 nm 的玻璃皿中,要求尽量 无重叠地铺满整个底面。这使得样本之间有相对一 致的照明环境。由于叶片完全覆盖玻璃皿底面,玻 璃皿底面对叶片反射光谱采集的影响可忽略。铺满 玻璃皿所需的叶片数量主要由叶片的面积大小决 定。对每种植物采集 30个样本,四种植物总共有 120个样本。采集 325~1075 nm 波段范围的光谱 反射率。光谱采集时,光谱仪探头和样本中心表面 的距离为 14 cm。采集过程中,采用 Lowell prolam 公司(大阪、日本)的 14.5 V Bulb/128690 卤素灯作 为光源。卤素灯与样本中心间的距离设定为 30 cm。光谱仪和卤素灯之间的夹角大约是 45°。整个 光谱采集前通过一个面积约为 65 cm<sup>2</sup>的圆形 BaSO4 白盘进行光谱平衡校正。每个样本采集 3 个 方向,方向间夹角 120°,以减少由于入射角差异带 来的影响。每个方向采集 10 次,每个样本一共 30 次。旋转过程中不要移动玻璃皿中心点的位置。3 个方向光谱的均值作为该样本的反射光谱值。

## 2.3 近红外数据分析

由于仪器采集精度限制,在采集到的光谱数据 中首端与末端的噪声较大。因此,将 325~399 nm 和 1001~1075 nm 的光谱数据去除,以提高测量数据 的信噪比。所有的光谱分析都是采用 400~1000 nm 波段的数据。所有的反射率数据都通过取反求对数 的方法[lg(1/R)]转化为吸光度数据。

为了降低由系统硬件带来的随机误差,所有的 光谱吸光度数据都用 Savitzky-Golay 最小平方拟合 进行平滑。然后用一阶 Savitzky-Golay 差分平滑光 谱数据,消除基线漂移和背景噪声<sup>[14]</sup>带来的干扰。 考虑到叶片样本上表面相对平坦,多重漫反射的影 响相对较弱,可以忽略不计。

首先用主成份分析(PCA)方法来从光谱数据中 产生 20 个主成份,以检验数据的相关性和剔除部分 数据<sup>[15]</sup>。然后用一阶差分后的 400~1000 nm 光谱 数据进行完全交叉验证的偏最小二乘回归法(PLS) 以区分四种植物。随机选取 66%的样本进行模型 校正,剩下的数据用来评估模型预测误差。所以,每 个品种随机选取 20 个样本(共 80 个)用来作为建模 数据集合,而剩下的共 40 个样本用来验证回归模型 的有效性。所有的计算过程都在 Unscrambler (version 9.2, CAMO Process AS, Norway)统计软 件上进行。

# 3 结论与讨论

## 3.1 植物的可见-近红外反射光谱

图 1 显示了每种植物在 400~1000 nm 的吸收 光谱曲线。在"红边"<sup>[16]</sup>(680~740 nm)位置各种植 物的光谱曲线发生了重叠。而在绿光区域(560~ 600 nm,玉米的光谱曲线与其他植物有一定的差 异)能将玉米与其他三种植物区分开来。而蓝光区 域(400~560 nm)、红光区域(600~680 nm)及近红 外区域(740~1000 nm)的差异可用于进行作物和 杂草的区分。然而当样本曲线增加时,各类植物的 光谱曲线会交叉重叠,很难通过直接观察光谱曲区 分作物和杂草。因此利用 PLS 模型进行光谱分析, 研究了作物和杂草的叶片反射光谱区特性。



图 1 大豆、玉米、铁苋菜、田字草样本的可见-近红外 吸收光谱

Fig. 1 Visible-near infrared absorption spectra for soybean, corn, three-seeded mercury and quatrefoil duckweed

#### 3.2 统计分析

## 3.2.1 主成份分析

为了检测出奇异样本和在不同品种间作定性分析,对训练集中的 80 个光谱样本在 400~1100 nm 之间的数据做了 PCA 分析。结果显示,主成分 (Pricipal component), PC1 和 PC2 分别代表了 78%和 13%的分布差异性(占总体的 91%)。而剩 下的因子所占比例小得多。所以,前两个主成份就 近似于植物叶片的光谱特征描述。图 2 表示了 PCA 的聚类图(PC1 和 PC2)和四个品种的聚类。 它可以解释植物品种的不同的光谱反射率。

