J. Lake Sci.(湖泊科学),2010,**22**(3):337-348
http://www.jlakes.org. E-mail:jlakes@niglas.ac.cn
© 2010 by *Journal of Lake Sciences*

太湖水体吸收分解(Ⅰ):悬浮颗粒与浮游植物色素的分离*

郝景燕[1,2],马荣华[1],段洪涛[1],张寿选[1,2]
(1:中国科学院南京地理与湖泊研究所,南京 210008)
(2:中国科学院研究生院,北京 100049)

摘　要:以2008年10月太湖实测数据为基础,用改进的指数函数和线性法拟合非色素颗粒物吸收和浮游植物色素吸收,根据二者的加和关系,建立总悬浮颗粒物吸收分解模型,依据参量的不同,分别构建了两个分解模型(Mod-4 和 Mod-5),两者都可以较好的分解出太湖水体浮游植物色素吸收和非色素颗粒物吸收,但 Mod-5 的拟合精度稍高于Mod-4. 研究结果对于进一步探索和建立太湖区域生物光学模型,精确反演水质参数具有一定意义.
关键词:太湖;吸收分解;悬浮颗粒;浮游植物色素;非色素颗粒

The absorption spectral decomposition of water in Lake Taihu, China (Ⅰ): the decomposition of absorption due to suspend particulate matter and due to phytoplankton pigment

HAO Jingyan[1,2], MA Ronghua[1], DUAN Hongtao[1] & ZHANG Shouxuan[1,2]
(1:*Nanjing Institute of Geography & Limnology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing* 210008, *P. R. China*)
(2:*Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100049, *P. R. China*)

Abstract: Based on the data measured *in situ* in Lake Taihu in October 2008, two models, namely, Mod-4 with five unknown parameters and Mod-5 with two unknown parameters, were developed to decompose the absorption due to suspend particulate matter (SPM) into absorptions due to phytoplankton pigment and non-pigment particulate absorption. The result showed that both of the models were good for the accurate decomposition. But Mod-5 was better than Mod-4 and Mod-5 can be preferentially recommended, which was helpful to develop an appropriable and applicable bio-optical model for retrieval of water quality parameter in Lake Taihu.
Keywords: Lake Taihu; absorption decomposition; suspend particulate matter; phytoplankton pigment; non-pigment particulate matter

目前,湖泊水色遥感的研究热点已转移至以生物光学模型为基础的半分析算法[1],其基础是水体的固有光学量和表观光学量,而吸收系数是最重要的固有光学量之一. 通过吸收系数,一方面可以建立与水色参数含量的定量关系,另一方面可以更好地理解水体的表观光学量. 另外,吸收系数影响着水生植物的光合性能、生长速度[2]以及水体的初级生产力[3]. 对于Ⅰ类水体,影响水体总吸收的因子较为单一,主要为浮游植物色素,非色素颗粒物一般认为来源于浮游植物的降解. Ⅱ类水体的情况则较为复杂,除纯水外,主要来源于浮游植物色素、非色素颗粒物以及 CDOM(Colored Dissolved Organic Matter)等三类物质,其吸收分别记为 a_{ph}、a_d 和 a_g. 数据的获取过程中,一般首先得到的是颗粒物总吸收 a_p,由 a_d 和 a_{ph} 加和而成($a_p = a_d + a_{ph}$)[4];a_{ph} 直接包含有叶绿素浓度信息,a_{ph} 的精确提取与分离显得尤为重要,目前方法主要有两种,(1) 实验室测试法:首先测出总悬浮颗粒物吸收,然后再测出非色素颗粒物吸收,两者相减,便得到了浮游植物色素的吸收;(2) 模型分解法:通过数学模型将测定的总悬浮颗粒物吸收分解为非色素颗粒物和浮游植物色素的吸收. 早

* 中国科学院知识创新工程方向性项目(KZCX2-YW-QN311)、国家自然科学基金项目(40871168,40801137)、中国科学院知识创新工程重大项目(KZCX1-YW-14-3)和水专项课题(2008ZX07101-014-01)联合资助. 2009-08-20 收稿;2009-12-02 收修改稿. 郝景燕,女,1985 年生,硕士研究生;E-mail:hjyz8511@gmail.com.

在1982年,就有学者尝试从颗粒物吸收中分离出叶绿素a的贡献[5]. 1986年,Kishino[6]首次提出用甲醇萃取法分离出浮游植物的吸收,后经一系列改进,国际上广泛采用,并被纳入NASA SeaWiFS测量规范. 随着遥感技术的发展,一些学者以颗粒物的遥感光谱特征为基础,建立了吸收分解方法. Bricaud等[7]采用基于光谱标准化的方法把研究区域的总悬浮颗粒吸收系数分解为浮游植物色素吸收和非色素颗粒的吸收,并使用另一批独立的来自马尾藻海的非色素颗粒吸收数据对该方法进行了验证. Wang Guifen等[8]则根据光谱相关关系在南海区域对海水总悬浮颗粒进行分解,得到了较好的结果. 上述的研究都基于Ⅰ类水体. Gallegos等[9]则在Ⅱ类水体浮游植物色素吸收不占主导优势的水体中,以矩阵求逆和吸收光谱标准化等为基础,建立了一系列数学方程,成功地把总吸收分解为浮游植物色素吸收、有色可溶性有机物以及非色素颗粒物的吸收. 赵巧华等[10]利用标准光谱,将悬浮颗粒物的吸收分成藻类和非藻类颗粒物吸收,然后将藻类颗粒物的吸收系数与通过甲醇浸泡法所得的结果进行分析对比;随后[11],又利用同种藻标准化吸收光谱基本恒定不变的特性,对实验室培养的纯种藻形成的混合藻的吸收系数进行了分离. 本文试图以吸收光谱变化规律为基础,通过分析总悬浮颗粒物、浮游植物色素以及非色素颗粒物的吸收特性,试图寻求一种更为简单便捷的方法,建立高精度的总悬浮颗粒物吸收分解模型,以服务于太湖区域生物光学模型及其基于生物光学模型的水色参数遥感定量反演.

1 数据与方法

1.1 数据获取与处理

2008年10月在太湖共布设样点100个(图1),现场测量遥感反射比、后向散射系数、水深、水温、风速、风向等;同时采集水样,放入冷藏箱保存,带回到实验室,测量分析后获得叶绿素a浓度、总悬浮物(SPM)浓度、无机悬浮物(SPIM)浓度、有机悬浮物(SPOM)浓度和溶解性有机碳(DOC)浓度(图2)和以及浮游植物色素吸收a_{ph}、非藻类色素吸收a_d、CDOM吸收a_g.

