

利用机器学习算法和原位高光谱反射数据评估城市河流综合水质

摘要

本文基于高光谱遥感技术,结合一维卷积神经网络(1D-CNN)和DenseNet架构,提出了一种用于水质监测的深度学习模型。通过分析深圳河与茅洲河的高光谱反射数据,反演了四个水质参数,包括叶绿素a(Chla)、总磷(TP)、总氮(TN)和氨氮(NH₃)。数据预处理阶段,采用归一化处理计算水质指数(WQI),并将数据集分为训练集和验证集。实验结果表明,结合DenseNet的1D-CNN模型在各水质参数的预测上表现出了较好的精度,尤其是在Chla预测上效果最为显著。然而1D-CNN单独使用时对于参数范围较窄的总磷和总氮,模型的预测精度较低,揭示了模型在处理小范围波动数据时的局限性。

关键词: 1D-CNN; Densenet; 水质指数(WQI)

1 引言

近年来,随着遥感技术的不断发展,高光谱遥感技术已广泛应用于水质监测领域。高光谱遥感通过获取水体的反射光谱数据,可以为水质参数的估算提供丰富的信息,尤其是在从可见光到近红外区域的反射率分析方面[9]。不同波段的反射率包含了关于水体特征的关键信息,因此可以有效地反演出水体中的各种水质参数[5]。传统的水质评估方法依赖于现场采样和实验室分析,但这些方法往往受限于空间和时间的局限,难以满足大范围和高频率的监测需求。而高光谱遥感技术则能够克服这些局限,实现大规模的水质动态监测。

目前,卷积神经网络(CNN)因其在处理高维数据和图像理解方面的优越性,已被广泛应用于高光谱遥感数据的分析中。CNN能够自动提取复杂的空间和光谱特征,从而提升水质预测的精度和空间分布的合理性[7]。DenseNet作为一种具有密集连接结构的神经网络模型[2],其特有的连接方式不仅促进了信息的流动和特征的重用,还具有正则化效果,能够有效减少在小规模训练集上可能出现的过拟合问题。这一特性使得DenseNet在处理高光谱水质监测相关小样本集时尤为适用。

结合1D卷积神经网络(1D-CNN)[1]和DenseNet模型,利用高光谱遥感数据可以对城市河流的水质进行高效评估。通过这一方法,可以充分挖掘水体反射光谱中的丰富信息,准确反映水质的时空变化特征,为水质监测与管理提供有力的数据支持。

2 相关工作

在许多研究中, 研究人员通过高光谱数据构建了使用半经验、半分析和生物光学模型的估计算法, 用于估计一个或有限数量的水质参数 [4]。半经验和半分析模型通过选择几个特征波段 [10] 来建立遥感数据与水质参数之间的关系。生物光学模型基于水辐射传输理论, 建立表观光学性质 (AOPs) 与固有光学性质 (IOPs) [3] 之间的关系。尽管这些模型在估计和监测方面取得了良好的效果, 但由于生物光学环境中含有不同的水污染物, 因此很难找到光谱信息与光学非活性水质参数之间特定的内部相关性。在这种情况下, 传统的线性和非线性回归技术可能无法提取高光谱数据的深度光谱特征, 并对这种复杂的非线性关系进行建模。为了在处理休斯现象的同时获得更全面的水质更高的检索精度, 偏最小二乘回归、支持向量机和人工神经网络是高光谱遥感中常用的方法 [8]。在过去的十年中, 新的机器学习方法受到了越来越多的关注, 如卷积神经网络 (CNN) 算法。该算法不需要先验地确定初始假设, 而是自动获取特征, 直接解释输出。目前, CNN 算法已成功应用于遥感水质参数检测 [6]。

