

应用水表面下辐照度比估测太湖夏季水体叶绿素 a 浓度*

孙德勇, 李云梅, 乐成峰, 龚绍琦, 伍 蓝

(南京师范大学教育部虚拟地理环境重点实验室, 南京 210046)

摘 要: 利用便携式光谱辐射计, 采用一定的观测角度获取水体表面的光谱, 进而提取水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 信息, 分析 $R(0^-)$ 光谱特征与叶绿素 a 浓度之间的相互关系, 结果表明太湖夏季水体叶绿素 a 浓度与 $R(0^-)$ 光谱曲线 762 nm、727 nm 和 496 nm 处的相关系数较大, 分别达到了 0.85、0.84、-0.80。通过单波段、波段比值模型分析, 认为以 $R(0^-)_{762}$ 、 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 、 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$ 为自变量的二次函数模型是利用水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 估算太湖夏季水体中叶绿素 a 浓度的最佳模型, 模型的决定系数 R^2 分别达到了 0.923、0.919、0.916, 回归估计的标准误差 S 分别为 0.012、0.013、0.013, F 检验值分别为 101.241、96.576、92.925。利用剩余 10 个样本对估算模型进行精度和误差检验, 结果表明以 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 为自变量的二次函数模型好于另外两个, 对太湖夏季水体叶绿素 a 浓度估算具有一定的实用性。此外, 将光谱微分技术应用到 $R(0^-)$ 信息分析太湖夏季水体叶绿素 a 浓度, 结果不能获得较高的预测精度。

关键词: 太湖; 叶绿素 a 浓度; 水表面下辐照度比 $R(0^-)$; 模型

Estimating chlorophyll-a concentration in Lake Taihu in summer by irradiance ratio just beneath water surface

SUN Deyong, LI Yunmei, LE Chengfeng, GONG Shaoqi & WU Lan

(Virtual Geographical Environment Laboratory of Ministry of Education, Nanjing Normal University, Nanjing 210046, P. R. China)

Abstract: Water surface spectra, which can work irradiance ratio just beneath water surface $R(0^-)$ out, is obtained by ASD FieldSpec Hand-Held Spectroradiometer. When the in-situ data is collected, a certain special angle has been adopted. After analyzing the relationship between spectral characteristics of $R(0^-)$ and chlorophyll-a concentration, the results showed that the strongest correlations appeared at 762 nm, 727 nm and 496 nm, the values separately were 0.85, 0.84 and -0.80. The model analysis with single band and band ratio revealed that the quadratic models, of which independent variables were $R(0^-)_{762}$ 、 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 、 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$, were better than others. R^2 separately reach 0.923、0.919、0.916; std. error of the estimate S separately were 0.012、0.013、0.013; F separately were 101.241、96.576、92.925. Make use of the 10 surplus samples to estimate three quadratic models and carry on the accuracy and error margin examinations. Then find that the quadratic model with the independent variable $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ was the best, and to a certain extent had some functions on chlorophyll-a concentration estimation in Lake Taihu in summer. In addition, try to apply differential calculus to $R(0^-)$ to estimate chlorophyll-a concentration, and can not acquire the better result.

Keywords: Lake Taihu; chlorophyll-a concentration; irradiance ratio just beneath water surface $R(0^-)$; model

太湖位于江苏和浙江两省的交界, 长江三角洲南部, 是我国第三大淡水湖, 流域面积 2338.1 km², 湖面海拔 3.33 m, 平均水深 2.12 m, 最深处达 4.8 m。它是环湖地区城镇居民生活饮用水、工业用水、农业用水、渔业用水的重要水源, 也是水上航运的重要通道, 它在该区域的经济发展中起着不可估量的作用。然而随

* 国家自然科学基金项目(40571110)和南京师范大学“研究生培养创新工程”项目(1612005023)联合资助。2006–10–01 收稿; 2007–01–16 收修改稿。孙德勇, 男, 1984 年生, 硕士研究生; E-mail: sundeyong1984@163.com.

着近几年太湖流域经济的高速发展和水资源的不合理开发、利用,导致了太湖水体的严重污染,进而影响了区域经济的可持续发展. 水体污染主要表现为水体的富营养化,其重要特征就是藻类物质的大量繁殖,而叶绿素 a 是藻类物质中的主要色素,其浓度的高低直接反映了水中藻类物质的含量,因此,叶绿素 a 常作为反映水体富营养化的一个重要参数.