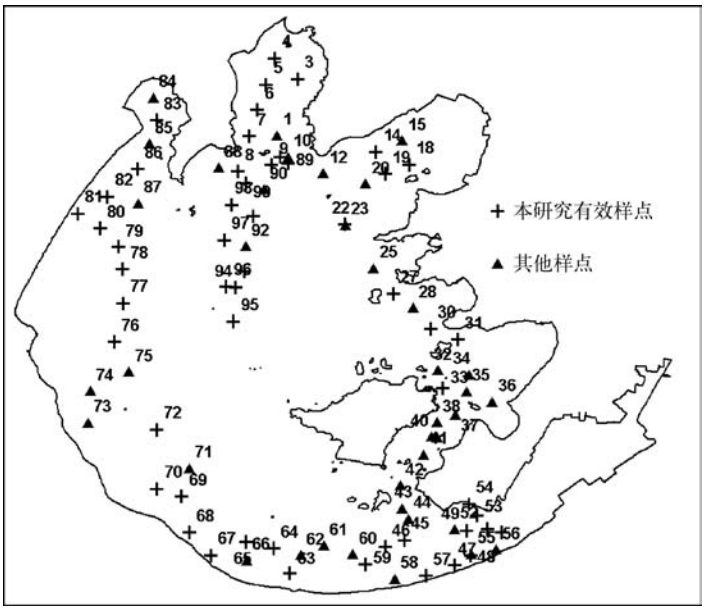


图1 2008年10月太湖采样点分布

Fig. 1 Spatial distribution of sampling points in Lake Taihu, October 2008

Chl. a浓度测量采用热乙醇萃取法[12]. 颗粒物的吸收测量采用滤膜富集法[5,13-14],利用UV-2401PC型分光光度计测定滤膜上总颗粒物吸收系数,然后用90%的甲醇溶液浸泡样品滤膜4h,萃取浮游植物色素,重新过滤测定,计算得到非色素颗粒的吸收系数a_d. 悬浮颗粒吸收系数与非色素颗粒吸收系数相减,即得到浮游植物色素吸收系数a_{ph}. 水体光谱测量采用现在Ⅱ类水体通用的水表面以上测量法[15],使用仪器为美国ASD公司生产的FieldSpecRPro FR便携式分光辐射光谱仪.

剔除现场测量数据异常点和实验室测量数据异常点后，共有 61 个有效样点供本次研究使用(图 1)，其中，前 50 个样点参与建立模型，剩余的 11 个样点用来对模型进行检验. 吸收特性模拟时，选用 400－700nm 波段范围，该波段范围包含了影响浮游植物色素吸收的所有典型特征波段.

数据处理选用 MATLAB 7.0 和 SPSS 13.0. 引入残差、均方根误差(Root Mean Square Error, *RMSE*)和相对误差(Relative Error，*RE*)作为统计量来检验模拟值和实测值的一致程度，分别如下式：

$$\text{残差} = \text{真实值}-\text{模拟值} = a_r - a_m \tag{1}$$

$$RMSE = \sqrt{\sum (a_m - a_r)^2 / n} \tag{2}$$

$$RE = \frac{1}{n}\sum \frac{|a_m - a_r|}{a_r} \times 100\% \tag{3}$$

式中，a_m和 a_r分别为模拟值和实测值.

1.2 光谱模拟

1.2.1 a_d模拟　非色素颗粒物吸收一般遵守指数衰减规律[16-18]，有：

$$a_d(\lambda) = a_d(\lambda_0)\exp[S_d(\lambda - \lambda_0)] \tag{4}$$

式中，$a_d(\lambda)$为非色素颗粒物在波长 λ 处的吸收(m^{-1})；λ_0是参考波长(nm)，一般取 440nm[19-20]；S_d是曲线斜率，决定着非色素颗粒物吸收随波长的增加而下降的速率，S_d值的获取一般通过对吸收光谱的函数拟合后获得，拟合方法和选用的光谱范围不同，获得的值随之有所差别[21]. 诸多研究表明[22-25]，增加背景参数 K，可以得到更好的拟合效果，如下式(记为 Mod-1)：

$$a_d(\lambda) = a_d(\lambda_0)\exp[S_d(\lambda - \lambda_0)] + K \tag{5}$$

然而，50 个样点的 Mod-1 模拟没有获得满意的效果，为此建立了如(6)式的拟合模型，记为 Mod-2：

$$a_d(\lambda) = a_d(440)\exp[-S_d(\lambda - 440) + b(\lambda - 440)^2 + c] \quad (400 \leqslant \lambda \leqslant 700) \tag{6}$$

首先对 $a_d(\lambda)$建立关于 $a_d(440)$和 λ 的指数模型，式(6)中每个样点 301 个波段的 a_d值相当于 301 个观测，利用这 301 个观测值对每个样点进行对数线性回归，最后得到 50 个样点的参数 S_d、b 和 c(表 1).

表 1 非色素颗粒物吸收光谱模型参数(Mod-2)

Tab. 1 The modeling results for a_d by Mod-2

系数	均值	变化范围	标准差
S_d	0.0106	0.0092－0.0130	0.0008
$b(\times 10^{-5})$	1.9289	0.9146－2.5113	0.2791
c	0.0087	－0.0303－0.0297	0.0140
RMSE	0.0303	0.0071－0.1343	0.0254
RE(%)	2.21	1.27－5.12	0.80

Mod-1 的 *RMSE* 均值约为 Mod-2 均值的 4.5 倍，*RE* 约为 Mod-2 的 5.8 倍(图 2)；另外，Mod-2 的模拟 R^2 值均在 0.99 附近，远大于 Mod-1(图 3). 因此，Mod-2 远优于

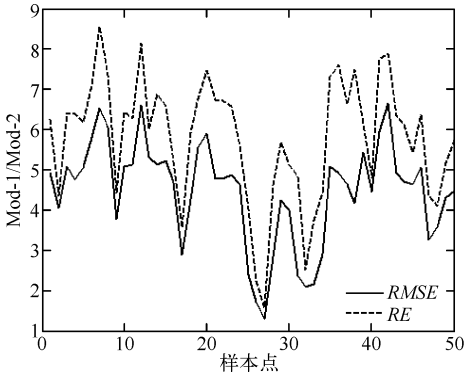


图 2 Mod-1 和 Mod-2 的误差对比分析

Fig. 2 Comparative analysis on errors of Mod-1 and Mod-2

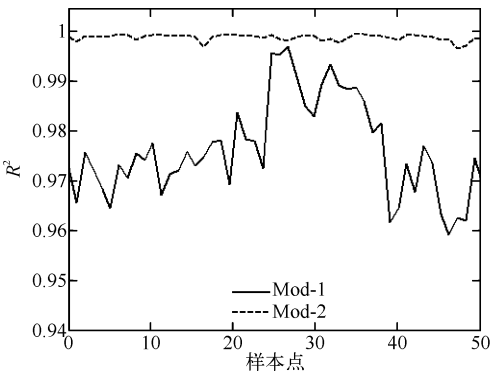


图 3 a_d拟合的 R^2 变化

Fig. 3 The determination coefficient R^2

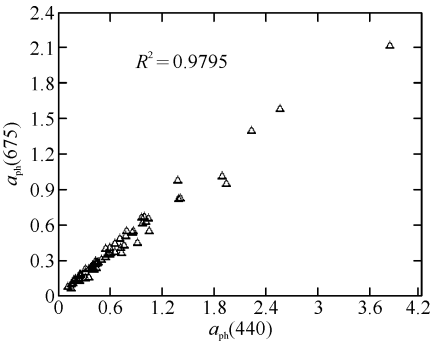


图 4 $a_{ph}(675)$ $a_{ph}(440)$的相关关系

Fig.4 The correlation between $a_{ph}(675)$ and $a_{ph}(440)$

Mod-1;通过(6)式,在已知 $a_d(440)$、S_d,b 和 c 的情况下,就可以高精度地获得任意波长处的 a_d值.