3 本文方法

3.1 数据集介绍

由于本复现论文是通过高光谱反射数据实现综合水质的反演且未公开数据集, 所以在数据集选取时, 着重选择有多个水质参数及一定数量的光谱反射率的数据集。但部分调研的数据集要么参数太少, 要么波段量不够, 所以最终选择了每个样本有 216 个波段, 4 个参数 (Chla、TP、TN、NH₃) 的深圳河与茅洲河的数据集, 该数据集有 124 个样本。

3.2 数据预处理

通过复现的论文中的数据分布处理方式进行数据集重新划分, 即通过 TP、TN、NH₃ 分别除以其对应归一化因子后相加, 将原始值转换为无量纲值, 得到 WQI 值。通过 WQI 值进行排序, 按照 4:1 的顺序将前 120 个样本分成训练集和验证集, 剩下四个样本, 前两个分给训练集, 后两个分给验证集。一般可将各参数的污染排放或环境质量标准参考值作为归一化因子。在本复现实验中, TP、TN、NH₃ 的归一化因子分别为 0.3、1.5 和 1.5mg/L, 这三个参数对应于《地表水环境质量标准》中的四级值, 如图 1 所示。由于未找到 Chla 对应归一化因子, 所以不将其用来构建 WQI。

表 1 地表水环境质量标准基本项目标准限值 单位：
mg/L

序号		I 类	II 类	III 类	IV 类	V 类
1	水温 (°C)	人为造成的环境水温变化应限制在：周平均最大温升≤1 周平均最大温降≤2				
2	pH 值(无量纲)	6 - 9				
3	溶解氧 ≥	饱和率 90% (或 7.5)	6	5	3	2
4	高锰酸盐指数 ≤	2	4	6	10	15
5	化学需氧量 (COD) ≤	15	15	20	30	40
6	五日生化需氧量 (BOD ₅) ≤	3	3	4	6	10
7	氨氮 (NH ₃ -N) ≤	0.015	0.5	1.0	1.5	2.0
8	总磷 (以 P 计) ≤	0.02 (湖、 库 0.01)	0.1 (湖、 库 0.025)	0.2 (湖、 库 0.05)	0.3 (湖、 库 0.1)	0.4 (湖、 库 0.2)
9	总氮 (湖、库、 以 N 计)	0.2	0.5	1.0	1.5	2.0

图 1. 地表水环境质量标准基本项目标准限值部分图示

3.3 本文方法概述

CNN 是一种特殊的用于深度学习架构的多层神经网络。典型的 CNN 通常会堆叠一系列具有非线性激活函数和下采样池化层的卷积层，并伴有局部连接和共享变换矩阵。这种特性使得 CNN 比传统方法更好地提取层次特征，并且可以自动学习它们的特征，而不是来自手动设计。一维 CNN (1D-CNN) 是采用一维向量 (如时间序列、频谱数据集) 作为输入数据的 CNN 的一种特殊形式。在复现文章中，1D-CNN 由两个卷积层、两个池化层、一个扁平层和三个完全连接层组成。1D-CNN 算法的架构如图 2 所示。

