

太湖冬季有色可溶性有机物吸收荧光特性及遥感算法^{*}

冯龙庆^{1,2}, 时志强^{2,3}, 潘剑君^{1**}, 殷 燕², 张运林², 刘明亮²

(1: 南京农业大学资源与环境科学学院,南京 210095)

(2: 中国科学院南京地理与湖泊研究所湖泊与环境国家重点实验室,太湖湖泊生态系统研究站,南京 210008)

(3: 河海大学环境科学与工程学院,南京 210098)

摘要: 基于 2006 年和 2007 年 1 月两次太湖采样, 对 50 个点位的有色可溶性有机物(CDOM)光谱吸收、荧光、溶解性有机碳(DOC)浓度及遥感反射率进行测定与分析, 探讨冬季太湖 CDOM 的吸收荧光特性及空间分布, 建立 CDOM 吸收系数的遥感反演算法。结果表明, 太湖冬季 CDOM 在 355nm 处吸收系数 $a(355)$ 变化范围和均值分别为 $1.83 - 7.34 \text{ m}^{-1}$ 、 $3.37 \pm 1.01 \text{ m}^{-1}$, 相应的荧光及 DOC 浓度变化范围、均值分别为 $9.79 - 29.18 \text{ N. FL. U.}$ 、 $13.4 \pm 3.37 \text{ N. FL. U.}$; $4.61 - 10.45 \text{ mg/L}$ 、 $6.37 \pm 1.24 \text{ mg/L}$ 。CDOM 吸收系数、CDOM 荧光值、DOC 浓度三者呈显著正相关。空间分布上, 两次调查均显示 CDOM 吸收系数、CDOM 荧光值、DOC 浓度呈现出明显的南低北高, 最大值都出现在太湖北部的藻型湖区梅梁湾内, 最小值则在东太湖和贡湖湾 2 个草型湖区。通过单波段、一阶微分和 BP 神经网络模型 3 种不同 CDOM 反演方法精度的分析、比较发现, BP 神经网络模型反演结果最好, 模型验证的相对均方根误差和平均相对误差分别为 14.9%、11.7%, 可以用于冬季太湖 CDOM 吸收系数 $a(355)$ 的遥感估算。

关键词: 有色可溶性有机物; 荧光; 遥感反射率; BP 神经网络模型; 太湖

Characteristics of spectral absorption, fluorescence and remote sensing algorithms of chromophoric dissolved organic matter in winter, Lake Taihu

FENG Longqing^{1,2}, SHI Zhiqiang^{2,3}, PAN Jianjun¹, YIN Yan², ZHANG Yunlin² & LIU Mingliang²

(1: College of Resources and Environmental Sciences, Nanjing Agricultural University, Nanjing 210095, P. R. China)

(2: Lake Taihu Laboratory Ecosystem Research Station, State Key Laboratory of Lake Science and Environment, Nanjing Institute of Geography and Limnology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, P. R. China)

(3: College of Environmental Science and Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, P. R. China)

Abstract: Based on two investigations with 100 sampling sites in Lake Taihu in January, 2006 and 2007, the characteristics of spectral absorption and fluorescence, spatial distribution, and the retrieval model of chromophoric dissolved organic matter (CDOM) were studied. The ranges and mean values of CDOM absorption coefficient at 355nm $a(355)$, fluorescence normalized $F_n(355)$ and dissolved organic carbon (DOC) concentration were $1.83 - 7.34$, $3.37 \pm 1.01 \text{ m}^{-1}$; $9.79 - 29.18$, $13.4 \pm 3.37 \text{ N. FL. U.}$; and $4.61 - 10.45$, $6.37 \pm 1.24 \text{ mg/L}$, respectively. Significant positive correlations between $a(355)$ and DOC, $a(355)$ and $F_n(355)$ were found. Spatially, two surveys have shown that the higher values of $a(355)$, $F_n(355)$, DOC concentration were found in Meiliang Bay and lower values were found in East Lake Taihu and Gonghu Bay. Overall, $a(355)$, $F_n(355)$, and DOC concentration were significantly higher in two transects in northern lake regions than those in other transects in southern lake regions. The results showed that BP neural network model was superior to a single band model and the first order differential model for CDOM absorption estimation. The relative root mean square error (RRMSE) and mean relative error (MRE) of BP neural network model were 14.9% and 11.7%, respectively, based on an independent validation dataset including 25 samples.

* 中国科学院知识创新工程项目(KZCX1-YW-14, KZCX2-YW-QN312)和国家自然科学基金项目(40971252, 40825004, 40730529)联合资助。2010-07-05 收稿; 2010-09-06 收修改稿。冯龙庆,男,1986年生,硕士研究生; E-mail:fenglongqing07@163.com.

** 通讯作者; E-mail:jpan@njau.edu.cn.

Thus, BP neural network model could be better used to estimate CDOM absorption in Lake Taihu.

