

DOI: 10.3724/SP.J.1006.2020.94157

## 基于光谱指数和偏最小二乘的棉花类胡萝卜素/叶绿素 *a* 比值估算

易秋香<sup>1,2,3,\*</sup> 刘英<sup>1,2,3</sup> 常存<sup>1,2,3</sup> 钟瑞森<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>中国科学院新疆生态与地理研究所 / 荒漠与绿洲生态国家重点实验室, 新疆乌鲁木齐 830011; <sup>2</sup>新疆维吾尔自治区遥感与地理信息系统应用重点实验室, 新疆乌鲁木齐 830011; <sup>3</sup>中国科学院大学, 北京 100049

**摘要:** 类胡萝卜素(Car)与叶绿素 *a* 含量比值(Car/Chla)的变化与植被生长发育变化、环境胁迫及叶片衰老特征等密切相关, 可作为植被生理生态及物候的监测指标。不同植被类型和植被品种其色素变化随植被生长发育呈现出不同的变化特征。为了探究适用于干旱区棉花 Car/Chla 比值估算的光谱指数和估算方法, 本研究通过 2011 年和 2012 年连续 2 年的大面积田间试验, 获取了棉花不同生育期的叶片及冠层尺度光谱反射率及色素含量信息, 对多种光谱指数及偏最小二乘回归(Partial Least Square Regression, PLSR)用于 Car/Chla 比值和 Car 估算进行了探讨。对比表明, 基于光化学指数(Photochemical Reflectance Index, PRI)的线性和一元二次模型对 Car/Chla 比值和 Car 的估算精度最高, 由 PRI-Car/Chla 线性模型得到的叶片和冠层尺度的 Car/Chla 比值估算值与实测值之间的决定系数  $R^2$  大于 0.6, PRI-Car 的  $R^2$  大于 0.36; 基于 PLSR 模型得到的 Car/Chla 比值估算值与实测值之间的拟合关系略优于基于 PRI 的估算模型, 由其得到的叶片及冠层尺度 Car/Chla 比值估算值与实测值之间的决定系数  $R^2$  大于 0.80, Car 估算值与实测值之间  $R^2$  大于 0.73; 不论基于 PRI 还是基于 PLSR 方法, 对 Car/Chla 比值的估算精度均高于 Car 含量, 该结论进一步证实了 Car/Chla 比值遥感监测的可行性, 丰富了对棉花生长高温胁迫、养分胁迫等环境胁迫及病虫害等遥感监测的依据指标。

**关键词:** 类胡萝卜素/叶绿素 *a* 比值; 类胡萝卜素; 光化学指数; 偏最小二乘回归; 棉花

## Estimation of cotton Car/Chla ratio by hyperspectral vegetation indices and partial least square regression

YI Qiu-Xiang<sup>1,2,3,\*</sup>, LIU Ying<sup>1,2,3</sup>, CHANG Cun<sup>1,2,3</sup>, and ZHONG Rui-Sen<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> State Key Laboratory of Desert and Oasis Ecology / Xinjiang Institute of Ecology and Geography, Chinese Academy of Sciences, Urumqi 830011, Xinjiang, China; <sup>2</sup> Key Laboratory of GIS & RS Application Xinjiang Uygur Autonomous Region, Urumqi 830011, Xinjiang, China; <sup>3</sup> University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

**Abstract:** Estimating the ratio between carotenoid to chlorophyll *a* (Car/Chla) provides an additional avenue for the assessment of physiology and phenology of plant growth and development. With the aim of assessing cotton Car/Chla ratio from hyperspectral reflectance, a wide range of carotenoid (Car) and chlorophyll *a* concentrations, and leaf and canopy reflectance at cotton different growth stages were measured. The performance of a variety of Car/Chla ratio related vegetation indices and partial least square regression (PLSR) for Car/Chla ratio and Car estimation were tested. Among all tested vegetation indices, PRI (Photochemical Reflectance Index) and linear PRI models had the most significant correlations with Car/Chla ratio and Car, and could accurately estimate, Car/Chla ratio ( $R^2_{\text{leaf level}} = 0.69$  and  $R^2_{\text{canopy level}} = 0.67$ ) and Car concentration ( $R^2_{\text{leaf level}} = 0.44$  and  $R^2_{\text{canopy level}} = 0.36$ ). The best estimation of the Car/Chla ratio and Car was provided by PLSR models with  $R^2 > 0.80$  between the estimated and measured value for Car/Chla ratio and  $R^2 = 0.74$  for Car. Both reflectance indices and PLSR method were more successful for the estimation of Car/Chla ratio than for that of Car concentration, indicating the promising potential of Car/Chla ratio as a powerful indicator using for plant status monitoring by remote sensing. Besides, accuracy test of models using validation dataset highlighted the remarkable performance of PLSR for Car/Chla ( $R^2_{\text{leaf level}} = 0.87$  and  $R^2_{\text{canopy level}} = 0.84$ ) and Car ( $R^2_{\text{leaf level}} = 0.73$  and  $R^2_{\text{canopy level}} = 0.74$ ) estimated by hyperspectral reflectance at both the leaf and canopy levels. The results further prove the remarkable

本研究由国家自然科学基金项目(41571428, 41871328)资助。

This study was supported by the National Natural Science Foundation of China (41571428, 41871328).

\* 通信作者(Corresponding author): 易秋香, E-mail: yiqx@ms.xjb.ac.cn

Received (收稿日期): 2019-10-22; Accepted (接受日期): 2020-03-24; Published online (网络出版日期): 2020-04-13.

URL: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.1809.S.20200413.0842.002.html>

performance of hyperspectral reflectance for the estimation of Car/Chla ratio, and enrich the parameters for monitoring high temperature stress, water deficit stress, and nutrient stress and pest diseases by remote sensing in cotton.