1.2.2 a_{ph}模拟 相对于非色素颗粒物来说,浮游植物色素的吸收较为复杂,它受藻类种群、光照和色素细胞包囊等诸多因素的影响[26-27]. 在波长 440nm 和 675nm 处,存在明显的吸收峰,为浮游植物色素吸收特征所在;440nm 左右的吸收峰由叶绿素 a 和一些辅助色素所致,675nm 左右的吸收峰主要由叶绿素 a 的吸收所致. 但 $a_{ph}(675)$与$a_{ph}(440)$高度相关(图 4),R^2达到了 0.9795,在模型构造时,不予同时考虑. 对于二类水体而言,675nm 的吸收特征始终存在[28],因此选择 $a_{ph}(675)$作为模型构建的主要因子. 50 个样点的实测浮游植物色素吸收分析表明,式(7)可以更好地表达浮游植物色素吸收随波长的变化关系($R^2>0.88$,图 5a;$RMSE<0.14$,图 5b),记为 Mod-3:

$$a_{ph}(\lambda)=c_1(\lambda)+c_2(\lambda)a_{ph}(675) \tag{7}$$

式中,c_1、c_2是波长的函数,其中 $c_2(\lambda)$揭示了其他波段处的 $a_{ph}(\lambda)$与 $a_{ph}(675)$的比值变化规律,反映了某一藻种或藻群的固有变化特性. 对太湖秋季水体而言,c_1随波长的变动很小(图 5c),可以认为是一定值,其均值为 $-0.0084(\pm0.0087)$;c_2是波长的函数(图 5c),在整个波长范围内的取值见表 2. 因此已知 $a_{ph}(675)$的情况下,根据(7)式,可以获得任意波长处的 a_{ph}值.

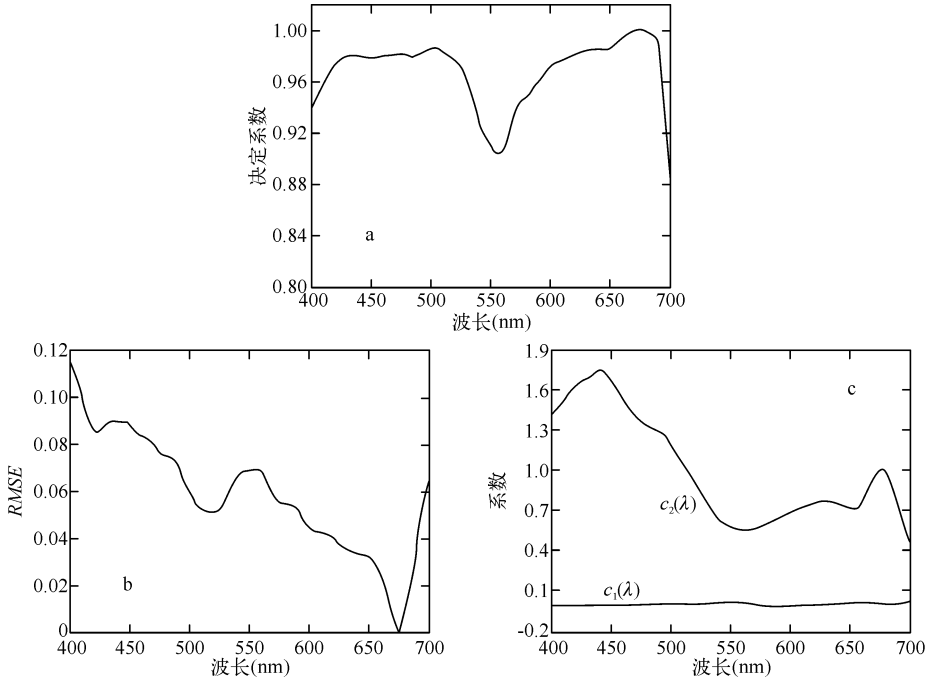


图 5 整个波段的决定系数 R^2(a),均方根误差(b),c_1和 c_2随波长的变化(c)

Fig. 5 The determination coefficient R^2(a), root mean square error(b), the regression coefficients $c_1(\lambda)$ and $c_2(\lambda)$(c)

表 2 c_2在整个波长范围内的取值

Tab. 2 The value of c_2 at the whole bands

波长(nm)	c_2取值(无单位)	波长(nm)	c_2取值(无单位)	波长(nm)	c_2取值(无单位)	波长(nm)	c_2取值(无单位)	波长(nm)	c_2取值(无单位)	波长(nm)	c_2取值(无单位)	波长(nm)	c_2取值(无单位)
400	1.4256	430	1.7077	490	1.2792	540	0.6285	595	0.6805	650	0.7069	690	0.7532
401	1.4368	435	1.7379	495	1.242	545	0.5943	600	0.6972	655	0.7172	691	0.7193
402	1.4483	440	1.7492	500	1.1862	550	0.5699	605	0.714	660	0.7623	692	0.6853
403	1.4601	445	1.7166	505	1.1157	555	0.5525	610	0.7335	665	0.845	693	0.6518
404	1.4722	450	1.6491	510	1.0396	560	0.5452	615	0.7547	670	0.9386	694	0.619
405	1.4845	455	1.576	515	0.9643	565	0.5497	620	0.7722	675	1.0000	695	0.5874
406	1.4968	460	1.5114	520	0.8899	570	0.5645	625	0.7798	680	0.994	696	0.5572
410	1.5466	465	1.4547	525	0.8144	575	0.585	630	0.774	685	0.9057	697	0.5284
415	1.6052	470	1.4065	530	0.7415	580	0.6075	635	0.756	687	0.8500	698	0.5014
420	1.6511	475	1.3671	485	1.3056	585	0.633	640	0.7331	688	0.8191	699	0.4761
425	1.681	480	1.3334	535	0.6778	590	0.6592	645	0.7151	689	0.7866	700	0.4525

1.3 光谱分解

根据吸收组分线性叠加原理，

$$a_p = a_d + a_{ph} \tag{8}$$

把(6)式和(7)式代入(8)式，则有：

$$a_p(\lambda) = c_1(\lambda) + c_2(\lambda)a_{ph}(675) + a_d(440)\exp[-S_d(\lambda-440) + b(\lambda-440)^2 + c] \tag{9}$$

根据式(7)分析，认为 c_1和 c_2对于太湖秋季水体而言是已知量. 式(6)所做的模拟是针对每个样点得到的一组估计，原则上不同样点的估计是不同的，因此 S_d、b、c 为未知量，此时把分解模型记为 Mod-4，即式(10)，该模型包括 $a_{ph}(675)$、$a_d(440)$、S_d、b、c 等 5 个未知量. 实际上，式(6)所得到的每个样点的估计值波动很小(表 1)，因此可以得到不依赖于样本点的估计值，分别记为 S_d^0、b^0和 c^0，此时把分解模型记为 Mod-5，即式(11)，仅包括 $a_{ph}(675)$和 $a_d(440)$这 2 个未知量.