从图 2 中可以看到,有一个豆苗样本被错误地 分类到田字草当中,这可能是由于实验中的随机误 差导致的。所以,它被作为对系统模型有较大影响 的奇异样本剔除出训练集。80 个样本中的 79 个作 为定标样本能够正确分类。此外,20 个田字草样本 的聚集区半径最小,可能是由于它的叶片比较规则, 在摆放样本时叶片之间的空隙较小,重叠因素的影 响也小。而玉米的光谱样本在图中最为分散,可能 是由于玉米叶片中间有大的脊,影响了入射光的角 度,造成了较大的反射率误差。

为了研究四种植物光谱的差异,进一步对主成 分载荷图作分析(图 3)。从图中可以看到,主成份



## 图 2 大豆、玉米、铁苋菜、田字草的主成分 PC1 和 主成分 PC2 的聚类图

Fig. 2 Principal components cluster plot of crop and weed leaf samples



图 3 作物和杂草叶片的可见-近红外反射光谱样本 主成分 PC1 和主成分 PC2 的载荷图

Fig. 3 Loadings weights of the first and second principal components at visible-near infrared spectra of crop and weed leaf sample

PC1和PC2在可见光波段有较大差异,并且波动明显,而在近红外波段的载荷都很小。PC1的最大的 正向载荷出现在638~665 nm和720~760 nm,这 些波段对应叶绿素吸收波段<sup>[10]</sup>。PC2在大部分波 段上与PC1反向变化,它的最大正向载荷出现在 510~526 nm和687~706 nm,分别对应蓝光吸 收<sup>[9]</sup>和"红边"位置,由于用一阶 Savitzky-Golay 差 分进行光谱预处理而被放大。

3.2.2 PLS校正和有效性分析

PLS 是一个双线性模型,原始的独立变量信息 (X)被投影到少数的 PCs 中。在作物与杂草的定性 分析中,由于没有相应的化学指标作为因变量 Y 值,就人工赋以1,3,5,7,分别代表大豆,玉米,铁苋 菜和田字草。采用带交叉验证的 PLS 回归方法来 建立在光谱数据与品种数值之间的定标模型。采用 完全 交叉 验 证 的 预 测 残 差 平 方 和 (Prediction residual error sum of squares, PRESS)为评价标 根据 PCA 的结果,大豆的样本中有一个奇异样 本被剔除。建模的光谱样本被随机分为训练集和验 证集。用相关系数(correlation coefficient)r,建模 标准差(standard error of calibration, SEC) $S_{EC}$ ,预 测标准差(Standard error of prediction, SEP) $S_{EP}$ , 建模均方根误差(root mean square error of calibration, RMSEC) $R_{MSEC}$ ,预测均方根误差(Root mean square error of prediction, RMSEP) $R_{MSEP}$ ,偏 差(bias) $b_{ias}$ ,斜率(slope) $s_{lope}$ 和偏移(offset) $o_{ffset}$ 等来 衡量模型预测的精确性。好的模型有较小的 $b_{ias}$ ,  $S_{EC}$ , $S_{EP}$ , $R_{MSEC}$ 和 $R_{MSEP}$ ,以及较大的 $r_{o}$ , $b_{ias}$ , $S_{EC}$ <sup>[17]</sup>,  $S_{EP}$ <sup>[15]</sup>分别由下式定义:

$$b_{\rm ias} = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^{I} (\hat{y}_i - y_i), \qquad (1)$$

$$S_{\rm EC} = \sqrt{\frac{1}{I-1} \sum_{i=1}^{I} (\hat{y}_i - y_i)^2}, \qquad (2)$$

$$S_{\rm EP} = \sqrt{\frac{1}{I-1} \sum_{i=1}^{I} (\hat{y}_i - y_i - b_{\rm ins})^2}, \qquad (3)$$