**Keywords:** Car/Chla ratio; carotenoid; PRI (Photochemical Reflectance Index); PLSR (Partial Least Square Regression); cotton

植被色素变化与植被胁迫、光合作用等密切相关。叶绿素(chlorophyll, Chl)及类胡萝卜素(carotenoid, Car)被认为是反映植被生理状况的良好指示器<sup>[1]</sup>。随着遥感技术的发展,植被色素含量诊断得到了进一步的发展,其中,叶绿素含量的监测有很多研究,并且建立了各类叶绿素含量估算模型<sup>[2-6]</sup>。类胡萝卜素作为叶绿体中的第二大色素,和叶绿素一样,具有吸收、传递光能及光保护功能,并且它可反映植被受胁迫情况<sup>[7]</sup>。由于叶片中类胡萝卜素含量明显低于叶绿素含量,并且两者显著相关<sup>[8]</sup>,用于类胡萝卜素监测的敏感波段也同时受叶绿素含量影响,这导致类胡萝卜素含量的估算较难<sup>[9-10]</sup>。

对于大部分植被,正是由于各类色素含量及其占比的变化,导致叶片颜色变化<sup>[11-13]</sup>。当植被受到高温胁迫、养分胁迫或在叶片老化过程中,叶绿素和类胡萝卜素含量都会随之老化而降低,但相比叶绿素含量的快速减少,类胡萝卜素含量变化相对更稳定<sup>[12,14-16]</sup>,这也就意味着类胡萝卜素与叶绿素含量比值可反映植被生长环境胁迫及叶片的老化特征,如 Sanger<sup>[17]</sup>证实在衰老的叶片中类胡萝卜素要比叶绿素a更持久地存在; Peñuelas 等<sup>[18-19]</sup>发现类胡萝卜素与叶绿素a(Chla)比值(Car/Chla)在老化和不健康的植被叶片中会增加,而在健康的叶片中会降低。相比于利用单一叶绿素或类胡萝卜素含量进行植被生理状况监测,Car/Chl 比值是一个无量纲值,能够消除植被类型及品种之间类胡萝卜素和叶绿素含量本身的差异,使得不同植被类型之间的色素变化情况更具有可比性,并且,相比单一叶绿素含量变化或类胡萝卜素含量变化能更灵敏地指示植被生理变化或衰老特征<sup>[20]</sup>,可为植被生理生态状况监测提供更有效的监测指标。

目前对于类胡萝卜素与叶绿素含量比值的遥感监测已有部分研究。最早 Peñuelas 等<sup>[18]</sup>分析了光谱指数用于 Car/Chla 监测的可能性,提出归一化色素指数(Normalized Difference Pigment Index, NDPI)与向日葵及水生植物的 Car/Chla 比值具有显著相关性;随后 Peñuelas 等<sup>[21]</sup>又进一步获取了多种植被包括玉米、小麦、番茄、大豆、向日葵、甜菜、橡树、枫树以及肉质植物等的叶片光谱和色素信息,探讨了

叶片光谱用于 Car/Chla 估算的最佳波段,并构建了结构不敏感色素指数(Structure Insensitive Pigment Index, SIPI),认为该指数可削弱叶片表面及叶肉结构对 Car/Chla 估算的影响,同时证实该指数与 Car/Chla 比值之间呈非线性相关,当 Car/Chla 比值较小时(小于 1), SIPI 敏感性较低,当 Car/Chla 比值大于 10 时, SIPI 达到饱和; Merzlyak 等<sup>[16]</sup>发现多种植被(包括枫树、栗树、土豆以及锦紫苏)叶片老化及果实(包括柠檬和苹果)成熟过程中,500 nm 和 680 nm 附近的叶片光谱的差值( $R_{678}-R_{500}$ )对叶片老化引起的色素含量变化最为敏感,由此构建了用于类胡萝卜素与叶绿素比值估算的植被衰老指数(Plant Senescing Reflectance Index, PSRI),通过 PSRI 与  $R_{678}/R_{750}$  之间的关系判定叶片老化和果实成熟阶段,但不同植被在叶片老化和果实成熟过程中所展示的 PSRI 变化有所不同; Nakaji 等<sup>[22]</sup>和 Garrity 等<sup>[23]</sup>分别证实日本落叶松及橡树和枫树的 Car/Chl 比值与光化学指数(Photochemical Reflectance Index, PRI)具有极显著相关性。此外,也有研究利用辐射传输模型证实了光谱指数与 Car/Chla 比值之间的显著相关,如 Garrity 等<sup>[23]</sup>利用 PROSPECT-5 模型证实了 PRI 与 Car/Chl 之间显著相关,决定系数  $R^2=0.83$ ,但通过实测获取的两种针叶林植被的 PRI 和 Car/Chl 比值之间的判定系数仅为 0.22,研究者认为这与获取的叶片样本受干旱胁迫有关; Hernández-Clemente 等<sup>[24]</sup>的研究表明, PRI 与叶绿素或类胡萝卜素之间的关系取决于 PRI 和 Car/Chl 比值之间的关系,其利用 PROSEPECT+DART 模型模拟的针叶林 PRI 光谱指数与类胡萝卜素与叶绿素比值相关系数达到 0.9。国内,周贤峰<sup>[20]</sup>利用实测的叶片和冠层光谱评估了一些常用于类胡萝卜素、叶绿素及两者比值估算的光谱指数,用于玉米和冬小麦的 Car/Chl 比值估算的精度,并构建了类胡萝卜素与叶绿素比值植被指数(Combined Carotenoid/Chlorophyll Ratio Index, CCRI)<sup>[25]</sup>,也证实不同光谱指数对不同作物的 Car/Chl 比值估算精度与作物 Car/Chl 比值分布有关,其中 SIPI、PSRI 以及 PRI 对玉米 Car/Chl 比值估算的精度要优于对冬小麦 Car/Chl 比值的估算,主要因为玉米 Car/Chl 比值分布范围更广泛,包含更大的

变化。

由上可见,已有研究中关于类胡萝卜素和叶绿素比值遥感监测所提出的光谱指数多针对林木植被展开,并且都是基于研究对象的经验统计模型,这类型模型的估算精度受植被类型、植被生长环境、植被色素含量变化特征及植被本身光谱特征等多种因素影响,无法直接应用于不同研究区域的不同作物,同时对于作物 Car/Chla 比值遥感监测的研究目前还较少,有待进一步探讨。本研究分析各类光谱指数用于棉花类胡萝卜素与叶绿素比值及类胡萝卜素的估算精度,并与偏最小二乘方法对比,旨在明确其估算的可行性,丰富棉花生理生态遥感监测指标。