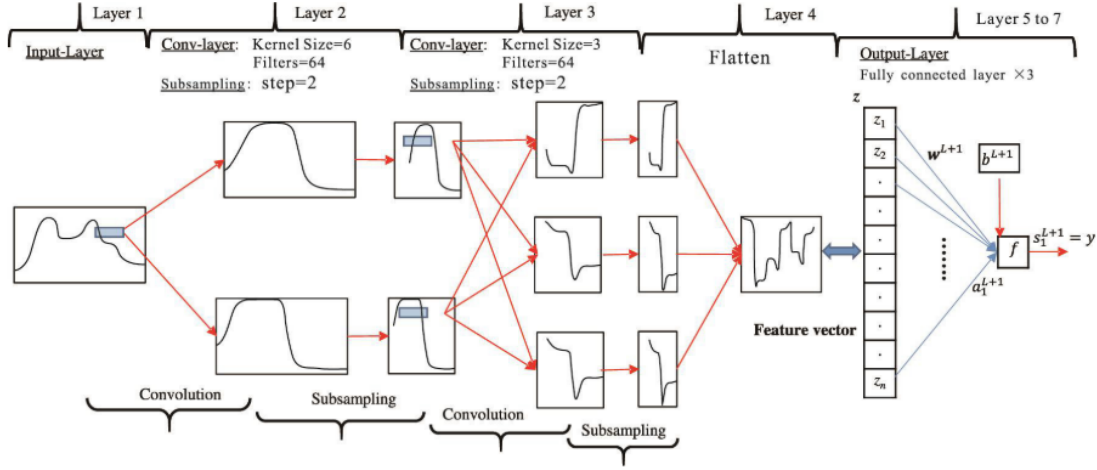


图 2. 1D-CNN 模型结构图

3.4 模型结构搭建与参数设置

模型各层的作用和参数选择如下:

- 1) 算法的输入数据为高光谱数据。
- 2) 卷积层使用不同大小和数量的卷积核从输入特征图中提取特征。每个卷积核检测输入特征图上的特定特征，以实现同一输入特征图上的权值共享。

假设矩阵 $x_j^l(l-1)$ 是 l 层的输入，则 1D-CNN 算法的公式为

$$x_j^l = f \left(b_j^l + \sum_i^M k_{ij}^l * x_i^{l-1} \right) \quad (1)$$

其中 x_j^l 为当前第 l 层的第 j 个特征映射; k_{ij}^l 表示卷积核; j 表示核数; M 表示输入特征映射的个数; B 为核对应的偏置; $F(\cdot)$ 为激活函数; 而 $*$ 表示向量卷积。

- 3) 池化层用来降低特征图的维数，同时保留输入数据中的主要信息。它通过减少参数的数量和防止过拟合来降低计算成本; 本复现论文使用的池化类型是 max-pooling，从池化的字段中选择最大值。

- 4) 平坦层是一个用于将上层的输出转换为 1-D 向量的层，该向量被馈送到完全连接层中。

- 5) 全连接层包含许多神经元，这些神经元连接到前面各层的所有节点。本复现论文中，第三个完全连接层只有一个神经元，作为输出层。

- 6) 第三层全连通层采用线性激活，其余层均采用 ReLU 激活函数。

4 复现细节

4.1 与已有开源代码对比

本复现文章无开源代码。在原文只是 1D-CNN 模型的基础上加入了 DenseNet 网络架构，构建过程中参考了 DenseNet121 与 DenseNet-BC 结构。

4.1.1 引用代码——DenseNet121 架构

```

1 self.dense_block1 = DenseBlock(num_filters, growth_rate, 6)
2 num_filters_t = num_filters + 6 * growth_rate
3 self.transition_block1 = TransitionBlock(num_filters_t)
4 num_filters = num_filters_t // 2
5 self.dense_block2 = DenseBlock(num_filters, growth_rate, 12)
6 num_filters_t = num_filters + 12 * growth_rate
7 self.transition_block2 = TransitionBlock(num_filters_t)
8 num_filters = num_filters_t // 2
9 self.dense_block3 = DenseBlock(num_filters, growth_rate, 24)
10 num_filters_t = num_filters + 24 * growth_rate
11 self.transition_block3 = TransitionBlock(num_filters_t)
12 num_filters = num_filters_t // 2
13 self.dense_block4 = DenseBlock(num_filters, growth_rate, 16)

```

DenseNet121 是 DenseNet 系列中一个较简单的版本，该网络中总共有 121 层。具体来说，它采用了较少的每个 DenseBlock 内的层数，通常每个 DenseBlock 包含 6、12、24 和 16 层。

