基于半分析模型的波段最优化组合反演混浊太湖水体叶绿素 a^{*}

周冠华^{1,2}, 柳钦火¹, 马荣华³, 田国良¹

(1: 中国科学院遥感应用研究所遥感科学国家重点实验室, 北京 100101)

(2: 北京师范大学资源学院, 北京 100875)

(3: 中国科学院南京地理与湖泊研究所, 南京 210008)

摘 要: 内陆水体叶绿素 a 浓度定量反演是水质遥感的热点与难点. 本文基于对内陆水体叶绿素 a、悬浮物、溶解有机物与水分子的光谱特征分析, 从半分析生物光学模型出发, 利用太湖实测的水面 ASD 高光谱遥感数据三波段组合, 进行迭代优化, 得到与叶绿素浓度密切相关而受悬浮物与黄色物质影响小的最优波段组合模型, 反演精度较高, 其决定系数和均方根误差分别为 0.8358、3.816 mg/m³, 该方法可以有效地反演高浓度悬浮物主导光学特性的水体叶绿素 a 浓度.

关键词: 太湖; 高光谱; 半分析模型; 叶绿素 a; 组合优化

Inversion of chlorophyll-a concentration in turbid water of Lake Taihu based on optimized multi-spectral combination

ZHOU Guanhua^{1,2}, LIU Qinhuo¹, MA Ronghua³ & TIAN Guoliang¹

(1: *State Key Laboratory of Remote Sensing Science, Institute of Remote Sensing Application, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, P.R.China*)

(2: *College of Resources Sciences and Technology, Beijing Normal University, Beijing 100875, P.R.China*)

(3: *Nanjing Institute of Geography and Limnology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, P.R.China*)

Abstract: Inversion of phytoplankton chlorophyll-a concentration of inland water body is hotspot and difficulty problem in water quality remote sensing. This paper provides a method to resolve this problem. Basing on the characteristic spectral analysis of chlorophyll-a, suspended matter, chromatic dissolved inorganic matter and pure water molecule in inland water body, the three-band model was spectrally tuned in accord with optical properties of Lake Taihu to optimize spectral bands combination for accurate chlorophyll-a concentration estimation. The remarkable linear relationship was established between analytically measured chlorophyll-a concentration and the three-band model. Depended on the favorable theory basis of the model developed, this method achieved good result with high determination coefficient 0.8358 and low root-mean-square error (3.816 mg/m³), which was proved to be an useful tool to retrieval chlorophyll-a concentration in very turbid, hyper-eutrophic inland waters.

Keywords: Lake Taihu; semi-analytical model; hyperspectral; chlorophyll-a; optimum combination

内陆水体水质参数的遥感反演精度制约了内陆水质遥感的实用化与业务化运行, 尤其是对于高浓度悬浮物主导光学特性的水体, 悬浮物的光学特性掩盖了叶绿素浓度对光谱的响应, 使得叶绿素浓度的提取非常困难^[1-2]. 水质参数的估计通常是基于经验或半经验方法, 建立遥感测量的离水辐亮度或遥感反射率与实测水质参数之间的相关性. 在大洋一类水体中, 蓝绿波段比值算法可以满足业务化运行的精度需求^[3]. 国内外许多学者对此进行了研究^[1,4-6], 并取得了较大的进展. 二类水体成分浓度范围跨度很大, 且成分

* 中国科学院知识创新工程重要方向项目(KZCX2-YW-313, KZCX3-SW-338)、国家自然科学基金重点项目(40730525)和国家自然科学基金项目(40671138)联合资助. 2007-08-05 收稿; 2007-10-22 收修改稿. 周冠华, 男, 1976 年生, 博士, 讲师; E-mail: zhoughuanhua@163.com.

复杂多样, 悬浮泥沙与黄色物质增多. 悬浮泥沙的后向散射与黄色物质的强烈吸收直接影响了水体的光学性质, 使得对一类水体有效的反演算法往往在二类水体中失效^[3]. 尤其是对于高叶绿素a浓度的富营养化水体, 蓝光信号很弱, 基本降至探测极限以下, 蓝绿波段比值很小, 使蓝绿波段比值算法几乎不可用^[7]. 因此, 必须基于研究区的水体光谱特征, 充分考虑其区域性与季节性的差异, 选择受其它物质干扰小而与叶绿素a显著相关的波段组合算法是内陆水体叶绿素a遥感的关键.