随着遥感技术的发展,利用其进行水体中叶绿素 a 浓度的监测已成为主流方向,利用遥感的方法监测叶绿素 a 浓度的优势在于可以实时、动态、宏观地获得水体中叶绿素 a 浓度信息,而较常规的实验室量测方法省时、省力. 叶绿素 a 和其他水体要素在不同波长的吸收和散射致使光谱曲线特征在不同波长处存在差异,这是遥感定量监测叶绿素 a 浓度的基础. 国内外许多学者通过分析水表面以上的水体反射率的光谱特征,选择对叶绿素 a 浓度比较敏感的波段进行叶绿素 a 浓度反演,Arenz 等人^[1]利用水体反射率的波段比值建立了 Colorado 水库叶绿素 a 浓度反演模型,获得了较好的拟合效果;Dekker 等人^[2]利用水体反射率的波段比值估算荷兰富营养化湖泊中的叶绿素 a 浓度,反演精度较高;Vertucci 等人^[3]利用波段反射率比值也较好的估算叶绿素 a 浓度;疏小舟等^[4]利用叶绿素浓度超过 $5\mu\text{g/L}$ 时的数据进行拟合,叶绿素浓度与 700 nm 处峰值的位置是一种非常好的指数关系,拟合度 R^2 达到 0.89 ;李素菊^[5]等人用水体反射率的波段比值法成功的提取了巢湖的叶绿素 a 浓度. 然而这些研究都是基于垂直水面测量的水体反射率,没有有效的避免水面反射光和天空散射光的辐射影响. 本文通过具有一定观测角度的数据获取方法,提取了能反映水体更纯粹信息的水表面下辐照度比 $R(0^-)$,并分析此光学参量与叶绿素 a 浓度之间的关系,从而建立基于水表面下辐照度比信息的太湖夏季水体叶绿素 a 浓度估算模型,目的在于寻求太湖夏季水体叶绿素 a 浓度估算的更精确、更有效方法.

由于水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 是水表面下向上辐照度与向下辐照度的比值,所以它反映了入射到水体中能量的损失,而这部分损失的能量主要就是由水体各组分的吸收和散射所致,因此前人常利用 $R(0^-)$ 和固有光学量建立了水体生物-光学模型^[20]. 然而,太湖是大型的浅水内陆湖泊,马荣华认为其光学浅水底质是影响水体表观光学量的重要因素,并利用水深、透明度以及表观光学量之间的关系分析了太湖底质对表观光学量的影响,结果显示东太湖是底质影响表观光学量的主要湖区,而本研究在东太湖没有设置采样点,所以可以忽略底质对水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 的贡献.

1 研究方法

1.1 光谱数据的获取

光谱数据获取的时间分别在 2005 年 6、7、8 月初,利用 4-5d 的时间对太湖 21 个常规监测点进行光谱测量(图 1),一天中的测量时间集中在 10:00-15:00,是光线较好的时段. 光谱观测使用的仪器是美国 ASD 公司生产的 ASD FieldSpec Pro 便携式光谱辐射计,其波段范围是 $350-1050\text{ nm}$,光谱分辨率是 2 nm ,色散为 141 nm ,视场角为 7.5° . 仪器观测的数据有:标准灰板(反射率为 30%)、水体和天空光的光谱辐亮度信息,每个对象采集 10 条光谱数据,用以做均值处理. 为了避开太阳直射反射和船舶阴影对光场的破坏,采用一定的观测角度进行水体光谱观测,仪器观测平面与太阳入射平面的夹角 $90^\circ \leq \Phi \leq 135^\circ$ (背向太阳方向),仪器与水面法线方向的夹角 $30^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$ ^[6]. 天空光在水面的反射是不可避免的,因此,在仪器面向水体进行测量后,必须将仪器在观测平面内向上旋转一个角度,使得天空光辐亮度的观测方向天顶角等于水面测量时的观测角. 在采集光谱数据的同时,记录采样点的位置坐标和光谱数据采集时的风速风向.

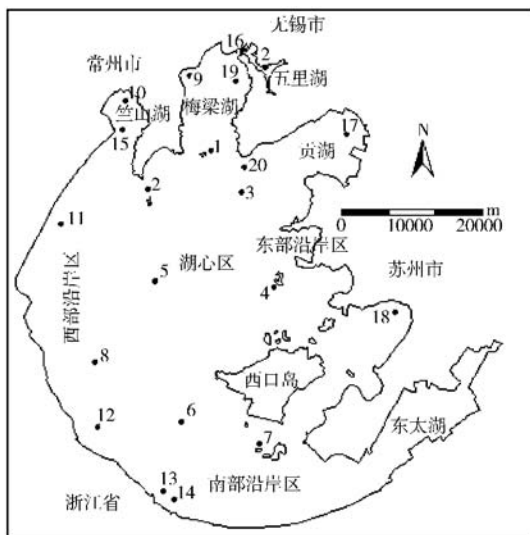


图 1 太湖样点分布

Fig. 1 The distribution of sample sites, Lake Taihu

1.2 水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 的提取

在常规的水质遥感监测中,多利用的是水体视反射率来反映水体的光谱信息^[4,5,7-9],即垂直水面向上的反射辐射和总入射辐射的比值.由于光谱仪镜头接收到的是水面上的光谱辐射信息,因此它不完全是水体的离水反射辐射,还包括水面反射光和天空散射光的辐射信息.为了剔除非水体因素对光谱信息的影响,反映更为纯粹的水体信息,本文选择水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 来表征水体的光谱信息.

