

基于反射光谱的太湖北部叶绿素 a 浓度定量估算*

吕恒¹, 李新国^{1,2}, 周连义^{1,2}, 江南¹

(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 100039)

摘要: 利用地物光谱仪研究了太湖水体的反射光谱特征与叶绿素 a 浓度之间的定量关系, 结果表明太湖水体的叶绿素 a 浓度可以用 720 nm 附近的反射率估算, 同时也可以利用 806 nm 和 571 nm 两个波段的反射率比值来估算, 前者建立的估算模型具有较好的通用性, 而后者只能较好的估算 < 10 $\mu\text{g/L}$ 的叶绿素 a 浓度; 通过对光谱微分的分析, 发现叶绿素 a 浓度与 690 nm 附近的一阶微分和 702 nm 附近的二阶微分相关性最好, 但基于反射光谱一阶微分的叶绿素 a 浓度估算模型, 并没有显著的提高太湖叶绿素 a 浓度的估测精度, 二阶微分后的估测精度好于一阶微分, 但其估测精度仍没有利用 720 nm 反射光谱的反演模型高。太湖水体的叶绿素 a 浓度可以利用 720 nm 附近的反射光谱有效地估算。

关键词: 太湖; 叶绿素 a 浓度; 定量估算; 反射光谱; 光谱微分

Quantitative estimation of chlorophyll-a concentration in the northern part of Lake Taihu using spectral reflectance

LÜ Heng¹, LI Xinguo^{1,2}, ZHOU Lianyi^{1,2} & JIANG Nan¹

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

(2: *Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, P. R. China*)

Abstract: The quantitative relationship between Spectral Reflectance (SR) characteristics of water and chlorophyll-a (Chl. a) concentration in Lake Taihu was analysed based on the in-situ data collected by ASD FieldSpec Hand-Held Spectroradiometer. The results reveal that the Chl. a concentration can be quantitative retrieved using SR at wavelength of 720 nm, or using the ratio of SR at wavelength of 806 nm and 507 nm. The model using SR at wavelength of 720 nm is an effective retrieval model whether Chl. a concentration > 10 $\mu\text{g/L}$ or Chl. a concentration < 10 $\mu\text{g/L}$, while the model using the ratio only retrieve Chl. a concentration effectively for Chl. a concentration < 10 $\mu\text{g/L}$. It was found that there is high correlation between Chl. a and the first derivative at 690 nm, also high correlation between Chl. a and the second derivative at 702 nm through spectral derivative method, but the model retrieve accuracy using the first derivative or the second derivative is not significantly improved compared to the model directly using SR. But the retrieval accuracy using the second derivative is a little higher than the model using the first derivative. So it was concluded that the Chl. a Concentration in Lake Taihu can be retrieved using SR at wavelength 720.

Keywords: Lake Taihu; Chl. a concentration; quantitative estimation; spectral reflectance; spectral derivative

叶绿素 a 浓度是水质参数中一个重要的指标, 经常被用于估测浮游植物的生物量和生产力, 也是指示水体富营养化程度的一个重要参数。常规的叶绿素 a 浓度测定是在水面上逐点采样, 然后在实验室内利用分光光度法或其他方法量测, 这种方法费时、费力, 而且只能反映监测断面上叶绿素 a 浓度的信息, 并不能反映整个水体的叶绿素 a 浓度分布状况, 而利用遥感方法监测叶绿素 a 浓度可以快速、及时地提供整个湖

* 中国科学院南京地理与湖泊研究所所长基金资助。2005-04-24 收稿; 2005-08-24 收修改稿。吕恒, 男, 1977 年生, 博士, 助理研究员; E-mail: HengLu@niglas.ac.cn.

泊叶绿素 a 浓度分布状况. 叶绿素 a 和其它一些物质通过在不同波长的吸收、散射作用, 造成一定波长范围反射率的显著不同, 这是遥感定量监测叶绿素 a 的基础. 通过分析水面上反射光谱特征, 找出不同波长反射率与叶绿素 a 浓度之间的定量关系, 从而为将来利用高光谱遥感监测叶绿素 a 的波段选择和设置提供理论依据和参考.