4.1.2 引用代码——DenseNet-BC 架构

```

1 class Bottleneck(nn.Module):
2     def __init__(self, num_features, growth_rate):
3         super(Bottleneck, self).__init__()
4         self.num_features = num_features
5         self.growth_rate = growth_rate
6         self.conv1d1 = nn.Conv1d(in_channels=self.num_features,
7                                   out_channels=self.growth_rate * 4, kernel_size=1,
8                                   stride=1)
9         self.bn1 = nn.BatchNorm1d(self.num_features)
10        self.bn2 = nn.BatchNorm1d(self.growth_rate * 4)
11        self.relu = nn.ReLU()
12        self.conv1d2 = nn.Conv1d(in_channels=self.growth_rate * 4,
13                                  out_channels=self.growth_rate, kernel_size=3,
14                                  stride=1, padding=1)
15        self.drop = nn.Dropout(0.2)

```



```

1 class TransitionBlock(nn.Module):
2     def __init__(self, num_filters):
3         super(TransitionBlock, self).__init__()
4         self.num_filters = num_filters
5         self.bn = nn.BatchNorm1d(self.num_filters)
6         self.conv = nn.Conv1d(in_channels=self.num_filters,
7                                out_channels=self.num_filters//2, kernel_size=1, stride=1)

```

```

7         self.pool = nn.AvgPool1d(kernel_size=2, stride=2)
8         self.relu = nn.ReLU()

```

DenseNet-BC 在 DenseNet 的基础上引入了两个关键的设计优化：瓶颈层和压缩操作。其中瓶颈层（BottleNeck）通过减少每个 DenseBlock 的参数来控制模型的复杂度，其结构是先通过 1×1 卷积减少通道数，再通过 3×3 卷积提取信息。而压缩层（TransitionBlock）通过减少每个 DenseBlock 输出特征图的通道数来控制模型的复杂度。其结构为 1×1 卷积减少通道数，再通过 2×2 的平均池化减小特征图的空间大小。

4.2 实验环境搭建

表 1. 实验环境配置

名称	配置信息
操作系统	Ubuntu 20.04.2
开发语言	Python 3.8.10
框架	Pytorch 2.4.1
CPU	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2678 v3 @ 2.50GHz
GPU	NVIDIA Tesla P100
内存	251G

4.3 创新点

DenseNet 其核心思想是通过密集连接来提升特征的重用和梯度传播。如图 3 所示，模型间每一层都与所有之前的层直接连接，即每层的输入除了包含前一层的输出外还包含前面所有层的输出。

