

基于LBFSGS加速多层感知网络的高光谱遥感非光学水质参数反演

何汝艳¹, 吕子俊¹, 贾森^{1,2,3}

1. 深圳大学 计算机与软件学院, 深圳 518060;
2. 自然资源部大湾区地理环境监测重点实验室, 深圳 518060;
3. 粤港澳智慧城市联合实验室, 深圳 518060

摘要: 高光谱遥感在水质监测方面具有巨大潜力, 目前多集中在光学特性水质参数定量反演研究, 而对同样能够反映人类活动对水体影响的非光学水质参数的研究相对较少。基于此, 本文选择广东省某城中村河流作为研究区, 开展了无人机高光谱遥感同步水体样本数据采集实验, 提出了一种基于LBFSGS加速多层感知网络模型(LBFSGS-MLP)对城市河流的非光学特性水质参数进行反演研究。首先, 通过Pearson相关分析筛选出总磷、总氮、氨氮3种非光学特性水质参数的相关波段作为模型输入; 然后, 在探究不同网络层数和优化算法对模型性能影响的基础上, 基于LBFSGS优化算法对多层感知网络进行加速; 最后, 利用构建的LBFSGS-MLP模型应用于研究区水体的非光学特性水质参数浓度空间分析。总体而言, 在总磷、总氮和氨氮3种非光学特性水质参数浓度的训练数据集和测试数据集上, 提出的LBFSGS-MLP模型反演精度明显优于随机森林、CatBoost和XGBoost模型, 尤其在总氮和氨氮浓度的反演上; 模型的决定系数(R^2)分别为0.71、0.82和0.72, 平均绝对误差(MAE)分别为0.0118 mg/L、0.0394 mg/L和0.0601 mg/L; 研究区内总磷浓度主要分布在0.1—0.3 mg/L之间, 总氮浓度在2—5 mg/L之间, 氨氮浓度在0.1—0.4 mg/L之间, 与调查结果一致。通过本文的研究, 验证了多层感知网络在非光学特性水质参数反演的有效性和可行性, 可为更全面地评估城市河流水体状况提供理论依据和参考。

关键词: 非光学水质参数, 机器学习, 高光谱遥感, 浓度反演

中图分类号: P2

引用格式: 何汝艳, 吕子俊, 贾森. 2024. 基于LBFSGS加速多层感知网络的高光谱遥感非光学水质参数反演. 遥感学报, 28(11): 2970-2983

He R Y, Lyu Z J and Jia S. 2024. Inversion of non-optical water quality parameters of hyperspectral remote sensing based on LBFSGS-accelerated multi-layer perceptron network. National Remote Sensing Bulletin, 28(11): 2970-2983 [DOI: 10.11834/jrs.20243509]

1 引言

近年来, 面对资源约束、环境污染、生态退化等问题, 中国大力开展生态文明建设, 坚持可持续发展, 采用多种手段解决环境问题。水资源保护作为生态文明建设的重要组成部分, 如何合理有效地做好水资源保护被广泛探讨, 在水污染防治行动计划中, 围绕改善水质环境这一主线任务(吴舜泽等, 2015), 对控制污染物排放、水资

源保护、强化科技支撑等十个方面制定了一系列方案。其中, 水质监测是水生态和水环境管理的一个重要环节, 几乎所有的水污染防治、水资源保护的效果评估都要依靠水质监测结果。

在传统的水质监测流程中, 普遍采取的方法是由水质监测站进行水质采样(张乐等, 2023), 该方法存在时间周期长、资源消耗多、无法从全局反映水体综合情况等问题(He等, 2021)。利用遥感技术与人工智能技术相结合的水质监测方式,

收稿日期: 2023-12-07; 预印本: 2024-04-17

基金项目: 国家自然科学基金(编号: 62271327); 广东省高等学校科技创新项目(编号: 2023KCXTD029); 广东省基础与应用基础研究基金(编号: 2022A1515011290); 深圳市科技计划(编号: RCJC20221008092731042, JCYJ20220818100206015, KQTD20200909113951005); 深圳大学科研团队培育项目(编号: 2023JCT002)

第一作者简介: 何汝艳, 研究方向为高光谱遥感图像水体参数反演与监测。E-mail: luckhry106@163.com

通信作者简介: 贾森, 研究方向为人工智能和遥感信息处理。E-mail: senjia@szu.edu.cn

有着采样便捷、采样成本低、分析范围广、分析速度快等优势（张兵等，2021；王思梦和秦伯强，2023）。因此，充分利用人工智能与遥感技术的优势，可以精确、快速、简便有效地获取水体监测结果，对于建立健全水质监测机制具有极其重要的现实意义。

目前，已有很多学者利用卫星影像进行了水质参数的反演研究（郑著彬等，2022；刘瑶等，2022），如利用高分一号、北京二号等卫星影像与采样点水体数据建立统计回归模型对水质参数进行估算（张方方等，2023；鲁婉婷等，2023），或采用哨兵2号、Landsat等卫星数据构建机器学习反演模型（刘轩等，2021；张宏建等，2022；王世瑞等，2023），取得了较好的估算精度，成功分析了水质在时间和空间上的变化，为深入理解水体环境的动态变化提供了重要信息。虽然基于卫星影像在水质监测方面取得了较好的成果，但主要是针对大型水体如湖泊、水库和入海口等的水质监测研究，此外，监测周期高度依赖于卫星过境时间且可用光谱特征有限，对于中小尺度、分布比较破碎的河流水质精细监测任务，还存在空间分辨率低、监测时间不灵活、光谱波段少等问题。

高光谱遥感技术具有光谱分辨率高且图谱合一的独特优势（童庆禧等，2016），在水质监测领域具有巨大潜力。利用无人机搭载高光谱成像仪进行高光谱图像采集，由于其飞行于低空，可有效提高图像的空间分辨率，并通过精度更高的高光谱成像仪获取更为丰富的光谱信息，从而有效提高水质参数反演的准确性。此外，在使用无人机进行数据采集时，通常不受大气折射和云层影响（黄昕晰等，2020；Doña等，2015；Zaman等，2014；Michaelsen和Meidow，2014），提高了数据获取的可靠性，非常有助于中小尺度河流水质的精细监测研究（刘彦君等，2019；黄昕晰等，2020；Niu等，2021）。

然而，基于无人机高光谱的水质参数反演研究主要集中于叶绿素a、悬浮物等具有明显光学特性的水质参数（吴欢欢等，2021），总磷、总氮、氨氮等作为能够反映生活污水排放、化肥、农药使用等人类活动对水体的影响的重要非光学特性水质参数，其研究相对较少。由于总磷、总氮、氨氮这类水质参数不具备较明显的光学特性，因

此基于光学原理的高光谱水质分析方法难以适用于这类水质参数的监测。针对这一问题，目前国内外学者多依靠机器学习算法实现对非光学水质参数的定量反演研究（周博天等，2022），如基于改进XGBoost算法对河流中总磷、总氮和氨氮等参数进行反演（Chen等，2021）、采用随机森林算法对总氮浓度进行估算（赵慈等，2021）、利用CatBoost模型反演氨氮等水质参数浓度（Chen等，2023），均取得了较好的反演精度，但以上研究算法对于处理高维数据的能力是较为有限的。神经网络算法通过多层次的特征学习能够逐步提取高维数据的抽象表示，更好地捕捉数据的内在结构，已在机器学习和计算机视觉等领域得到了广泛的研究与应用。基于此，本研究充分利用神经网络算法在处理高维非线性复杂数据的优势，探索其在处理基于无人机高光谱图像的河流非光学特性水质参数定量反演任务上的表现性能。

本研究以广东省某城中村河流作为研究区，利用无人机获取高光谱图像，设计了一种基于LBFGS加速多层感知网络（LBFGS-MLP）对研究区水体的总磷、总氮、氨氮浓度进行反演，并与随机森林（RF）、CatBoost和XGBoost等3种机器学习算法进行精度对比，最后将提出的LBFGS-MLP模型应用于研究区水体总磷、总氮、氨氮浓度的空间分布图绘制，综合判断研究区的水质情况，验证了多层感知网络在非光学水质参数反演的可行性，为城市水环境监测和水质管理提供了理论支持。

2 研究区及数据来源

2.1 研究区概况

本次实验的研究区为广东省某城中村河流，如图1所示。由于工业发展、人口增长、环保滞后等问题的影响，该河流水质曾受到严重污染。近年来，随着生态保护政策的落实，该条河流的水质已有明显改善，流域生态环境稳步向好。本实验测量河段位于城中村区域，人口较为密集，附近道路人流量与车流量较大，大多数建筑为居民自建楼。