国外许多学者早已开展了利用地物光谱仪测定水体中叶绿素 a 浓度的研究. Han, Dekker 等人利用反射光谱不同的波段比值有效的提取了水体中的叶绿素 a 浓度^[1-10], Rundquist^[11] 利用 690 nm 处的一阶微分反演了水体中的叶绿素 a 浓度, 取得了较好的效果. 国内李素菊等人^[12] 用波段比值的方法成功的提取了巢湖的叶绿素 a 浓度. 由于不同区域水体的组成及其浓度不同, 国内外这些研究成果是否适用于太湖水体, 需要进一步的验证和探讨, 本文利用地物光谱仪研究太湖水体的反射光谱特征, 试图寻找出反演太湖叶绿素 a 浓度的最有效的方法.

1 研究区域

太湖是我国长江中下游地区著名的五大淡水湖之一, 它位于长江三角洲的南翼坦荡的太湖平原上, 位于北纬 30°55'40" - 31°32'58", 东经 119°52'32" - 120°36'10", 其面积为 2427.8 km², 平均水深 2.12 m, 居我国五大淡水湖的第三位^[13], 水体呈中度富营养化到重富营养化, 水质属于 II - V 类^[14].



图 1 采样点位置示意图

Fig. 1 Distribution of sampling points

2 研究方法

2003 年 11 月 13 日, 在太湖采取了 17 个点的水面反射光谱(图 1), 每个采样点同时进行表层水质采样, 在实验室测得悬浮物浓度、叶绿素 a 和溶解性有机碳(DOC)等三个指标, 叶绿素 a 测定采用分光光度法测量, 用 GF/C(Whatman 公司)过滤, 95% 热乙醇提取, 然后放到 7230 分光光度计上进行检测.

水面反射光谱是利用美国 ASD 公司的 FieldSpec HandHeld 手持式地物光谱仪测量, 该光谱仪的波段范围为 325 - 1075 nm, 共 512 个波段, 色散 1.6 nm, 光谱分辨率为 3.5 nm, 视场角 25°. 采样当天, 天空晴朗无云, 湖面平静. 反射光谱数据在距离水面 1 m 处垂直于水面测得. 每次光谱测量扫描 5 次, 每个采样点至少测量 5 次光谱, 最后取平均值作为该点的反射光谱. 在测量光谱时, 面向太阳, 避免仪器阴影影响水体的反射光谱.

3 基于反射光谱的太湖叶绿素 a 定量提取模型

3.1 太湖水体光谱特征分析

17 个采样点中, 叶绿素 a 浓度的最高值为 159.59 μg/L, 最小值为 3.12 μg/L, 悬浮物浓度最高 135.40 mg/L, 最低 9.44 mg/L, 浓度变化幅度较大, DOC 浓度在 4 - 7 mg/L, 由此可见太湖水体是典型的二类水体. 图 2 是 17 个采样点的反射光谱曲线.

从图中可以明显看出反射光谱特征呈典型的二类水体特征, 在 445 nm 和 665 nm 附近有的采样点呈现明显的反射谷值, 这是由于叶绿素 a 的吸收作用造成的, 有的点这一谷值不甚明显甚至丢失, 是因为太湖水体的悬浮物和 DOC 含量较高, 严重影响了叶绿素 a 的反射光谱特征信息, 在 625 nm 附近呈现反射谷值或呈肩状, 是由于藻蓝素在 624 nm 处的吸收峰造成的, 690 - 710 nm 附近左右强烈的反射峰值, 是由于叶绿素 a 的荧光作用, 这一反射峰值随着叶绿素 a 浓度的增加, 向长波方向偏移.

3.2 基于反射光谱的叶绿素 a 浓度估算模型

在统计分析软件 SAS 支持下对叶绿素 a 浓度及叶绿素 a 浓度的自然对数和各波段反射率进行相关性分析, 图 3 是叶绿素 a 浓度和各波段反射率之间 PEARSON 相关系数图. 从图中可以明显看出, 不论是叶绿素 a 浓度还是叶绿素 a 浓度的对数, 550 nm、660 nm、720 nm 附近出现了相关关系的峰值, 这三个波段对应