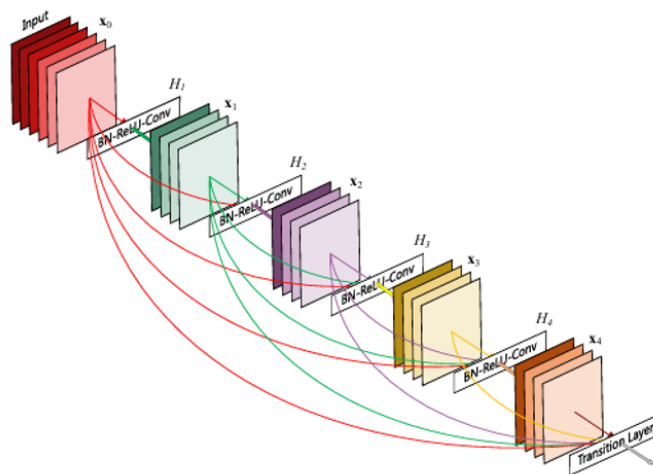


图 3. 层间结构示意图

DenseNet 的网络结构如图 4 所示，主要由多个 DenseBlock 模块组成。

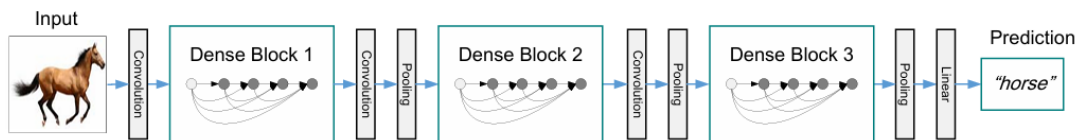


图 4. 网络结构示意图

在复现实验中，首先输入经过两层卷积、激活函数和池化层进行特征提取和空间尺寸压缩，逐步提取低级到中级特征。然后，网络使用 4 个 DenseBlock 来提取更高级的特征，每个 DenseBlock 内部通过密集连接增强特征共享和重用。相邻的 DenseBlock 之间通过 TransitionBlock 控制特征图的维度，从而实现逐层压缩和降维。接着，经过第三次卷积、激活、池化和 Dropout 操作后，网络将特征图的尺寸进一步压缩，为预测做好准备。最后，将输入展平到一维进入全连接层，通过 ReLU 激活函数将其结果映射到非线性空间，最后一层全连接层进行单一神经元的线性映射。