式中 ŷ<sub>i</sub>和 ŷ 为每个样本的预测值和实际值, I 是样本数。

经交互验证法判断,本研究 PLS 模型的最佳主 成分数为 5。表 1 显示了四种植物共 79 个样本的 400~1000 nm 波段光谱的 PLS 模型建模和交叉验 证结果。其中建模和交叉验证的 r 分别为 0.987 和 0.984。建模和交叉验证的 r 值较高,并且  $b_{ias}$ 较小。  $S_{EC}=0.356$  和  $S_{EP}=0.396$  值较小且差异不大,同 时  $R_{MSEC}=0.354$  和  $R_{MSEP}=0.394$  值接近,说明模型 没有出现"过度拟合"和"欠拟合"。因此,建立的 PLS 模型具有较好的区分作物好杂草光谱的能力。

# 表 1 四种植物的 400~1000nm 波段光谱的 PLS 模型 建模和交叉验证结果

Table 1 Calibration and cross-validation results of the four plants from PLS modeling at the spectral range of  $400 \sim 1000 \text{ nm}$ 

Parameter	Calibration	Cross validation
Element	79	79
Slope	0.975	0.967
Offset	0.102	0.138
Correlation	0.987	0.984
Bias	$3.71 \times 10^{-7}$	0.00647
SEC	0.356	/
SEP	/	0.396
RMSEC	0.354	/
RMSEP	/	0.394

#### 3.3 统计预测分析

根据建立好的 PLS 模型来预测每种植物中剩下的 10个样本,图 4显示了区分四种植物的预测结果。r=0.987表明预测值与真实值之间有极大的相关性。 $S_{\rm EP}=0.366$ 和建模时的  $S_{\rm EC}=0.356$ 之间差异较小,表明模型有较高的预测精度。 $R_{\rm MSEP}=0.364 n b_{\rm ias}=-0.0436$ 表明了模型在作物与杂草分类上有较强的识别能力。从图 4 中可以看到,通过阈值 2.0,4.0 和 6.0 对预测的结果进行划分,可以 100%地区分四个植物品种的样本,说明了模型 有较好的识别结果。



图 4 四种植物种类的可见-近红外光谱 PLS 预测结果 Fig. 4 PLS prediction results of the four plants at visible and near-infrared spectra

# 4 结 论

对两种作物(玉米和豆苗)和两种杂草(铁苋菜和田字草)的叶片的可见-近红外反射光谱,建立了 一个完全交叉验证的 PLS 模型。在对 80 个吸收度 光谱做 Savitzky-Golay 平滑和一阶差分的预处理 后,进行 400~1000 nm 光谱的 PCA 预分析,显示 了前两个主成份可以代表超过 91%的总体变异,因 此非常适合用来做种类鉴别。有一个豆苗样本被错 误地归类为田字草,因此被作为奇异样本剔除了。 PLS 模型的预测结果显示预测值与实际值高度相 关(r=98.7%,  $S_{EP}=0.366$ ,  $R_{MSEP}=0.364$ ,  $b_{ias}=$ -0.0436)。通过阈值的划分能够得到 100%的识别 率。因此,只要用特定的数值来量化品种因子,作为 因变量 Y 值,用可见-近红外反射光谱来做杂草与 作物的品种鉴别,PLS 模型是一种有效的方法。

#### 参考文献

1 Li Zhichen, Rao Honghui, Wang Yong et al.. Status quo and advance on research of variable-rate spraying technology[J]. J. Northeast Agricultural University, 2007, 38(4): 563~567 李志臣, 饶洪辉, 王 勇等. 除草剂变量施药技术的研究现状与 进展[J]. 东北农业大学学报, 2007, **38**(4): 563~567

2 Chen Derun, Wang Shumao, Wang Xiu. Status and prospect for recognition technology of farm weeds [J]. Chinese Agriculture Mechanization, 2005, 2: 35~38

陈德润,王书茂,王 秀.农田杂草识别技术的现状与展望[J]. 中国农机化,2005,2:35~38

3 Wu Di, Feng Lei, Zhang Chuanqing et al.. Early detection of gray mold (cinerea) on eggplant leaves based on vis/near infrared spectra[J]. J. Infrared and Millimeter Waves, 2007, 26(4): 269~273

吴 迪, 冯 雷, 张传清 等. 基于可见/近红外光谱技术的茄子 叶片灰霉病早期检测研究[J]. 红外与毫米波学报, 2007, **26**(4): 269~273