于叶绿素 a 在绿光区域的反射峰、叶绿素 a 的吸收峰和叶绿素 a 的荧光位置,而在这三个波段中,以 720 nm 附近的相关系数最大,可达 0.95,说明在这一波段值,悬浮物和 DOC 的影响较小. 总体上说,小于 700 nm 各波段的反射率与叶绿素 a 浓度的相关系数较小,表明这一区间的反射率受悬浮物、DOC 的影响比较大,从图 3 中可以明显看出在 < 700 nm 的波段区域,lnChla 与波段反射率的关系要好于叶绿素 a 浓度,而在 > 700 nm 的波段,叶绿素 a 浓度与反射率之间的相关性要好于 lnChla. 因此,以 720 nm 波段的反射率进行回归分析,建立反射率值与叶绿素 a 浓度的回归方程. 把 17 个采样点按照叶绿素 a 浓度从高到低排序,每隔 3 个点取出一,即把 17 个点的采样数据分成两组,一组 13 个点用于建立回归模型,一组 4 个点用于检验回归模型,在 SAS 支持下利用线性回归的方法得到如式 1 的方程,模型预测值与实测值的散点图如图 4 所示.

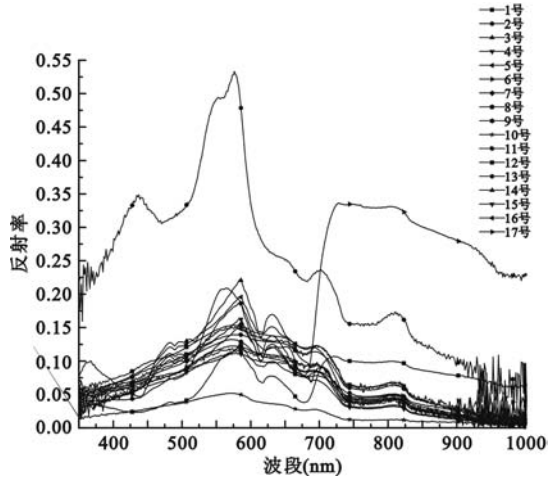


图 2 采样点反射光谱曲线

Fig. 2 Spectral reflectance of all the sampling points

$$\text{Chla}(\mu\text{g/L}) = 1368.384R_{720}^2 + 4.183$$

$$R^2 = 0.98, RMSE = 6.05, F = 567.63, Pr > F < 0.0001 \quad (1)$$

式中, R^2 为决定系数; RMSE 为误差均方根; F 为假设检验; F 为统计量; $Pr > F$ 为显著概率.

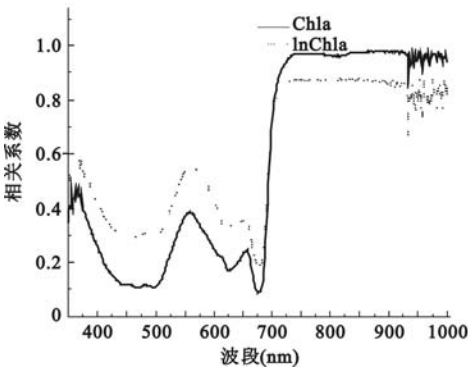


图 3 叶绿素 a 与各波段之间的相关系数

Fig. 3 Correlation between Chl. a concentration and reflectance

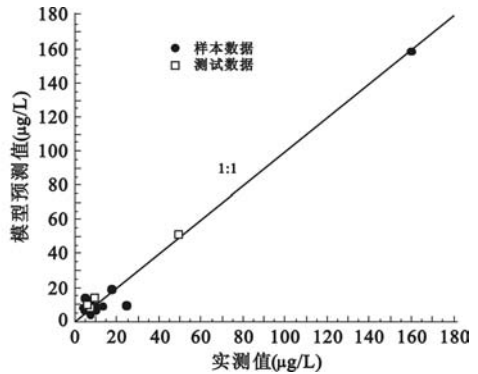


图 4 模型 1 的预测值和实测值的散点图

Fig. 4 Predicted Chl. a concentration versus measured Chl. a concentration using Model 1