5 实验结果分析

5.1 1D-CNN 结合 DenseNet 实验结果

叶绿素 a 数据分布如图 5 所示，以及预测精度可视化如图 6 所示。

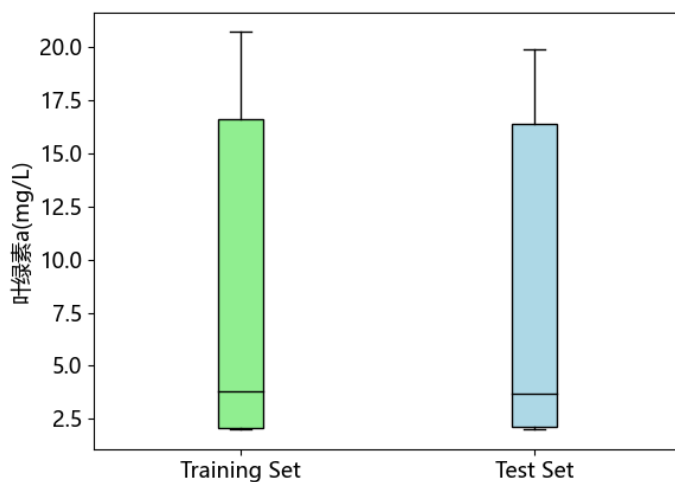


图 5. 叶绿素 a 数据分布图

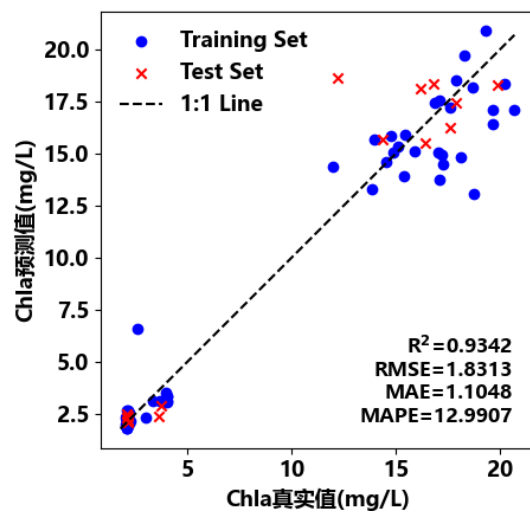


图 6. 叶绿素 a 预测精度图

总磷数据分布如图 7 所示，以及预测精度可视化如图 8 所示。

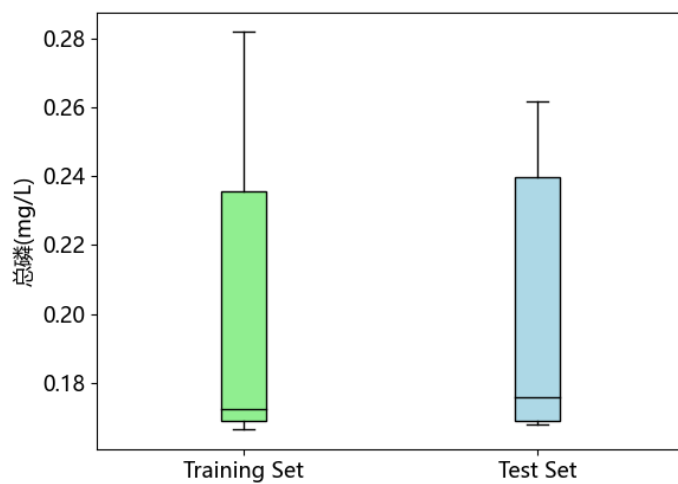


图 7. TP 数据分布图

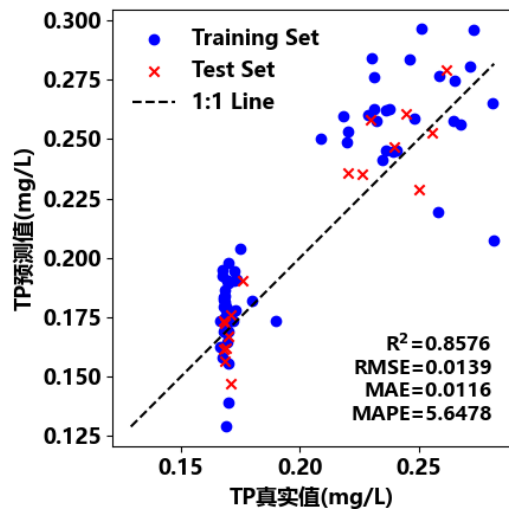


图 8. TP 预测精度图

总氮数据分布如图 9所示，以及预测精度可视化如图 10所示。

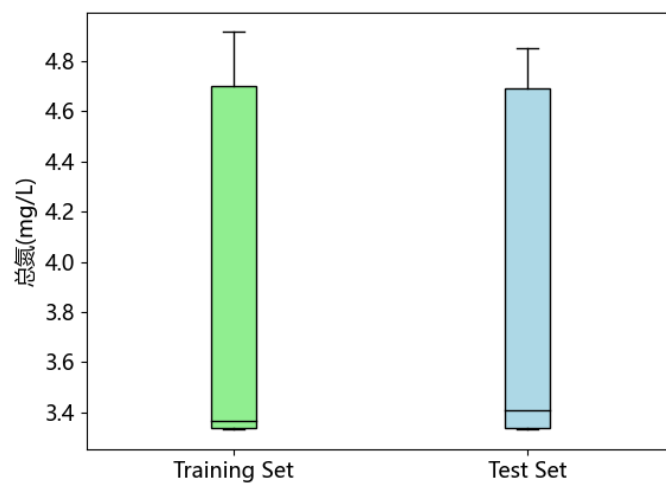


图 9. TN 数据分布图

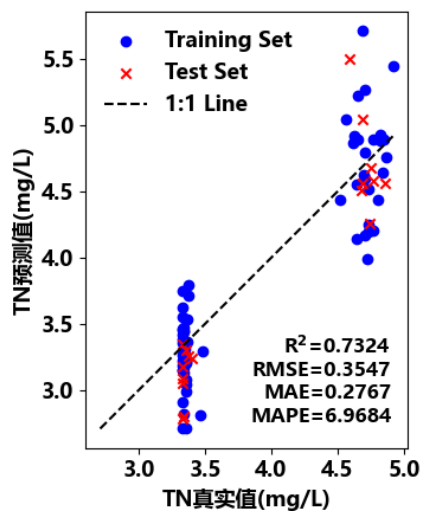


图 10. TN 预测精度图

氨氮数据分布如图 11所示，以及预测精度可视化如图 12所示。

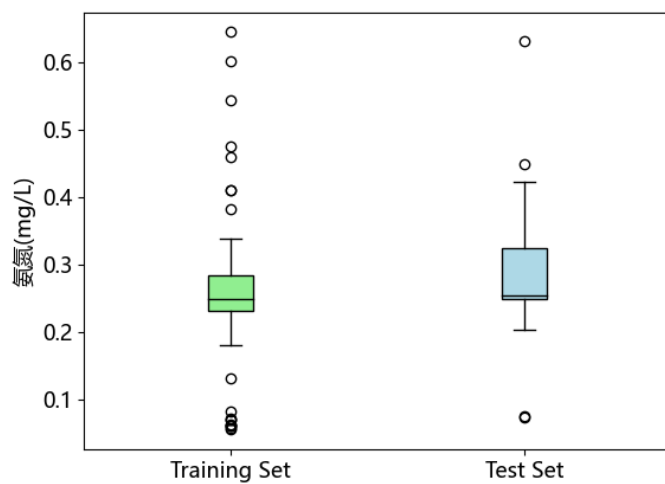


图 11. NH₃ 数据分布图

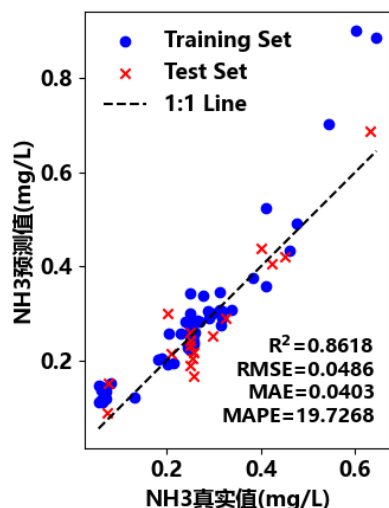


图 12. NH3 预测精度图

5.2 1D-CNN 实验结果