水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 定义为:

$$R(0^-) = E_u(0^-) / E_d(0^-) \quad (1)$$

式中, $E_u(0^-)$ 、 $E_d(0^-)$ 分别为刚好位于水面下方的向上、向下辐照度.这两个参数的推算过程如下: $E_u(0^-) = QL_u(0^-)$, 其中 Q 为光场分布参数,受不同的水体、太阳角度、观测角度影响而不同,对混浊的内陆水体 Q 约为 $3.5^{[10]}$; $L_u(0^-)$ 为刚好位于水面下方的向上辐亮度, $L_u(0^-) = (n^2/t)/L_w$, 其中 t 是气—水界面 Fresnel 透射系数,通常取 $t = 0.98$, n 是水的折射指数,通常取 $n = 1.34$, L_w 是离水辐亮度,通过公式(3)求得. $E_d(0^-) = (1 - \rho_{sw}) E_d(0^+)$, ρ_{sw} 为气—水界面的辐照度反射率,在 $0.04 - 0.06$ 之间,在此取 $\rho_{sw} = 0.05^{[11]}$, $E_d(0^+)$ 为水面总入射辐照度,可以通过测量标准灰板的反射得到,公式如下:

$$E_d(0^+) = L_p \times \pi / \rho_p \quad (2)$$

式中, L_p 为标准灰板的辐亮度; ρ_p 为标准灰板的反射率,选用的是经过严格定标的 30% 的灰板.

按照一定的观测角度,并避开太阳直射反射和水面白帽的影响获得的水体光谱信息是总光谱辐亮度信息,其中包括了天空漫散射光的信息,需去除天空漫散射光得到离水辐亮度信息,公式表示为:

$$L_{sw} = L_w + rL_{sky} \quad (3)$$

式中, L_{sw} 为总光谱辐亮度信息; L_w 为离水辐亮度; L_{sky} 为天空漫散射光辐亮度; r 为气—水界面对天空光的反射率,取决于太阳位置、观测几何、风速风向或水面粗糙度等因素.在上述观测几何条件下,平静水面可取 $r = 0.022$,在 5 m/s 左右风速的情况下可取 $r = 0.025$,在 10 m/s 左右风速的情况下可取 $r = 0.026 - 0.028^{[6]}$.本文中由于 6 和 7 月实测波谱的同时,平均风速为 4.5 m/s ,而大部分点位实测风速在 5 m/s 或 5 m/s 以上,因此取 $r = 0.025$; 8 月份观测时,最大风速 4 m/s ,多数样点观测时的风速在 $2 - 3 \text{ m/s}$ 之间,风浪很小,近似平静的水面,根据唐军武的研究取 $r = 0.022$.

1.3 数据分析

运用光谱仪软件 ViewSpec Pro 进行标准灰板、水体和天空光的光谱数据异常值剔除和均值化处理;对于数据的统计分析包括计算均值、归一化、线性和非线性拟合、误差分析等利用 SPSS11.0 来完成.

2 基于水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 的叶绿素 a 浓度估算模型

2.1 太湖夏季 $R(0^-)$ 光谱曲线分析

本文是在 2005 年夏季太湖光谱实测的基础上进行分析的,选择夏季的代表月份 6、7、8 月.对计算得到的水表面下辐照度比数据进行筛选,去除阴天光照条件差、水藻覆盖、水草较多等异常数据,最后选择 30 组数据用来分析处理.30 组水表面下辐照度比在可见光范围内的光谱曲线(图 2),具有典型内陆湖泊特征.在 $350 - 500 \text{ nm}$ 范围,由于叶绿素、类胡萝卜素在蓝紫光波段的吸收,以及可溶性有机物质在 500 nm 以下波段的强烈吸收^[12,13],水表面下辐照度比较低; $550 - 580 \text{ nm}$ 范围出现了反射峰,是由于藻类色素的低吸收和无机悬浮物质和浮游植物的散射引起的;在 $620 - 630 \text{ nm}$ 波段由于藻青蛋白的吸收辐照度比下降; 676 nm 附近出现反射谷,是由于叶绿素在红波段的最大吸收;在 $689 - 708 \text{ nm}$ 范围内有明显的荧光峰,是由于浮游植物的荧光效应引起的,此处可作为判断是否有叶绿素的依据^[7],但是此处的波峰位置不稳定,随着叶绿素 a 浓度升高,它会向长波方向偏移^[8,14];在 760 nm 附近出现了反射峰,其峰高较前面出现的反射峰小,但特征很明显.

2.2 叶绿素 a 浓度的敏感波段分析

2.2.1 峰谷值波长位置分析 对 30 组 $R(0^-)$ 的光谱数据进行统计分析,主要分析光谱曲线上三个波段范围出现的光谱特征,即 $550 - 580 \text{ nm}$ 之间反射峰(第一峰值)、 682 nm 附近的反射谷(谷值)和 706 nm 附近的荧光峰(第二峰值).统计后发现第一峰值出现的波段范围在 $556 - 590 \text{ nm}$ 之间,峰值 $R(0^-)$ 的变化范围

0.066–0.171;绝大多数(30 个样本中有 28 个)谷值波段位置出现在 671–680 nm 之间,谷值 $R(0^-)$ 的范围 0.050–0.132;第二峰值的波段位置绝大多数分布在 689–708 nm 之间,峰值 $R(0^-)$ 的范围 0.065–0.165. 分别对 30 组数据第一峰值、谷值和第二峰值出现的波长位置按出现频率进行归一化,得到第一峰值、谷值和第二峰值的波长位置分别为 571 nm、676 nm 和 700 nm.