2.2 数据采集

本实验数据采集时间为2019年11月18日

10:00—15:30左右,晴天、微风、河流水面比较平稳,近同步采集无人机高光谱图像和水体样本,其数据采集的示意图如图2所示。

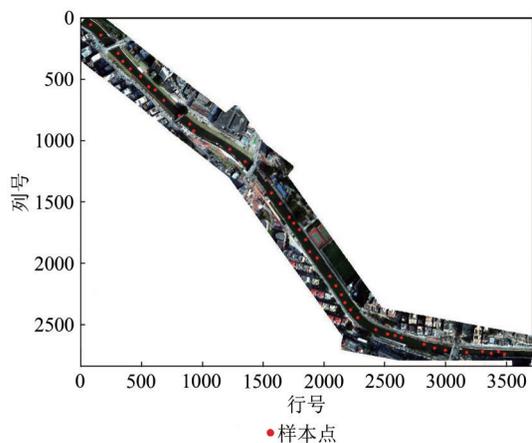
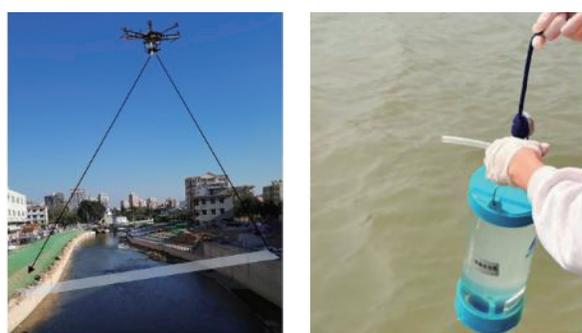


图1 研究区概况及采样点分布

Fig.1 Overview of the study area and distribution of the sampling points



(a) 高光谱图像
(a) Hyperspectral image by UAV
(b) 水体样本
(b) Water samples

图2 数据采集示意图

Fig.2 Diagram of data collection

无人机高光谱图像采集方案如下:本次实验利用大疆 M600PRO 无人机搭载 ZK-VNIR-FPG480 轻小型高光谱成像仪采集研究区高光谱图像。该型号无人机具有足够的飞行稳定性和载荷能力。高光谱成像仪光谱范围为 400—1000 nm,光谱分辨率 2.8 nm,光谱通道数 270 个,空间分辨率 0.25 m,视场角 55.6°,飞行高度 120 m,采用外置推扫式连续成像方式。在高光谱图像采集时,由于研究区河道整体呈“S”形,将采集航带划分为 3 个。

水体样本采集及测定如下:本次实验近同步加密采集 40 个水体样本,采样点分布如图 1 所示。每个样本点采集水样 1 L 左右,采集的样本保存在玻璃瓶中,用保温箱保存;实验结束后立即送往

实验室进行分析,测定水体中总磷(TP)、总氮(TN)、氨氮(NH₃-N) 3 种非光学水质参数浓度。参照《水质 总磷的测定 钼酸铵分光光度法》(GB/T 11893-1989)标准,总磷浓度测定采用钼酸铵分光光度法;参照《水质 总氮的测定 碱性过硫酸钾消解紫外分光光度法》(HJ 636-2012)标准,总氮浓度测定采用碱性过硫酸钾消解紫外分光光度法;参照《水质 氨氮的测定 纳氏试剂分光光度法》(HJ 535-2009)标准,氨氮浓度测定采用纳氏试剂分光光度法。综上,研究区水体样本的非光学特性水质参数浓度统计值如表 1 所示;对应水体样本点位置的无人机高光谱反射率曲线如图 3 所示。

表1 研究区水体样本的水质参数浓度统计表

Table 1 Statistical table of concentrations of water quality parameters in water samples from the study area

水质参数	最小值	最大值	均值	标准差
总磷(TP)	0.2179	0.3021	0.2543	0.0206
总氮(TN)	4.5271	5.0418	4.7920	0.1157
氨氮(NH ₃ -N)	0.0307	0.6823	0.2930	0.1606

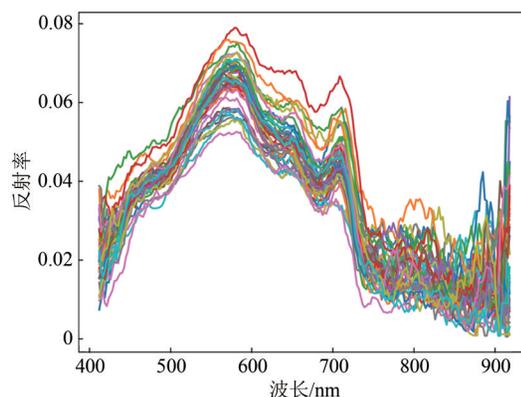


图3 水体样本点的无人机高光谱反射率曲线
Fig.3 Reflectance curve of unmanned aerial vehicle hyperspectral image of water sampling points

2.3 数据预处理

在本实验中,高光谱图像的数据预处理主要包括:快视图生成、辐射校正、几何校正、影像拼接、水体提取。其中,高光谱快视图生成是直接抽取原始数据中的红、绿、蓝 3 个波段进行快速拼接,得到一张高光谱成像仪从数据采集开始到结束全过程数据的全局图,用于检查数据质量和覆盖的测区范围。辐射校正采用标准反射率灰布

的定标参数, 将获取的水体DN值转换为高光谱反射率值。几何校正可以减弱成像时因各种原因造成的地理位置、图像形状的改变, 在反射率数据上增加较为准确的地理信息。影像拼接是基于地理坐标信息将3条航带所获取的高光谱图像进行拼接, 以便于后续数据分析和水质参数反演。水体提取是通过手动裁剪出河流的主干部分再利用NDWI指数(波段49和158分别对应绿色波段和近红外波段)进行水体提取, 设置阈值为0.33, 有效保证了水体提取的准确性。

3 研究方法

3.1 LBFGS-MLP算法

多层感知机MLP(Multi-layer Perceptron)算法是一种神经网络算法, 它在整体结构上呈现出前向结构, 层结构包括有: 输入层、输出层、隐藏层(樊海玮等, 2020), 相邻层之间的连接方式为全连接(夏国恩等, 2020)。该算法将多个输入数据集映射到单一的输出数据集上, 可用于处理非线性数据(张毅锋等, 2018)。在MLP训练过

程中, 使用了反向传播算法(LeCun等, 2015)。反向传播算法通过计算每个权重对预测误差的影响, 并据此调整权重, 从而实现信息处理。该处理过程涉及到在不同维度之间的连续映射和多次对非线性函数的拟合。

基于神经网络算法在处理高维非线性复杂数据的优势, 本研究构建了基于LBFGS优化算法的MLP网络结构(LBFGS-MLP)用于无人机高光谱遥感的城市河流非光学特性水质参数反演任务。在模型构建时, 由于不同隐藏层数量和优化算法选择对模型性能的影响相对较大, 因此, 在构建非光学水质参数反演模型时首先探究不同网络层数和不同优化算法对模型性能的影响。

神经网络的层数会直接影响模型的表达能力, 通常更深的网络能够学到更复杂的特征和关系, 但也可能会导致模型计算复杂和过拟合问题。根据本研究中非光学水质参数反演数据集, 分别设置了1、3、5、7、9层的MLP网络结构, 并从模型拟合时间和反演精度两个方面进行了评估, 如图4所示。随着网络层数的增加, 模型的拟合时间变长、均方根误差增大。

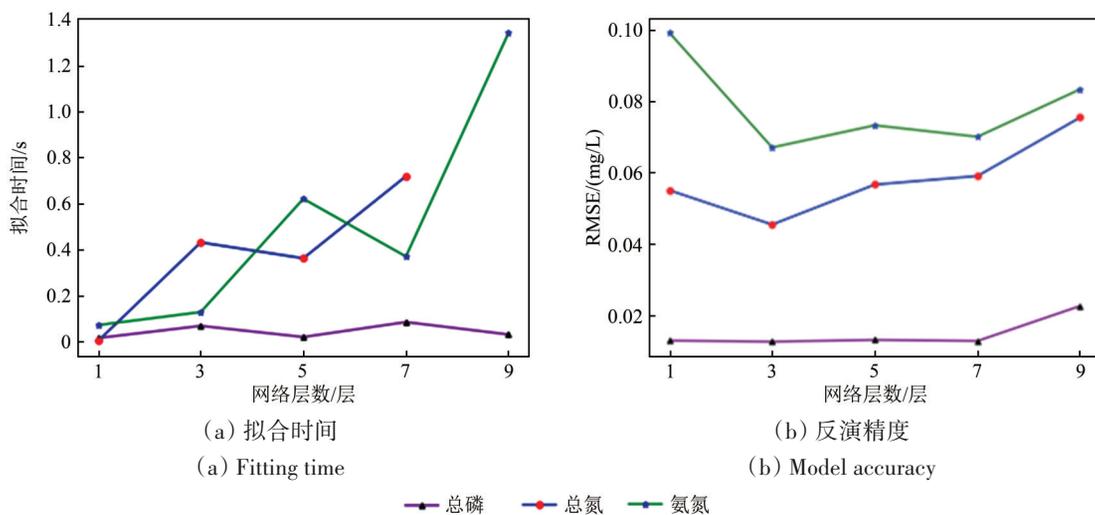


图4 不同网络层数对模型性能的影响

Fig.4 Impact of different network depths on model performance

优化算法在神经网络模型中起着重要作用, 其主要任务是通过调整模型参数使损失函数达到最小值, 从而提高模型的性能。根据不同的任务、数据集和网络结构, 选择适合的优化算法并调整其超参数是模型训练中的一个重要环节。因此, 本文探究LBFGS(Limited-memory Broyden-Fletcher-

Goldfarb-Shanno)(Liu和Nocedal, 1989)、Adam(Adaptive Moment Estimation)(Kingma和Ba, 2015)、和SGD(Stochastic Gradient Descent)(Robbins和Monro, 1951)3种优化算法对模型性能的影响, 如图5所示。其中, LBFGS优化算法在模型收敛速度和泛化性能方面具有较好的效果。