(1) 分解模型 Mod-4：

$$a_p(\lambda_i) = c_1(\lambda_i) + c_2(\lambda_i)a_{ph}(675) + a_d(440)\exp[-S_d(\lambda_i-440) + b(\lambda_i-440)^2 + c] \tag{10}$$

式中，有 5 个未知量，即 $a_{ph}(675)$、$a_d(440)$、S_d、b 和 c，可以采用 Newton-Raphson 方法进行迭代求解.

(2) 分解模型 Mod-5：

$$a_p(\lambda_i) = c_1(\lambda_i) + c_2(\lambda_i)a_{ph}(675) + a_d(440)\exp[-S_d^0(\lambda_i-440) + b^0(\lambda_i-440)^2 + c^0] \tag{11}$$

式中，有 2 个未知量，即 $a_{ph}(675)$和 $a_d(440)$，因此可以表达矩阵形式为：

$$\begin{bmatrix} a_p(\lambda_1) - c_1(\lambda_1) \\ a_p(\lambda_2) - c_1(\lambda_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_2(\lambda_1), \exp(-S_d^0(\lambda_1-440) + b^0(\lambda_1-440)^2 + c^0) \\ c_2(\lambda_2), \exp(-S_d^0(\lambda_2-440) + b^0(\lambda_2-440)^2 + c^0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{ph}(675) \\ a_d(440) \end{bmatrix} \tag{12}$$

整合所有 50 个观测点的数据，得到不依赖于样本点的估计值 $S_d^0 = 0.0108$、$b^0 = 2.1410 \times 10^{-5}$和 $c^0 = 0.0136$($R^2 = 0.9969$)，此时可以通过 2 个波段的 a_p实测值建立方程组求解.

Mod-4 和 Mod-5 的求解受到所选取波段的影响，可能导致不稳定，即不同的波段可能得到不同的估计，波动较大. 因此在波段选取时，除要满足必要条件外(即 Mod-4 求解时至少 5 个波段、Mod-5 求解时至少 2 个波段)，应该选取更多的波段，以得到未知量的稳定值；此时，可根据条件平差原理[29]，建立条件方程，按高斯约化法求解. 另外，在选取必要的波段时，首先要考虑特征波段，如 440、490、550、625、650、675nm 等.

2 结果与分析

首先使用 Mod-4 和 Mod-5 分别对 11 个验证样点的 a_p进行分解，得到分解后的 a_{dm}和 a_{phm}；然后分别与对应的实验室实测得到的 a_{dr}和 a_{phr}进行对比分析(图 6)，表明 Mod-5 的模拟效果好于 Mod-4，11 个样点的验证均取得了理想的模拟效果，具体分析见下文.

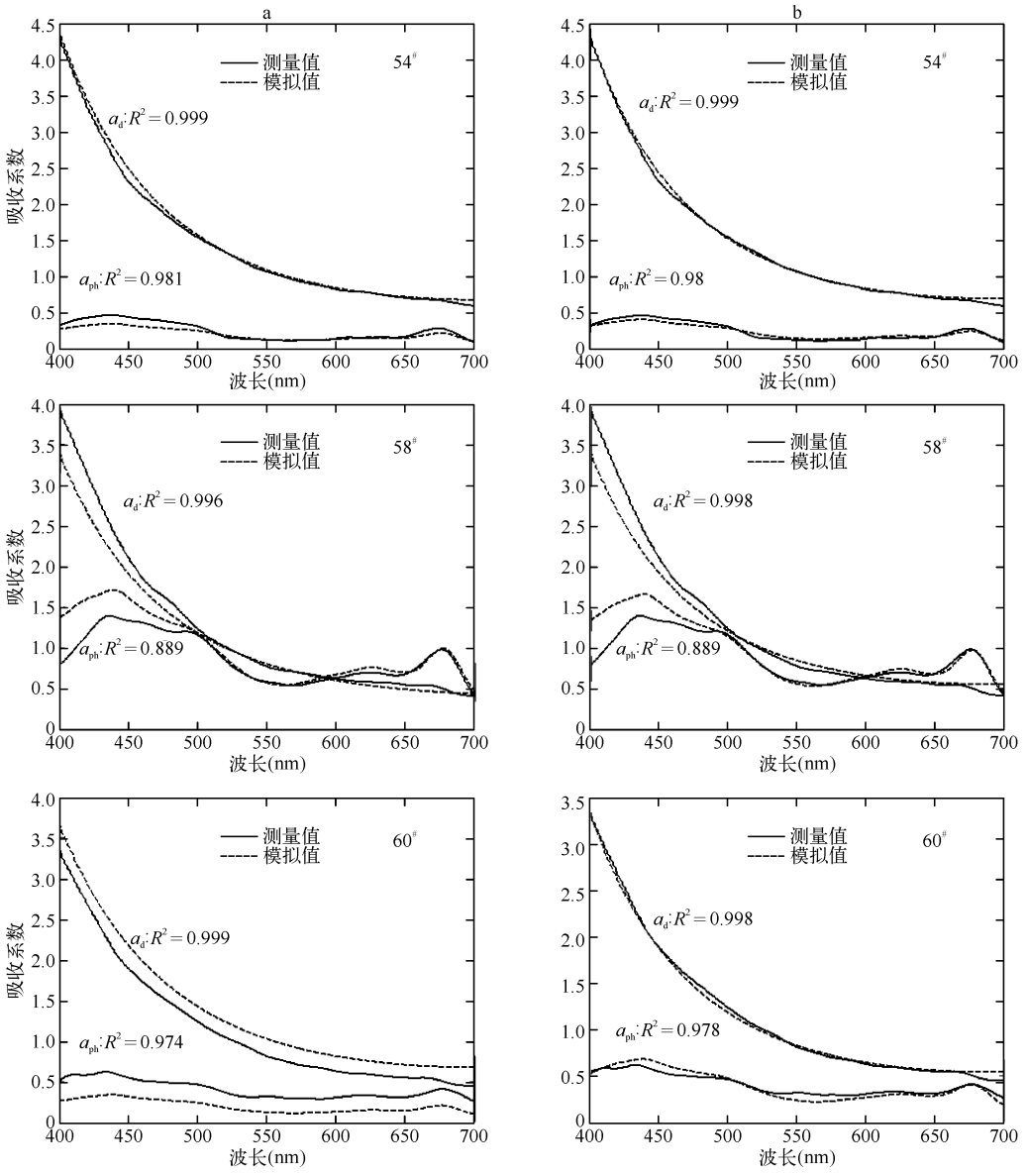


图 6 典型采样点(54#,58#,60#)的 a_{ph} 和 a_d 实测值和模拟值的对比:Mod-4(a),Mod-5(b)