Keywords: Chromophoric dissolved organic matter; fluorescence; remote sensing reflectance; BP neural network model; Lake Taihu

有色可溶性有机物(CDOM)又称黄质,存在于所有水体中,被认为是水环境中最大的溶解有机碳贮库^[1],由腐质酸、富里酸、芳烃聚合物等一系列物质组成,主要是土壤和水生植物降解的产物^[2]。CDOM能强烈吸收紫外辐射,减少增强UV-B辐射对水体生态系统的影响^[3],如在云南高原湖泊CDOM是控制水体内UV-B和UV-A衰减的绝对主导因子^[4]。同时CDOM吸收了紫外辐射后容易发生光化学降解,将大分子有机物矿化分解成小分子有机物和无机营养盐,供微生物和浮游植物生长,同时会释放CO₂、CH₄等温室气体,加剧全球气候变暖^[5-6]。CDOM的吸收还延展到可见光的蓝光部分,与浮游植物叶绿素a和非生物悬浮颗粒物的吸收重叠,因而影响水体初级生产力,干扰浮游植物生物量和初级生产力的水色遥感^[7-8]。

CDOM、悬浮物和浮游植物是水色遥感的三个主要研究对象。相对于悬浮物和叶绿素大量的反演模型而言,CDOM的反演研究相对较少,并且也多是应用于海洋水色遥感中^[9-12]。Kowalcuk等^[9]对波罗的海水体CDOM吸收与遥感反射比之间的关系进行了研究,建立了Kowalcuk模型;陈楚群等^[12]在珠江口海域水体利用正演方法模拟水体光谱并反演水体中CDOM吸收。内陆水体CDOM反演模型的缺失主要是由于在诸如太湖这样的大型内陆浅水湖泊中通常是悬浮颗粒物及浮游植物吸收占据主导,CDOM在水体的光谱信号相对较弱且受到其它光学活性物质的影响较重,从而造成反演精度偏低。由于CDOM的成分相当复杂,很难从水体中提取出来,所以当前大部分研究都从其吸收和荧光特性方面开展,特别是近年来发展的三维荧光技术及平行因子分析法能较为准确解析CDOM的组成和来源^[4,8,13-15]。

随着全球碳循环研究的深入,迫切需要知道内陆水体中溶解性有机碳(DOC)的储量,而CDOM的遥感反演将为内陆水体DOC的估算提供方法和途径,加之CDOM在蓝藻水华暴发中营养盐循环和供给中发挥着重要作用,因此有必要对诸如太湖这类大型富营养化浅水湖泊CDOM的空间分布、遥感反演算法开展深入研究。鉴于冬季浮游藻类较少,对于CDOM遥感反射率的影响相对于其它季节小,有利于CDOM的遥感反演估算,本文基于2006年和2007年1月两次太湖采样,对50个点位CDOM光谱吸收、荧光、DOC浓度及遥感反射率进行测定与分析,探讨了冬季太湖CDOM的吸收荧光特性及空间分布,建立了CDOM吸收系数的单波段模型、一阶微分模型和BP神经网络模型3种遥感反演算法。

1 材料与方法

1.1 样品采集

在太湖布设了50个采样点(图1),其中1[#]-16[#]点(航线1)均匀分布在太湖北部梅梁湾内、17[#]-29[#]点(航线2)从贡湖湾到西太湖、30[#]-40[#](航线3)从光福湾到西太湖、41[#]-50[#](航线4)从胥口湾经西山岛到南太湖,4条航线基本涵盖了太湖不同生态类型湖区,包括藻型湖区(梅梁湾)、草型湖区(胥口湾)和大太湖开阔水域。分别于2006年1月7-9日和2007年1月7-9日进行水面反射光谱测量和水样采集。用中国科学院水生生物研究所研制的有机玻璃采水器采集表层水样(0-0.5m),装入干净的塑料桶并置于冷藏箱内避光低温保存,带回实验室分析CDOM吸收、荧光及DOC浓度,两次采样共计测得100组有效化学参数数据。

1.2 光谱测定

采样期间天气晴朗,风速均较小,湖面平静,

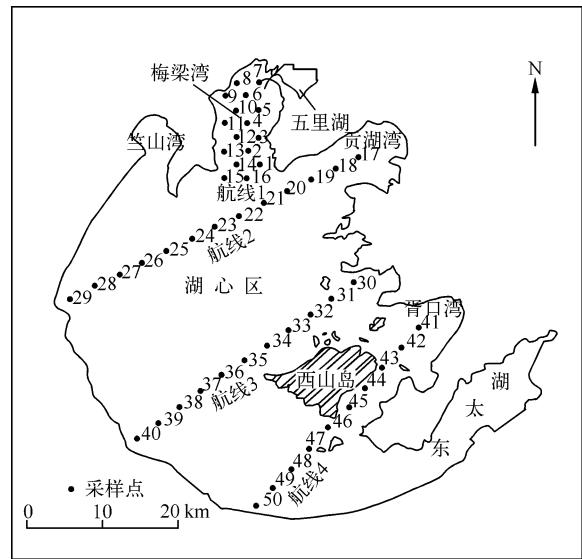


图1 太湖航线及样点分布图

Fig. 1 Transects and distribution of sampling sites in Lake Taihu

据太湖湖泊生态系统研究站自计式风速风向仪测定,两次采样期间平均风速分别为2.1m/s、2.9m/s,因此光谱测定比较理想。光谱测量采用美国ASD公司生产的Field Spec Pro FR便携式分光辐射光谱仪,水面上光谱测量参照唐军武等^[16]推荐的方法,同时记录采样点的位置坐标和光谱数据测量时的风速风向,两次采样共获得95个样本有效光谱反射率数据。