利用光谱反射率值估算叶绿素 a 浓度,国内外许多研究者针对不同湖泊做了大量的研究, Han 等人^[1]、Dekker^[2]、Gitelson 等^[3]、Thiemann^[10]、李素菊等人^[12]利用近红外反射率最大值和红外反射率最小值附近的两个波段的反射率比值定量估算叶绿素 a 浓度,即 R700 左右/R670 左右,反演精度较高, Gitelson 等人^[3-5]研究发现波段反射率比值 R700/R560、R695/R573 也与叶绿素 a 浓度高度相关,另外, Mittenzwey 等人^[6]利用波段比值 R705/R550 估算了中富营养化到富营养化水体的叶绿素 a 浓度. Melack 等人^[7]和 Gitelson 等人^[3]成功的利用了波段比值 R520/R550 估算了叶绿素 a 浓度, Vertucci 等人^[8]得出波段反射率比值 R445/R554, R525/R554, R554/R589 和 R477/R700 也是估算叶绿素 a 浓度的有效波段比值, Arenz 等

表1 波段比值与叶绿素浓度 a 的相关系数
Tab. 1 Correlation coefficient between Chl. a concentration and band ratios

波段比值	CHLA	LnChla
R705/R680	0.877	0.750
R700/R680	0.817	0.744
R710/R680	0.834	0.757
R728/R680	0.855	0.763
R720/R680	0.846	0.756
R715/R680	0.842	0.758
R700/R560	0.452	0.194
R695/R573	0.178	-0.100
R705/R550	0.616	0.408
R706/R676	0.827	0.747
R700/R675	0.815	0.739
R520/R550	-0.658	-0.765
R445/R554	-0.488	-0.502
R525/R554	-0.624	-0.726
R554/R589	0.655	0.549
R477/R700	-0.457	-0.315
R806/R571	0.862	0.701

人^[9]成功地利用了 R806/R571 反演了科罗拉多州水库的叶绿素 a 浓度. 为了检验前人的研究成果是否适用于太湖水体, 分析不同的波段比值与太湖叶绿素 a 浓度的相关性, 相关系数如表 1 所示, 从表 1 中可以看出 Arenz 等人的研究结论 R806/R571 与太湖的叶绿素 a 浓度的相关性最大, 其次就是波段比值 R728/R680. 这表明利用波段比值估算叶绿素 a 浓度, 只能针对特定的水体和区域, 不具备较好的通用性.

因此, 选择 806 nm 和 571 nm 两个波段的反射率比值来估算叶绿素 a 浓度, 方法如上所述, 得到 2 式的回归方程, 模型预测结果如图 5 所示.

$$\begin{aligned} Chla(\mu\text{g/L}) &= 114.202 (R_{806}/R_{571})^2 - \\ &105.256R_{806}/R_{571} + 28.306 \\ (R^2 &= 0.89, RMSE = 4.54, F = 508.8 \\ Pr > F &< 0.0001) \end{aligned} \quad (2)$$

根据水体反射光谱数据, 分别利用单波段和波段比值估算叶绿素 a 浓度, 比较图 4 与图 5 测试数据距 1:1 线的离散程度可以看出单波段估算太湖叶绿素 a 浓度, 即模型 1, 取得了非常好的效果. 从图 5 测试数据可以看出, 模型 2 在估算叶绿素 a 浓度在 10 $\mu\text{g/L}$ 以内的时候具有非常高的精度, 但在估算叶绿素 a 浓度 > 10 $\mu\text{g/L}$ 时, 估算精度急剧下降, 这可能是由于采样点的叶绿素 a 浓度分布不均匀造成的, 采样点中叶绿素 a 浓度 > 10 $\mu\text{g/L}$ 的点仅有 5 个, 其他 12 个点都在 10 $\mu\text{g/L}$ 以内, 由此可见模型 2 具有局限型, 只能较好的估算叶绿素 a 浓度 < 10 $\mu\text{g/L}$ 的样点, 但如果采样点叶绿素 a 浓度分布比较均匀, 波段比值可能会具有很好的估测精度. 模型 1 无论是对于浓度在 10 $\mu\text{g/L}$ 以下的和 10 $\mu\text{g/L}$ 以上的都有很好的估算精度, 受采样点叶绿素 a 浓度分布影响较小, 模型 1 具有较好的通用性.

3.3 基于光谱微分技术的叶绿素 a 浓度估算模型

光谱微分技术是高光谱遥感中一种常用的技术手段^[15], 它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.