本文基于以上研究思路, 建立适合于混浊太湖水体的叶绿素a遥感反演模型, 具体研究步骤如下: 1)太湖水体实测遥感反射率的光谱特征分析; 2)从半分析生物光学模型出发, 建立基于三波段遥感反射率的适用于混浊水体的叶绿素a遥感反演模型, 其中两个波段的差值用来增强叶绿素信息, 另外一个波段用来消除其他因素的影响; 3)选择合适的波段组合, 根据太湖水体的光学特性进行迭代计算, 得到最优的波段组合遥感反演模型; 4)用三波段最优组合反演模型估算太湖叶绿素a浓度并对反演结果进行验证.

2 实验数据

本文以典型内陆湖泊-太湖为研究区, 于2004年10月20-29日在太湖均匀布设了67个实验点, 测量了水面光谱数据与水质采样数据以及固有光学特性数据^[8], 采样点的空间位置(图1). 根据NASA SeaWiFS海洋光学测量规范^[9], 使用ASD公司生产的便携式地物波谱仪FieldSpec进行表观光学量的观测, 经处理后得到离水辐亮度、归一化离水辐亮度与遥感反射率. 为了消除不同时间测量光照条件差异的影响, 本研究采用遥感反射率. 实验中由于天气原因, 在第17号实验点遥感反射率的测量结果出现异常, 第48号实验点没有进行遥感反射率测量, 因此65个实验点的遥感反射率数据有效. 光谱测量结果(图2)表明, 光谱曲线呈现典型的内陆水体光谱特征. 叶绿素a的测定采用分光光度计法, 用0.45 μm 的Whatman GF/C滤纸过滤, 90%热乙醇提取, 然后用7230分光光度计检测.

图1 太湖采样点位置

Fig.1 Spatial distribution of sampling point locations in Lake Taihu

图2 太湖实测遥感反射率光谱

Fig.2 Remote sensing reflectance of Lake Taihu

3 反演模型

3.1 特征光谱分析

地物光谱特性是遥感地物识别与信息提取的物理基础。为了定量提取水体中的叶绿素 a 含量, 必须对内陆水体研究区的光学特性与光谱表现形式有深入的认识, 进而选择这些可遥感的水质指标的敏感波段, 并优化波段组合。前人对富营养化水体的光谱特征进行了广泛的研究^[10-12], 其主要的光谱特征是 670nm 附近的吸收谷与 700nm 附近的反射峰。当叶绿素 a 浓度增加时, 该峰值往长波方向移动^[13-14], 并且峰值大小与叶绿素 a 的浓度相关。

先分析本实验数据单一特征波段与叶绿素 a 浓度之间的相关性。在红光波段 670nm 叶绿素 a 的吸收强度(用该波长反射率 R_{670} 的倒数表示)与叶绿素 a 浓度的相关性很小(图 3); 同样, 在近红外波段(780nm)的反射率 R_{780} 与叶绿素 a 浓度的相关性也不大(图 4), 由此表明除了叶绿素 a 的影响外, 水体的光谱特性受其它成分的影响非常大。700nm 附近叶绿素反射峰的位置与叶绿素 a 浓度之间的关系(图 5)。当叶绿素 a 浓度增加时, 反射率峰值整体趋势往长波方向移动; 而叶绿素 a 浓度与峰值的大小相关性不显著(图 6)。同时由太湖水体遥感反射率曲线(图 2)近红外波段的高反射率可以看出, 当时太湖悬浮泥沙的浓度非常高。由当时现场实验测量的先验知识可知, 水体非常混浊, 无机物与非生命有机悬浮物主导了该光谱区域的反射率。由此可见, 由于受其它水体物质的严重干扰, 即使在叶绿素 a 的特征波段, 利用单一特征波段也难以有效地提取叶绿素 a 的浓度。为此, 必须综合考虑水体各组分对总遥感信号的贡献, 进行特征波段的组合优化才能有效地混浊水体叶绿素 a 的浓度。