1.3 CDOM光谱吸收、荧光及DOC浓度测定

通过孔径0.22μm的Millipore膜过滤的水样在UV-2450PC型分光光度计下在280~750nm波长测定吸光度,通过计算、校正得到各波长的吸收系数^[13]。由于CDOM的浓度无法计算,最常用的方法是用280、355nm等波段处的吸收系数来表征CDOM浓度,为了与CDOM荧光对应起来,本文选择355nm处CDOM吸收系数 $a(355)$ 来表征其浓度,并用于后面CDOM吸收的遥感估算。

荧光的测定选取国际上通用的355nm作为激发波长,380~600nm作为发射光谱范围,用Mill-Q水做参比样,使用RF5301荧光光度计测定荧光强度,其中仪器夹缝宽度为5nm,以1nm间隔得到荧光光谱,并采用Hoge等^[17]提出的方法对荧光强度进行定标处理。

DOC的测定是采用GF/F滤膜过滤后的清液在1020型TOC仪进行,仪器检测范围为0.5~500mg/L,相对误差为±3%。

1.4 统计分析

运用SPSS17.0进行数据统计分析,包括平均值、标准差的计算,方差分析、线性相关分析等。

CDOM吸收遥感反演模型的建立和检验是将95个样本数据按CDOM吸收数据大小排序,然后随机选取70个样本进行建模,剩余的25个样本用于模型检验。CDOM吸收反演的BP神经网络模型通过MATLAB7.0实现。

引入决定系数、相对均方根误差(*RRMSE*)和平均相对误差(*MRE*)作为统计量来检验模拟值和实测值是否一致的评判标准:

$$RRMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{(x_{\text{Est}} - x_{\text{Obs}})}{x_{\text{Obs}}} \right)^2} \times 100\% \quad (1)$$

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_{\text{Est}} - x_{\text{Obs}}}{x_{\text{Obs}}} \right| \times 100\% \quad (2)$$

式中, x_{Est} 、 x_{Obs} 分别为模型模拟和实测的CDOM吸收系数 $a(355)$ 。

2 结果与分析

2.1 冬季CDOM光谱吸收和空间分布

从2006年1月4个航线典型站位CDOM吸收光谱可以看出,4个航线典型站点的CDOM光谱变化趋势完全一致,在280~320nm紫外光波段吸收系数最大,并且呈现急剧减小的趋势,在700nm附近逐渐趋近于0(图2a)。CDOM吸收系数的对数在600nm以内从长波到短波线性增加,反映了CDOM光谱吸收可以近似用指数函数拟合。但在600nm以上波段线的波动明显增加,反映长波部分由于吸收很低,仪器干扰误差明显增加,样品的测量精度将会受到影响(图2b)。两次采样中,2006年1月份CDOM在355nm处吸收系数 $a(355)$ 变化范围和均值分别为 $2.27\sim7.34\text{m}^{-1}$ 、 $3.53\pm0.88\text{m}^{-1}$,最大值在梅梁湾藻型湖区的6[#],这可能是因为梅梁湾的入湖河流较多,外源性的输入造成CDOM的增加;最小值在南太湖草型湖区的47[#],其中航线1、2、3、4的均值分别为 $4.46\pm0.95\text{m}^{-1}$ 、 $3.22\pm0.44\text{m}^{-1}$ 、 $3.11\pm0.29\text{m}^{-1}$ 、 $2.93\pm0.38\text{m}^{-1}$ (表1),从北往南呈现逐渐下降趋势。通过组间方差分析(One-way Anova)发现,位于梅梁湾内的1号航线与其它3条航线 $a(355)$ 都存在显著性差异($P\leq0.001$),而航线2、3、4三组相互之间差异都不显著,说明梅梁湾CDOM浓度要显著高于其它湖区,而其它湖区之间的差异不大。2007年1月数据显示, $a(355)$ 变化范围和均值分别为 $1.83\sim6.05\text{m}^{-1}$ 、 $3.20\pm1.10\text{m}^{-1}$,最大值和最小值分别位于8[#]和42[#],其中航线1、2、3、4的 $a(355)$ 均值分别为 4.33 ± 0.84 、 2.95 ± 0.99 、 2.78 ± 0.56 、 $2.17\pm0.21\text{m}^{-1}$ (表1),经组间方差分析发现,与2006年1月数据规律相同,航线1与航线2、3、4之间均存在显著性差异($P\leq0.001$),航线2、3、4之间差异不显著。2006年、

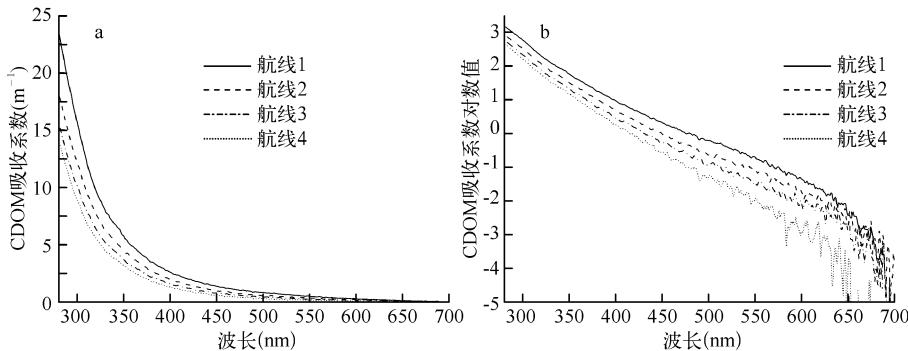


图 2 典型站点 CDOM 吸收吸收系数(a)和吸收系数对数值(b)

Fig. 2 Absorption spectra of CDOM in typical sites

2007 年 1 月采样所得数据之间在水质参数和空间分布上相似性很高, 总体上 2006 年冬季太湖的 CDOM 浓度要高于 2007 年, 全太湖 CDOM 冬季分布呈现南低北高, 其中最高值出现在梅梁湾内, 这主要是河流输入造成湾内 CDOM 浓度较高, 草型湖区东太湖 CDOM 浓度最低, 湖心区则介于梅梁湾和南太湖、东太湖之间, 这与张运林等^[13]的研究是一致的.