由于采集的光谱反射率值是离散的, 对 17 个采样点的反射光谱求微分, 一阶和二阶微分分别用下式求算:

$$\begin{aligned} R(\lambda_i)' &= (R(\lambda_{i+1}) - R(\lambda_{i-1})) / (\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}) \\ R(\lambda_i)'' &= (R'(\lambda_{i+1}) - R'(\lambda_{i-1})) / (\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}) \\ &= (R(\lambda_{i+1}) - 2R(\lambda_i) + R(\lambda_{i-1})) / (\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1})^2 \end{aligned}$$

$\lambda_{i+1}, \lambda_{i-1}$ 为相邻波长, $R(\lambda_i)'$ 和 $R(\lambda_i)''$ 为波长 λ_i 的一阶微分和二阶微分光谱.

为了进一步分析叶绿素 a 对光谱一阶微分的影响, 提取 6、11 号两个可比点的一阶微分光谱分析, 6 号点的悬浮物浓度为 60.48 mg/L, 叶绿素 a 浓度为 159.59 $\mu\text{g/L}$, DOC 浓度为 8.49 mg/L, 11 号点的悬浮物浓度为 60.92 mg/L, 叶绿素 a 浓度为 7.03 $\mu\text{g/L}$, DOC 浓度为 5.54 mg/L, 两个采样点悬浮物浓度相差无几, 但

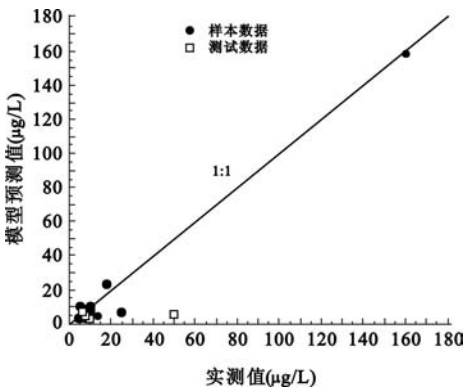


图5 模型 2 预测值和实测值的散点图

Fig. 5 Predicted Chl. a concentration versus measured Chl. a concentration using Model 2

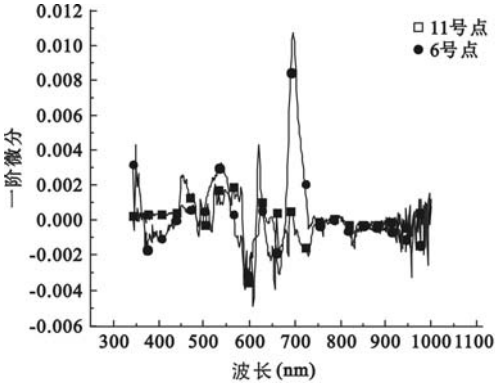


图 6 6 号采样点和 11 号采样点一阶微分光谱
Fig. 6 The First Derivative of Point 6 and Point 11

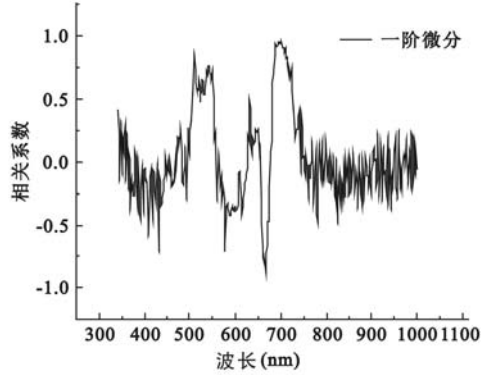


图 7 叶绿素 a 浓度与一阶微分的相关系数
Fig. 7 Correlation between Chl a concentration and first derivative

叶绿素 a 浓度相差甚远. 两个采样点的一阶微分光谱见图 6 所示,处于近红外反射峰与叶绿素 a 的红光吸收峰之间的 690 nm 附近,反射率的一阶微分值变化幅度最大,叶绿素 a 浓度越高,变化值越大,图中可以明显看出 6 号点 690 nm 附近的一阶微分值要远远高于 11 号点. 在 SAS 的支持下分析各波段的一阶微分与叶绿素 a 浓度的相关关系(图 7),图中可以看出 690 nm 左右一阶微分与叶绿素 a 浓度相关性最大,呈正相关,同时在 670 nm 附近,一阶微分与叶绿素 a 浓度的相关系数仅次于 690 nm 处,呈负相关,因此以 690 nm 波段的一阶微分为自变量,以叶绿素 a 浓度为因变量,进行回归分析,得到太湖水体叶绿素 a 浓度估算模型如下:

$$Chla(\mu\text{g/L}) = 1346606.020D_{690}^2 + 8.355$$

$$R^2 = 0.98, RMSE = 5.315, F = 738.48, Pr > F < 0.0001 \text{ (式中各符号含义同式 1)} \quad (3)$$

