

黄渤海浮游植物种群比吸收光谱的确定及其应用

李楠¹, 孙德勇^{1,2,3*}, 环宇¹, 王胜强^{1,2,3}, 张海龙^{1,2,3}, 丘中锋^{1,2,3}, 何宜军^{1,2,3}

¹南京信息工程大学海洋科学学院, 江苏 南京 210044;

²江苏省海洋动力遥感与声学重点实验室, 江苏 南京 210044;

³江苏省海洋环境探测工程技术研究中心, 江苏 南京 210044

摘要 浮游植物比吸收系数是关联浮游植物生物量与吸收光谱的重要参数。对浮游植物种群比吸收系数的量化分析,可弥补黄渤海浮游植物种群比吸收光谱研究的不足,为监测浮游植物种群浓度提供新思路。结合 2016 年 6 月黄渤海航次的浮游植物吸收系数与色素浓度数据,利用 CHEMTAX 软件分析得到黄渤海 8 个优势藻种的浓度。运用留一法,对吸收系数与藻种浓度数据进行多元线性回归分析,提取各藻类比吸收光谱,重建总吸收光谱。结果显示,模型反演效果较好,重构的吸收光谱与实测光谱在蓝、红光波段具有较高的一致性。此外,分析优势藻种对浮游植物吸收系数的贡献时,发现在所有优势藻种中,定鞭藻对浮游植物的吸收贡献最大,蓝藻次之。

关键词 海洋光学; 浮游植物比吸收系数; 线性分解模型; 种群浓度; 黄渤海

中图分类号 P76

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.0601004

Determination and Application of Specific Absorption Spectra of Phytoplankton Species in Yellow Sea and Bohai Sea

Li Nan¹, Sun Deyong^{1,2,3*}, Huan Yu¹, Wang Shengqiang^{1,2,3},
Zhang Hailong^{1,2,3}, Qiu Zhongfeng^{1,2,3}, He Yijun^{1,2,3}

¹School of Marine Sciences, Nanjing University of Information Science and Technology,
Nanjing, Jiangsu 210044, China;

²Jiangsu Key Laboratory of Ocean Dynamics Remote Sensing and Acoustics, Nanjing, Jiangsu 210044, China;

³Jiangsu Research Center for Ocean Survey Technology, Nanjing, Jiangsu 210044, China

Abstract Phytoplankton specific absorption coefficient is an important optical parameter associated with phytoplankton biomass and absorption spectrum. The quantitative analysis of specific absorption coefficients of phytoplankton populations makes up for the deficiency of specific absorption spectra of phytoplankton populations in Yellow Sea and Bohai Sea, and provides a new idea for monitoring the phytoplankton population concentration. Combined with the phytoplankton absorption coefficient and pigment concentration data collected during the cruise in Yellow sea and Bohai Sea in June, 2016, CHEMTAX software is used to analyze the concentrations of eight dominant alga species in Yellow Sea and Bohai Sea. The multiple linear regression analysis of the absorption coefficient and concentration data of algal species is carried out by using the LOO-CV method, the specific absorption spectra of each algae are extracted, and the total absorption spectra are reconstructed. The results show that the model inversion is effective, and the reconstructed absorption spectrum is consistent with the measured spectra in blue and red wavebands. In addition, when analyzing the contribution of dominant alga species to phytoplankton absorption coefficient, it is found that among all dominant alga species, the dinoflagellate gives the greatest contribution to phytoplankton absorption, followed by cyanobacteria.

Key words oceanic optics; phytoplankton specific absorption coefficient; linear decomposition model; population concentration; Yellow Sea and Bohai Sea

OCIS codes 010.4450; 010.7340; 010.1690

收稿日期: 2019-10-18; 修回日期: 2019-11-15; 录用日期: 2019-12-02

基金项目: 国家自然科学基金(41876203, 41576172)、江苏高校“青蓝工程”中青年学术带头人(R2019Q07)、江苏省“六大人才高峰”高层次人才项目(JY-084)、南京信息工程大学人才启动经费(2019R058)、南京市留学人员科技创新项目(R2019LZ05)、江苏省海洋科技创新项目(HY2017-5)