表 1 两次采样 CDOM 吸收、DOC 浓度及荧光的范围、均值

Tab. 1 Ranges, mean values of CDOM absorption coefficient, DOC concentration and normalized fluorescence in the two cruises

年份	航线	$a(355) (\text{m}^{-1})$		DOC 浓度 (mg/L)		CDOM 荧光 $F_n(355) (\text{N. FL. U})$	
		范围	均值	范围	均值	范围	均值
2006 年	1	3.60 – 7.34	4.46 ± 0.95	5.42 – 10.45	6.91 ± 1.42	14.16 – 29.18	17.65 ± 3.62
	2	2.68 – 4.14	3.22 ± 0.44	4.61 – 6.69	5.81 ± 0.64	10.87 – 15.67	12.36 ± 1.36
	3	2.76 – 3.62	3.11 ± 0.29	4.63 – 6.05	5.28 ± 0.45	10.72 – 12.92	11.65 ± 0.75
	4	2.27 – 3.67	2.93 ± 0.38	4.75 – 6.60	5.39 ± 0.64	10.32 – 11.76	11.10 ± 0.44
	总计	2.27 – 7.34	3.53 ± 0.88	4.61 – 10.45	5.96 ± 1.14	10.32 – 29.18	13.64 ± 3.53
2007 年	1	3.06 – 6.05	4.33 ± 0.84	6.38 – 9.92	7.77 ± 1.00	13.88 – 21.23	16.79 ± 2.55
	2	1.91 – 4.73	2.95 ± 1.00	5.56 – 10.07	6.75 ± 1.38	9.79 – 17.71	12.56 ± 2.52
	3	1.97 – 3.90	2.78 ± 0.56	5.50 – 7.48	6.38 ± 0.62	10.62 – 12.72	11.38 ± 0.78
	4	1.83 – 2.50	2.17 ± 0.21	5.09 – 6.25	5.72 ± 0.42	9.81 – 10.73	10.40 ± 0.29
	总计	1.83 – 6.05	3.20 ± 1.10	5.09 – 10.45	6.79 ± 1.21	9.79 – 21.23	13.22 ± 3.22

这两次的调查显示, DOC 浓度最高出现在 2006 年 1 月采样的梅梁湾北部 6# 点位, 为 10.54 mg/L , 与 CDOM 浓度最大值点位相同; 最小值出现在同次采样位于贡湖湾内的 17# 点位, 为 4.61 mg/L , 这因为 6# 点位位于梅梁湾的北部, 属于典型的藻型湖区, 且附近河流入口较多, 而 17# 点位于贡湖湾内, 属于草型湖区, 水质相对清澈. 由于冬季藻类较少, 且梅梁湾内沉水植物腐烂造成 DOC 浓度增加的可能性较小, 所以可以判断冬季太湖 DOC 应该主要来自于外源河流的输入. 对 2006 年 1 月 4 条航线的 DOC 进行组间方差分析发现航线 1 与航线 2 之间差异不显著, 航线 1 与航线 3、航线 4 之间存在显著性差异 ($P \leq 0.05$), 航线 2、3、4 之间差异均不显著; 对 2007 年 1 月 4 条航线 DOC 浓度进行方差分析, 发现规律与 2006 年 1 月采样相同, 说明太湖北部 DOC 浓度大于南部, 与 CDOM 吸收系数分布相似. $a(355)$ 与 DOC 存在显著的线性正相关(图 3), 主要因为 CDOM 是 DOC 库的一部分, 表明可以用 CDOM 吸收系数 $a(355)$ 来模拟 DOC 的浓度^[18].

2.2 CDOM 荧光特性

CDOM 是一类荧光物质, 吸收紫外辐射后, 在紫外短波光的激发下会发出长于吸收光波长的荧光. 由于荧光的高灵敏度和一些荧光仪可以现场使用的便捷性, 人们也常常利用 CDOM 的荧光特性来研究湖泊