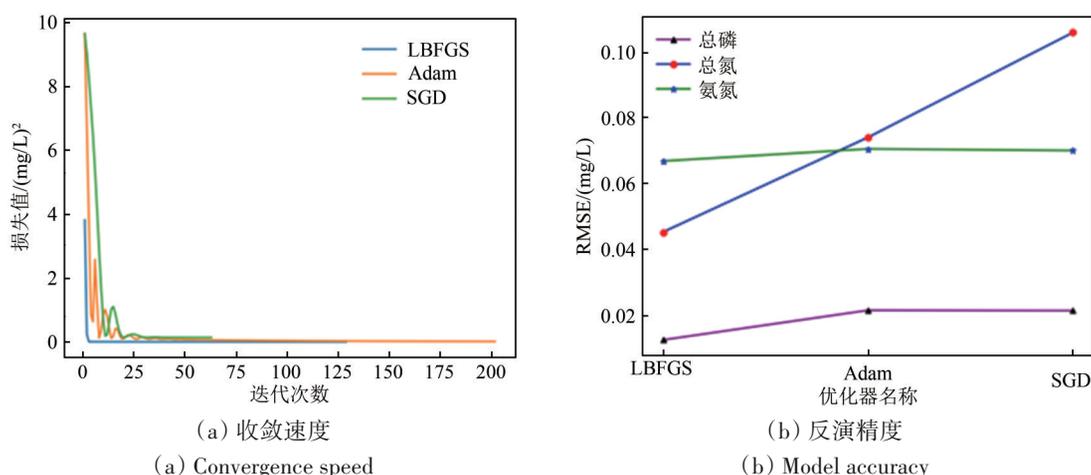


图5 不同优化算法对模型性能的影响

Fig.5 Impact of different optimization algorithms on model performance

综上, 基于不同网络层数和不同优化算法对神经网络模型的影响探究, 结合非光学水质参数的样本数据集, 本研究构建了一种3个隐藏层的MLP网络结构, 并基于在小型数据集上表现良好

的LBFGS优化算法对多层感知网络进行加速, 构建的网络模型简称为LBFGS-MLP (图6), 数据集以3:1的比例划分为训练集与测试集。

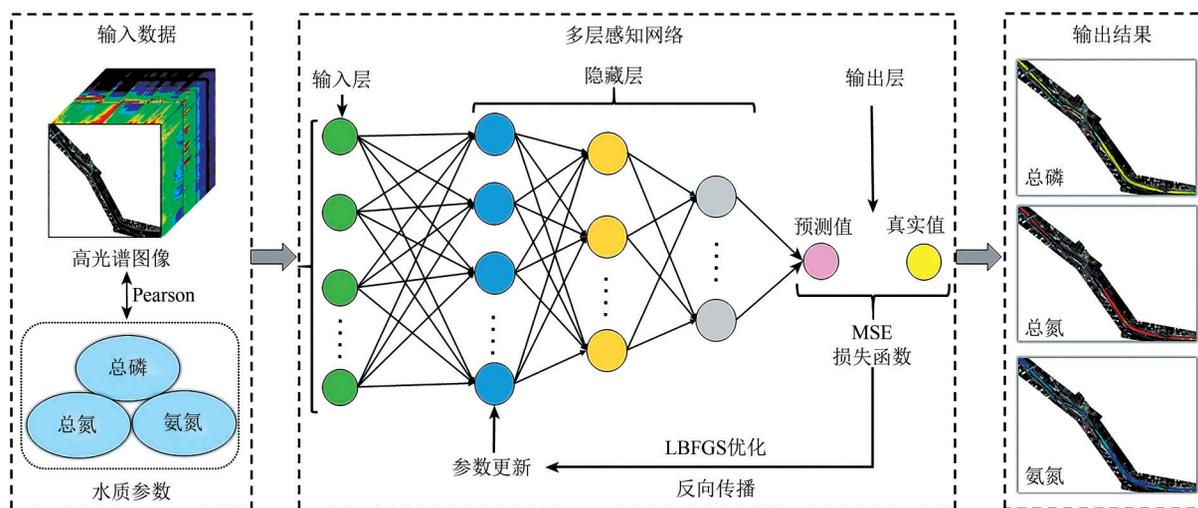


图6 LBFGS-MLP网络模型框架

Fig.6 The framework of LBFGS-MLP model

该模型的输入为通过 Pearson 相关分析筛选的高光谱特征波段和非光学水质参数值, 输入数据通过3个隐藏层, 以MSE为损失函数来衡量网络性能, 并基于LBFGS优化算法对网络进行加速, 即利用之前多次迭代的信息来构造一个近似的Hessian矩阵的逆矩阵并使用此矩阵来更新搜索方向, 其优点是保持了拟牛顿法的准确性且比其他优化算法收敛速度快, 最后输出3种非光学水质参数浓度的空间分布。

3.2 对比算法介绍

本研究选择了机器学习中具有代表性的随机森林 (RF) 算法、CatBoost算法和XGBoost算法作为对比模型进行精度比较。

(1) RF使用多个决策树对样本进行特征提取, 具有准确度高以及对数据误差和缺失等问题有一定容忍性等优势 (方匡南等, 2011; 杨传训等, 2023)。

(2) CatBoost是基于梯度提升树的算法, 具有

较好的处理类别型特征能力，其对超参数选择相对不敏感且具有较强的稳健性（Dorogush等，2018；马晓君等，2020；杨怀珍等，2023）。

(3) XGBoost是基于梯度提升树的算法，在数据处理方面可以自动处理混合了类别型与数值型的数据，有效提高了数据处理效率（Chen和Guestrin，2016）。

3.3 模型参数设置

(1) 总磷浓度反演模型。在总磷浓度反演模型构建时，LBFGS-MLP算法建立了（50，50，50）的3层网络，正则化项设置为0.0001。RF算法决策树个数为10，树的最大深度为3。CatBoost算法中，建立树的最大数量设置为100，树的深度设置为4，学习率设置为0.09，L2正则化项系数设置为1。XGBoost算法中，学习器数量设置为180，学习器中树的最大深度设置为8，学习率设置为0.8，L1正则化系数设置为0.04，L2正则化系数设置为0，叶子节点最小权重和设置为5。

(2) 总氮浓度反演模型。在总氮浓度反演模型构建时，LBFGS-MLP算法建立了（64，32，16）的3层网络，正则化项设置为0.001。RF算法决策树个数为90，树的最大深度为8。CatBoost算法中，建立树的最大数量设置为100，树的深度设置为2，学习率设置为0.07，L2正则化项系数设置为9。XGBoost算法中，学习器数量设置为180，学习器中树的最大深度设置为2，学习率设置为0.2，L1正则化系数设置为0，L2正则化系数设置为0.1，叶子节点最小权重和设置为1。

(3) 氨氮浓度反演模型。在氨氮浓度反演模型构建时，LBFGS-MLP算法建立了（50，50，50）的3层网络，正则化项设置为0.0001。RF算法决策树个数为30，树的最大深度为9。CatBoost算法中，建立树的最大数量设置为100，树的深度设置为2，学习率设置为0.08，L2正则化项系数设置为1。XGBoost算法中，学习器数量设置为25，学习器中树的最大深度设置为8，学习率设置为0.1，L1正则化系数设置为0.05，L2正则化系数设置为0.1，叶子节点最小权重和设置为5。

3.4 精度评价

本研究采用决定系数（ R^2 ）、均方根误差（RMSE）以及平均绝对误差（MAE）3个指标对非光学特性水质参数反演模型精度进行评价分析。

其中， R^2 为决定系数，可以反映反演模型对数据的解释能力；RMSE为均方根误差，可以反映样本的真实值与预测值间的误差，以此判断模型的性能；MAE为平均绝对误差，使用平均绝对误差，可以避免误差相互抵消的问题。其计算公式如下：

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

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

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (3)$$

式中， y_i 为水质参数真实值， \hat{y}_i 为水质参数预测值， \bar{y} 为水质参数真实值的平均值， n 为样本个数。

4 结果与分析

4.1 特征波段选择

特征波段选择是找到与水质参数浓度相关性较高的光谱波段，然后利用筛选出的特征波段进行反演模型的构建。其优势是在保留了高光谱图像主要特征的同时，简化了构建模型时的计算量，节省了生成模型的时间。

本研究使用Pearson相关性分析（式（4））作为特征波段选择方法，去除噪声较大的波段后共保留216个波段进行分析。通过Pearson相关性分析获得总磷、总氮和氨氮3个水质参数的模型输入波段，如图7所示。在700—800 nm波段范围内，总磷的Pearson相关系数在0.5—0.8之间；总氮在450—500 nm和600—700 nm之间的相关系数较高，其值在0.7—0.85之间；与氨氮相关系数较高的波段范围为500—650 nm，呈负相关关系（-0.4—-0.6）。选择的模型输入波段个数和Pearson相关系数阈值见表2。

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (4)$$

式中， r 为相关系数值， x_i 为无人机高光谱反射率值， \bar{x} 为无人机高光谱反射率值的平均值。

4.2 模型精度评价

(1) 总磷浓度反演模型精度。总磷浓度反演模型的训练集与测试集数据分布箱式图如图8所示。

在训练集中, 浓度范围在 0.2193—0.2996 mg/L, 中位数为 0.2538 mg/L; 测试集浓度为 0.2179—0.3021 mg/L, 中位数为 0.2546 mg/L。