图 8 是利用模型 3 估算叶绿素 a 浓度的预测值和实测值的散点图,从图中测试数据可以看出,该模型对浓度 10 $\mu\text{g/L}$ 以下的点有着较好的估测精度,而浓度大于 10 $\mu\text{g/L}$ 估算误差就比较大,并且模型 3 对叶绿素 a 浓度变化不敏感. 图 8 表明,在去除线性影响后,利用一阶微分估算太湖水体叶绿浓度的精度并没有显著的提高,估测效果没有直接利用光谱反射数据的效果好.

Gooding 等人^[16]认为水体的反射光谱的一阶微分可消除水面的影响,二阶微分可以消除悬浮物浓度的影响,根据 Gooding 等人的结论,对 17 个采样点进行二阶微分,分析二阶微分与叶绿素 a 浓度的相关性. 图 9 是二阶微分与叶绿素 a 浓度的相关系数曲线,从曲线中可以看出,叶绿素 a 浓度与二阶微分相关性变化趋势与一阶微分非常接近,叶绿素 a 浓度在 685 nm 和 702 nm 附近与二阶微分的相关性最好,在 685 nm 附近呈正相关,在 702 nm 附近呈负相关,根据上述方法进行回归分析,得到 4 式的二阶微分叶绿素 a 浓度估算模型,模型预测效果见图 10 所示.

$$Chla(\mu\text{g/L}) = 327036792.9D_{702}^2 + 4.5$$

$$R^2 = 0.86, RMSE = 16.64, F = 65.47, Pr > F < 0.0001 \text{ (式中各符号含义同式 1)} \quad (4)$$

4 结论

通过对太湖 17 个不同采样点反射光谱及其微分的分析得出,太湖水体的叶绿素 a 浓度可以用 720 nm 附近的反射率估算,同时也可以利用 806 nm 波段和 571 nm 两个波段的反射率比值来估算叶绿素 a 浓度,结果表明,前者建立的估算模型具有较好的通用性,而后者只能较好的估算 < 10 $\mu\text{g/L}$ 的叶绿素 a 浓度;通过对光谱微分的分析,表明叶绿素 a 浓度与 690 nm 附近的一阶微分和 702 nm 附近的二阶微分相关性最好,但基于反射光谱一阶微分的叶绿素 a 浓度估算模型,并没有显著的提高太湖叶绿素 a 浓度的估测精度,比较图

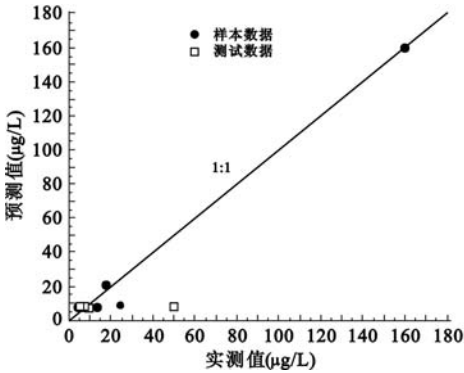


图8 模型3 预测值和实测值散点图

Fig. 8 Predicted Chl. a concentration versus measured Chl. a concentration using Model 3