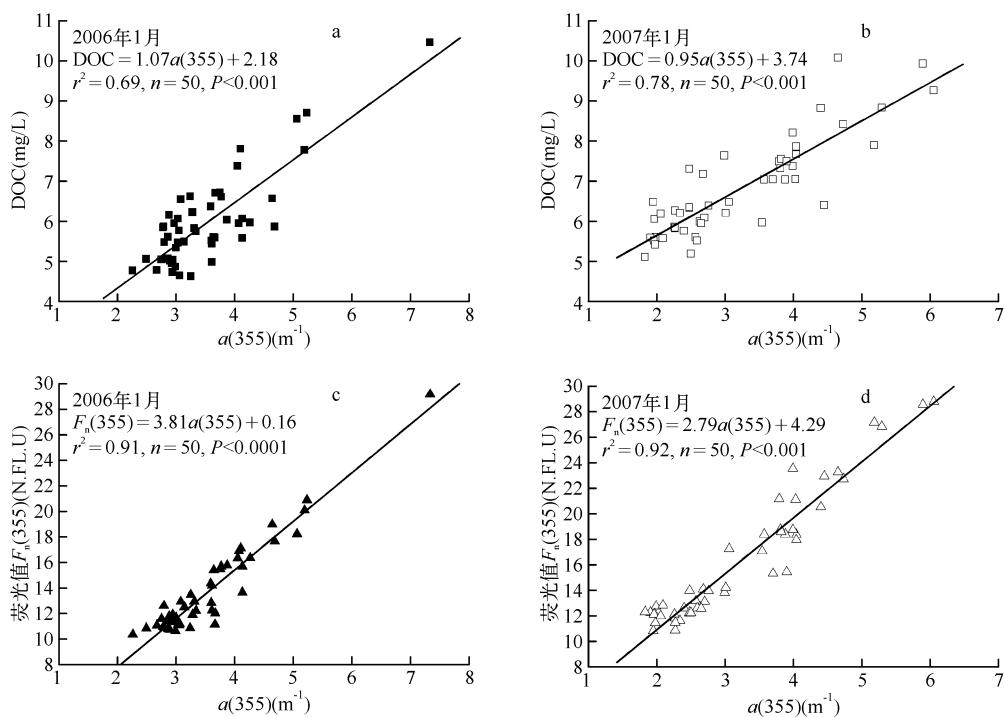


图 3 CDOM 吸收系数 $a(355)$ 与 DOC 浓度(a、b)、荧光强度(c、d)线性关系

Fig. 3 Linear correlations between CDOM absorption coefficient $a(355)$ and DOC concentration(a,b), normalized fluorescence $F_n(355)$ (c, d)

CDOM 的浓度及空间分布特征。此外,近年来发展的三维荧光仪还可以根据其荧光特性来分析荧光有机物的组成及来源。这也带来了对 CDOM 荧光特性研究的热潮,已有学者在近海、河口、海湾、湖泊^[15,17,19-20]建立了不同的 CDOM 荧光强度与吸收系数之间的线性关系。

CDOM 在 355nm 激发波长下,450nm 发射波长的荧光强度达到峰值,在 410 和 415nm 处有一个峰值和谷值,荧光越强这两个值就越不明显(图 4)。通常采用 450nm 发射波长的荧光信号对荧光进行定标。两次调查的结果都是位于北部梅梁湾内的航线 1 与其它 3 个航线间,CDOM 荧光值存在显著差异($P \leq 0.001$),航线 2,3,4 之间差异不显著(表 1),这结果与上述 $a(355)$ 在整个太湖的分布及各航线之间的差异结果完全一致。

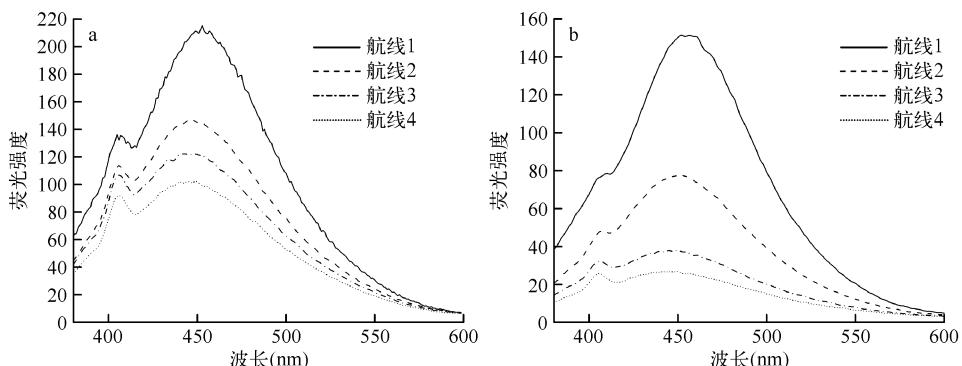


图 4 典型站点 355nm 激发波段荧光强度光谱分布

Fig. 4 Spectral fluorescence intensity at 355nm excitation wavelength in typical sites

致。其中最大值出现在2006年的6[#]点位,最小值出现在2007年的17[#]点位,这也与DOC浓度极值分布位置相同。本研究中,荧光值 $F_n(355)$ 与 $a(355)$ 之间存在显著的正相关(图3c、3d),2006年与2007年的 r^2 分别为0.91、0.92,此研究结果表明可以利用CDOM的荧光值来表征CDOM浓度。目前市面上的CDOM浓度野外原位测定探头设计就是基于其激发发射荧光来设计的,但其选择的激发发射的波长与本文研究有些差异,如德国Trios公司和美国Wetlab公司生产的CDOM探头选择的激发发射波长均为370nm/460nm。