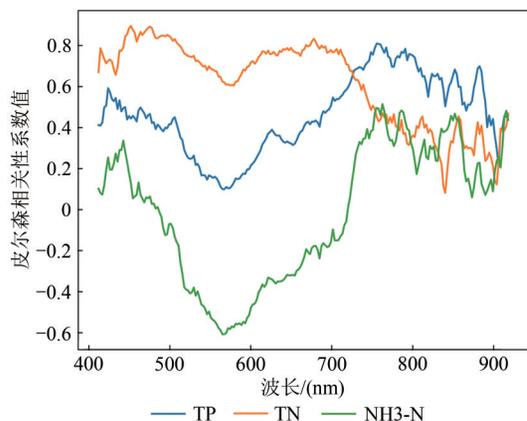


图7 水质参数的Pearson相关系数($n=40$)

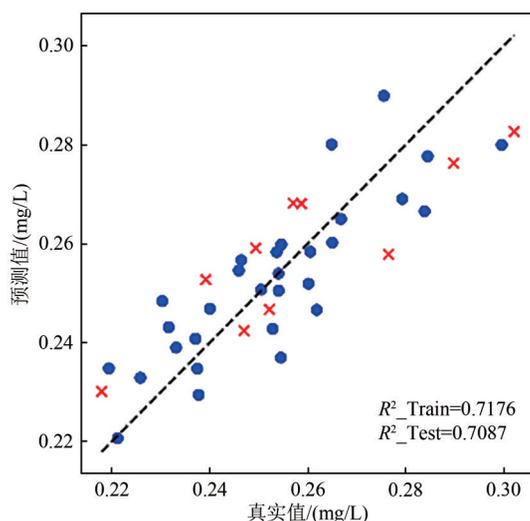
Fig.7 Pearson correlation coefficient of water quality parameters ($n=40$)

表2 总磷、总氮、氨氮的反演模型输入波段个数

Table 2 Number of selected wavebands for the inversion models of TP, TN, and NH₃-N

水质参数	所选波段数量	相关系数阈值
总磷(TP)	57	0.60
总氮(TN)	61	0.77
氨氮(NH ₃ -N)	55	0.40

4种算法反演总磷浓度的精度结果如图9所示, 模型的决定系数(R^2)、均方根误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE)评价指标值如表3所示。总体而言, 4种算法反演总磷浓度的效果相近, 测试精度 R^2 在0.71左右, RMSE约为0.013 mg/L。但



(a) LBFSG-MLP算法
(a) LBFSG-MLP

RF、CatBoost和XGBoost等3种算法在训练过程中均出现了不同程度的过拟合现象, 尤其是CatBoost算法, 其训练模型 R^2 接近1.0, RMSE为0.0004 mg/L, 而测试模型 R^2 仅为0.707, RMSE为0.0127 mg/L。

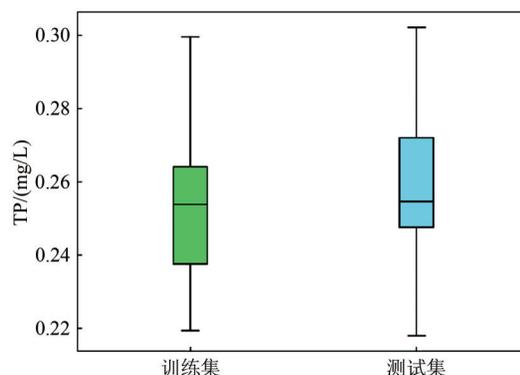
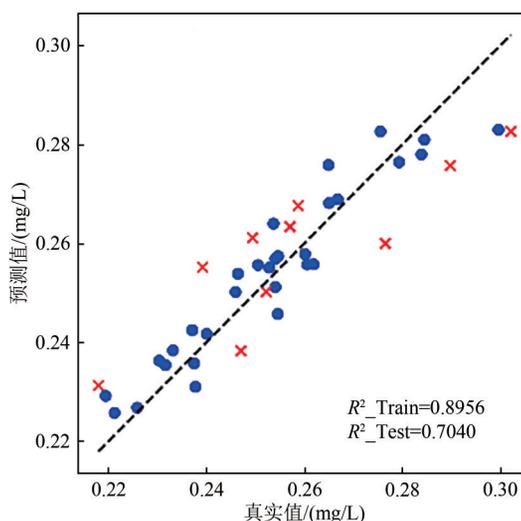


图8 总磷浓度数据分布箱式图

Fig.8 Box plot of TP data distribution

(2) 总氮浓度反演模型精度。总氮浓度反演模型的训练集与测试集数据分布箱式图如图10所示。训练集浓度的中位数为4.7878 mg/L, 范围在4.5271—5.0290 mg/L; 测试集的中位数为4.8316 mg/L, 范围为4.6563—5.0418 mg/L。

4种算法反演总氮浓度的精度结果如图11所示, 模型的 R^2 、RMSE、MAE评价指标值如表4所示。总体而言, LBFSG-MLP模型反演总氮浓度的效果最优, 真实值和预测值比较均匀的分布于1:1线的两侧, 其测试精度 R^2 为0.82, RMSE为0.0454 mg/L。XGBoost算法测试精度次之, 但训练过程中出现了过拟合现象, 模型 R^2 为1.0。RF和CatBoost算法效果相近, 反演模型精度相对较差。



(b) 随机森林算法
(b) Random Forest

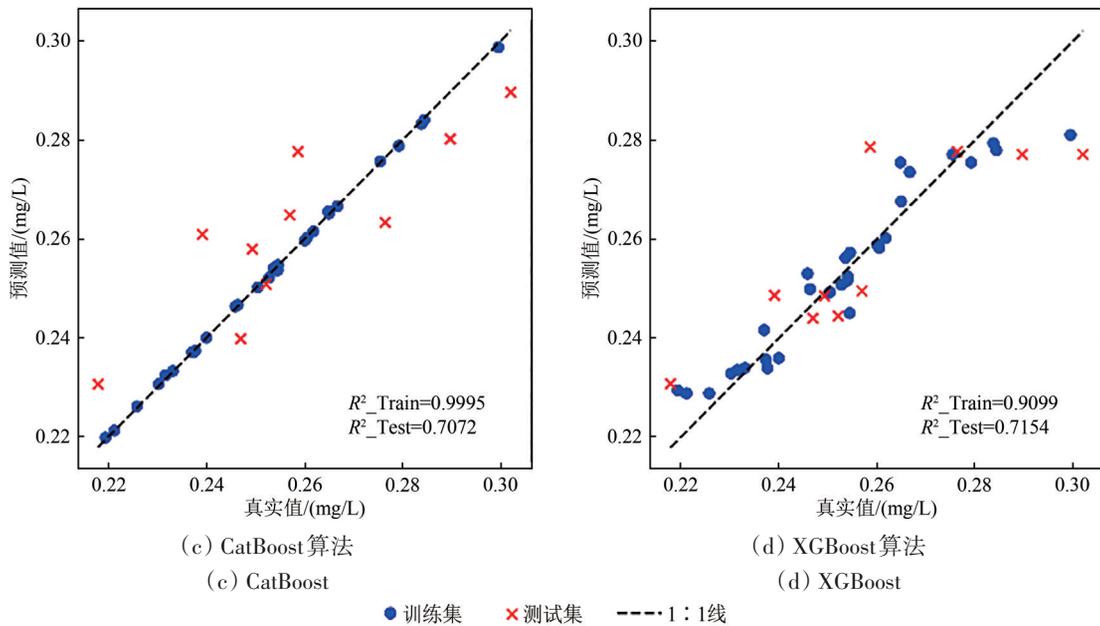


图9 总磷浓度在训练集和测试集上的真实值和预测值对比散点图

Fig.9 Scatter plots comparing the observed and estimated values of TP in the training and testing datasets

表3 总磷浓度反演评价指标对比表

Table 3 Comparison table of TP inversion evaluation indicators

算法名称	训练集			测试集		
	R^2	RMSE/(mg/L)	MAE/(mg/L)	R^2	RMSE/(mg/L)	MAE/(mg/L)
LBFGS-MLP	0.7176	0.0103	0.0085	0.7087	0.0126	0.0118
随机森林	0.8956	0.0062	0.0053	0.7040	0.0127	0.0117
CatBoost	0.9995	0.0004	0.0004	0.7072	0.0127	0.0114
XGBoost	0.9099	0.0058	0.0044	0.7154	0.0125	0.0100

注：加粗字体表示最优结果。

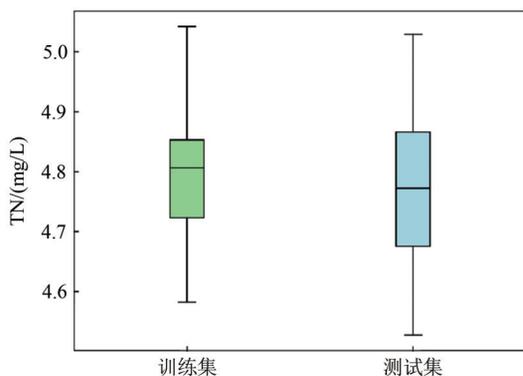


图10 总氮浓度数据分布箱式图

Fig.10 Box plot of TN data distribution

(3) 氨氮浓度反演模型精度。氨氮浓度反演模型的训练集与测试集数据分布箱式图如图12所示。在训练集中，浓度范围为0.0307—0.6823 mg/L，中位数为0.2888 mg/L；在测试集中，浓度范围在0.0456—0.4714 mg/L，中位数为0.2345 mg/L。