图3 $1/R_{670}$ 与叶绿素 a 浓度的相关性Fig.3 $1/R_{670}$ vs. Chl.a concentration 图4 R_{780} 与叶绿素 a 浓度的相关性

Fig.4 Reflectance in 780nm vs. Chl.a concentration

图5 叶绿素 a 浓度与 700nm 附近反射率峰位置的关系

Fig.5 Chl.a concentration vs. the reflectance peak near 700nm

图6 叶绿素 a 浓度与 700nm 附近反射率峰值大小的关系

Fig.6 Chl.a concentration vs. the reflectance peak magnitude near 700nm

3.2 遥感建模

根据水体光学的基本理论, 水体的遥感反射率 R_{rs} 定义为离水辐亮度与水面总入射辐照度的比值, 其可由水体的固有光学特性参数与经验参数加以描述^[15], 半分析模型的反演方法中常用遥感反射率来提取水体组分信息:

$$R_{rs} \propto \frac{f}{Q} \frac{b_b(\lambda)}{[a(\lambda) + b_b(\lambda)]} \quad (1)$$

式中: f 为受太阳天顶角和水体体散射影响的参数; $Q = E_u(0^-)/L_u(0^-)$, 为刚好处于水面以下的上行辐照度与上行辐亮度之间的转换系数, 是描述水体光场分布的参数, 受不同水体、太阳角度、观测角度影响而不同. 对于同一水体, 在特定的太阳高度角与方位角测量时, f/Q 可视为常数^[15]. a 为水体的总吸收系数, 水体的吸收主要受纯水、叶绿素(Chl)、总悬浮物(TSM)、黄色物质(CDOM)的影响. 因此, a 可分解为:

$$a = a_w + a_{chl} + a_{TSM} + a_{CDOM} \quad (2)$$

其中, a_w , a_{chl} , a_{TSM} , a_{CDOM} 分别为纯水、叶绿素、总悬浮物、黄色物质的吸收系数. 为方便起见, 不妨令: $a_0 = a_{TSM} + a_{CDOM}$ 为总的后向散射系数, 由于叶绿素和黄色物质的后向散射非常弱, 通常可忽略, 因此 b_b 可分解为:

$$b_b = b_{b,w} + b_{b,TSM} \quad (3)$$

式中, $b_{b,w}$, $b_{b,TSM}$ 分别为纯水和悬浮物的后向散射系数.

由于黄色物质、叶绿素与无机悬浮物的吸收光谱在蓝绿波段具有很强的相似性, 为了有效地提取叶绿素 a 的信息, 我们首先利用其在红光波段 670nm 附近的最大吸收谷波段 λ_1 (在通常的内陆水体中, 吸收谷的波长范围为 $660\text{nm} \leq \lambda_1 \leq 690\text{nm}$). 利用遥感反射率的倒数建立一个直接关联叶绿素 a 吸收的函数关系:

$$R_{rs}^{-1}(\lambda_1) \propto \frac{Q}{f} \frac{a_{chl}(\lambda_1) + a_w(\lambda_1) + a_0(\lambda_1) + b_b(\lambda_1)}{b_b(\lambda_1)} \quad (4)$$

为了最大程度地减小 b_b 与 $a_0(\lambda_1)$ 的影响, 从而有效地分离 $a_{chl}(\lambda_1)$ 的贡献, 引入叶绿素 a 的荧光峰波段 λ_2 (在通常的内陆水体中, 荧光峰的波长范围为 $660\text{nm} \leq \lambda_2 \leq 690\text{nm}$)^[16]. 由于黄色物质与无机悬浮物的吸收系数呈负指数规律衰减, 二者在红光波段相差很小, 因此 $a_0(\lambda_1) \approx a_0(\lambda_2)$, 而 $a_{chl}(\lambda_1) \gg a_{chl}(\lambda_2)$. 这样, 通过选择两个合适的波段 λ_1, λ_2 , 计算其遥感反射率倒数之差:

$$R_{rs}^{-1}(\lambda_1) - R_{rs}^{-1}(\lambda_2) \propto \frac{Q}{f} \left(\frac{a(\lambda_1)}{b_b(\lambda_1)} - \frac{a(\lambda_2)}{b_b(\lambda_2)} \right) \quad (5)$$