* E-mail: sundeyong@nuist.edu.cn

1 引 言

浮游植物吸收系数($a_{ph}(\lambda)$, λ 为波长)是水体固有光学特性之一,同时也是引起近岸水体光学性质变化的重要因素^[1],可通过现场原位测量和高光谱海洋水色遥感反演获得^[2-3]。浮游植物吸收光谱是海洋高光谱水色遥感的重要生物光学参数之一,可以通过比吸收系数($a_{ph}^*(\lambda)$)进行表征^[4]。浮游植物比吸收系数最初被定义为常量,大约为 $0.016 \text{ m}^2 \cdot \text{mg}^{-1}$ ^[5],随着学者对比吸收系数的研究,发现比吸收系数是一个生物学变量,受浮游植物种群组成、浓度及色素打包效应影响^[6]。近年来,学者还发现 $a_{ph}^*(\lambda)$ 的变化是影响海表温度的一个重要因素^[7]。因此,浮游植物比吸收系数的研究对于构建水色遥感分析模型及观测全球气候环境的变化有重要意义。

一般来说, $a_{ph}(\lambda)$ 是细胞中所含色素的吸收系数总和,因此与浮游植物种群特征相关的色素组成和浓度对其的影响较大^[8-9]。一个特定的浮游植物种群,其色素组成稳定,色素浓度随生理状态的不同而发生改变^[10-11]。虽然所有浮游植物种群都显示出高度一致的吸收光谱趋势,不同种群的浮游植物吸收光谱仍具有显著的特征差异,如在 $400 \sim 500 \text{ nm}$ 波段范围内,甲藻、定鞭藻在 435 nm 和 465 nm 处存在双吸收峰特征,硅藻在蓝光波段的吸收峰位于 435 nm 附近。因此,这种浮游植物吸收特征的差异性可以作为区分浮游植物种群的依据^[12]。利用不同浮游植物种群色素的合成数据集,开发了化学分析软件CHEMTAX^[13]。该软件通过构建色素比例矩阵,实现不同藻种浓度的分离,进而描述浮游植物种群结构。

近年来,很多学者对世界各海域水体的浮游植物吸收分解模型和比吸收求解方法进行了大量研究,取得了许多重要成果。Moisan等^[14]使用非负最小二乘法(NNLS)、奇异值分解(SVD)和非线性最小二乘法(MRQMIN),结合色素浓度数据,计算得到18种色素的比吸收光谱,从而实现高光谱遥感反演色素浓度。Woźniak等^[15]采用高斯方程得到叶绿素a、叶绿素b、叶绿素c、光合作用类胡萝卜素与光保护作用类胡萝卜素的比吸收系数,反演获得不同水体不同深度的色素浓度并进行比较。王桂芬等^[16]使用浮游植物吸收系数与叶绿素a浓度的比值表征比吸收系数,建立比吸收系数与叶绿素a浓度的幂指数模型并研究比吸收系数在空间的变化。

王瑜^[17]分析研究铜绿微囊藻、小球藻、梅尼小环藻、卵形隐藻和纤细裸藻及五藻混合藻的比吸收光谱,从而在卫星遥感接收的混合藻光谱信息中分离出各藻的信息。周虹丽等^[18]测得小球藻、扁藻、裸甲藻的比吸收光谱,并比较研究不同藻的比吸收特征,对赤潮藻种的鉴别、藻类组成变化的监测有重要意义。目前,国内在浮游植物种群比吸收系数方面的研究不够深入,仅限于单一的浮游植物种群,且已有模型在黄渤海的适用性有待进一步验证。

针对黄渤海水体,本文利用浮游植物吸收系数和藻类浓度数据,建立了基于种群结构的浮游植物吸收分解模型,得到了优势藻种的比吸收系数。同时分析了不同浮游植物种群对总吸收的吸收贡献,探讨了种群吸收贡献率的空间分布特征。