4种算法反演氨氮浓度的精度结果如图13所示，模型的 R^2 、RMSE、MAE评价指标值如表5所示。总体而言，LBFGS-MLP模型表现出了良好性能，反演精度较好，训练和测试 R^2 均为0.72，RMSE分别为0.0897和0.0670 mg/L，MAE分别为0.071和0.060 mg/L。XGBoost算法精度次之，而RF和CatBoost算法均出现了不同程度的过拟合现象。

4.3 水质参数浓度空间分布

利用本研究提出的LBFGS-MLP模型对无人机获取的高光谱图像中河流水体的总磷、总氮、氨氮浓度进行了空间制图，如图14所示。在研究区内，总磷浓度的空间分布呈现两端较高，中间较低的趋势，浓度值大多在0.20—0.25 mg/L之间，有部分区域浓度值位于0.10—0.15 mg/L（图14(a)），该水质参数值在Ⅲ—Ⅳ类水体的标准限值内（Ⅲ类 ≤ 0.2 mg/L，Ⅳ类 ≤ 0.3 mg/L）。

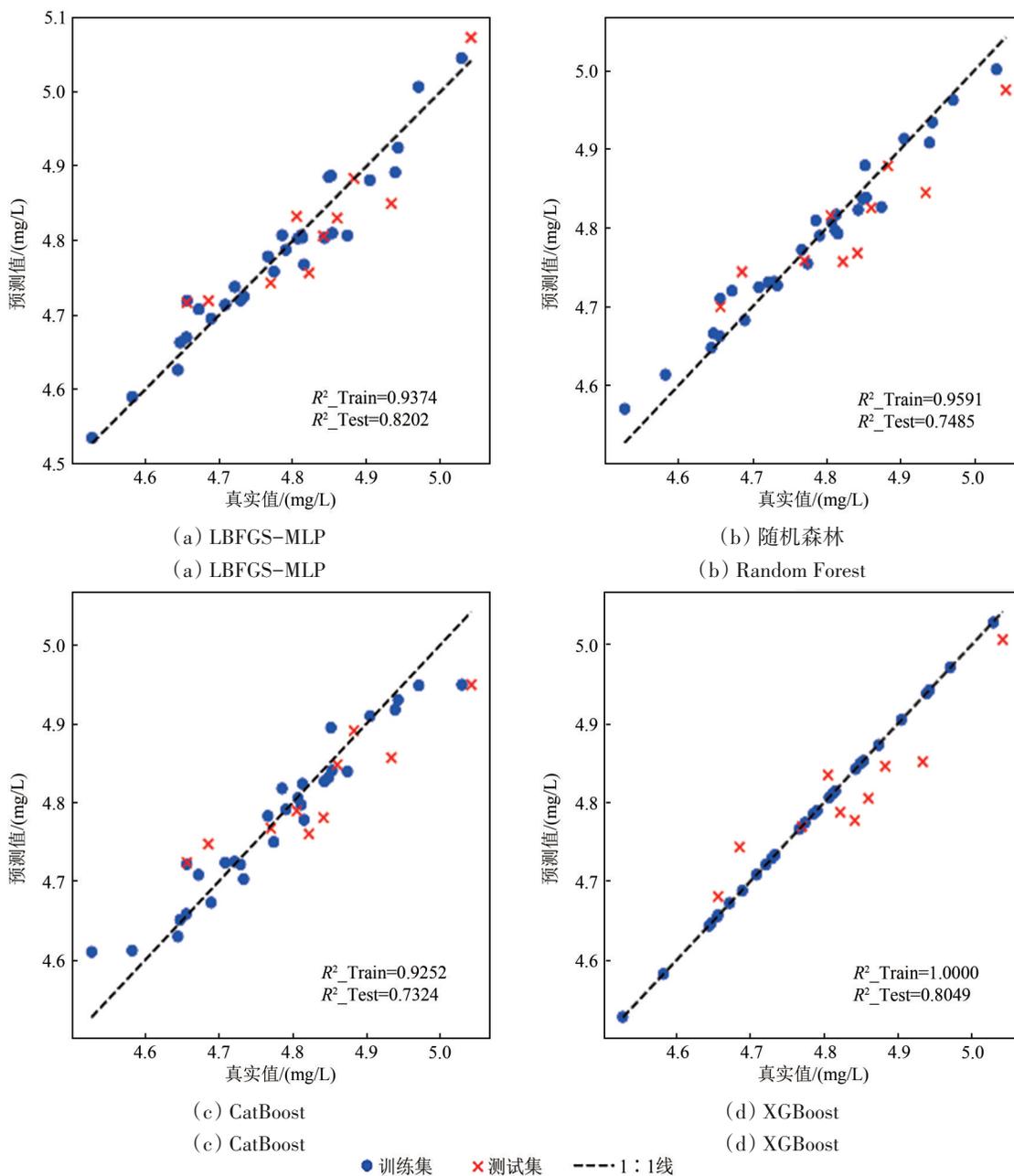


图 11 总氮浓度在训练集和测试集上的真实值和预测值对比散点图

Fig.11 Scatter plots comparing the observed and estimated values of TN in the training and testing datasets

表 4 总氮反演评价指标对比表

Table 4 Comparison table of TN inversion evaluation indicators

算法名称	训练集			测试集		
	R^2	RMSE/(mg/L)	MAE/(mg/L)	R^2	RMSE/(mg/L)	MAE/(mg/L)
LBFGS-MLP	0.9374	0.0289	0.0229	0.8202	0.0454	0.0394
随机森林	0.9591	0.0234	0.0182	0.7485	0.0537	0.0458
CatBoost	0.9252	0.0316	0.0237	0.7324	0.0554	0.0460
XGBoost	1.0000	0.0005	0.0004	0.8049	0.0473	0.0419

注：加粗字体表示最优结果。

总氮浓度的空间分布同样呈现出两端较高，中间较低的趋势，两端的浓度值大多位于4.0—5.0 mg/L，少部分区域浓度值位于2.0—3.0 mg/L

(图 14 (b))，该参数值明显高于地表水环境质量监测标准 (V类 ≤ 2.0 mg/L)。

总磷和总氮浓度两端稍高、中间偏低的空间

分布现象，可能与本研究区内河流中间区域两侧植被较多、而两端区域附近多为居民生活区有关。一方面植被生长会吸收土壤中的磷、氮元素，同时植被可以减缓地表径流中携带的磷、氮等营养盐含量进入水体。另一方面居民生活区排放的生活污水在一定程度上也增加了水体中总磷、总氮的含量。

氨氮浓度在总体上空间分布较为均匀，大部分区域浓度值在0.2—0.4mg/L，在研究区下游（图14（c）右下方）出现浓度稍高区域，其浓度值在0.4—0.5mg/L之间，该参数值在Ⅱ类水体的标准限值内（Ⅱ类≤0.5mg/L）。经调查，该河流的监测断面水质情况在2019年底经治理达到V类，本研究