Fig. 6 Measured value and simulated result of a_{ph} and a_d for some sample cites(54#,58#,60#): Mod-4(a), Mod-5(b)

2.1 分解模型的误差与稳定性评价

a_d 的吸收模拟在整个波段范围内都达到了较好的效果,Mod-4 和 Mod-5 的拟合决定系数 R^2 均值分别为 0.9981 (±0.0006) 和 0.9983 (±0.0012);对于 a_{ph},这两个模型的 R^2 均值分别为 0.9633 (±0.0282) 和 0.9625(±0.0282). 浮游藻类色素吸收的主要特征波段 440、490、550、625、650、675nm 处的吸收特征在两个模型的模拟中都得到了很好的体现. 但在短波波段 450 - 490nm 范围内,拟合效果相比其他波段较差,典型波段实验室测量值和模型模拟值之间的散点图也充分说明了这一点(图 7). Mod-5 对特征波段吸收的模拟效果明显好于 Mod-4,最重要的特征波段 440、490、625、675nm 处的模拟值和实测值的 R^2 均值,Mod-4 为 0.7420,而 Mod-5 达 0.8146(图 7).

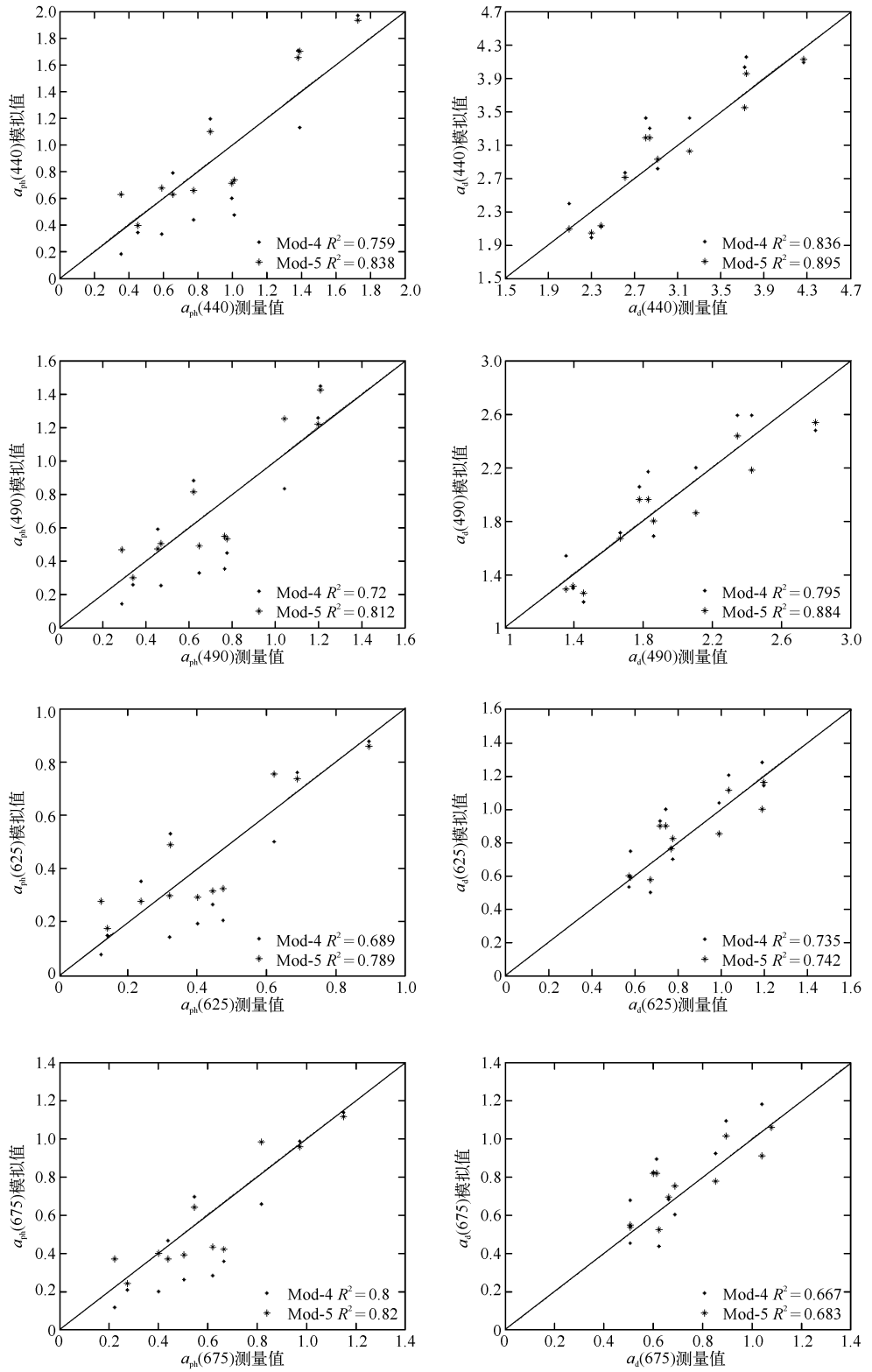


图 7 几个典型波段的估计值和真实值的散点图

Fig. 7 Scatters between predicted and measured a_{ph} of several spectral bands

2.1.1 模型误差 残差能直观的表达实测值和模拟值的偏差. 对于每个检验样点,选取 400 - 700nm 波长范围内的 20 个波段(取值为 $500+k\times5, k=1,2,\cdots,20$)处的 a_p 值进行非线性回归分析,得到参数 $a_{ph}(675)$, $a_d(440)$, S_d, b, c 的估计. 代入(10)式,分别得到 11 个检测样点的 Mod-4 残差(图 8). Mod-5 中,由于已经得到估计值 $S_d^0=0.0108$, $b^0=2.1410\times10^{-5}$, $c^0=0.0136$,此时模型只有两个未知数,选取包含浮游植物色素的几个典型特征波段(400、412、440、490、500、550、600、625、650、675、700nm)处的 a_p 值进行回归分析,获得参数 $a_{ph}(675)$ 和 $a_d(440)$,然后得到 11 个检测样点的 Mod-5 残差(图 8).

使用分解模型 Mod-4 和 Mod-5,得到的 a_d 的残差变化范围分别为 -0.6177 至 0.5471 和 -0.3807 至 0.5324,均值分别为 -0.0838 (±0.2022) 和 0.0020 (±0.1587),最大值和最小值分别位于约 410 和 430nm 波段处,最小值均位于 400nm 处;相对误差的变化范围分别为 29.68% - 45.87% 和 4.08% - 24.06% (图 9),均值分别为 36.02% (±2.68%) 和 9.43% (±3.62%),最大值均位于约 700nm 波段处,最小值分别位于 674nm 波段处和 400nm 波段处. 因此,在整个波段范围内,对 a_d 而言,Mod-5 的波动范围远小于 Mod-4,但在 550nm 以后的波段范围内,二者均表现出很好的稳定性(图 8a).