2.3 CDOM的遥感反演

2.3.1 CDOM单波段相关分析 CDOM吸收不仅是水体固有光学特征的重要组成部分,也影响着水质参数的遥感反演。总体来看,350~750nm遥感反射率与 $a(355)$ 呈现负相关,并在紫光和红光波段相关系数较低(图5a),这是因为在短波部分遥感反射率较低,测定误差增加,使得其与水色参数的相关性明显降低,很难用于与水色参数建立定量关系。而在红光波段,CDOM本身吸收就很低,测量噪声增加,再加上纯水的高吸收,使得在此波段相关性也比较低(图5a)。在455nm附近相关性达到最高,为-0.842,这与孙德勇等^[21]的研究结果有所不同,其主要原因可能是采样时间的差异,水体内的光学活性物质的浓度、比例有所不同从而对CDOM的光谱信号影响不同。由于CDOM在水色遥感中不占主导地位,很容易被其它水色因子所干扰,很难找出某个固定波段进行反演,所以本文就利用455nm波段反射率来估算太湖水体中的CDOM吸收,以455nm的遥感反射率为自变量,以 $a(355)$ 为因变量建立估测模型(图5b)。

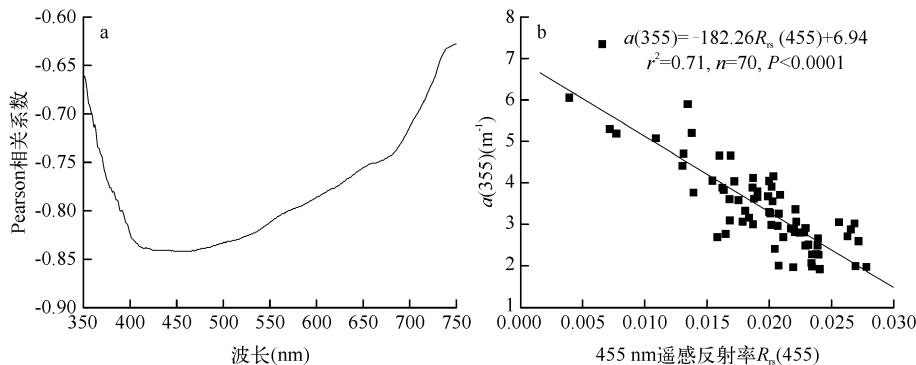


图5 CDOM吸收系数与遥感反射率的相关系数(a)及对应的CDOM单波段估算模型(b)

Fig. 5 Correlation coefficient between CDOM absorption $a(355)$ and remote sensing reflectance (a), single-band estimation model of $a(355)$ (b)

2.3.2 一阶微分 微分光谱技术通过对反射光谱进行数学模拟,可以迅速地确定光谱弯曲点及最大最小反射率的波长位置,微分技术对光谱信噪比非常敏感。研究表明,光谱的低阶微分处理对噪声影响敏感性较低,因而在实际应用中比较有效^[22]。由于光谱仪采集的是离散型数据,因此光谱数据的一阶微分可以用以下公式近似计算:

$$R_{rs}(\lambda_i)' = \frac{R_{rs}(\lambda_{i+1}) - R_{rs}(\lambda_{i-1})}{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}} \quad (3)$$

式中, $\lambda_{i+1}, \lambda_i, \lambda_{i-1}$ 为相邻波长, $R_{rs}(\lambda_i)'$ 为波长 λ_i 的一阶微分反射光谱。本文对原始遥感数据进行一阶微分处理后,分别求 $a(355)$ 与各波段微分值的相关系数, $a(355)$ 与各波段微分值相关系数呈现出在570nm之前为负相关,之后则大部分为正相关。其中在443nm处最大负相关为-0.833,以443nm处的遥感反射率微分值为自变量,以 $a(355)$ 为因变量建立模型(图6)。

2.3.3 BP神经网络 人工神经网络以其自学习、自组织、较好的容错性、广泛的适用性和优良的非线性逼近能力而备受关注。在实际应用中,80%~90%的人工神经网络模型是采用误差反传算法或其变化形式的网络模型(简称BP网络)。理论上已证明具有偏差和至少一个S型隐含层加上线性输出层的网络能够逼近任何有理函数^[23]。本次反演采用一个隐含层的3层神经网络结构,网络具有4个输入神经元和一个输出神经元,

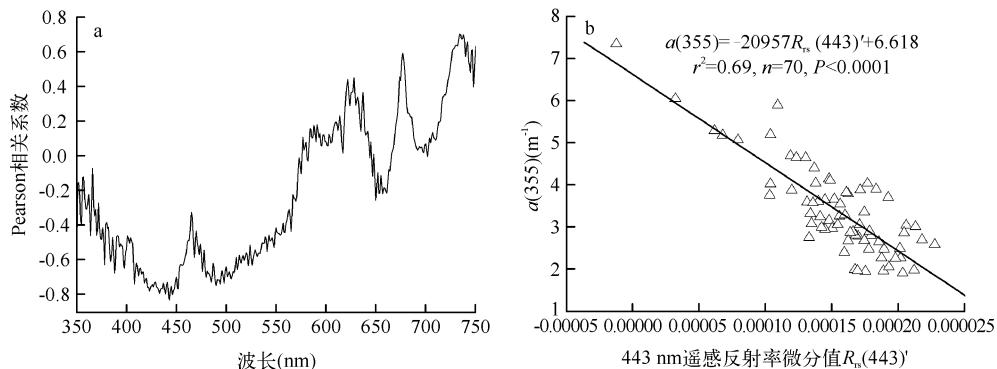


图 6 CDOM 吸收系数与遥感反射率一阶微分的相关系数(a)及对应的 CDOM 一阶微分估算模型(b)

Fig. 6 Correlation coefficient between CDOM absorption $a(355)$ and the first derivative differential of remote sensing reflectance (a), first derivative estimation model of CDOM absorption $a(355)$ (b)