2 研究区域与数据处理

2.1 研究区域

研究区域位于黄海和渤海,现场实测数据采集于2016年国家自然科学基金委员会夏季黄渤海共享航次,包括浮游植物吸收系数数据和色素数据共计66个。渤海是我国半封闭的内海,三面环陆,水深较浅。黄河、滦河、大清河等多条河流常年流入渤海,故盐度较低,径流携带大量营养盐,促进了浮游植物的生长。黄海为太平洋西部的半封闭浅海,海底平缓,含有大量泥沙。淮河、鸭绿江、汉江等携带大量的营养物质、泥沙、淡水注入黄海,为黄海的浮游生物提供良好的生存条件^[19]。

2.2 浮游植物吸收

浮游植物吸收系数测量主要是采用定量滤膜技术(QFT)。将一定体积($0.8 \sim 4.0 \text{ L}$)的海水样本过滤到直径为 25 mm ,孔径为 $0.7 \mu\text{m}$ 的玻纤滤膜(Whatman公司,GF/F,英国)上,随即放入 $-80 \text{ }^\circ\text{C}$ 液氮罐中保存。实验室测量浮游植物吸收系数主要是通过散射-透射法,先测量得到总颗粒物吸收系数 $a_p(\lambda)$,然后将滤膜放置在质量分数约为90%的甲醇溶液中浸泡 $24 \sim 48 \text{ h}$,萃取样品膜上的有机物,再通过散射-透射法测得非色素颗粒物吸收系数 $a_d(\lambda)$ ^[20]。浮游植物吸收光谱 $a_{ph}(\lambda)$ 可表示为 $a_p(\lambda)$ 与 $a_d(\lambda)$ 的差值^[21]。

2.3 浮游植物种群浓度

浮游植物色素样品采集是使用直径为 40 mm ,孔径为 $0.7 \mu\text{m}$ 的GF/F玻璃纤维滤膜过滤一定体积($1 \sim 4 \text{ L}$)水样,并立即将滤膜保存于液氮容器中,并通过高效液相色谱法(HPLC)测得色素浓度^[22]。

用于 CHEMTAX 分析的色素以及对应的藻类信息如表 1 所示。

表 1 用于 CHEMTAX 分析的色素以及对应的藻类信息
Table 1 Pigments for CHEMTAX analysis and corresponding algae informations

Symbol	Pigment	Algae
Peri	Peridinin	Dinoflagellates
But	19'-butanoyloxy-fucoxanthin	Chrysophytes and Haptophytes
Fuco	Fucoxanthin	Diatoms, Prymnesiophytes and some dinoflagellates
Hex	19'-hexanoyloxy-fucoxanthin	Prymnesiophytes
Neo	Neoxanthin	Chlorophytes and Prasinophytes
Pra	Prasinoxanthin	Prasinophytes
Viol	Violaxanthin	Chlorophytes and Prasinophytes
Allo	Alloxanthin	Cryptophytes
Lut	Lutein	Chlorophytes and Prasinophytes
Zea	Zeaxanthine	Cyanobacteria, Prochlorophytes, Chlorophytes and Chrysophytes
Chla	Chlorophyll a	All-except Prochlorophytes

通过 CHEMTAX 矩阵因子程序将色素浓度转化为种群浓度^[23]。用于 CHEMTAX 分析的初始特征色素矩阵如表 2 所示。首先将初始比率矩阵乘以随机比例因子(0.65~1.35),生成 60 个色素比率矩阵(步骤 1)。然后,将 60 个比率矩阵中的每一个矩阵作为输入值,通过最速下降法得到色素比率矩阵残差最快下降方向,对矩阵进行迭代并且比较残差,以找到最小残差。在对 60 个矩阵中的每一个矩阵进行 60 次运算之后,比较得到最优的 6 个比率矩阵(即残差方均根误差最小的 6 个矩阵),并将它们的平均比率作为新的初始比率矩阵(步骤 2)。步骤 1 和步骤 2 重复一次,得出一个最优比率矩阵(表 3),再将该矩阵用于定量估计浮游植物种群浓度。根据已有关于黄渤海浮游植物种群特征的研究^[14,24-28],浮游植物种群大致可分为硅藻(Diatoms)、甲藻(Dinoflagellates)、隐藻(Cryptophytes)、定鞭藻(Prymnesiophytes)、金藻(Chrysophytes)、绿藻(Chlorophytes)、青绿藻(Prasinophytes)和蓝藻(Cyanobacteria)八类^[29]。