Mod-4 和 Mod-5 中 a_{ph} 的残差变化范围分别为 -0.5894 至 0.5585 和 -0.5477 至 0.2949(图 8b),均值分别为 0.0820 (±0.1988) 和 -0.0053 (±0.1494),最大值分别位于约 440nm 和 410nm 波段处、最小值均位于 400nm 波段处. Mod-4 和 Mod-5 的相对误差的变化范围分别为 29.68% - 45.87% 和 18.90% -31.68% (图 9),均值分别为 36.02% (±2.68%) 和 25.05% (±3.33%),最大值分别位于 400nm 和 676nm 波段处、最小值位于 679nm 和 400nm 波段处.

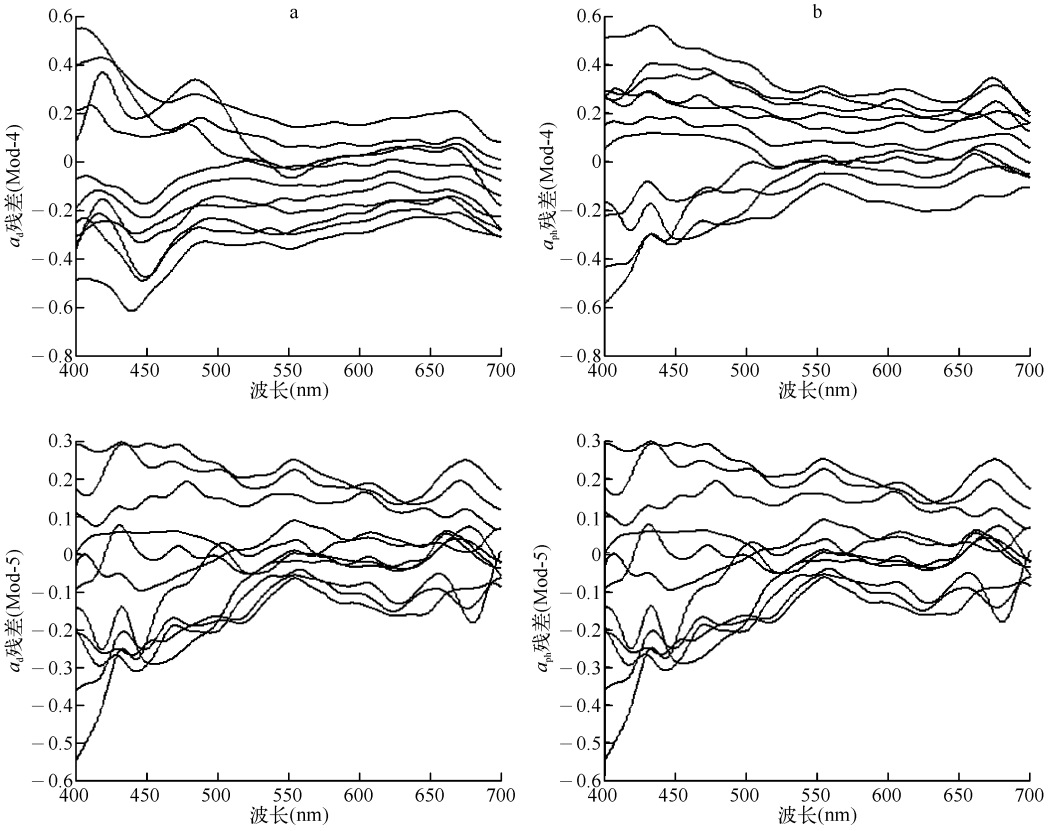


图 8 Mod-4 和 Mod-5 的残差变化范围:a_d(a);a_{ph}(b)

Fig. 8 The range of residuals of Mod-4 and Mod-5: a_d(a); a_{ph}(b)

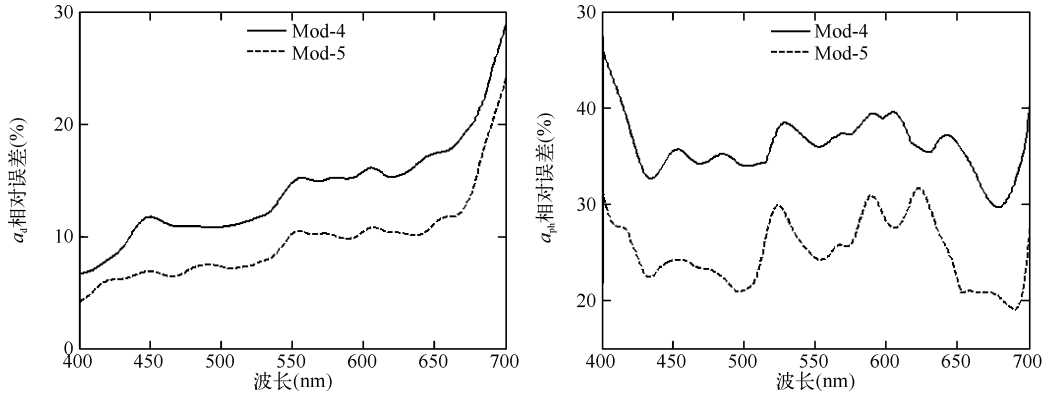


图 9 Mod-4 和 Mod-5 的相对误差

Fig. 9 The range of *RE* of Mod-4 and Mod-5

上述分析表明，Mod-4 与 Mod-5 均具有较好的模拟精度，误差水平基本一致，但 Mod-5 精度稍高于 Mod-4. 相对于 Mod-4，Mod-5 只需求解线性方程组，计算量相比 Mod-4 的非线性方程大大减少. 因此认为对于那些特定水体，或者物质组成较为稳定的水体而言，Mod-5 是较为理想的分解模型；否则 Mod-4 较为适用.