## 1 材料与方法

### 1.1 观测试验

于新疆维吾尔自治区北部石河子垦区 148 团、149 团及 150 团( $84^{\circ}58'—86^{\circ}24'E$ ,  $43^{\circ}26'—45^{\circ}20'N$ ),依据棉田连片面积,2011 及 2012 年分别选取 4 个种植面积大于  $50 \text{ hm}^2$  的地块作为试验样点布设田间观测点。在每个样点布设 6~8 个不等的观测点。分别于 2011 年 6 月 9 日(苗期)、7 月 14 日(开花初期)、8 月 17 日(花铃期)及 2012 年 6 月 19 日(现蕾期)、7 月 18 日及(开花盛期)8 月 1 日(花铃期)试验观测。

### 1.2 数据获取

1.2.1 光谱测定 使用美国 ASD (Analytical Spectral Device)公司的 ASDFieldSpec Pro FRTM 光谱仪测定光谱,其波段值为 350~2500 nm,其中 350~1000 nm 光谱采样间隔为 1.4 nm,光谱分辨率为 3 nm; 1001~2500 nm 光谱采样间隔为 2 nm,光谱分辨率为 10 nm。冠层光谱选择在无风无云或少云的天气测定,测定时间为 12:00~16:00。测量之前先开启光谱仪预热,再次测量之前都先进行光谱仪的

优化,光谱测定前进行参考板反射率测定,测量时探头垂直向下,距棉花冠层垂直高度约 0.7 m,  $25^{\circ}$  视场角。叶片光谱选取健康叶片利用叶片夹连接 ASD 光谱仪测定。冠层光谱和叶片光谱采样均以 10 条光谱为一采样光谱,即每次记录 10 条光谱,以其平均值作为该样点的光谱反射值。

1.2.2 色素含量测定 对应叶片光谱测定的位置,剪取约 0.2 g 叶片置试管中,加萃取液(丙酮 无水乙醇 蒸馏水=4.5 4.5 1.0)(v/v) 25 mL,于室温下遮光静置至样品完全发白。然后采用 722 s 分光光度计分别测定 663、645 和 440 nm 处的光密度值(optical density, OD),基于 OD 值计算叶绿素含量,参照蒋德安等<sup>[26]</sup>方法。

### 1.3 植被指数

考虑到 Car/Chla 比值与类胡萝卜素含量直接相关,除已有的 Car/Chla 比值指数外,还分析了各类研究中提出的类胡萝卜素光谱植被指数。Hernandez-Clemente 等<sup>[24]</sup>的研究中对用于类胡萝卜素及类胡萝卜素与叶绿素比值估算的植被指数进行了总结,并构建了简单植被指数( $R_{515}/R_{570}$ ),本文在利用其总结的植被指数外,加入了 Zhou 等<sup>[25]</sup>提出的 CCRI,共计 19 个植被指数。在对这些植被指数与棉花 Car/Chla 比值及类胡萝卜素进行相关性分析的基础上,筛选出在叶片及冠层尺度与 Car/Chla 比值及类胡萝卜素均达到极显著相关的植被指数进行进一步模型构建分析。采用的植被指数如表 1。

### 1.4 偏最小二乘回归

偏最小二乘回归(partial least square regression, PLSR)是用于光谱数据分析的强有力方法,该方法已被应用于各类研究<sup>[28-29]</sup>。对于该方法的具体介绍可参考 Geladi 等<sup>[30]</sup>和 Wold 等<sup>[31]</sup>。本研究中,PLSR 用于构建棉花叶片及冠层光谱反射率与 Car/Chla 比

表 1 所采用的光谱指数

Table 1 Vegetation indices used for Car/Chla ratio and carotenoids estimation

指数 Index	全称 Full name	表达式 Formula	文献 Reference
PRI	Photochemical Reflectance Index	$(R_{531}-R_{570})/(R_{531}+R_{570})$	[27]
PRI*CI	Carotenoid/Chlorophyll Ratio Index	$(R_{531}-R_{570}) / (R_{531}+R_{570})*((R_{760}/R_{700})-1)$	[23]
PSRI	Plant senescence reflectance index	$(R_{678}-R_{500})/R_{750}$	[16]
$R_{515}/R_{570}$	Simple ratio vegetation index	$R_{515}/R_{570}$	[24]
CCRI	Combined carotenoid/chlorophyll ratio index	$(R_{720}-R_{521})*R_{705}/(R_{750}-R_{705})*R_{521}$	[25]

值及类胡萝卜素之间的线性模型, 采用波段 400~1000 nm 共计 601 个光谱反射率作为输入变量, 利用留一验证法(leave-one-out cross-validation, LOOCV)<sup>[32]</sup>通过最小预测残差平方和(predicted residual sums of squares, PRESS)<sup>[33]</sup>确定各估算模型的最佳潜变量(latent variables)个数。PLSR 模型构建通过 Matlab 代码编程实现。

## 2 结果与分析

### 2.1 类胡萝卜素与叶绿素 a 比值(Car/Chla)及类胡萝卜素(Car)统计特征

将叶片和冠层尺度的 Car/Chla 比值及 Car 的实测数据随机分为检验样本和验证样本, 其中总数据的三分之二用于建模, 剩余的三分之一用于模型估算精度验证。建模样本和检验样本的 Car/Chla 比值及 Car 统计特征见表 2。由表 2 可知, Car/Chla 比值

及 Car 的取值分布广泛, Car/Chla 比值的最大最小值分别是 0.109 和 0.495, Car 含量最小 3.97  $\mu\text{g cm}^{-2}$ , 最大 23.06  $\mu\text{g cm}^{-2}$ 。建模样本和检验样本统计特征相似, 说明样本随机分组合理。

### 2.2 基于植被指数的估算模型构建

已有的研究证实 Car/Chla 比值及 Car 和光谱指数之间通常呈线性<sup>[24-25]</sup>或一元二次的非线性相关<sup>[23]</sup>, 本研究构建了基于这 2 种拟合函数的估算模型。

$$\text{线性模型为 } y = ax + b \quad (1)$$

$$\text{一元二次模型为 } y = ax^2 + bx + c \quad (2)$$

其中,  $y$  表示 Car/Chla 比值或 Car 含量;  $x$  表示光谱指数。

基于各类植被指数构建的线性及一元二次估算模型的决定系数见表 3。由表 3 可知, 对于 Car/Chla 比值及 Car 含量, 在叶片及冠层尺度, 均是基于 PRI 的一元二次模型具有最大决定系数, 并且不论