表 2 用于 CHEMTAX 分析的初始特征色素矩阵
Table 2 Initial characteristic pigment matrix for CHEMTAX analysis

Algae	Peri	But	Fuco	Hex	Neo	Pra	Viol	Allo	Lut	Zea	Chla
Prasinophytes	0	0	0	0	0.10	0.35	0.11	0	0.02	0	0.80
Dinoflagellates	1.06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cryptophytes	0	0	0	0	0	0	0	0.23	0	0	0
Chlorophytes	0	0	0	0	0.08	0	0.06	0	0.14	0.01	0.46
Cyanobacteria	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.35	0
Diatoms	0	0	0.47	0	0	0	0	0	0	0	0
Chrysophytes	0	0.37	0.11	0	0	0	0	0	0	0	0
Prymnesiophytes	0	0	0	1.71	0	0	0	0	0	0	0

表 3 用于 CHEMTAX 分析的最终特征色素矩阵
Table 3 Final characteristic pigment matrix for CHEMTAX analysis

Algae	Peri	But	Fuco	Hex	Neo	Pra	Viol	Allo	Lut	Zea	Chla
Prasinophytes	0	0	0	0	0.11	0.26	0.09	0	0.01	0	0.63
Dinoflagellates	1.28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Cryptophytes	0	0	0	0	0	0	0	0.29	0	0	0
Chlorophytes	0	0	0	0	0.07	0	0.07	0	0.18	0.01	0.58
Cyanobacteria	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.43	0
Diatoms	0	0	0.37	0	0	0	0	0	0	0	0
Chrysophytes	0	0.29	0.13	0	0	0	0	0	0	0	0
Prymnesiophytes	0	0	0	1.35	0	0	0	0	0	0	0

2.4 吸收分解模型

根据浮游植物吸收光谱的可加性,浮游植物总吸收系数 $a_{ph}(\lambda)$ 可表示为各个浮游植物种群的吸收之和^[11, 30]:

$$a_{ph}(\lambda) = \sum_{i=1}^m C_i a_i^*(\lambda), \quad (1)$$

式中: $a_i^*(\lambda)$ 为第 i 种藻类的比吸收系数 ($m^2 \cdot mg^{-1}$); C_i 是第 i 种藻类浓度 (质量浓度, 全文同, $mg \cdot m^{-3}$); m 为所有藻类数量, 本文 $m=8$ 。

在回归分析中, 如果因变量受两个或两个以上的自变量影响, 就称为多元回归, 本文中浮游植

物吸收系数为因变量, 各藻类浓度为自变量, 并且自变量与因变量之间为线性关系, 则多元线性回归模型为

$$a_{ph,j=n} = C_{i=1,j=n} a_{i=1}^*(\lambda) + C_{i=2,j=n} a_{i=2}^*(\lambda) + \dots + C_{i=m,j=n} a_{i=m}^*(\lambda), \quad (2)$$

式中: $a_{ph,j=n}(\lambda)$ 为第 j 个样本的吸收系数 (m^{-1}); $C_{i,j}$ 是第 i 种藻类第 j 个样本的浓度 (质量浓度, 全文同, $mg \cdot m^{-3}$); $a_i^*(\lambda)$ 为第 i 种藻类的比吸收系数 ($m^2 \cdot mg^{-1}$); m 为藻类数量; n 为样本数量。

在特定波长处, 多元线性回归模型的回归参数为

$$\begin{cases} a_{ph,j=1}(\lambda) = C_{i=1,j=1} \cdot a_{i=1}^*(\lambda) + \dots + C_{i=m,j=1} \cdot a_{i=m}^*(\lambda) \\ a_{ph,j=2}(\lambda) = C_{i=1,j=2} \cdot a_{i=1}^*(\lambda) + \dots + C_{i=m,j=2} \cdot a_{i=m}^*(\lambda) \\ \vdots \\ a_{ph,j=n}(\lambda) = C_{i=1,j=n} \cdot a_{i=1}^*(\lambda) + \dots + C_{i=m,j=n} \cdot a_{i=m}^*(\lambda) \end{cases} \quad (3)$$