2.1.2 模型的稳定性　此处仅对最佳模型 Mod-5 的稳定性进行分析评价. 以样点 54#为例，拟定给予 a_p 值 ±5% 的扰动(图 10)，扰动变化的步长为 1%，然后得到 a_d 及 a_{ph} 的变化范围，结果表明(图 11)，a_p 变动 5% 时，a_{ph} 和 a_d 均有类似对应的变动(表 3)，变化具有同步性、一致性，且变化范围较小，表明模型具有较好的稳定性，其中，a_d 的拟合公式表明 a_d 拟合值各波段成比例，各波段得到的

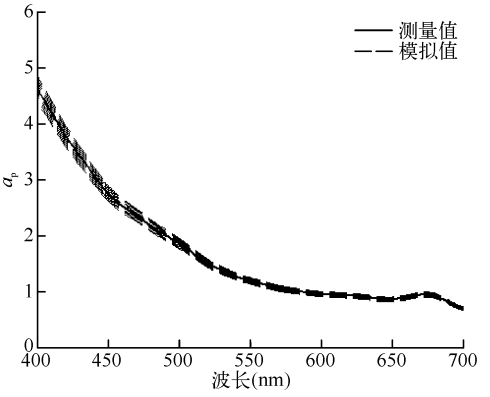


图 10 a_p 变动范围

Fig. 10 The range of a_p

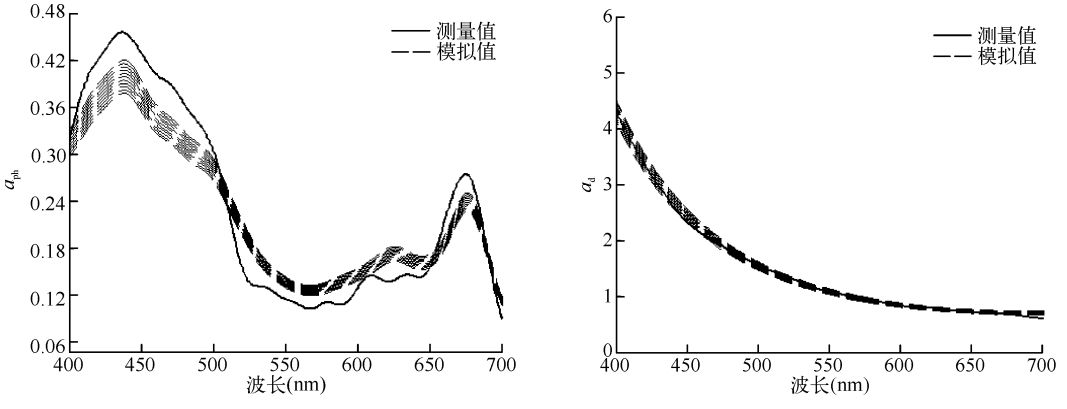


图 11 a_{ph} 和 a_d 拟合值的变化范围(实线为实测值，虚线为拟合的上下限)

Fig. 11 The range of a_{ph} and a_d

变动比率是一样的,所以 a_d 扰动值标准差皆为 0 值. 以典型波段 440nm 和 675nm 为例,$a_{ph}(440)$ 实测值为 0.4535,无扰动预测值为 0.3984,扰动范围为[0.3772,0.4195],$a_{ph}(675)$ 实测值为 0.2750,无扰动预测值为 0.2388,扰动范围为[0.2267,0.2508]. a_{ph} 和 a_d 的扰动均在实测值 5% 以内.

表 3 a_{ph} 和 a_d 变动情况

Tab. 3 Variable ranges of a_{ph} and a_d

a_p 变动范围	a_{ph} 扰动均值	a_{ph} 扰动值标准差	a_d 扰动均值	a_d 扰动值标准差
1%	0.0106	0.0004	0.0099	0
2%	0.0211	0.0009	0.0199	0
3%	0.0317	0.0013	0.0298	0
4%	0.0422	0.0017	0.0397	0
5%	0.0528	0.0021	0.0496	0

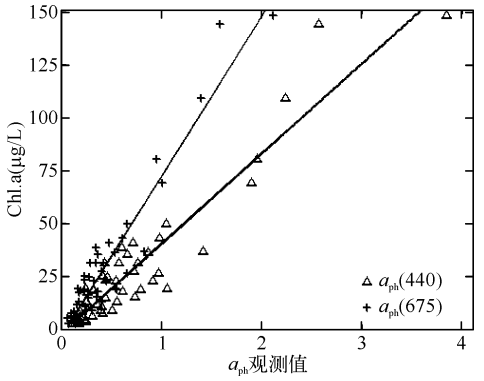


图 12 浮游藻类色素吸收 $a_{ph}(440)$ 和 $a_{ph}(675)$ 实测值和实测 Chl. a 浓度的关系

Fig. 12 The relationship between the measured $a_{ph}(440)$, measured $a_{ph}(675)$ and Chl. a concentration

2.2 分解模型的实用性评价

440nm 和 675nm 波段是浮游藻类色素的特征波段,两处波段的吸收值与实测 Chl. a 浓度(Chl. a_r)均具有很好的相关性(图 12),可以表示为式(13)和(14).

$$\text{Chl. a} = 42.5292a_{ph}(440) - 1.9699;R^2 = 0.8911,N = 50 \quad (13)$$

$$\text{Chl. a} = 75.7363a_{ph}(675) - 3.3407;R^2 = 0.9086,N = 50 \quad (14)$$

通过 Mod-4 与 Mod-5,获得全部检测样点的 $a_{phm}(440)$ 和 $a_{phm}(675)$,带入方程(13)和(14),可以得到模拟的 Chl. a 浓度,记为 Chl. a_m;另外,把利用公式(13)和(14),通过实测的 $a_{ph}(440)$ 和 $a_{ph}(675)$ 得到的 Chl. a 浓度记为 Chl. a_e. 两个波段处,Chl. a_r 和 Chl. a_m 的 R^2 均在 0.70 以上(图 13),虽然低于 Chl. a_r 和Chl. a_e 之间的 R^2 值($R^2 = 0.813$),但仍具有很好的相关性. 当使用 440nm 波段的 a_{ph} 值进行预测时,由 Mod-4 和 Mod-5 得到检测样点 Chl. a_m 的相对误差分别为 35.25% 和 32.00%,稍大于 Chl. a_e 的 16.27%;当使用 675nm

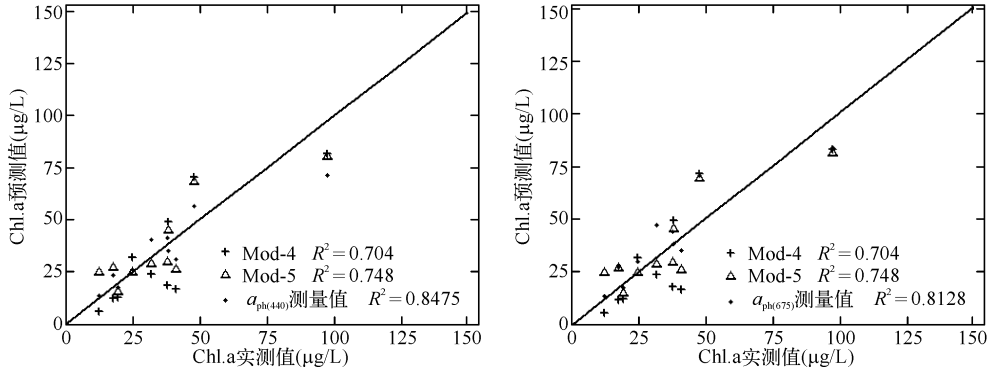


图 13 Chl. a 浓度实测值和实测值的散点图

Fig. 13 Scatters between measured and predicted Chl. a concentration

波段的 a_{ph} 值进行预测时，由 Mod-4 和 Mod-5 得到检测样点 Chl. a_m 的相对误差分别为 36.23% 和 32.20%，稍大于 Chl. a_c 的 24.85%，均表现出较好的精度. 因此，使用分解模型获得的浮游植物色素吸收，可以直接用来估测叶绿素 a 的含量，表明分解模型具有较好的实用性.