由于在 650–750nm 波段范围内, 总后向散射系数 b_b 变化不大, 可认为定值^[11,17], 即 $b_b(\lambda_1) \approx b_b(\lambda_2)$. 因此, 由上式可得,

$$R_{rs}^{-1}(\lambda_1) - R_{rs}^{-1}(\lambda_2) \propto \frac{Q}{f} \frac{a(\lambda_1) - a(\lambda_2)}{b_b} = \frac{Q}{f} \frac{a_{chl}(\lambda_1) + a_w(\lambda_1) - a_w(\lambda_2)}{b_b} \quad (6)$$

由于纯水的吸收系数是常数, 即 $a_w(\lambda_1) - a_w(\lambda_2)$ 为定值. 因此, 上式可表示为:

$$R_{rs}^{-1}(\lambda_1) - R_{rs}^{-1}(\lambda_2) \propto \frac{Q}{f} \frac{a_{chl}(\lambda_1)}{b_b} \quad (7)$$

这样, 就建立了两个特征波段的遥感反射率与叶绿素a吸收系数之间的显式表达式, 该表达式凸显了叶绿素a的浓度信息. 此外, 为了消除水体光场分布参数 Q 、 f 与总后向散射系数 b_b 的影响, 引入近红外波段 λ_3 的反射率 $R_{rs}(\lambda_3)$. 在该波段附近, 叶绿素a、悬浮物与黄色物质的吸收系数都接近于0, 即 $a_{chl}(\lambda_3) \approx 0$, $a_0(\lambda_3) \approx 0$. 此时, 纯水的吸收作用主导了水体的光学特性, 即 $a(\lambda_3) \approx a_w(\lambda_3)$, 且 $a(\lambda_3) \gg b_b(\lambda_3)$; 总后向散射系数 b_b 随波段变化不大, 可视作常数. 据此, 该波段的选择范围为: $730\text{nm} \leq \lambda_1 \leq 800\text{nm}$ ^[16], 因此, 该波段范围的遥感反射率可表示为:

$$R_{rs}(\lambda_3) \propto \frac{f}{Q} \frac{b_b}{a + b_b} \approx \frac{f}{Q} \frac{b_b}{a_w + b_b} \quad (8)$$

由于 $a(\lambda_3) \gg b_b(\lambda_3)$, 因此 $a_w + b_b \approx a_w$, 由上式可得,

$$R_{rs}(\lambda_3) \propto \frac{f}{Q} \frac{b_b}{a_w(\lambda_3)} \quad (9)$$

由于纯水的吸收系数为常数, 因此, 上式可进一步简化为,

$$R_{rs}(\lambda_3) \propto \frac{f}{Q} b_b \quad (10)$$

将(7)式和(10)相乘, 便得到三个特征波段遥感反射率与叶绿素a密切相关的表达式:

$$[R_{rs}^{-1}(\lambda_1) - R_{rs}^{-1}(\lambda_2)] R_{rs}(\lambda_3) \propto a_{chl} \quad (11)$$

通过组合三个波段的遥感反射率可分离出 a_{chl} , 使组合结果正比于叶绿素a浓度, 且受水体其它物质的影响较小. 既然水体叶绿素a的吸收系数与其浓度有关, 故可将叶绿素a的吸收系数表示为其浓度与单位吸收系数的乘积:

$$a_{chl}(\lambda) = C \times a^*_{chl}(\lambda) \quad (12)$$

式中, $a_{chl}(\lambda)$ 为波长 λ 处的叶绿素 a 吸收系数; C 为叶绿素 a 浓度; $a^*_{chl}(\lambda)$ 为叶绿素 a 单位吸收系数, 随水体的变化很大. 随叶绿素浓度的不同, 其单位吸收系数有一个数量级的差别^[18]. 在特定光谱区域, 算法的反演精度最主要受水体成分生物光学参数的变化与测量的反射率的不确定性的影响. 如果固有光学量不确定, 就不可能参数化生物光学模型. 为了提高叶绿素 a 的估算精度, 应该根据太湖的水体光学特性组合优化特征波段的位置, 以减少这些误差源的影响.