4 Chen Quansheng, Zhao Jiewen, Zhang Haidong et al.. Indentification of authenticity of tea with near infrared spectroscopy based on support vector machine[J]. Acta Optica Sinica, 2006, 26(6): 933~937

陈全胜,赵杰文,张海东等.基于支持向量机的近红外光谱鉴别 茶叶的真伪[J].光学学报,2006,**26**(6):933~937

5 Zhao Jiewen, Zhang Haidong, Liu Muhua. Preprocessing methods of near-infrared spectra for simplifying prediction model of sugar content of apples[J]. Acta Optica Sinica, 2006, 26(1): 136~140

赵文杰,张海东,刘木华.简化苹果糖度预测模型的近红外光谱 预处理方法[J].光学学报,2006,**26**(1):136~140

6 Shi Youming, Liu Gang, Liu Jianhong *et al.*. Identification of auricularia auricula from different regions by Fourier transform infrared spectroscopy [J]. Acta Optica Sinica, 2007, 27 (1): 129~132

时有明,刘 刚,刘剑虹 等.不同产地黑木耳的傅里叶变换红外 光谱鉴别[J]. 光学学报,2007,**27**(1):129~132

- 7 Xu Xiangqun, Wu Liu. Dependence of optical clearing effect on tissue structure[J]. Chin. J. Lasers, 2006, 33(7): 998~1002
  徐向群,吴 柳.不同结构生物组织光透明作用比较[J]. 中国激光, 2006, 33(7): 998~1002
- 8 Wei Huajiang, Xing Da, Wu Guoyong *et al.*. Using spatially resolved reflectance to measure optical properties of stomach tissue[J]. *Chin. J. Lasers*, 2007, **34**(4): 582~588 魏华江,邢 达,巫国勇等. 采用空间分辨漫反射测定胃组织光 学特性[J]. 中国激光, 2007, **34**(4): 582~587

- 9 Reyer Zwiggelaar. A review of spectral properties of plants and their potential use for crop/weed discrimination in row-crops[J]. *Crop Protection*, 1998, **17**(3): 189~206
- 10 Cliff H. Koger, Lori M. Bruce, David R. Shaw *et al.*. Wavelet analysis of hyperspectral reflectance data for detecting pitted morningglory (Ipomoea lacunosa) in soybean (Glycine max)[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2003, 86(1): 108~119
- 11 Anne M. Smith, Robert E. Blackshaw. Weed-crop discrimination using remote sensing: A detached leaf experiment [J]. Weed Technology, 2003, 17(4): 811~820
- 12 D. C. Slaughter, W. T. Lanini, D. K. Giles. Discriminating weeds from processing tomato using visible and near-infrared spectroscopy[J]. *Transactions of the ASAE*, 2004, 47(6): 1907~1911
- 13 Ji Shouwen, Wang Rongben, Chen Jiajuan *et al.*. Research on recognizing weed from corn seedling by using computer image processing technology [J]. *Transactions of the CSAE*, 2001, 17(2): 154~156
  纪寿文,王荣本,陈佳娟 等. 应用计算机图像处理技术识别玉米 苗期田间杂草的研究 [J]. 农业工程学报, 2001, 17(2): 154~156
- 14 M. Blanco, J. Coello, H. Iturriaga et al.. NIR calibration in non-linear systems: different PLS approaches and artificial neural networks[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2000, 50(1): 75~82
- 15 T. Naes, T. Isaksson, T. Fearn et al. A user-Friendly Guide to Multivariate Calibration and Classification [M]. UK: NIR Publications, 2002
- 16 Fang Hui, Song Haiyan, Cao Fang *et al.*. Study on the relationship between spectral properties of oilseed rape leaves and their chlorophyll content [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 127(19): 1731~1734
  方 慧,宋海燕,曹芳等.油菜叶片的光谱特征与叶绿素含量之间的关系研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 127(19): 1731~1734
- 17 Gamal ElMasry, Ning Wang, Adel ElSayed *et al.*. Hyperspectral imaging for nondestructive determination of some quality attributes for strawberry [J]. *J. Food Engineering*, 2007, 81(1): 98~107