2.2.2 相关分析 对 30 组 $R(0^-)$ 数据用其 350–800 nm 的均值做归一化处理,然后用归一化后数值与叶绿素 a 浓度进行相关分析,旨在找出对叶绿素 a 浓度敏感的波段. 如图 3 相关分析结果可知,在 450–500 nm 出现较高的负相关,在 500 nm 附近负相关达到最低值,这与叶绿素在蓝光波段的吸收峰有关^[5];在 620 nm 和 680 nm 处 $R(0^-)$ 与叶绿素 a 浓度也出现了一定的负相关;从 710 nm 之后出现了较高的正相关,相关系数达 0.80 以上,说明在这波段之后水表面下辐照度比受叶绿素浓度影响较大. 通过对相关系数的大小进行排序,选择两个最高正相关波段 762 nm、727 nm(相关系数分别为 0.85 和 0.84)和一个最低负相关波段 496 nm(相关系数为 -0.80)作为分析叶绿素 a 浓度的敏感波段.

2.3 单波段模型分析

本文从 30 个样本中随机选择 20 个用作模型的建立,其余 10 个用作模型的精度分析. 选择相关系数最大 762 nm 处的水表面下辐照度比作为模型分析的自变量 x ,叶绿素 a 浓度为因变量 y ,进行回归分析,建立模型. 模型类型包括一元线性、对数函数、逆函数、二次函数、三次函数、幂函数、S 形曲线和指数函数,目的在于通过各模型之间的比较选出反演叶绿素 a 浓度的最佳模型,选择模型的评价指标有决定系数 R^2 、回归估计的标准误差 S 和 F 显著性检验. 二次、三次函数模型拟合效果最佳, R^2 分别达到了 0.923 和 0.921, S 分别为 0.012 和 0.013, F 分别为 101.241 和 98.974;一元线性模型的效果次之, R^2 为 0.763;若仅考虑决定系数 R^2 ,幂函数和指数函数模型的较高,但二者回归估计的标准误差较大,所以整体效果不够理想;逆函数、S 形曲线和对数函数模型的 R^2 都较低,模型拟合效果不好.

表 1 单波段 $R(0^-)_{762}$ 为自变量的模型分析*

Tab.1 Model analysis with independent variable $R(0^-)_{762}$

模型类型	模型方程	R^2	S	F
一元线性	$y = 0.175x - 0.07$	0.763	0.021	57.997
对数函数	$y = 0.097 + 0.112\ln(x)$	0.671	0.025	36.630
逆函数	$y = 0.157 - 0.067/x$	0.578	0.028	24.625
二次函数	$y = 0.138 - 0.451x + 0.433x^2$	0.923	0.012	101.241
三次函数	$y = 0.066 - 0.136x + 0.189x^3$	0.921	0.013	98.974
幂函数	$\ln(y) = 0.092 + 2.094\ln(x)$	0.726	0.409	47.637
S 形曲线	$\ln(y) = -1.225 - 1.278/x$	0.656	0.458	34.296
指数函数	$\ln(y) = 0.004 + 3.179x$	0.780	0.366	63.881

* R^2 为决定系数, S 为回归估计的标准误差, F 为假设检验中的统计量,各模型 F 检验值的实际显著性水平 $\alpha < 0.001$.

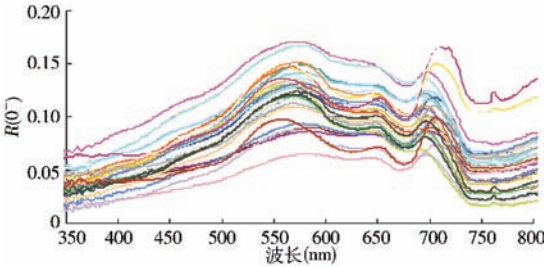


图 2 太湖夏季水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 光谱曲线
Fig.2 Water sub-irradiance ratio $R(0^-)$ spectra curve of Lake Taihu in summer

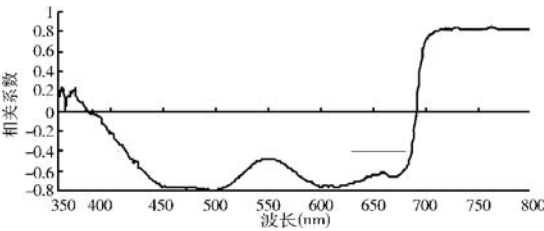


图 3 归一化 $R(0^-)$ 与叶绿素 a 浓度的相关分析
Fig.3 Correlation analysis between normalized $R(0^-)$ and chlorophyll-a concentration

2.4 波段比值模型分析

通过波段比值可以部分地消除大气影响和不同时间和空间上水表粗糙度(小范围和大范围的波浪)的干扰,并在一定程度上减小其它污染物的影响^[15,16]. 通常利用叶绿素浓度与光谱响应间的明显特征,采用不同波段比值法或比值回归法等,以扩大叶绿素吸收峰与叶绿素反射峰或荧光峰间的差异,提取叶绿素浓度信息,有助于对叶绿素 a 含量进行定量遥感^[9,17].