结论与其较为一致。

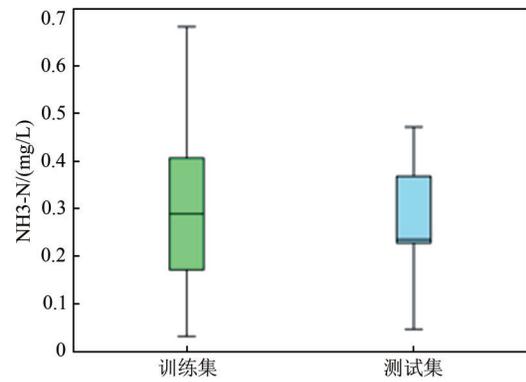


图12 氨氮浓度数据分布箱式图

Fig.12 Box plot of NH₃-N data distribution

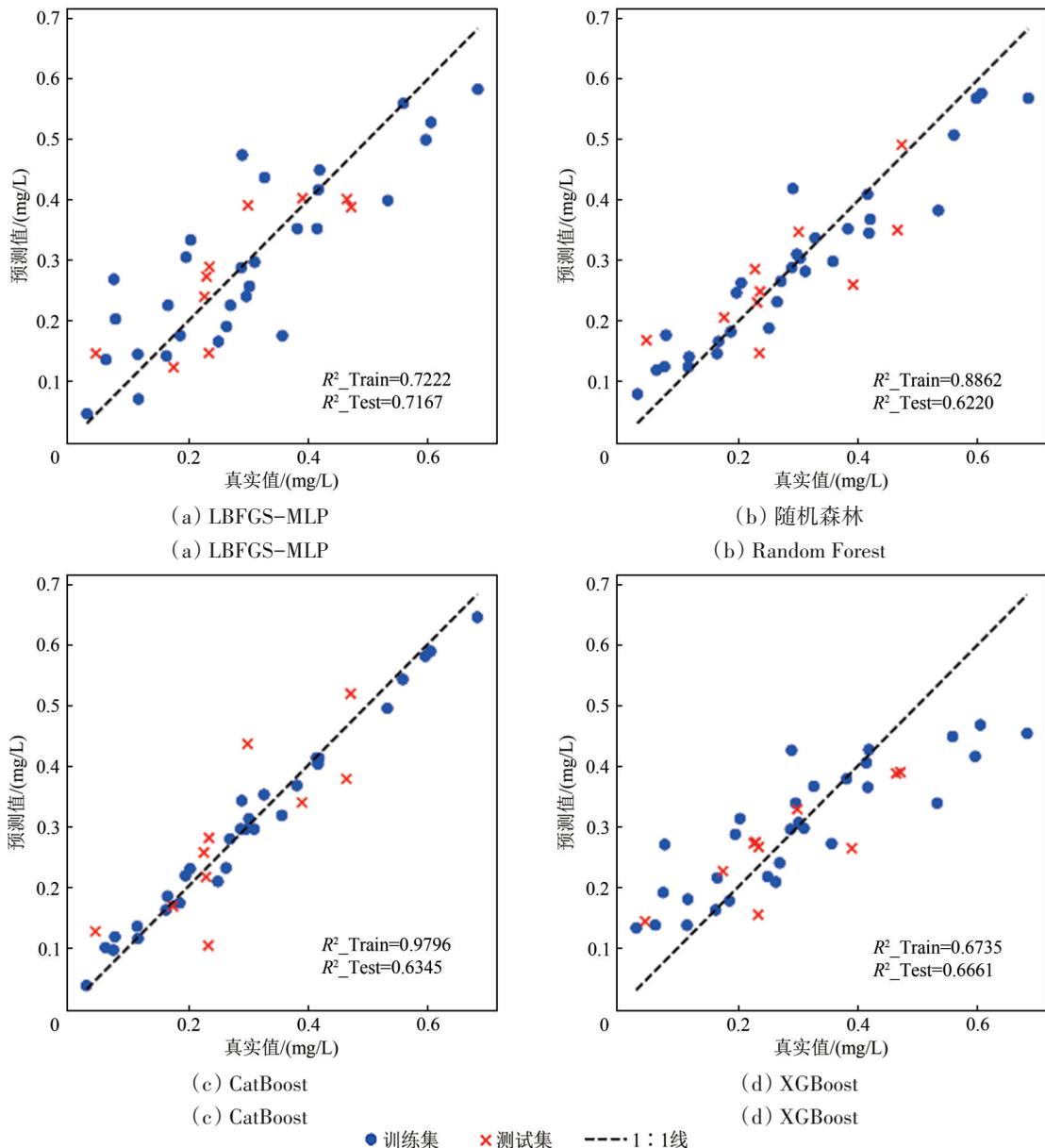


图13 氨氮浓度在训练集和测试集上的真实值和预测值对比散点图

Fig.13 Scatter plots comparing the observed and estimated values of NH₃-N in the training and testing datasets

表5 氨氮反演评价指标对比表

Table 5 Comparison table of NH₃-N inversion evaluation indicators

算法名称	训练集			测试集		
	R^2	RMSE/(mg/L)	MAE/(mg/L)	R^2	RMSE/(mg/L)	MAE/(mg/L)
LBFCS-MLP	0.7222	0.0897	0.0710	0.7167	0.0670	0.0601
随机森林	0.8862	0.0574	0.0428	0.6220	0.0774	0.0624
CatBoost	0.9796	0.0243	0.0200	0.6345	0.0761	0.0630
XGBoost	0.6735	0.0973	0.0732	0.6661	0.0727	0.0665

注：加粗字体表示最优结果。

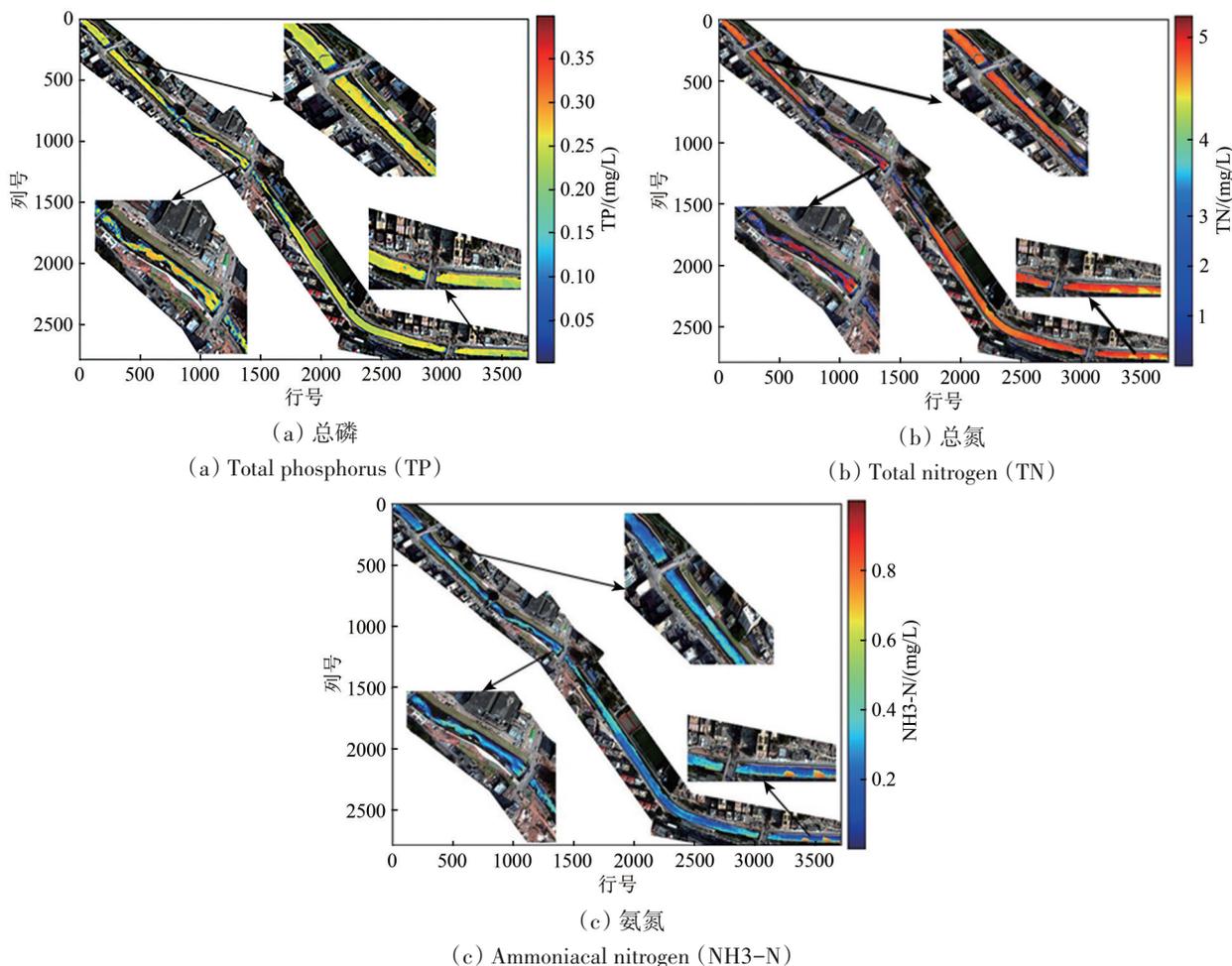


图14 水质参数浓度空间分布图

Fig.14 Spatial distribution of water quality parameter concentrations

5 结论

本研究以广东省某城中村河流为研究区，完成了从数据采集、数据处理、模型建立、模型应用的全流程研究。相比于卫星遥感影像，无人机高光谱遥感像幅较小、续航时间较短。但是，针对城市中小河流分布比较破碎、面积大小不一的特征，利用无人机平台搭载高光谱成像仪可以获取高空间、高光谱分辨率的遥感图像，能够捕捉

中小尺度河流的细微特征。同时，无人机具有在云下低空飞行、起降灵活的特点，可以根据需要随时进行飞行任务，从根本上解决了卫星遥感因时空分辨率低而导致的监测延迟、细节缺失等问题，在城市河流水质精细监测中具有独特优势。

本文基于无人机高光谱遥感对城市河流非光学水质参数总磷、总氮和氨氮浓度进行定量反演研究，提出了一种基于LBFCS加速的多层感知网络模型(LBFCS-MLP)，并与随机森林(RF)、

CatBoost、XGBoost算法进行精度对比,验证了所提的神经网络算法应用于高光谱图像进行水质分析的可行性及有效性。总体来讲,通过对4种模型的决定系数(R^2)、均方根误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE)进行分析与比较,本研究发现这4种算法在非光学水质参数反演中均取得了相对较好的效果,其中,本研究提出的LBFGS-MLP算法在各水质参数浓度估算上表现最优,且没有出现拟合现象。

在总磷浓度反演结果方面,4种算法效果相近,但CatBoost算法出现过拟合的问题。在总氮浓度反演结果方面,LBFGS-MLP算法效果最好,XGBoost算法次之,RF算法与CatBoost算法相当,但XGBoost算法也出现了过拟合的问题。在氨氮浓度反演结果方面,LBFGS-MLP算法表现出了显著的优势,效果好于其他3种算法。在水质参数浓度空间分布上。

从训练过程来看,虽然LBFGS-MLP算法在总磷、总氮和氨氮3种非光学特性水质参数浓度反演中均取得了较高精度,但超参数设置过程较为复杂,调参工作量稍大于其他3种机器学习算法。因此,鉴于LBFGS-MLP算法在取得较好结果和调参复杂度之间的平衡,后续的研究工作可以考虑深入研究基于多层感知网络算法在非光学水质参数反演中参数设定问题,充分发挥神经网络模型的优势并推动其在实践中的应用。