神经元的激活函数使用双曲正切 S 型函数。神经网络训练方法采用 Levenberg-Marquardt 算法^[23]。确定神经网络初始权重在 $[-1, 1]$ 区域内随机生成, 网络学习速率 lr 设定为 0.05, 训练误差 goal 取 0.001。本文选择 450nm、455nm、460nm 和 465nm 的遥感反射率作为神经网络模型的输入层数据, 以实测的 CDOM 吸收系数 $a(355)$ 为输出层数据对网络进行训练。

另外, 在通常的网络训练过程中为了提高精度, 关于隐含层神经元节点数的确定有两种方法: 提高隐含层的层数和增加隐含层的神经元节点数量。但在增加隐含层同时也使网络复杂化, 从而增加了网络权值的训练时间, 所以一般情况下优先考虑增加隐含层中神经元数。目前关于神经元节点数量的确定还没有成熟的研究理论, 大部分研究中都是根据实验数据来确定, 不具有普遍实用性。所以本研究采用增加隐含层神经元数量的网络训练模式, 节点数量从少到多分别进行训练, 并利用预测值和实测值的相对均方根误差 RRMSE、平均相对误差 MRE 和 Pearson 相关系数 r 对不同神经元数量的神经网络模型进行测试比较, 从而得出最优的隐含层神经元节点数量。

当隐含层节点数为 12 时, 相关系数 r 值最大为 0.852, RRMSE 和 MRE 都最小, 分别为 15.14%、12.80% (表 2)。因此可以使用 12 个神经元节点来建立 CDOM 吸收反演的神经网络模型。

表 2 不同隐含层节点神经网络模型的相关系数、RRMSE 和 MRE

Tab. 2 Correlation coefficient (r), relative root mean square error (RRMSE) and mean relative error (MRE) of BP neural network model with different cells

节数	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
r	0.831	0.835	0.838	0.833	0.848	0.836	0.851	0.850	0.852	0.852	0.847	0.849
RRMSE (%)	16.26	16.05	15.94	16.22	15.32	16.00	15.15	15.20	15.33	15.14	15.32	15.54
MRE (%)	13.90	13.60	13.50	13.80	13.30	13.70	12.80	13.00	13.10	12.80	13.00	13.20

2.3.4 三种模型的验证与比较 为了分析模型的精度以及适用性, 必须要使用验证数据 ($n = 25$) 对所建立好的模型进行精度验证。选用模型估测数据与实测数据做线性相关, 对 CDOM 的单波段模型、一阶微分模型以及 BP 神经网络模型的估测精度分别进行验证(图 7)。单波段模型实测值与预测值的决定系数 r^2 为 0.64, RRMSE 为 16.7%, 相对误差最大值为 49.8%, 最小值为 0.8%, 平均相对误差为 $12.8\% \pm 10.9\%$ 。一阶微分模型实测值与预测值的 r^2 为 0.60, RRMSE 为 18.2%, 相对误差最大值 45.9%, 最小值为 2.3%, 平均相对误差为 $15.2\% \pm 10.1\%$ 。BP 神经网络模型的模拟值与实测值的 r^2 为 0.70, RRMSE 为 14.9%, 相对误差最大值和最小值分别为 40.5%、0.4%, 平均相对误差为 $11.7\% \pm 9.3\%$ 。总体而言, 三个模型中 BP 神经网络模型对太湖冬季 CDOM 浓度的估算精度最好, 其它两个模型稍低。

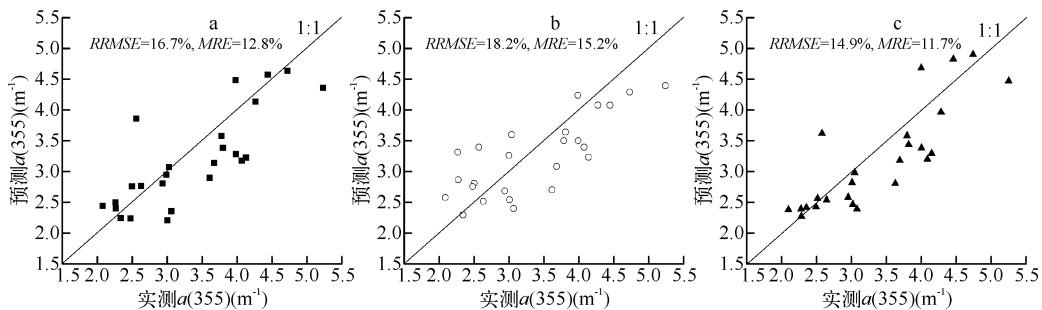


图 7 单波段模型(a)、一阶微分模型(b)、BP 神经网络模型(c)实测系数与预测值对比

Fig. 7 Comparison of measured and estimated CDOM absorption coefficient $\alpha(355)$ of the single-band model (a), the first derivative model (b) and BP neural network model (c)

3 结论

(1) 太湖冬季 CDOM 浓度分布呈现出北高南低, 其中梅梁湾区域吸收最高, 东太湖和贡湖湾的浓度最低, 这主要是梅梁湾属于藻型湖区, 而且周围河流输入带来大量 CDOM, 而东太湖和贡湖湾属于草型湖区, 外源的河流输入少. 另外, DOC 及 CDOM 荧光值的空间分布与 CDOM 浓度分布特征相似并与 $\alpha(355)$ 存在显著的线性相关.