3 结论

相对于现在国际通用的实验室滤膜测量法获取 a_d 和 a_{ph}，萃取试剂容易去除非色素有机部分[7,30-31]，可以更精度地分离出浮游植物色素的吸收. 本文的 a_p 分解模型较为稳定，简单易操作，并具有较高的精度. 另外，多余观测下的条件平差有利于提高模型的分解精度. 固定或特定水体的物质组成较为稳定，具有 2 个未知数的 Mod-5 是较为理想的分解模型，推荐使用. 否则，对那些变化较快、不是十分稳定的水体而言，具有 5 个未知数的 Mod-4 较为适用. 对模型在其他区域的推广应用，将在下一步的研究中完成.

4 参考文献

[1] 马荣华，唐军武，段洪涛等. 湖泊水色遥感研究进展. 湖泊科学，2009，**21**(2)：143-158.

[2] Kiefer DA，Mitchell BG. A simple steady state description of phytoplankton growth based on absorption cross section and quantum efficiency. *Limnol & Oceanogr*，1983，**28**：770-776.

[3] Morel A. Light and marine photosynthesis：A model with geochemical and climatological implications. *Progress in Oceanography*，1989，**23**：1545-1562.

[4] Prieur L，Sathyendranath S. An optical classification of coastal and oceanic waters based on the specific spectral absorption curves of phytoplankton pigments，dissolved organic matter，and other particulate materials. *Limnol & Oceanogr*，1981，**26**：671-689.

[5] Kiefer DA，SooHoo JB. Spectral absorption by marine particles of coastal waters of Baja California. *Limnol & Oceanogr*，1982，**27**：492-499.

[6] Kishino MN，Okami M，Takahashi *et al*. Light utilization efficiency and quantum yield of phytoplankton in a thermally stratified sea. *Limnol & Oceanogr*，1986，**31**：557-566.

[7] Bricaud A，Stramski D. Spectral absorption coefficients of living phytoplankton and nonalgal biogenous matter：A comparison between the Peru upwelling area and the Sargasso Sea. *Limnol & Oceanogr*，1990，**35**(3)：562-563.

[8] Wang Guifen，Cao Wenxi，Yang Dingtian. Partitioning particulate absorption coefficient into contributions of phytoplankton and nonalgal particles：A case study in the northern South China Sea. *Estuarine，Coastal and Shelf Science*，2008，**78**：513-520.

[9] Gallegos CL，Neale PJ. Partitioning spectral absorption in case 2 waters：discrimination of dissolved and particulate components. *Applied Optics*，2002，**41**：4220-4233.

[10] 赵巧华，张运林. 太湖梅梁湾水体悬浮颗粒物吸收系数的分离. 湖泊科学，2006，**18**(4)：356-362.

[11] 赵巧华，秦伯强. 藻类的光谱吸收特征及其混合藻吸收系数的分离. 环境科学学报，2008，**28**(2)：313-318.

[12] 陈宇炜，陈开宁. 浮游植物叶绿素测定的“热乙醇法”及其测定误差的探讨. 湖泊科学，2006，**18**(5)：550-552.

[13] Yentsch CS. Measurement of visible light absorption by particulate matter in the ocean. *Limnol & Oceanogr*，1962，**7**：207-217.

[14] Mitchell BG，Kiefer DA. Determination of absorption and fluorescence excitation spectra for phytoplankton. In：Hoin-Hanseno *et al* eds. Marine Phytoplankton and Productivity. Berlin：Springer，1984：157-169.

[15] 唐军武，田国梁，汪小勇. 水体光谱测量与分析：水面以上测量法. 遥感学报，2004，**8**(1)：37-44.

[16] Rosler CS. Theoretical and experimental approaches to improve the accuracy of particulate absorption coefficients derived from the quantitative filter technique. *Limnol & Oceanogr*，1998，**43**：1649-1660.

[17] Hojerslev NK，Aas E. Spectral light absorption by yellow substance in the Kattegat-Skagarrak area. *Oceanologia*，2001，**43**：39-59.

[18] Bricaud A，Morel A，Babin M *et al*. Variations of light absorption by suspended particles with chlorophyll a concentration in oceanic (case 1) waters：analysis and implications for bio-optical models. *J Geophys Res*，1998，**103**：31033-31044.

[19] Bricaud A，Morel A，Prieur L. Absorption by dissolved organic matter in the sea (yellow substance) in the UV and visible domain. *Limnol & Oceanogr*，1981，**26**：43-53.

[20] Nelson JR, Guarda S. Particulate and dissolved absorption on the continental shelf of the southeastern United States. *Journal of Geophysics Research*, 1995,**100**:8715-8732.

[21] Blough NV, del Vecchio R. Chromophoric Dissolved Organic Matter (CDOM) in the coastal environment. In: Hansell D, Carlson C eds. Biogeochemistry of marine dissolved organic matter. San Diego, CA: Academic Press,2002:509-546.

[22] Markager S, Vincent WF. Spectral light attenuation and the absorption of UV and blue light in natural waters. *Limnol & Oceanogr*, 2000,**45**(3):642-650.

[23] Stedmon CA, Markager S, Kasa H. Optical properties and signatures of chromophoric dissolved organic matter (CDOM) in Danish coastal waters. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 2000,**51**:267-278.

[24] Hu CM, Muller-Karger FE, Zepp RG. Absorbance, absorption coefficient, and apparent quantum yield: A comment on common ambiguity in the use of these optical concepts. *Limnol & Oceanogr*, 2002,**47**:1261-1267.

[25] Hong HS, Wu JY, Shang SL *et al*. Absorption and fluorescence of chromophoric dissolved organic matter in the Pearl River Estuary, South China. *Mar Chem*,2005,**97**:78-89.

[26] Stramski D, Sciandra A, Claustre H. Effects of temperature, nitrogen and light limitation on the optical properties of the marine diatom *Thalassiosira pseudonana*. *Limnol & Oceanogr*, 2002,**47**:392-403.

[27] Ciotti AM, Lewis MR, Cullen JJ. Assessment of the relation ships between dominant cell size in natural phytoplankton communities and the spectral shape of the absorption coefficient. *Limnol & Oceanogr*, 2002,**47**:404-417.

[28] Ma R, Tang J. Absorption and scattering properties of water body in Lake Taihu, China absorption. *International Journal of Remote Sensing*, 2006,**27**:4277-4304.

[29] 於宗涛,鲁林成. 测量平差基础. 北京:测绘出版社,1984:100-131.

[30] Cleve JS, Perry MJ. A model for partitioning particulate absorption into phytoplanktonic and detritus components. *Deep-Sea Research*, 1994,**41**(1):197-221.

[31] Roesler CS, Perry MJ. Modeling *in situ* phytoplankton absorption from total absorption spectra in productive inland marine waters. *Limnol & Oceanogr*, 1989,**34**(8):1510-1523.