参考文献(References)

- Chen B T, Mu X, Chen P, Wang B, Choi J, Park H, Xu S, Wu Y L and Yang H. 2021. Machine learning-based inversion of water quality parameters in typical reach of the urban river by UAV multispectral data. *Ecological Indicators*, 133: 108434 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2021.108434]
- Chen P, Wang B, Wu Y L, Wang Q J, Huang Z J and Wang C L. 2023. Urban river water quality monitoring based on self-optimizing machine learning method using multi-source remote sensing data. *Ecological Indicators*, 146: 109750 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2022.109750]
- Chen T Q and Guestrin C. 2016. XGBoost: a scalable tree boosting system//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. San Francisco: ACM: 785-794 [DOI: 10.1145/2939672.2939785]
- Doña C, Chang N B, Caselles V, Sánchez J M, Camacho A, Delegido J and Vannah B W. 2015. Integrated satellite data fusion and mining for monitoring lake water quality status of the Albufera de Valencia in Spain. *Journal of Environmental Management*, 151: 416-426 [DOI: 10.1016/j.jenvman.2014.12.003]
- Dorogush A V, Ershov V and Gulin A. 2018. CatBoost: gradient boosting with categorical features support. arXiv preprint arXiv: 1810.11363 [DOI: 10.48550/arXiv.1810.11363]
- Fan H W, Shi S, Zhang B M, Zhang Y P, Lin Q and Sun H. 2020. Improved learning resource recommendation algorithm of deep neural network based on MLP. *Application Research of Computers*, 37(9): 2629-2633 (樊海玮, 史双, 张博敏, 张艳萍, 蔺琪, 孙欢. 2020. 基于MLP改进型深度神经网络学习资源推荐算法. *计算机应用研究*, 37(9): 2629-2633) [DOI: 10.19734/j.issn.1001-3695.2019.04.0109]
- Fang K N, Wu J B, Zhu J P and Xie B C. 2011. A review of technologies on random forests. *Statistics and Information Forum*, 26(3): 32-38 (方匡南, 吴见彬, 朱建平, 谢邦昌. 2011. 随机森林方法研究综述. *统计与信息论坛*, 26(3): 32-38) [DOI: 10.3969/j.issn.1007-3116.2011.03.006]
- He Y H, Gong Z J, Zheng Y H and Zhang Y B. 2021. Inland reservoir water quality inversion and eutrophication evaluation using BP neural network and remote sensing imagery: a case study of dashahe reservoir. *Water*, 13(20): 2844 [DOI: 10.3390/w13202844]
- Huang X X, Ying H T, Xia K, Feng H L, Yang Y H and Du X C. 2020. Inversion of water quality parameters based on UAV multispectral images and the OPT-MPP algorithm. *Environmental Science*, 41(8): 3591-3600 (黄昕晰, 应哈婷, 夏凯, 冯海林, 杨垠晖, 杜晓晨. 2020. 基于无人机多光谱影像和OPT-MPP算法的水质参数反演. *环境科学*, 41(8): 3591-3600) [DOI: 10.13227/j.hjcx.201911141]
- Kingma D P and Ba J. 2015. Adam: a method for stochastic optimization//3rd International Conference on Learning Representations. San Diego: [s.n.]
- LeCun Y, Bengio Y and Hinton G. 2015. Deep learning. *Nature*, 521(7553): 436-444 [DOI: 10.1038/nature14539]
- Liu D C and Nocedal J. 1989. On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Mathematical Programming*, 45(1/3): 503-528 [DOI: 10.1007/BF01589116]
- Liu X, Zhao T Q, Cai T Y, Xiao C Y, Chen X S and Zhang W J. 2021. Spatiotemporal monitoring of total nitrogen and ammonia nitrogen in Danjiangkou reservoir. *Journal of Agricultural Resources and Environment*, 38(5): 829-838 (刘轩, 赵同谦, 蔡太义, 肖春艳, 陈晓舒, 张文静. 2021. 丹江口水库总氮、氨氮遥感反演及时空变化研究. *农业资源与环境学报*, 38(5): 829-838) [DOI: 10.13254/j.jare.2021.0195]
- Liu Y, Li J S, Xiao C C, Zhang F F and Wang S L. 2022. Inland water chlorophyll-a retrieval based on ZY-1 02D satellite hyperspectral observations. *Journal of Remote Sensing (in Chinese)*, 26(1): 168-178 (刘瑶, 李俊生, 肖晨超, 张方方, 王胜蕾. 2022. 资源一号02D高光谱影像内陆水体叶绿素a浓度反演. *遥感学报*, 26(1): 168-178) [DOI: 10.11834/jrs.20221244]
- Liu Y J, Xia K, Feng H L and Fang Y M. 2019. Inversion of water quality elements in small and micro-size water region using multispectral image by UAV. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 39(4): 1241-1249 (刘彦君, 夏凯, 冯海林, 方益明. 2019. 基于无人机多

- 光谱影像的小微水域水质要素反演. 环境科学学报, 39(4): 1241-1249 [DOI: 10.13671/j.hjkxb.2018.0362]
- Lu W T, Xu G B, Wang Y, Ying K H, Lin Y N and Xie B. 2023. Remote sensing retrieval of water quality at Jiaojiang estuary based on Beijing No.2 satellite image and synchronously measured data. *Journal of Hangzhou Normal University (Natural Science Edition)*, 22(2): 218-224 (鲁婉婷, 徐攻博, 王昱, 应孔辉, 林焯楠, 谢斌. 2023. 基于北京二号卫星影像与同步实测数据的椒江入海口水质遥感反演. *杭州师范大学学报(自然科学版)*, 22(2): 218-224) [DOI: 10.19926/j.cnki.issn.1674-232X.2023.02.015]
- Ma X J, Song Y Q, Chang B S, Yuan M Y and Su H. 2020. Application research of P2P default prediction model based on CatBoost algorithm. *Statistics and Information Forum*, 35(7): 9-17 (马晓君, 宋嫣琦, 常百舒, 袁铭忆, 苏衡. 2020. 基于CatBoost算法的P2P违约预测模型应用研究. *统计与信息论坛*, 35(7): 9-17) [DOI: 10.3969/j.issn.1007-3116.2020.07.002]
- Michaelsen E and Meidow J. 2014. Stochastic reasoning for structural pattern recognition: an example from image-based UAV navigation. *Pattern Recognition*, 47(8): 2732-2744 [DOI: 10.1016/j.patcog.2014.02.009]
- Niu C, Tan K, Jia X P and Wang X. 2021. Deep learning based regression for optically inactive inland water quality parameter estimation using airborne hyperspectral imagery. *Environmental Pollution*, 286: 117534 [DOI: 10.1016/j.envpol.2021.117534]
- Robbins H and Monro S. 1951. A stochastic approximation method. *The Annals of Mathematical Statistics*, 22(3): 400-407 [DOI: 10.1214/aoms/1177729586]
- Tong Q X, Zhang B and Zhang L F. 2016. Current progress of hyperspectral remote sensing in China. *Journal of Remote Sensing (in Chinese)*, 20(5): 689-707 (童庆禧, 张兵, 张立福. 2016. 中国高光谱遥感的前沿进展. *遥感学报*, 20(5): 689-707) [DOI: 10.11834/jrs.20166264]
- Wang S M and Qin B Q. 2023. Research progress on remote sensing monitoring of lake water quality parameters. *Environmental Science*, 44(3): 1228-1243 (王思梦, 秦伯强. 2023. 湖泊水质参数遥感监测研究进展. *环境科学*, 44(3): 1228-1243) [DOI: 10.13227/j.hjkx.202203285]
- Wang S R, Shen F and Wei X D. 2023. Deep learning based super resolution reconstruction of Sentinel-2/MSI imagery and water quality retrieval in rivers and lakes. *Remote Sensing Information*, 38(3): 16-24 (王世瑞, 沈芳, 魏小岛. 2023. Sentinel-2/MSI深度学习超分辨率重建及河湖水质遥感反演. *遥感信息*, 38(3): 16-24) [DOI: 10.20091/j.cnki.1000-3177.2023.03.003]
- Wu H H, Guo Q Z, Zang J L, Qiao Y, Zhu L and He Y H. 2021. Study on water quality parameter inversion based on Landsat 8 and measured data. *Remote Sensing Technology and Application*, 36(4): 898-907 (吴欢欢, 国巧真, 臧金龙, 乔悦, 朱丽, 何云海. 2021. 基于Landsat 8与实测数据的水质参数反演研究. *遥感技术与应用*, 36(4): 898-907) [DOI: 10.11873/j.issn.1004-0323.2021.4.0898]
- Wu S Z, Wang D, Ma L K and Xu M. 2015. An overall reading of action plan for prevention and control of water pollution. *Environmental Protection*, 43(9): 15-18 (吴舜泽, 王东, 马乐宽, 徐敏. 2015. 向水污染宣战的行动纲领——《水污染防治行动计划》解读. *环境保护*, 43(9): 15-18) [DOI: 10.14026/j.cnki.0253-9705.2015.09.002]
- Xia G E, Tang Q and Zhang X Q. 2020. Improved multi-layer perceptron applied to customer churn prediction. *Computer Engineering and Applications*, 56(14): 257-263 (夏国恩, 唐琪, 张显全. 2020. 改进的多层感知机在客户流失预测中的应用. *计算机工程与应用*, 56(14): 257-263) [DOI: 10.3778/j.issn.1002-8331.1904-0496]
- Yang C X, Li Y, Yang J and Shu S J. 2023. Remote sensing inversion and regularity analysis of suspended sediment in Pearl River Estuary based on machine learning model. *Bulletin of Surveying and Mapping*, (9): 117-123 (杨传训, 李勇, 杨骥, 舒思京. 2023. 机器学习模型的珠江口悬浮泥沙遥感反演与规律分析. *测绘通报*, (9): 117-123) [DOI: 10.13474/j.cnki.11-2246.2023.0275]
- Yang H Z, Zhang J and Li L. 2023. Personalized recommendation based on multiple similarity and CatBoost. *Computer Engineering and Design*, 44(9): 2687-2693 (杨怀珍, 张静, 李雷. 2023. 基于多重相似度和CatBoost的个性化推荐. *计算机工程与设计*, 44(9): 2687-2693) [DOI: 10.16208/j.issn1000-7024.2023.09.017]
- Zaman B, Jensen A, Clemens S R and McKee M. 2014. Retrieval of spectral reflectance of high resolution multispectral imagery acquired with an autonomous unmanned aerial vehicle: Aggieair™. *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing*, 80(12): 1139-1150 [DOI: 10.14358/PERS.80.12.1139]
- Zhang B, Li J S, Shen Q, Wu Y H, Zhang F F, Wang S L, Yao Y, Guo L N and Yin Z Y. 2021. Recent research progress on long time series and large scale optical remote sensing of inland water. *National Remote Sensing Bulletin*, 25(1): 37-52 (张兵, 李俊生, 申茜, 吴艳红, 张方方, 王胜蕾, 姚月, 郭立男, 殷子瑶. 2021. 长时序大范围内陆水体光学遥感研究进展. *遥感学报*, 25(1): 37-52) [DOI: 10.11834/jrs.20210570]
- Zhang F F, Li J S, Wang C and Wang S L. 2023. Estimation of water quality parameters of GF-1 WFV in turbid water based on soft classification. *National Remote Sensing Bulletin*, 27(3): 769-779 (张方方, 李俊生, 王超, 王胜蕾. 2023. 高分一号卫星浑浊水体水质参数软分类反演. *遥感学报*, 27(3): 769-779) [DOI: 10.11834/jrs.20232442]
- Zhang H J, Wang B, Zhou J, Yu Y, Ke S and Huangfu K. 2022. Remote sensing retrieval of inland river water quality based on BP neural network. *Journal of Central China Normal University (Natural Sciences)*, 56(2): 333-341 (张宏建, 王冰, 周健, 余勇, 柯帅, 皇甫款. 2022. 基于BP神经网络的内陆河流水质遥感反演. *华中师范大学学报(自然科学版)*, 56(2): 333-341) [DOI: 10.19603/j.cnki.1000-1190.2022.02.017]
- Zhang L, Lei J R, Chen Y Q, Chen Z Z, Zhou P, He R X, Wu T T, Chen X H, Li Y L and Pan X Y. 2023. Inversion and spatial evaluation of water quality parameters of Yongzhuang Reservoir in Haikou based on drone multispectral data. *China Environmental Science*, 43(S1): 258-267 (张乐, 雷金睿, 陈毅青, 陈宗铸, 周鹏, 何荣晓, 吴庭天, 陈小花, 李苑菱, 潘小艳. 2023. 基于无人机多光谱数据的水质参数反演与评价——以海口市永庄水库为例. *中国环境科学*, 43(S1): 258-267) [DOI: 10.19674/j.cnki.issn1000-6923.2023.0236]
- Zhang Y F, Jiang C, Cheng X and Liu Y. 2018. Deepnetwork structure design based on base completion and embedded multi-layer perceptron. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*