理论上, $m(m=8)$ 个未知数至少需要 m 个方程即 m 个样本的实测数据来计算求取。本文采用留一法, 依次取出一个样本, 剩余样本使用最小二乘法来计算得到八类藻的 $a_i^*(\lambda)$ 。

2.5 精度评价指标

利用数学软件 MATLAB 以及统计分析软件 SPSS 对数据进行统计分析与建模, 求解最优吸收分解模型参数。并采用留一法 (LOO-CV) 评估新建模型的稳定性。选择决定系数 (R^2)、平均绝对百分误差 (MAPE) 和方均根误差 (RMSE) 作为评价指标。

$$R^2 = \left[\frac{\sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})(y_k - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})^2 \sum_{k=1}^n (y_k - \bar{y})^2}} \right]^2, \quad (4)$$

$$E_{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (x_k - y_k)^2}, \quad (5)$$

$$E_{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n |(x_k - y_k)/x_k| \times 100\%, \quad (6)$$

式中: E_{RMSE} 为方均根误差; E_{MAPE} 为平均绝对百分误差 (%); x_k 和 \bar{x} 分别表示第 k 个样本的实测值和实测平均值; y_k 和 \bar{y} 分别表示第 k 个样本的模型反演结果与其平均值。

3 结 果

3.1 浮游植物种群浓度的统计分布特征

通过 CHEMTAX 软件求解得到 8 种浮游植物种群浓度。图 1 为 8 种不同种群浓度的频数

分布直方图, 其中曲线为正态分布曲线, S.D. 为标准差, CV 为变异系数 (标准差与平均值的比值), max 为最大值。可以看出, 硅藻 (图 1(a))、青绿藻 (图 1(b))、隐藻 (图 1(c)) 和定鞭藻 (图 1(d)) 4 种藻类的浓度分布特征较相近, 高频率浓度主要集中在 $10^{-2} mg \cdot m^{-3}$ 左右, 且最大值明显高于其他藻种。而剩下的四种藻类高频浓度则相对较低, 其中绿藻 (图 1(e)) 与金藻 (图 1(f)) 两种藻的高频浓度 (约为 $10^{-3} mg \cdot m^{-3}$) 略高于甲藻 (图 1(g)) 和蓝藻 (图 1(h)) (约为 $10^{-5} mg \cdot m^{-3}$)。

3.2 浮游植物种群比吸收系数

3.2.1 种群比吸收系数的计算

基于 $a_{ph}(\lambda)$ 与 C_i 数据, 通过吸收分解模型, 由留一法反演获得 8 藻的 66 条比吸收光谱 $a_i^*(\lambda)$, 如图 2 所示。所有藻类比吸收光谱在 443 nm 和 675 nm 附近都存在吸收峰, 可能是因为辅助色素在蓝光波段的吸收峰对总吸收的贡献^[24, 31], 同时大部分藻在 412 nm 的吸收峰可能是由脱镁叶绿素的存在而导致的^[32]。除此之外, 部分藻种比吸收光谱在 475 nm 附近也存在吸收肩峰, 主要与辅助色素有关。硅藻 (图 2(a)) 和甲藻 (图 2(c)) 因其共有的硅甲藻黄素, 在 475 nm 附近存在肩峰; 蓝藻 (图 2(d)) 在 475 nm 的肩峰与其特有色素玉米黄素有关; 别黄素是隐藻 (图 2(b)) 的标志物, 引起了 450~500 nm 的两个吸收峰^[9, 24, 33-35]; 定鞭藻、绿藻、金藻 (图 2(b)、(c)) 的比吸收特征相似, 在吸收光谱幅度上有差异。同时, 发现 8 藻比吸收大小与其浓