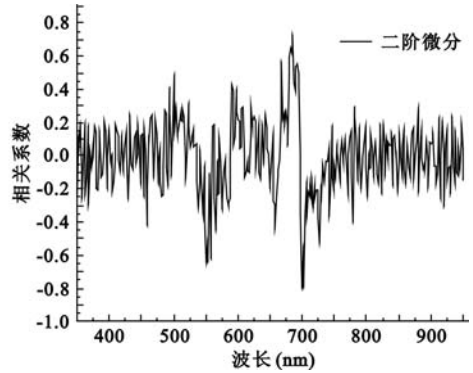


图9 叶绿素浓度与二阶微分的相关系数

Fig. 9 Correlation of Chl. a concentration and Second Derivative

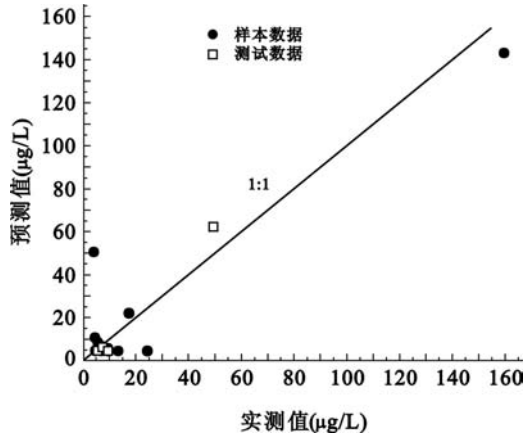


图10 模型4 预测值和实测值散点图

Fig. 10 Predicted Chl. a concentration versus measured Chl. a concentration using Model 4

10 和图8 测试数据的离散程度可以看出二阶微分后的估测精度稍好于一阶微分,但其估测精度仍没有利用720 nm 反射光谱的反演模型高。

水体由于所在区域的不同,富营养化程度的不同,叶绿素 a 浓度提取的模型和精度也不一样,许多研究表明利用波段比值或微分技术可以显著的提高叶绿素 a 浓度反演的精度,而本次研究表明太湖水体的叶绿素 a 浓度反演效果最好的是利用720 nm 附近的光谱反射率,而不是利用波段比值或微分技术。

5 参考文献

- [1] Han L, Donald C, Rundquist D C. Comparison of NIR/ RED ratio and first derivative of reflectance in estimating chlorophyll concentration: a case study in a turbid reservoir. *Remote Sensing of Environment*, 1997, **62**:253 - 261.
- [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] Gitelson A A, Garbuzov G. Quantitative remote sensing methods for real-time monitoring of inland waters quality. *Int J Remote Sensing*, 1993, 14 (7):1269 - 1295.

- [4] Gitelson A A. The peak near 700 nm on radiance spectra of algae and water relationships of its magnitude and position with chlorophyll concentration. *Int J Remote Sensing*, 1992,13: 3367 – 3373.
- [5] Gitelson A A, Keydan G P. Remote sensing of inland surface water quality measurements in the visible spectrum. *Acta Hydrophysica*. 1990, 14 : 1269 – 1295.
- [6] Mittenzwey K-H, Gitelson A A, Lopatchenko A A, *et al.* In-situ monitoring of water quality on the basis of spectral reflectance. *Internationale Revue der gesamten Hydrobiologie*, 1988, 73:61 – 72.
- [7] Melack J M, Pilorz S H. Reflectance spectral from eutrophic mono Lake, California, measured with the Airborne visible and infrared imaging spectrometer (AVIRIS). *SPIE*, 1990,1298:202 – 212.
- [8] Vertucci F A, Likens G E. Spectral reflectance and water quality of Adirondack mountain region lakes. *Limnol. Oceanogr*, 1989,34(8):1656 – 1672.
- [9] Arenz R F, Jr, Lewis W M, *et al.* Determination of chlorophyll and dissolved organic carbon from reflectance data for Colorado reservoirs. *Int J Remote Sensing*, 1996,17:1547 – 1566.
- [10] Thiemann S & Kaufmann H. Lake water quality monitoring using hyperspectral airborne data—a semiempirical multisensor and multitemporal approach for the Mecklenburg Lake District, Germany. *Remote Sensing of Environment*, 2002, **81**: 228 – 237.
- [11] Rundquist D C Han L, Schalles J, *et al.* Remote measurement of algal chlorophyll in surface waters; the case for the first derivative of reflectance near 690 nm. *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing*, 1996,**62**:195 – 200.
- [12] 李素菊,吴 倩,王学军等. 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):230 – 233.
- [13] 秦伯强,胡维平,陈伟民等. 太湖水环境演化过程与机理. 北京:科学出版社,2004.
- [14] 刘兆德,虞孝感,王志宪. 太湖流域水环境污染现状与治理的新建议. *自然资源学报*, 2003, **18**(4): 467 – 474.
- [15] 浦瑞良,宫 鹏. 高光谱遥感及其应用. 北京:高等教育出版社,2000.
- [16] Goodin, 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.