通过各波段与叶绿素 a 浓度的相关分析,选择了三个敏感波长,同时构建两个自变量 x 分别是: $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 和 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$,以叶绿素 a 的浓度作为因变量 y ,建立模型. 模型类型包括一元线性、对数函数、逆函数、二次函数、三次函数、幂函数、S 形曲线和指数函数,旨在选择出较好的模型. 表 2、3 分别给出了关于两个自变量的模型分析结果. 对于自变量是 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 的模型来说,若仅考虑 R^2 评价,三次函数模型最优, R^2 为 0.926,其次是二次函数、一元线性和指数函数(R^2 相同),最差的是逆函数, R^2 为 0.585;若仅考虑 F 检验,二次函数模型最优,其次是一元线性、指数函数,最差的是逆函数;综合分析评价指标,认为利用波段比值二次函数模型对叶绿素 a 浓度的反演是精度高、误差小、可靠性强的最佳模型,逆函数和 S 形曲线模型是较差模型,不适合于叶绿素 a 浓度反演. 对于自变量是 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$ 的模型来说,二次函数模型是最佳模型, R^2 为 0.916,回归估计的标准误差 S 是 0.013, F 检验值是 92.925;三次函数模型较二次函数模型稍差一些,但各项模型评价指标都很高,也不外是种较好的模型;逆函数、S 形曲线和对数函数模型的整体评价效果较差.

表 2 自变量为 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 的模型分析
Tab.2 Model analysis with independent variable $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$

模型类型	模型方程	R^2	S	F
一元线性	$y = 0.136x - 0.046$	0.818	0.018	80.876
对数函数	$y = 0.09\ln(x) + 0.087$	0.705	0.024	43.022
逆函数	$y = 0.136 - 0.053/x$	0.585	0.028	25.350
二次函数	$y = 0.051 - 0.148x + 0.181x^2$	0.919	0.013	96.576
三次函数	$y = 0.178 - 0.695x + 0.895x^2 - 0.288x^3$	0.926	0.013	66.518
幂函数	$\ln(y) = 0.077 + 1.686\ln(x)$	0.765	0.378	58.597
S 形曲线	$\ln(y) = -1.6 - 1.022/x$	0.679	0.442	38.147
指数函数	$\ln(y) = 0.007 + 2.44x$	0.818	0.333	80.647

* 表 2、3 中各参数的含义同表 1.

表 3 自变量为 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$ 的模型分析
Tab.3 Model analysis with independent variable $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$

模型类型	模型方程	R^2	S	F
一元线性	$y = 0.12x - 0.066$	0.802	0.019	72.739
对数函数	$y = 0.11\ln(x) - 0.06$	0.712	0.023	44.398
逆函数	$y = 0.156 - 0.092/x$	0.615	0.027	28.782
二次函数	$y = 0.094 - 0.219x + 0.164x^2$	0.916	0.013	92.925
三次函数	$y = 0.039 - 0.05x + 0.05x^3$	0.914	0.013	90.117
幂函数	$\ln(y) = 0.046 + 2.079\ln(x)$	0.786	0.361	66.301
S 形曲线	$\ln(y) = -1.2 - 1.802/x$	0.722	0.412	46.685
指数函数	$\ln(y) = 0.005 + 2.199x$	0.829	0.323	87.023

利用 2.2.1 节分析得到的峰谷值波长 571 nm、676 nm 和 700 nm 来估算叶绿素 a 的浓度,国内外许多学者针对不同湖泊做了大量的研究,曾提出波段反射率比值有 R_{700}/R_{560} ^[12]、 R_{477}/R_{700} ^[3]、 R_{670}/R_{571} 、 R_{700}/R_{571} 、

R_{700}/R_{670} 、 R_{716}/R_{571} 、 $R_{806}/R_{571}^{[1]}$ 、 $R_{706}/R_{676}^{[2]}$ 以及 700 nm 处峰值^[4].

本文利用前人提出的这些波段比值,结合计算处理得到的太湖夏季 $R(0^-)$ 数据作了模型拟合分析,目的在于分析这些波段比值是否适合利用 $R(0^-)$ 来反演太湖夏季水体叶绿素 a 的浓度,同时与本文提出的波段比值 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 和 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$ 进行对比. 对比模型类型选择上述分析得到的效果最佳的二次函数模型,对比精度指标选择模型的决定系数 R^2 、回归估计的标准误差 S 和 F 检验值. 利用其他学者提出的波段比值所建立的二次函数模型,其精度变化范围较大, R^2 在 0.036–0.824 范围内,说明对于不同的研究水体其波段比值的选择变化较大,特定的波段比值不具有较好的通用性. 这些模型中拟合效果最佳的是以 $R(0^-)_{716}/R(0^-)_{571}$ 为自变量构建二次函数模型, R^2 、 S 和 F 分别为 0.824、0.019 和 39.861,而以波段比值 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 和 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$ 为自变量构建的二次函数模型的 R^2 、 S 和 F 分别为 0.919、0.013、96.576 和 0.916、0.013、92.925,可见本文模型指标均好于其他模型指标(表 4). 因此,利用水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 估算太湖夏季叶绿素 a 的浓度,选择波段比值 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 和 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$,并以其为自变量构建的二次函数模型更为理想,与此同时,说明峰谷值波长不是很适合于结合水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 数据来估算太湖夏季叶绿素 a 的浓度.