(2) CDOM 吸收系数 $\alpha(355)$ 与遥感反射率在可见光波段都呈负相关, 其中在 455nm 处相关性最高, 可以得知, 455nm 为 CDOM 的敏感波段. 单波段、一阶微分和 BP 神经网络模型 3 种方法对太湖冬季的 CDOM 吸收进行反演估算, 结果发现 3 种方法的精度为: BP 神经网络模型 > 单波段模型 > 一阶微分模型. 使用验证数据得出 BP 神经网络模型 r^2 为 0.70, $RRMSE$ 为 14.9%, MRE 为 $11.7\% \pm 9.3\%$. 这表明, BP 神经网络模型可以较好的应用于冬季太湖 CDOM 浓度的反演估算.

致谢: 野外采样得到冯胜、王鑫、赵巧华、李俊生、张浩等同志的鼎力帮助, 在此一并表示谢意.

4 参考文献

- [1] Green SA, Blough NV. Optical absorption and fluorescence properties of CDOM in nature waters. *Limnology and Oceanography*, 1994, **39**:1903-1916.
- [2] Kirk JTO. Light and photosynthesis in aquatic ecosystem. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
- [3] Zhang YL, Zhang EL, Zhu GW et al. Spectral attenuation of ultraviolet and visible radiation in lakes in the Yunnan Plateau, and the middle and lower reaches of the Yangtze River, China. *Photochem Photobiol Sciences* (in revision).
- [4] Stedmon CA, Markager S, Tranvik L et al. Photochemical production of ammonium and transformation of dissolved organic matter in the Baltic Sea. *Marine Chemistry*, 2007, **104**:227-240.
- [5] Tranvik L, Downing JA, Cotner JB et al. Lakes and reservoirs as regulators of carbon cycling and climate. *Limnology and Oceanography*, 2009, **54**:2298-2314.
- [6] Häder DP, Kumar HD, Smith RC. Effects on aquatic ecosystems. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, 1998, **46**:53-68.
- [7] Carder KL, Steward RG, Harvey GR et al. Marine humic and fulvic acids: Their effects on remote sensing of ocean chlorophyll. *Limnology and Oceanography*, 1989, **34**:68- 81.
- [8] Rochelle-Newall EJ, Fisher TR. Production of chromophoric dissolved organic matter fluorescence in marine and estuarine environments: an investigation into the role of phytoplankton. *Marine Chemistry*, 2002, **77**:7-21.
- [9] Kowalcuk P, Olszewski J, Darecki M et al. Empirical relationships between coloured dissolved organic matter (CDOM) absorption and apparent optical properties in Baltic Sea waters. *International Journal of Remote Sensing*, 2005, **26**: 345-370.
- [10] Kutser T, Pierson DC, Kallio KY et al. Mapping lake CDOM by satellite remote sensing. *Remote Sensing of Environment*,

- 2005, **94**:535-540.
- [11] Kutser T, Pierson DC, Tranvik L *et al.* Using satellite remote sensing to estimate the colored dissolved organic matter absorption coefficient in lakes. *Ecosystems*, 2005, **8**:709-720.
- [12] 陈楚群, 潘志林, 施 平. 海水光谱模拟及其在黄生物质遥感反演中的应用. *热带海洋学报*, 2003, **22**:33-39.
- [13] 张运林, 秦伯强, 杨元龙. 太湖梅梁湾有色可溶性有机物的空间分布及光学行为. *湖泊科学*, 2006, **18**:319-326.
- [14] Stedmon CA, Markager S. Resolving the variability in dissolved organic matter fluorescence in a temperate estuary and its catchment using PARAFAC analysis. *Limnology and Oceanography*, 2005, **50**:686-697.
- [15] Zhang YL, van Dijk MA, Liu ML *et al.* The contribution of phytoplankton degradation to chromophoric dissolved organic matter (CDOM) in eutrophic shallow lakes: field and experimental evidence. *Water Research*, 2009, **43**:4685-4697.
- [16] 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**:37-44.
- [17] Hoge FE, Vodacek A, Blough NV. Inherent optical properties of the ocean: retrieval of the absorption coefficient of chromophoric dissolved organic matter from fluorescence measurements. *Limnology and Oceanography*, 1993, **38**:1394-1402.
- [18] 张运林, 秦伯强, 马荣华等. 太湖典型草、藻型湖区有色可溶性有机物的吸收及荧光特性. *环境科学*, 2005, **26**: 142-147.
- [19] Kowaleczuk P, Cooper WJ, Whitehead RF *et al.* Characterization of CDOM in an organic-rich river and surrounding coastal ocean in the South Atlantic Bight. *Aquatic Sciences*, 2003, **65**:384-401.
- [20] 张运林, 秦伯强, 龚志军. 太湖有色可溶性有机物荧光的空间分布及其与吸收的关系. *农业环境科学学报*, 2006, **25**:1337-1342.
- [21] 孙德勇, 李云梅, 王 桥等. 利用高光谱数据估算太湖水体 CDOM 浓度的神经网络模型. *武汉大学学报(信息科学版)*, 2009, **34**:851-855.
- [22] Cloutis EA. Review article hyperspectral geological remote sensing: Evaluation of analytical techniques. *International Journal of Remote Sensing*, 1996, **17**:2215-2242.
- [23] Martin TH, Howard BD, Mark HB. 神经网络设计. 北京: 机械工业出版社, 2002.