表 2 用于模型构建和验证的 Car/Chla 比值以及 Car 的统计特征

Table 2 Statistical information of the Car/Chla ratio and Car for calibration and validation datasets

尺度 Level	数据集 Dataset	样本数 <i>n</i>	Car/Chla 比值 Car/Chla ratio			类胡萝卜素 Car ( $\mu\text{g cm}^{-2}$ )		
			平均值 Mean	取值范围 Range	标准偏差 SD	平均值 Mean	取值范围 Range	标准偏差 SD
叶片尺度 Leaf level	总体 All	141	0.286	0.109~0.495	0.081	13.49	3.97~23.06	3.99
	验证样本 Calibration	94	0.283	0.109~0.478	0.081	13.08	5.76~22.83	3.72
	检验样本 Validation	47	0.292	0.118~0.495	0.083	14.32	3.97~23.06	4.40
冠层尺度 Canopy level	总体 All	159	0.302	0.109~0.495	0.082	14.15	3.97~23.06	4.16
	验证样本 Calibration	104	0.300	0.109~0.440	0.082	13.88	5.76~20.93	3.91
	检验样本 Validation	55	0.306	0.118~0.495	0.082	14.55	3.97~23.06	4.51

表 3 基于植被指数的 Car/Chla 比值及 Car 估算模型

Table 3 Vegetation indices predictive models for Car/Chla ratio and Car

建模方法 Method	叶片尺度 Leaf level		冠层尺度 Canopy level	
	比值 Car/Chla ratio	类胡萝卜素 Car	比值 Car/Chla ratio	类胡萝卜素 Car
PRI-Linear	$y = -0.834x + 0.338$ $R^2=0.723$	$y = -30.58x + 14.86$ $R^2=0.541$	$y = 1.343x + 0.313$ $R^2=0.670$	$y = -0.009x + 0.135$ $R^2=0.486$
PRI-Polynomial	$y = 1.897x^2 - 1.31x + 0.348$ $R^2=0.732$	$y = 26.1x^2 - 37.07x + 14.9$ $R^2=0.542$	$y = 3.191x^2 - 1.679x + 0.309$ $R^2=0.681$	$y = 0.001x^2 - 0.044x + 0.349$ $R^2=0.487$
PRI*CI-Linear	$y = -0.155x + 0.328$ $R^2=0.638$	$y = -5.35x + 14.37$ $R^2=0.426$	$y = -0.127x + 0.32$ $R^2=0.519$	$y = -0.0718x + 1.1565$ $R^2=0.356$
PRI*CI-Polynomial	$y = 0.104x^2 - 0.293x + 0.341$ $R^2=0.681$	$y = 5.38x^2 - 12.49x + 15.03$ $R^2=0.488$	$y = 0.073x^2 - 0.248x + 0.321$ $R^2=0.627$	$y = 0.01x^2 - 0.34x + 2.79$ $R^2=0.431$
PSRI-Linear	$y = 3.711x + 0.323$ $R^2=0.203$	$y = 155.2x + 14.47$ $R^2=0.196$	$y = 1.74x + 0.293$ $R^2=0.157$	$y = 0.0015x - 0.0158$ $R^2=0.093$
PSRI-Polynomial	$y = -180.3x^2 - 0.66x + 0.314$ $R^2=0.257$	$y = -11414x^2 - 122.7x + 13.9$ $R^2=0.314$	$y = -54.95x^2 + 2.56x + 0.31$ $R^2=0.239$	$y = -0.0004x^2 + 0.01x - 0.09$ $R^2=0.244$
CCRI-Linear	$y = 0.173x + 0.079$ $R^2=0.501$	$y = 5.42x + 6.38$ $R^2=0.272$	$y = 0.182x + 0.082$ $R^2=0.405$	$y = 0.031x + 0.758$ $R^2=0.189$
CCRI-Polynomial	$y = -0.134x^2 + 0.49x - 0.097$ $R^2=0.580$	$y = -7.09x^2 + 22.3x - 2.89$ $R^2=0.396$	$y = -0.364x^2 + 0.976x - 0.317$ $R^2=0.526$	$y = -0.008x^2 + 0.239x - 0.51$ $R^2=0.417$

是叶片尺度还是冠层尺度, Car/Chla 比值的估算模型的决定系数总是大于 Car 含量的估算模型, PRI-Car/Chla 模型在叶片尺度具有最大决定系数  $R^2=0.732$ , 冠层尺度  $R^2=0.681$ , 叶片尺度的 Car/Chla 估算模型精度略优于冠层尺度。进一步对比发现, 基于 PRI 的线性估算模型与一元二次模型的决定系数非常接近, 2 种模型判定系数的差值均小于 0.01。考虑到模型的简单性, 在估算精度相似的情况下, 本研究将采用表达形式更为简单的线性模型利用检验样本进行进一步精度检验, 在此基础上, 讨论利用叶片尺度的 PROSPCT-D<sup>[34]</sup> 和冠层尺度的 SAILH<sup>[35]</sup> 辐射传输模型模拟棉花叶片及冠层尺度的反射率, 进一步检验 PRI 用于棉花 Car/Chla 估算的有效性。

### 2.3 基于 PLSR 的估算模型构建

PLSR 估算模型的最佳潜变量个数通过 LOCCV 获取最小预测残差平方和(PRESS)值来确定。潜变量是自变量信息的重新组合, 当潜变量个数对因变量解释性最强, 同时又最能概括自变量系统中的综合信息时, 为最佳潜变量个数, 通常用 PRESS 值来判

定, 当 PRESS 值最小时, 所对应的潜变量个数即为模型最佳潜变量个数。叶片尺度及冠层尺度的 Car/Chla 比值及 Car 含量的 PLSR 模型的潜变量个数与 PRESS 之间的关系如图 1 所示。图中最小 PRESS 值所对应的潜变量个数用黑色实心圆点表示。由图 1 可知, 叶片及冠层尺度 Car/Chla 比值的 PLSR 模型的最佳潜变量个数分别为 19 和 16, Car 含量的 PLSR 模型最佳潜变量个数分别为 10 和 13。