实验过程中，1D-CNN 无法做到对每一个参数的预测精度都能高指标。对于总磷、总氮无法很好地捕捉其特征，预测精度过低，以总磷为例如图 13所示。分析发现，二者对比于其他两个参数的参数值范围过窄，导致 1D-CNN 无法在过小波动范围内进行良好预测。

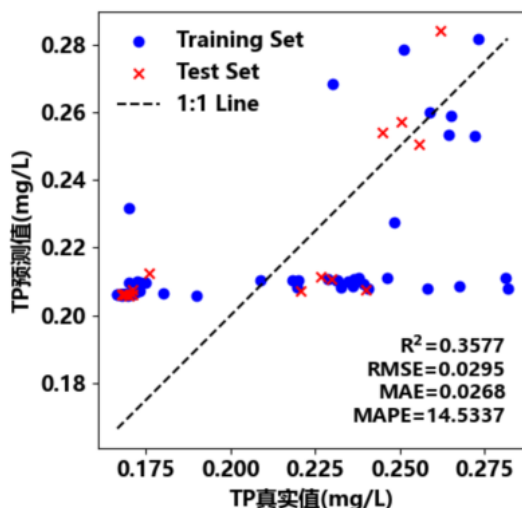


图 13. TP 预测精度图

5.3 实验结果对比分析

由二者对比可见，结合 DenseNet 的 1D-CNN 模型对于各参数预测效果各指标普遍偏高，其中 Chla 效果最佳，从数据集中看，也是 Chla 数值范围最大。而最窄的参数 TN 的 R2 也能达到 0.7 以上，说明了结合 DenseNet 的 1D-CNN 模型通过层与层之间的紧密连接，能够更好地捕捉细微的特征差异，从而提升模型在数据范围较窄时的学习能力。

6 总结与展望

本文基于高光谱遥感技术,结合卷积神经网络(CNN)和DenseNet架构,研究了深圳河与茅洲河的水质监测。研究的主要目标是利用高光谱反射数据,通过深度学习模型反演并预测水质参数,包括叶绿素a(Chla)、总磷(TP)、总氮(TN)和氨氮(NH₃)。

本文使用了一维卷积神经网络(1D-CNN)与DenseNet架构结合的模型,进行水质预测。1D-CNN主要通过卷积层和池化层提取特征,而DenseNet通过密集连接在每一层之间提供更强的特征共享和梯度传播,增强了模型在高维数据处理中的表现。模型的设计使得它能够捕捉到细微的特征差异,进而提高对不同水质参数的预测精度。