3.3 波段组合优化

为了确定 λ_1 、 λ_2 、 λ_3 的最佳位置, 采用迭代的方法, 使得 $[R_{rs}^{-1}(\lambda_1) - R_{rs}^{-1}(\lambda_2)] R_{rs}(\lambda_3)$ 与叶绿素a浓度的相关性最好. 波段组合优化的步骤如下:

1) 根据前文分析, 三波段的初始位置分别为, 670nm、700nm与750nm, 其对应的光谱范围分别为 660–690nm、680–710nm与720–780nm. 因此, λ_1^1 的波段范围取 660–690nm(注: 下标表示波段序号, 上标表示迭代次数), λ_2 、 λ_3 的初始位置分别为 $\lambda_2^1=700\text{nm}$ 、 $\lambda_3^1=750\text{nm}$, 计算 $[R_{rs}^{-1}(\lambda_1^1) - R_{rs}^{-1}(700)] R_{rs}(750)$ 与叶绿素a浓度的相关系数. 根据计算结果, 最大相关系数为0.827292(表1), 对应的波段为664nm, 因此在下一步迭代计算 λ_2 时, λ_1 设置为664nm.

2) 令 $\lambda_1^2=664\text{nm}$ 、 λ_2^2 的取值范围为 690–710nm, $\lambda_3^2=750\text{nm}$, 计算 $[R_{rs}^{-1}(664) - R_{rs}^{-1}(\lambda_2^2)] R_{rs}(750)$ 与叶绿素a浓度的相关系数, 选择最大相关系数0.887133对应的波段688nm作为下一步优化 λ_3 时 λ_2 的值.

3) 令 $\lambda_1^3=664\text{nm}$ 、 $\lambda_2^3=688\text{nm}$ 、 λ_3^3 的取值范围为 720–780nm, 计算 $[R_{rs}^{-1}(664) - R_{rs}^{-1}(688)] R_{rs}(\lambda_3^3)$ 与叶绿素a浓度的相关系数, 此时 λ_3 的最佳位置为728nm. 因此经过第一轮迭代计算, λ_1 、 λ_2 、 λ_3 分别为664nm、688nm与728nm.

表1 λ_1 、 λ_2 、 λ_3 最佳波段表

Tab.1 The optimum wavelength of λ_1 , λ_2 and λ_3

迭代过程	λ_1 (nm)	λ_2 (nm)	λ_3 (nm)	最佳波段(nm)	最大相关系数
第一次迭代	660-690	700	750	664	0.827292
	664	680-710	750	688	0.887133
	664	688	720-780	728	0.896139
第二次迭代	660-685	688	728	666	0.899082
	666	680-710	728	688	0.899082
	666	688	720-780	725	0.901452
第三次迭代	660-670	688	725	666	0.901452
	666	680-690	725	688	0.901452
	666	688	720-730	725	0.901452

4)按照上述过程重新优化 λ_1 、 λ_2 、 λ_3 时,直到各个最佳波段位置保持不变,且 $[R_{rs}^{-1}(\lambda_1^n)-R_{rs}^{-1}(\lambda_2^n)] R_{rs}(\lambda_3^n)$ 与叶绿素a的相关系数也保持不变. 经过三次迭代计算后,第三次优化后的最佳波段与第二次完全一致,而且相关系数完全相等. 因此,可最终确定 λ_1 、 λ_2 、 λ_3 的最佳位置分别为666nm、688nm和725nm,从而完成了最优波段组合迭代计算过程.

3.4 反演模型与验证

根据上面的波段组合迭代计算结果,以 $[R_{rs}^{-1}(666)-R_{rs}^{-1}(688)] R_{rs}(725)$ 的值为自变量,叶绿素a的浓度为因变量,在太湖实测有效的54个采样点中随机选择46个样本数据基于统计回归的方法,建立叶绿素a浓度的反演模型如下(图7):

$$y=246.4x+12.46(N=46, R^2=0.8358, RMSE=3.816)$$

(13)

模型的决定系数为 0.8358, 均方根误差为 3.816mg/m³, 远小于样本的极大极小值差 50.1542mg/m³. 将剩下的 18 个检验样本数据代入以上模型中,其验证结果如图 8 所示. 模型的均方根误差为 2.985mg/m³, 远小于检验样本极值差 37.73 mg/m³, 表明用该模型反演混浊的内陆水体—太湖叶绿素 a 浓度结果较为理想.