在确定各估算模型最佳潜变量个数的基础上, 将叶片及冠层光谱反射率(400~1000 nm)和 Car/Chla 比值及 Car 含量作为模型输入变量, 构建 PLSR 估算模型, 得到叶片及冠层尺度的 Car/Chla 比值和 Car 含量的估算值。基于建模样本的估算值与实测值之间的线性关系如图 2 所示。由图 2 可知, 在叶片和冠层尺度, Car/Chla 比值及 Car 含量的估算值与实测值均高度拟合, 两者的拟合线与 1:1 线接近重叠, 并且相比 Car 含量, Car/Chla 比值的估算精度更高, 叶片和冠层尺度其估算值与实测值的拟合决定系数  $R^2$  均大于 0.96, RMSE% 约为 5%, 小于 Car 含量的 11% 左右。

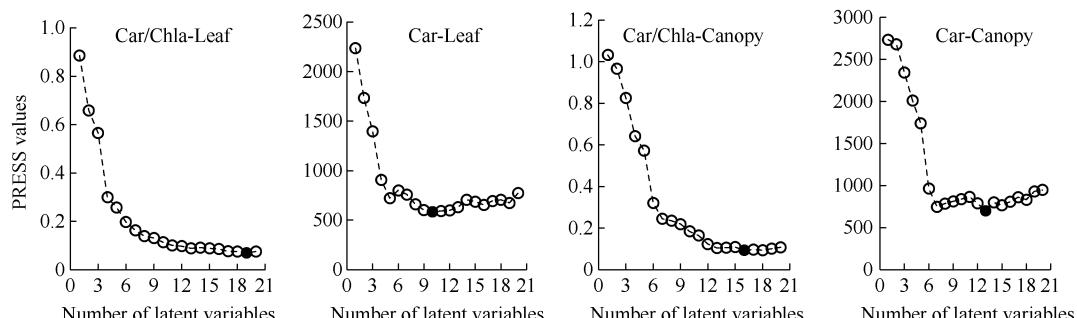
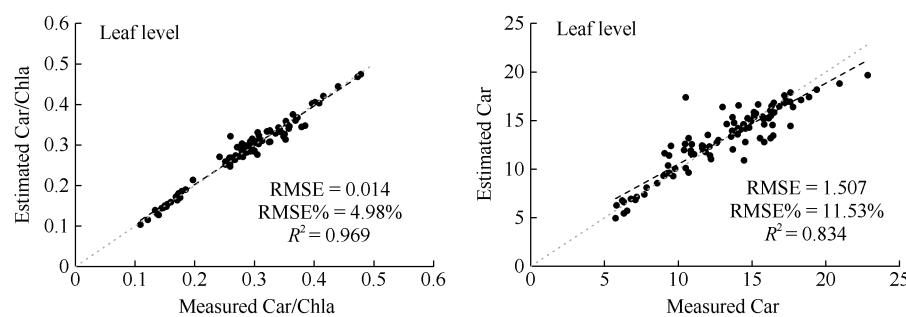


图 1 预测误差平方和(PRESS)与潜变量之间的变化关系

Fig. 1 Relationships between the number of latent variables and the predicted residual sums of squares (PRESS)



(图 2)

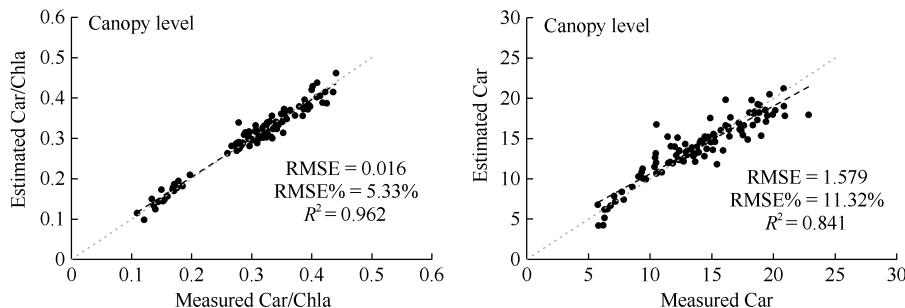


图2 基于建模样本的Car/Chla-PLSR和Car-PLSR估算模型的估算值与实测值之间的线性关系

Fig. 2 Measured vs. estimated Car/Chla ratio and Car for PLSR models using calibration dataset

#### 2.4 精度检验

进一步利用检验样本对基于 PRI 和 PLSR 的 Car/Chla 比值及 Car 含量估算模型进行精度验证。采用估算值与实测值之间线性拟合的决定系数  $R^2$ 、均方根误差 RMSE、RMSE% 以及估算值与实测值之间线性拟合的斜率( $a$ )和截距( $b$ )进行模型精度检验。决定系数  $R^2$  以及斜率和截距可反映估算值与实测值之间变化趋势的吻合程度, 当  $R^2$  越趋近 1, 斜率越接近 1, 截距越接近 0 时, 估算值和实测值

之间吻合越好; RMSE% 是 RMSE 值与实测平均值之间的百分比值, 它是无量纲值, 可用于单位不同的参数之间估算误差的比较, 直接体现模型估算误差。由表 4 可知, 叶片及冠层水平, 相比 Car 含量, Car/Chla 比值的光谱指数模型及 PLSR 模型均具有更好的精度结果, 并且对于 PLSR 方法, 叶片尺度和冠层尺度 Car/Chla 比值估算的精度接近, 对于 PRI, 叶片尺度光谱对 Car/Chla 比值估算的精度略优于冠层尺度。

表4 基于检验样本的Car/Chla比值及Car含量估算模型精度检验结果

Table 4 Cross-validation results for the Car/Chla and Car predictive models

尺度 Level	方法 Method	参数 Parameter	决定系数 $R^2$	均方根误差 RMSE	均方根误差 RMSE (%)	斜率 $a$	截距 $b$
叶片尺度 Leaf level	PRI	Car/Chla	0.69	0.05	15.8	0.66	0.09
		Carotenoid	0.44	3.57	24.9	0.37	7.71
	PLSR	Car/Chla	0.87	0.03	10.7	0.83	0.04
		Carotenoid	0.73	2.39	16.7	0.67	4.02
冠层尺度 Canopy level	PRI	Car/Chla	0.67	0.05	15.3	0.67	0.09
		Carotenoid	0.36	3.62	24.9	0.37	8.74
	PLSR	Car/Chla	0.84	0.03	10.1	0.84	0.05
		Carotenoid	0.74	2.19	14.9	0.72	3.87