实验结果表明,结合DenseNet的1D-CNN模型在各项水质参数预测上表现出了较好的精度,特别是在Chla参数的预测上效果最为显著。尽管如此,对于总磷和总氮这类数据值范围较窄的参数,1D-CNN单独使用时效果较差,说明模型对这类特点的参数的捕捉能力仍有待提高。通过1D-CNN与DenseNet结合的方式,模型在较小波动范围内仍能有效提取特征,从而提高了模型的学习能力。

在当前的实现过程中,仍存在一些不足之处。首先,由于数据集样本过少,可能导致该模型泛化能力较弱,后续将进一步扩展数据集和增加多维度参数提高模型的鲁棒性。

未来研究将进一步改进深度学习架构,以更好地适应不同类型的高光谱数据。此外,将努力提升模型在特征提取和参数优化方面的效率,例如通过自适应方法对不同水质参数的学习能力进行增强。同时,也将探索更多的高光谱数据处理和特征选择方法,有助于提升预测的精度和稳定性。

参考文献

- [1] Jiannan Cai, Jun Chen, Xianhui Dou, and Qianguo Xing. Using machine learning algorithms with in situ hyperspectral reflectance data to assess comprehensive water quality of urban rivers. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 60:1–13, 2022.
- [2] Gao Huang, Zhuang Liu, Laurens van der Maaten, and Kilian Q Weinberger. Densely connected convolutional networks. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 2017.
- [3] Linhai Li, Lin Li, and Kaishan Song. A bio-optical approach to estimating chlorophyll-a concentration from hyperspectral remote sensing. In *Remote Sensing and Modeling of Ecosystems for Sustainability VII*, volume 7809, pages 70–79. SPIE, 2010.
- [4] Chao Niu, Kun Tan, Xiuping Jia, and Xue Wang. Deep learning based regression for optically inactive inland water quality parameter estimation using airborne hyperspectral imagery. *Environmental Pollution*, 286:117534, 2021.
- [5] Leif G Olmanson, Patrick L Brezonik, and Marvin E Bauer. Airborne hyperspectral remote sensing to assess spatial distribution of water quality characteristics in large rivers: The mississippi river and its tributaries in minnesota. *Remote Sensing of Environment*, 130:254–265, 2013.

- [6] Fangling Pu, Chujiang Ding, Zeyi Chao, Yue Yu, and Xin Xu. Water-quality classification of inland lakes using landsat8 images by convolutional neural networks. *Remote Sensing*, 11(14):1674, 2019.
- [7] Nikolaos L Tsakiridis, Konstantinos D Keramaris, John B Theocharis, and George C Zalidis. Simultaneous prediction of soil properties from vnir-swir spectra using a localized multi-channel 1-d convolutional neural network. *Geoderma*, 367:114208, 2020.
- [8] Huanhuan Yuan, Guijun Yang, Changchun Li, Yanjie Wang, Jiangang Liu, Haiyang Yu, Haikuan Feng, Bo Xu, Xiaoqing Zhao, and Xiaodong Yang. Retrieving soybean leaf area index from unmanned aerial vehicle hyperspectral remote sensing: Analysis of rf, ann, and svm regression models. *Remote Sensing*, 9(4):309, 2017.
- [9] Yishan Zhang, Lun Wu, Huazhong Ren, Licui Deng, and Pengcheng Zhang. Retrieval of water quality parameters from hyperspectral images using hybrid bayesian probabilistic neural network. *Remote Sensing*, 12(10):1567, 2020.
- [10] Xiaochi Zhou, Marco Marani, John D Albertson, and Sonia Silvestri. Hyperspectral and multispectral retrieval of suspended sediment in shallow coastal waters using semi-analytical and empirical methods. *Remote Sensing*, 9(4):393, 2017.