表 4 利用其他学者提出的波段比值的模型对比分析*
Tab. 4 Comparison analysis of model with band ratios chosen by others

波段比值	模型方程	R^2	S	F
$R(0^-)_{670}/R(0^-)_{571}$	$y = -0.233 + 0.909x - 0.702x^2$	0.036	0.044	0.320
$R(0^-)_{700}/R(0^-)_{560}$	$y = 0.226 - 0.652x + 0.502x^2$	0.565	0.029	11.029
$R(0^-)_{700}/R(0^-)_{670}$	$y = -0.262 + 0.324x - 0.054x^2$	0.675	0.025	17.683
$R(0^-)_{706}/R(0^-)_{676}$	$y = 0.19 + 0.242x - 0.036x^2$	0.691	0.025	19.029
$R(0^-)_{700}/R(0^-)_{571}$	$y = 0.559 - 1.435x + 0.955x^2$	0.692	0.025	19.075
$R(0^-)_{477}/R(0^-)_{700}$	$y = 0.95 - 2.369x + 1.503x^2$	0.777	0.021	29.582
$R(0^-)_{806}/R(0^-)_{571}$	$y = 0.078 - 0.317x + 0.441x^2$	0.821	0.019	39.091
$R(0^-)_{716}/R(0^-)_{571}$	$y = 0.249 - 0.729x + 0.578x^2$	0.824	0.019	39.861

* R^2 为决定系数, S 为回归估计的标准误差, F 为检验值, x 为波段比值, y 为叶绿素 a 浓度.

2.5 $R(0^-)$ 光谱微分模型分析

光谱微分技术包括对反射光谱进行数学模拟和计算不同阶数的微分(差分)值以迅速地确定光谱弯曲点及最大最小反射率的波长位置,光谱微分处理强调曲线的变化和压缩均值影响^[18]. 一般认为,可用一阶微分处理去除部分线性或接近线性的背景,噪声光谱对目标光谱(必须为非线性的)的影响. Dooding 等的研究认为一阶微分可以消除水面在水体反射光谱的影响^[19]. 由于获得 20 组水表面下辐照度比数据是离散的,一阶微分可以通过如下公式求得:

$$R(0^-)(\lambda_i)' = [R(0^-)(\lambda_{i+1}) - R(0^-)(\lambda_{i-1})]/(\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}) \tag{4}$$

吕恒等^[8]对北部太湖水体反射光谱的一阶微分进行研究,发现在 690 nm 附近的反射率一阶微分值对叶绿素 a 浓度最敏感,并且此处二者存在较大的相关系数. 本文选取四组数据,分别编号 a、b、c、d,叶绿素 a 的浓度分别是 0.009 mg/L、0.007 mg/L、0.138 mg/L 和 0.135 mg/L. a、b 和 c、d 两组数据的叶绿素 a 浓度相差很大,两组数据的一阶微分光谱如图 4 所示,在 690 nm 附近水表面下辐照度比的一阶微分值变化幅度最大,且叶绿素 a 浓度越高变化值越大,图中可以明显看出 690 nm 附近 c、d 组微分值要远高于 a、b 组的,这也和吕恒等^[8]的研究是一致的. 因此,以 690 nm 波长处 $R(0^-)$ 的微分值作为自变量,叶绿素 a 浓度为因变量进行回归分析,得到叶绿素 a 的估算模型为:

- 模型 1: $Chl. a(\text{mg/L}) = 39.949R(0^-)'_{690} + 0.005$
($R^2 = 0.638, S = 0.026, F = 31.778, a < 0.001$)
- 模型 2: $Chl. a(\text{mg/L}) = 6358.76(R(0^-)'_{690})^2 + 20.207 R(0^-)'_{690} + 0.015$
($R^2 = 0.656, S = 0.026, F = 16.208, a < 0.001$)

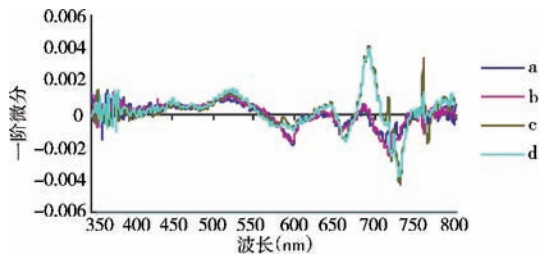


图 4 a 和 b、c 和 d 两组数据的一阶微分光谱
Fig. 4 The first derivative of two groups of data a and b, c and d

式中, R^2 是决定系数; S 是回归估计的标准误差; F 是检验假设; a 是 F 检验值的显著性概率。

模型 1、2 的叶绿素 a 浓度预测值和实测值的散点图, 说明 (图 5、6) 两模型的估算误差比较大, 在叶绿素 a 浓度 0.02 mg/L 附近预测值明显偏高。由此可知, 利用水表面下辐照度比光谱微分反演叶绿素 a 浓度, 并不能获得较高的预测精度, 原因在于一阶微分处理去除的是部分线性背景即水面对水体反射光谱的影响及消除一些噪声光谱, 而水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 反映的是水体内部信息, 其不直接受水面及外界环境的影响, 因此 $R(0^-)$ 光谱微分值并未提高模型反演精度, 这也和估算模型的结果一致。