基于检验样本得到的 Car/Chla 比值及 Car 含量估算值和实测值之间的吻合趋势见图 3。对比基于指数和基于 PLSR 方法的估算模型发现, 由 PLSR 模型得到的估算值与实测值之间拟合更好, 不论是 Car/Chla 比值还是 Car 含量, 利用 PLSR 方法得到的估算值都具有更大的斜率和更小的截距, 估算值与实测值更接近, 并且在叶片和冠层尺度 Car/Chla 比值的估算精度非常接近, 说明 PLSR 方法具有很好的稳定性。

#### 3 讨论

对多种光谱指数与 Car/Chla 比值及 Car 含量之间的相关分析表明, PRI 指数在叶片和冠层尺度均是表现最佳的植被指数。本研究进一步利用叶片辐射传输模型 PROSPECT-D 模型和冠层 SAILH 模型模拟了棉花叶片及冠层尺度的光谱反射率, 利用光谱模拟值分析了 PRI 对 Car/Chl 比值的估算能力, 如图 4 所示, 模拟结果也很好地证明了 PRI 与 Car/Chl

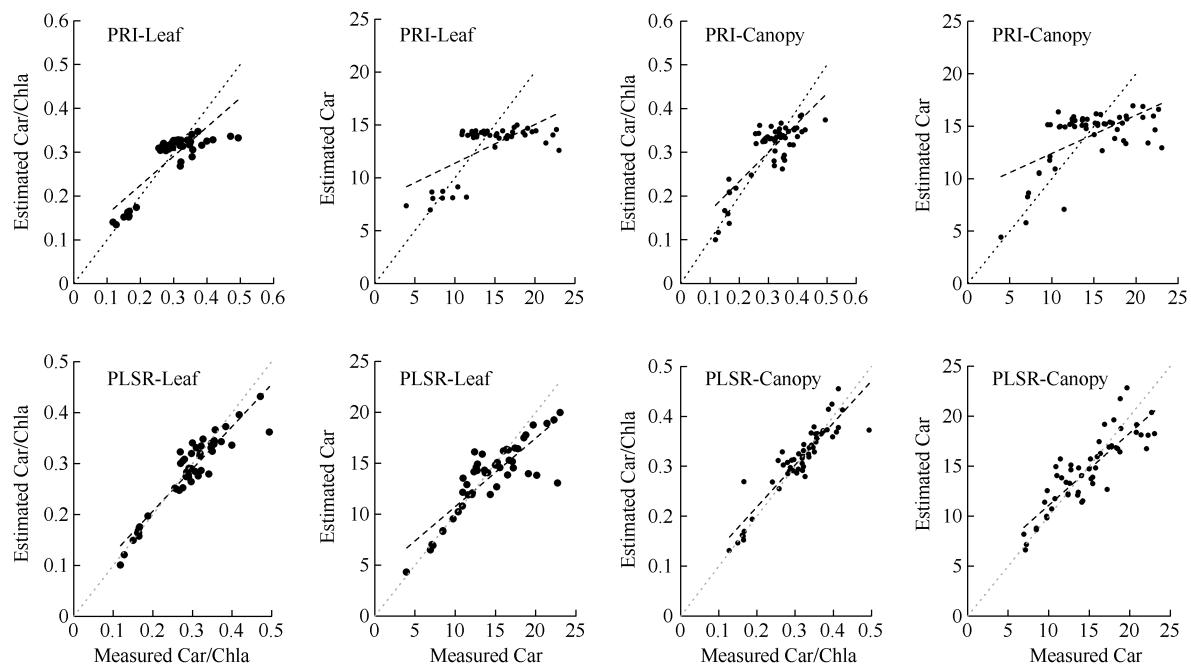


图 3 基于检验样本的 Car/Chla 比值及 Car 含量估算值与实测值之间的拟合关系

Fig. 3 Measured vs. estimated Car/Chla ratio and Car using validation dataset

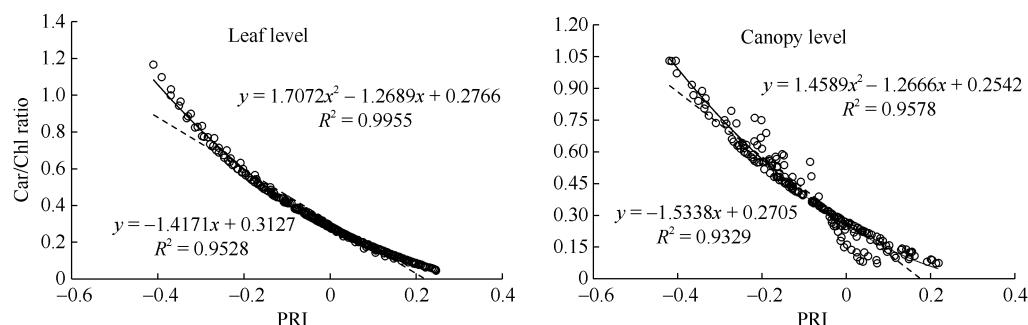


图 4 PROSPECT 和 SAILH 模型模拟的叶片及冠层 PRI 指数与 Car/Chl 之间的拟合关系

Fig. 4 Relationship of PROSPECT and SAILH simulated PRI with Car/Chl ratio

比值之间极显著线性及一元二次相关性。这一结论与 Garrity 等<sup>[23]</sup>对落叶林 Car/Chl 比值的监测结果一致, 该研究中落叶林模拟 PRI 值与 Car/Chl 比值之间的一元二次拟合关系的判定系数  $R^2=0.99$ , 与本研究接近。PRI 是 531 nm 和 570 nm 处光谱反射率的归一化比值, 最早用于叶黄素变化监测, 但叶绿素和类胡萝卜素在 531 nm 处均有吸收特征, 570 nm 处只叶绿素有吸收特征, 因此 PRI 与 Car/Chl 比值强烈相关<sup>[9,36]</sup>, 很多研究都证实 PRI 是时间上从天尺度<sup>[19,27]</sup>到月尺度<sup>[37-38]</sup>和在叶片<sup>[21,39-40]</sup>、冠层<sup>[19,41-42]</sup>以及生态尺度<sup>[43-44]</sup>监测光合作用的有效指数。本研究的结论也进一步证实了 PRI 在叶片尺度和冠层尺度, 对干旱区作物 Car/Chla 比值估算的精度接近, 凸显了该指数在不同光谱尺度的巨大应用价值。