- tion), 48(5): 933-938 (张毅锋, 蒋程, 程旭, 刘袁. 2018. 基于完备化理论和嵌入多层感知机的深度网络结构设计. 东南大学学报(自然科学版), 48(5): 933-938) [DOI: 10.3969/j.issn.1001-0505.2018.05.022]
- Zhao C, Shen P, Li Q, Chen C, Liu X Y and Liao F J. 2021. Retrieval concentration of TN using random forest algorithm based on GF-1 WFV remote sensing data. *Environmental Science and Technology*, 44(9): 23-30 (赵慈, 沈鹏, 李倩, 陈忱, 刘晓宇, 廖凤娟. 2021. 基于GF-1 WFV影像和随机森林算法的总氮反演研究. 环境科学与技术, 44(9): 23-30) [DOI: 10.19672/j.cnki.1003-6504.1080.21.338]
- Zheng Z B, Zhang R F, Li J Z, Lin L and Yang H. 2022. Remote sensing retrieval of chlorophyll-a concentration in Dianchi Lake based on orbita hyperspectral imagery. *National Remote Sensing Bulletin*, 26(11): 2162-2173 (郑著彬, 张润飞, 李建忠, 林琳, 杨虹. 2022. 基于欧比特高光谱影像的滇池叶绿素a浓度遥感反演研究. 遥感学报, 26(11): 2162-2173) [DOI: 10.11834/jrs.20211264]
- Zhou B T, Zhang Y Y and Shi K. 2022. Research progress on remote sensing assessment of lake nutrient status and retrieval algorithms of characteristic parameters. *National Remote Sensing Bulletin*, 26(1): 77-91 (周博天, 张雅燕, 施坤. 2022. 湖泊营养状态遥感评价及其表征参数反演算法研究进展. 遥感学报, 26(1): 77-91) [DOI: 10.11834/jrs.20221232]

Inversion of non-optical water quality parameters of hyperspectral remote sensing based on LBFGS-accelerated multi-layer perceptron network

HE Ruyan¹, LYU Zijun¹, JIA Sen^{1,2,3}

1. School of Computer and Software, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China;

2. Key Laboratory for Geo-Environmental Monitoring of Coastal Zone of the Ministry of Natural Resources, Shenzhen 518060, China;

3. Guangdong - Hong Kong-Macau Joint Laboratory for Smart Cities, Shenzhen 518060, China

Abstract: Water is the source of life, the foundation of survival, a necessity for production, and the basis of ecology. However, under the dual pressures of human activities and climate change, aquatic ecosystems are facing increasingly severe challenges, particularly the serious problem of water pollution, which directly threatens the physical and mental health of residents. Water quality monitoring plays a crucial role in water pollution control, which precisely evaluates the health of water bodies and promptly adjusts control strategies, ensuring the stability and health of water environmental quality. Hyperspectral remote sensing exhibits significant potential in water quality monitoring. With the rapid development of Unmanned Aerial Vehicles (UAVs) and hyperspectral technology, UAVs equipped with hyperspectral sensors have considerably improved in terms of spectral and spatial resolutions. Accordingly, water quality parameter inversion by using hyperspectral remote sensing has gradually become a research hotspot. However, current research predominantly focuses on optical water quality parameters, with relatively less emphasis on nonoptical parameters, which also reflect the effect of human activities on water bodies. In this study, an urban river in a certain village in Guangdong Province is selected as the study area. An experiment that involves UAV for hyperspectral remote sensing image acquisition and simultaneous water sample collection is conducted. Then, we propose a multilayer perceptron (MLP) network model accelerated by the limited-memory Broyden - Fletcher - Goldfarb - Shanno (LBFGS) method, called LBFGS-MLP, for the inversion of nonoptical water quality parameters. The parameters include Total Phosphorus (TP), Total Nitrogen (TN), and ammonia nitrogen (NH₃-N), which are important indicators for measuring the nutritional status of water bodies. Through Pearson correlation analysis, spectral bands related to the three nonoptical water quality parameters (TP, TN, and NH₃-N) are selected as model input. Subsequently, on the basis of exploring the effect of different network depths and optimization algorithms on model performance, the LBFGS optimization algorithm is adopted to accelerate the MLP network, and the loss function is mean squared error. Finally, the LBFGS-MLP model is applied to spatially analyze the concentrations of TP, TN, and NH₃-N in the study area. Overall, the LBFGS-MLP model demonstrates significantly better accuracy on the training and testing datasets for the concentrations of TP, TN, and NH₃-N compared with the random forest, CatBoost, and XGBoost models, particularly in the inversion of TN and NH₃-N concentrations. The model's coefficients of determination are 0.71, 0.82, and 0.72, while the mean absolute errors are 0.0118, 0.0394, and 0.0601 mg/L, respectively. The concentrations of TP, TN, and NH₃-N in the study area are mostly distributed at 0.1—0.3, 2—5, and 0.1—0.4 mg/L, respectively, which are consistent with the survey results. Through this study, the effectiveness of the MLP algorithm in the inversion of nonoptical water quality parameters is verified, providing a theoretical basis and reference for a more comprehensive assessment of urban river water body condition.

Key words: non-optical water quality parameters, machine learning, hyperspectral remote sensing, concentration inversion

Supported by National Natural Science Foundation of China (No. 62271327); Project of Department of Education of Guangdong Province (No. 2023KCXTD029); Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation (No. 2022A1515011290); Shenzhen Science and Technology Program (No. RCJC20221008092731042, JCYJ20220818100206015, KQTD20200909113951005); Team Cultivation Program of Shenzhen University (No. 2023JCT002)