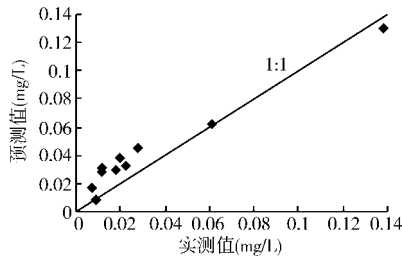


图 5 模型 1 预测值和实测值散点
Fig. 5 Predicted versus measured Chl. a concentration using model 1

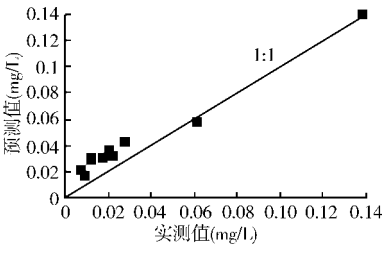


图 6 模型 2 预测值和实测值散点
Fig. 6 Predicted versus measured Chl. a concentration using model 2

3 叶绿素 a 浓度估算模型的精度分析

通过单波段和波段比值的模型分析, 二次函数模型的拟合效果最好, 对三个二次函数模型利用剩余的 10 样本进行预测精度分析, 选择模型的预测精度分析指标有模型决定系数 R^2 、平均相对误差 MPE 和预测误差的标准差 SDE (表 5)。在三个模型的比较中, 参考 R^2 的同时, 认为误差评价指标即 MPE 和 SDE 之和最小的模型为最佳, 由此确定自变量为 $R(0^-)_{762} / R(0^-)_{496}$ 的模型是最佳模型。最佳模型的预测值和实测值散点见图 7, 在叶绿素 a 浓度小于 0.05 mg/L 下预测值和实测值可以很好的逼近, 而夏季太湖水体多数监测点处叶绿素 a 浓度小于 0.05 mg/L, 因此该模型对于太湖夏季水体叶绿素 a 浓度的估算具有一定的实用性。

表 5 太湖夏季叶绿素 a 浓度估算模型的精度分析

Tab. 5 Accuracy analysis of models about Chl-a concentration in Lake Taihu in summer

自变量	模型方程	R^2	MPE(%)	SDE
$R(0^-)_{762} / R(0^-)_{496}$	$y = 0.051 - 0.148x + 0.181x^2$	0.919	8.518	0.026
$R(0^-)_{727} / R(0^-)_{496}$	$y = 0.094 - 0.219x + 0.164x^2$	0.916	8.944	0.023
$R(0^-)_{762}$	$y = 0.138 - 0.451x + 0.433x^2$	0.923	15.745	0.029

4 结语

通过对 2005 年太湖夏季水体常规监测点的光谱观测, 提取水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 信息, 并基于 $R(0^-)$ 信息, 分别应用了单波段模型分析、波段比值模型分析和光谱微分技术, 对太湖夏季水体叶绿素 a 浓度估算模型进行研究。单波段模型分析选择的敏感波长在 762 nm 处, 并以 $R(0^-)_{762}$ 为自变量构建的二次、

三次函数模型拟合效果最佳, R^2 分别达到了 0.923 和 0.921, S 分别为 0.012 和 0.013, F 分别为 101.241 和 98.974, 逆函数、 S 形曲线和对数函数模型的 R^2 都较低, 模型拟合效果不好。在波段比值模型分析中, 选择的波段比值为 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 和 $R(0^-)_{727}/R(0^-)_{496}$, 综合分析评价指标, 认为利用波段比值二次函数模型对叶绿素 a 浓度的反演是精度高、误差小、可靠性强的最佳模型, 逆函数和 S 形曲线模型是较差模型, 不适合于叶绿素 a 浓度反演, 此外, 分析了太湖夏季水体 $R(0^-)$ 光谱曲线峰谷值波长出现的位置, 并利用前人提出的波段比值 (其中利用到了峰谷值波长) 作为自变量, 进行模型的比较分析, 认为峰谷值波长不是很适合于结合水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 数据来估算太湖夏季叶绿素 a 的浓度。利用水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 光谱微分值反演叶绿素 a 浓度, 并不能获得较高的预测精度, 原因在于一阶微分处理去除的是部

分线性背景即水面对水体反射光谱的影响, 以及消除一些噪声光谱, 而水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 反映的是水体内部信息, 其不直接受水面及外界环境的影响。在对单波段和波段比值模型分析中提出的三个较好模型的精度验证过程中, 综合参考误差评价指标, 认为自变量为 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 的模型的效果最佳, 通过图 6 可知, 该模型对太湖夏季水体中的叶绿素 a 浓度估算具有一定的实用性。