本研究结果证明不论是基于光谱指数方法还是基于偏最小二乘 PLSR 方法, 相比单一叶绿素或类胡萝卜素, 光谱指数对 Car/Chl 比值的估算更为有效的结论一致。基于 PRI 和 PLSR 方法的估算模型均能实现 Car/Chla 比值和 Car 含量的估算, 前者在叶片和冠层尺度的决定系数  $R^2$  分别为 0.69 和 0.67, 而后者为 0.87 和 0.84, 可见偏最小二乘法对 Car/Chla 比值和 Car 含量的估算精度更好。但 PRI 是由 2 个与叶绿素含量和类胡萝卜素含量相关的敏感波段反射率值构成, PLSR 方法的输入变量则是 400~1000 nm 波段范围内的所有光谱反射率, 对于波段分布有限且包含多种指数波段的多光谱卫星,

如 Sentinel-2 卫星数据, 通过构建光谱指数进行 Car/Chla 比值监测较为适用, 而当输入变量较多时, 如光谱分辨率较高的高光谱数据, 则可采用 PLSR 方法, PLSR 包含的主成分分析计算, 能有效降低输入变量维度, 剔除冗余变量。

## 4 结论

(1) 对比各类光谱指数, 光化学指数(PRI)与 Car/Chla 比值及 Car 含量具有最显著相关性, 基于 PRI 指数的线性和一元二次非线性拟合模型对叶片和冠层尺度的 Car/Chla 比值和 Car 含量的估算具有最大决定系数; (2) PRI 和偏最小二乘回归(PLSR)对 Car/Chla 比值的估算精度要优于对 Car 含量的估算, Car/Chla 比值可作为棉花生理生态胁迫(如高温胁迫、养分胁迫和水分胁迫以及病虫害)遥感监测的有效参考指标; (3) PRI 和 PLSR 是 Car/Chla 比值和 Car 含量遥感监测的有效方法, 两者在叶片及冠层尺度对 Car/Chla 比值的估算精度接近, 对于叶片及冠层高光谱数据, PLSR 模型估算能力略高于 PRI 模型。进一步研究, 期望利用 Sentinel-2 卫星数据在区域尺度上验证本研究结论, 并探讨 Car/Chla 比值用于棉花水分、养分胁迫及叶片衰老状况监测的特点。

## References

- [1] Demmig-Adams B. Survey of thermal energy dissipation and pigment composition in sun and shade leaves. *Plant Cell Physiol*, 1998, 39: 474–482.
- [2] Zarco-Tejada P J, Miller J R, Harron J, Hu B, Noland T L, Goel N. Needle chlorophyll content estimation through model inversion using hyperspectral data from boreal conifer forest canopies. *Remote Sens Environ*, 2004, 89: 189–199.
- [3] Zhang Y, Chen J M, Miller J, Noland T. Needle chlorophyll content retrieval from airborne hyperspectral imagery. *Remote Sens Environ*, 2008, 112: 3234–3247.
- [4] Hunt E R, Doraiswamy P C, McMurtrey J E, Daughtry C S T, Perry E M, Akhmedov B. A visible band index for remote sensing leaf chlorophyll content at the canopy scale. *Int J Appl Earth OBS*, 2013, 21: 103–112.
- [5] Zarco-Tejada P J, Hornero A, Beck P S A, Kattenborn T, Kempeeneers P, Hernández-Clemente R. Chlorophyll content estimation in an open-canopy conifer forest with Sentinel-2A and hyperspectral imagery in the context of forest decline. *Remote Sens Environ*, 2019, 223: 320–335.
- [6] Gitelson A A, Chivkunova O B, Merzlyak M N. Non-destructive estimation of anthocyanins and chlorophylls in anthocyanic leaves. *Am J Bot*, 2009, 96: 1861–1868.
- [7] Young A, Britton G. Carotenoids and stress. In: Alscher R G Jr, Cumming J R, eds. *Stress Response in Plants: Adaptation and Acclimation Mechanisms*. New York: Wiley-Liss, 1990. pp 87–112.
- [8] Blackburn G A. Quantifying chlorophylls and carotenoids at leaf and canopy scales: an evaluation of some hyperspectral approaches. *Remote Sens Environ*, 1998, 66: 273–285.
- [9] Sims D A, Gamon J A. Relationships between leaf pigment content and spectral reflectance across a wide range of species, leaf structures and developmental stages. *Remote Sens Environ*, 2002, 81: 337–354.
- [10] Féret J B, François C, Gitelson A, Gregory P A, Barry K M, Panigada C, Richardson A D, Jacquemoud S. Optimizing spectral indices and chemometric analysis of leaf chemical properties using radiative transfer modeling. *Remote Sens Environ*, 2011, 115: 2742–2750.
- [11] Hendry G A F, Houghton J D, Brown S B. The degradation of chlorophyll: a biological enigma. *New Phytol*, 1987, 107: 255–302.
- [12] Biswall B. Carotenoid catabolism during leaf senescence and its control by light. *J Photochem Photobiol B: Biol*, 1995, 30: 3–14.
- [13] Buchanan-Wollaston V. The molecular biology of leaf senescence. *J Exp Bot*, 1998, 49: 181–199.
- [14] Gitelson A A, Merzlyak M N. Spectral reflectance changes associate with autumn senescence of *Aesculus hippocastanum* L. and *Acer platanoides* L. leaves. Spectral features and relation to chlorophyll estimation. *J Plant Physiol*, 1994, 143: 286–292.
- [15] Gitelson A A, Merzlyak M N. Quantitative estimation of chlorophyll-a using reflectance spectra: experiments with autumn chestnut and maple leaves. *J Photochem Photobiol B: Biol*, 1994, 22: 247–252.
- [16] Merzlyak M N, Gitelson A A, Chivkunova O B, Rakitin V Y. Non-destructive optical detection of pigment changes during leaf senescence and fruit ripening. *Physiol Plant*, 1999, 106: 135–141.
- [17] Sanger J E. Quantitative investigations of leaf pigments from their inception in buds through autumn coloration to decomposition in falling leaves. *Ecology*, 1972, 52: 1075–1089.
- [18] Peñuelas J, Field C, Griffin K, Gamon J. Assessing community type, plant biomass, pigment composition and photosynthetic efficiency of aquatic vegetation from spectral reflectance. *Remote Sens Environ*, 1993, 46: 1–25.
- [19] Peñuelas J, Gamon J, Freedman A, Merino J, Field C. Reflectance indices associated with physiological changes in nitrogen and water limited sunflower leaves. *Remote Sens Environ*, 1994, 48: 135–146.
- [20] 周贤峰. 色素含量比值进行作物氮素营养状况诊断方法研究. 中国科学院大学博士学位论文, 北京, 2017.  
Zhou X F. Research on the Methods of Crop Nitrogen Status Diagnosis Based on Carotenoid and Chlorophyll Ratio Values. PhD Dissertation of University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, China, 2017 (in Chinese with English abstract).
- [21] Peñuelas J, Baret F, Filella I. Semi-empirical indices to assess carotenoids/chlorophyll a ratio from leaf spectral reflectance. *Photosynthetica*, 1995, 31: 221–230.
- [22] Nakaji T, Oguma H, Fujinuma Y. Seasonal changes in the relationship between photochemical reflectance index and photosynthetic light use efficiency of Japanese larch needles. *Int J Remote Sens*, 2006, 27: 493–509.
- [23] Garrity S R, Eitel J U H, Vierling L A. Disentangling the rela-