图 7 基于波段组合优化的 Chl.a 反演模型
Fig.7 Estimating of Chl.a concentration
with three optimum bands

图 8 基于波段优化的 Chl.a 反演模型验证
Fig.8 Validation of the three optimum
bands model

4 结论

本文基于对混浊的内陆水体—太湖的光谱特征分析,从半分析模型出发,利用实测的ASD高光谱遥感数据三个特征波段组合,进行迭代优化,得到与叶绿素浓度密切相关而受悬浮物与黄色物质影响小的

最优波段组合, 有效地解决了高浓度悬浮物主导光学特性的水体叶绿素a浓度定量反演问题。与常规的统计方法相比, 该方法的背后是基于水体光谱的特征分析与水体各组分在特征波段贡献的全局考虑, 因此, 不失为内陆水体反演叶绿素a浓度的有效方法。

5 参考文献

- [1] Bukata RP, Jerome JH, Kondratyev KY *et al.* Optical properties and remote sensing of inland and coastal waters. Boca Raton, FL, CRC Press, 1995.
- [2] 周冠华. 内陆水体光学特性模拟与遥感反演研究[博士学位论文]. 中国科学院遥感应用研究所, 2007.
- [3] IOCCG Report3-Remote Sensing of Ocean Colour in Coastal, and Other Optically-Complex. Waters, 2000.
- [4] 唐军武. 海洋光学特性模拟与遥感模型[博士学位论文]. 中国科学院遥感应用研究所, 1999.
- [5] 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.
- [6] 马荣华, 戴锦芳. 结合 Landsat ETM 与实测光谱估测太湖叶绿素及悬浮物含量. 湖泊科学, 2005, **17**(2): 97-103.
- [7] 赵冬至, 张丰收, 杜 飞等. 不同藻类水体太阳激发的叶绿素荧光峰(SICF)特性研究. 遥感学报, 2005, **9**(2): 265-270.
- [8] Ma R, Tang J, Dai J *et al.* Absorption and scattering properties of water body in Lake Taihu, China: absorption. *International Journal of Remote Sensing*, 2006, **27**(19): 4277-4304.
- [9] Mueller JL, Austin RW. Ocean optics protocols for SeaWiFS validation. NASA Technical Memorandum 104566. Greenbelt, MD, NASA Goddard Space Flight Center, 1995.
- [10] Dekker AG, Peters SWM. 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): 799-822.
- [11] Gons HJ. Optical teledetection of chlorophyll a in turbid inland waters. *Environ Sci Technol*, 1999, **33**: 1127-1132.
- [12] Gitelson AA, Yacobi YZ, Schalles JF *et al.* Remote estimation of phytoplankton density in productive waters. *Advanc in Limnol*, 2000, **55**: 121-136.
- [13] Vos WL, Donze M, Buiteveld H. On the reflectance spectrum of algae in water: the nature of the peak at 700 nm and its shift with varying concentration. Technical Report Communication on Sanitary Engineering and water Management, Delft, The Netherlands, 1986: 86-22.
- [14] 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*, 1992, **13**(17): 3367-3373.
- [15] Gordon HR, Brown OB, Evans RH *et al.* A semianalytic radiance model of ocean color. *J Geophys Res*, 1988, **93**: 10909-10924.
- [16] Dall'Olmo G, Gitelson A. Effect of bio-optical parameter variability on the remote estimation of chlorophyll.a concentration in turbid productive waters: experimental results. *Applied Optics*, 2005, **44**(3): 412-422.
- [17] Melin F, Zibordi G, Berthon JF. Assessment of SeaWiFS atmospheric and marine products for the Northern Adriatic Sea. *IEEE Trans Geosci Remote Sensing*, 2003, **41**: 548-558.
- [18] Bricaud Annick, Babin Marcel, Morel Andre *et al.* Variability in the chlorophyll-specific absorption coefficients of natural phytoplankton: analysis and parameterization. *Journal of Geophysical Research*, 1995, **100**(c7): 13321-13332.