由于水表面下辐照度比 $R(0^-)$ 反映的是纯水体内部信息, 其对于水体的光学特性更具有代表性, 所以利用 $R(0^-)$ 来估算水质参数理论上将更加准确, 但是目前很少有高精度的相关仪器直接观测得到 $R(0^-)$, 多数是通过光谱仪获得水表面上的水体反射率信息进行分析, 本文中 $R(0^-)$ 的提取是通过具有一定观测角度获得的水体光谱信息推算得到的, 其中推算参数如 Q 、 ρ_{sw} 、 r 等受环境因素 (如风速、太阳高度角等) 影响较大, 且准确的参数会大大提高模型的反演精度, 因而更准确的参数选择对特定的研究对象还有待进一步的研究。此外, 叶绿素 a 在敏感波段位置 762 nm、727 nm 处的生物光学特性还比较模糊, 有待更多的学者进行研究探讨。

5 参考文献

- [1] Arenz R F, Jr, Lewis W M *et al.* Determination of chlorophyll and dissolve organic carbon from reflectance data for Colorado reservoirs. *Int J Remote Sensing*, 1996, **17**: 1547 – 1566.
- [2] Dekker A G, Peters S W. The use of the thematic mapper for the analysis of eutrophic lakes: a case study in the Netherlands. *Int J Remote Sensing*, 1993, **14**(5): 799 – 821.
- [3] Vertucci F A, Likens G E. Spectral reflectance and water quality of Adirondack mountain region lakes. *Limno & Oceanogr*, 1989, **34**(8): 1656 – 1672.
- [4] 疏小舟, 尹 球, 匡定波. 内陆水体藻类叶绿素浓度与反射光谱特征的关系. *遥感学报*, 2000, **4**(1): 41 – 45.
- [5] 李素菊, 吴 倩, 王学军. 巢湖浮游植物叶绿素含量与反射光谱特征的关系. *湖泊科学*, 2002, **14**(3): 228 – 234.
- [6] 唐军武, 田国良, 汪小勇等. 水体光谱测量与分析 I: 水面以上测量法. *遥感学报*, 2004, **8**(1): 37 – 44.
- [7] 马荣华, 戴锦芳. 应用实测光谱估测太湖梅梁湾附近水体叶绿素浓度. *遥感学报*, 2005, **9**(1): 78 – 86.
- [8] 吕 恒, 李新国, 周连义等. 基于反射光谱的太湖北部叶绿素 a 浓度定量估算. *湖泊科学*, 2006, **18**(4): 349 – 355.

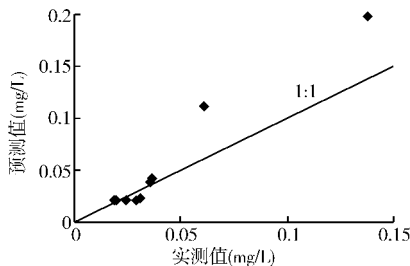


图 7 自变量为 $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$ 的叶绿素 a 浓度估算模型的预测值和实测值散点

Fig. 7 Predicted versus measured Chl. a concentration using model with independent variable $R(0^-)_{762}/R(0^-)_{496}$

- [9] 段洪涛, 张 柏, 宋开山等. 查干湖叶绿素 a 浓度高光谱定量模型研究. 环境科学, 2006, 27(3): 503 – 507.
- [10] Hermanj G. Optical teledetection of chlorophyll a in turbid inland waters. *Environ Sci Technol*, 1999, 33: 1127 – 1132.
- [11] Hoogenboom H J, Dekker A G, Althuis A. Simulation of AVIRIS sensitivity for detecting Chlorophyll over coastal and inland waters. *Remote Sensing of Environment*, 1998, 65: 333 – 340.
- [12] Gitelson A. The peak near 700nm on radiance spectra of algae and water relationships of its magnitude and position with chlorophyll concentration. *Int J Remote Sensing*, 1993, 13(17): 3367 – 3373.
- [13] 张运林, 吴生才, 秦伯强等. 太湖梅梁湾有色可溶性有机物对光的吸收. 中国环境科学, 2006, 24(4): 405 – 409.
- [14] 焦红波, 查 勇, 李云梅等. 基于高光谱遥感反射比的太湖水体叶绿素 a 含量估算模型. 遥感学报, 2006, 10(2): 242 – 248.
- [15] Pulliainen J, Kallio K, Eloheimo K. A semi-operative approach to lake water quality retrieval from remote sensing data. *The Science of the Total Environment*, 2001, 268: 79 – 93.
- [16] Koponen S, Pulliainen J, Kallio K *et al.* Lake water quality classification with airborne hyperspectral spectrometer and simulated MERIS data. *Remote Sensing of Environment*, 2002, 79: 51 – 59.
- [17] Mittenzwey H G, Gitelson A A. Determination of chlorophyll of inland waters on the basis of spectral reflectance. *Limno & Oceanogr*, 1992, 37: 147 – 149.
- [18] 浦瑞良, 宫 鹏. 高光谱遥感及其应用. 北京: 高等教育出版社, 2000.
- [19] Gooding, D G, Han L *et al.* Analysis of suspended solids in water using remotely sensed high resolution derivative spectra. *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing*, 1993, 59(4): 505 – 510.
- [20] Gordon H R, Brown O B, Jacobs M M. Computed relationships between the inherent and apparent optical properties of a flat homogeneous ocean. *Appl Opt*, 14(2): 417 – 427.