- tionships between plant pigments and the photochemical reflectance index reveals a new approach for remote estimation of carotenoid content. *Remote Sens Environ*, 2011, 115: 628–635.
- [24] Hernández-Clemente R, Navarro-Cerrillo R M, Zarco-Tejada P J. Carotenoid content estimation in a heterogeneous conifer forest using narrow-band indices and PROSPECT + DART simulations. *Remote Sens Environ*, 2012, 127: 298–315.
- [25] Zhou X F, Huang W J, Zhang J C, Kong W P, Casa R, Huang Y B. A novel combined spectral index for estimating the ratio of carotenoid to chlorophyll content to monitor crop physiological and phonological status. *Int J Appl Earth OBS*, 2019, 76: 128–142.
- [26] 蒋德安, 朱诚. 植物生理学实验指导. 成都: 成都科技大学出版社, 1999. pp 20–23.
- Jiang D A, Zhu C. Guide for Plant Physiology Experiment. Chengdu: Chengdu University of Science and Technology Press, 1999. pp 20–23 (in Chinese).
- [27] Gamon J A, Peñuelas J, Field C B. A narrow-waveband spectral index that tracks diurnal changes in photosynthetic efficiency. *Remote Sens Environ*, 1992, 41: 35–44.
- [28] Yi Q X, Jiapaer G L, Chen J M, Bao A M, Wang F M. Different units of measurement of carotenoids estimation in cotton using hyperspectral indices and partial least square regression. *ISPRS J Photogramm*, 2014, 91: 72–74.
- [29] 依尔夏提·阿不来提, 买买提·沙吾提, 白灯莎·买买提艾力, 安申群, 马春玥. 基于随机森林法的棉花叶片叶绿素含量估算. 作物学报, 2019, 45: 81–90.
- Ershat A, Mamat S, Baidengsha M, An S Q, Ma C Y. Estimation of leaf chlorophyll content in cotton based on the random forest approach. *Acta Agron Sin*, 2019, 45: 81–90 (in Chinese with English abstract).
- [30] Geladi P, Kowalski B R. Partial least-squares regression: a tutorial. *Analy Chimica Acta*, 1986, 185: 1–17.
- [31] Wold S, Sjöström M, Eriksson L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics. *Chemometr Intell Lab*, 2001, 58: 109–130.
- [32] Shao J. Linear model selection by cross-validation. *J Am Stat Assoc*, 1993, 88: 486–494.
- [33] Chen S, Hong X, Harris C J, Sharkey P M. Sparse modeling using orthogonal forward regression with PRESS statistic and regularization. *IEEE Trans Syst Man Cybern B Cybern*, 2004, 34: 898–911.
- [34] Féret J B, Gitelson A, Noble S D, Jacquemoud S. PROSPECT-D: towards modeling leaf optical properties through a complete lifecycle. *Remote Sens Environ*, 2017, 193: 204–215.
- [35] Kuusk A. The angular distribution of reflectance and vegetation indices in barley and clover canopies. *Remote Sens Environ*, 1991, 37: 143–151.
- [36] Filella I, Porcar-Castell A, Munné-Bosch S, Back J, Garbulsky M F, Peñuelas J. PRI assessment of long-term changes in carotenoids/chlorophyll ratio and short-term changes in de-epoxidation state of the xanthophyll cycle. *Int J Remote Sens*, 2009, 30: 4443–4455.
- [37] Styrinski C D, Gamon J A, Oechel W C. Seasonal patterns of reflectance indices, carotenoid pigments and photosynthesis of evergreen chaparral species. *Oecologia*, 2002, 131: 366–374.
- [38] Garbulsky M F, Peñuelas J, Papale D, Filella I. Remote estimation of carbon dioxide uptake of terrestrial ecosystems. *Global Change Biol*, 2008, 14: 2860–2867.
- [39] Gamon J A, Serrano L, Surfus J S. The photochemical reflectance index: an optical indicator of photosynthesis radiation use efficiency across species, functional types and nutrient levels. *Oecologia*, 1997, 112: 492–501.
- [40] Richardson A D, Berlyn G P. Spectral reflectance and photosynthetic properties of *Betula papyrifera* (Betulaceae) leaves along an elevational gradient on Mt. Mansfield, Vermont, USA. *Am J Bot*, 2002, 89: 88–94.
- [41] Filella I, Amaro T, Araus J L, Peñuelas J. Relationship between photosynthetic radiation-use efficiency of barley canopies and the photochemical reflectance index (PRI). *Physiol Plant*, 1996, 96: 211–216.
- [42] Trotter G M, Whitehead D, Pinkney E J. The photochemical reflectance index as a measure of photosynthetic light use efficiency for plants with varying foliar nitrogen contents. *Int J Remote Sens*, 2002, 6: 1207–1212.
- [43] Nichol C J, Huemmrich K F, Black T A, Jarvis P G, Walther C L, Grace J, Hall F G. Remote sensing of photosynthetic-light-use efficiency of boreal forest. *Agric For Meteorol*, 2000, 101: 131–142.
- [44] Peñuelas J, Inoue Y. Reflectance assessment of canopy CO<sub>2</sub> uptake. *Int J Remote Sens*, 2000, 21: 3353–3356.