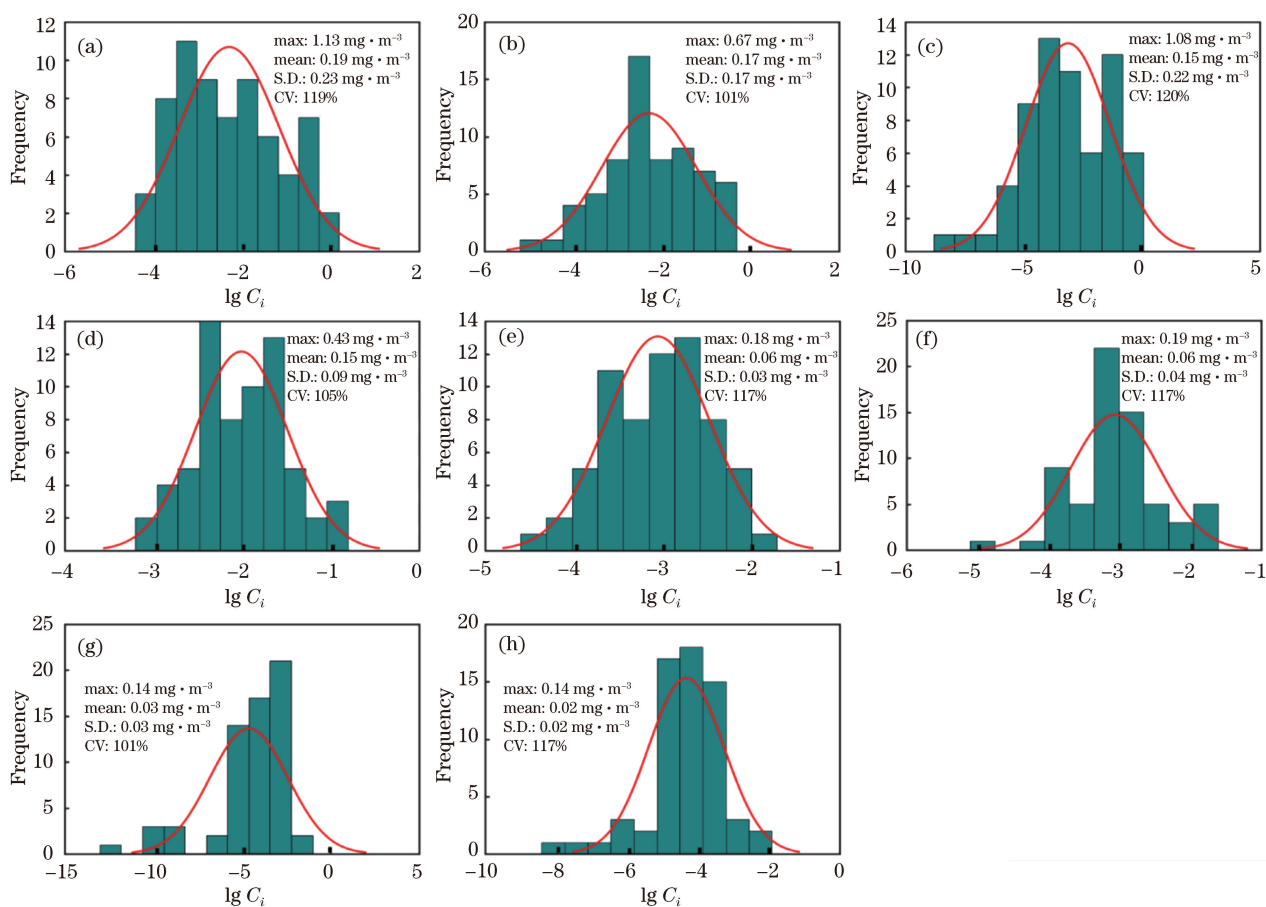


图 1 8 种藻类的浓度频数分布图(曲线为正态分布曲线)。(a)硅藻;(b)青绿藻;
(c)隐藻;(d)定鞭藻;(e)绿藻;(f)金藻;(g)甲藻;(h)蓝藻

Fig. 1 Frequency-concentration of eight alga species (curve is normal distribution). (a) Diatoms; (b) Prasinophytes; (c) Cryptophytes; (d) Prymnesiophytes; (e) Chlorophytes; (f) Chrysophytes; (g) Dinoflagellates; (h) Cyanobacteria

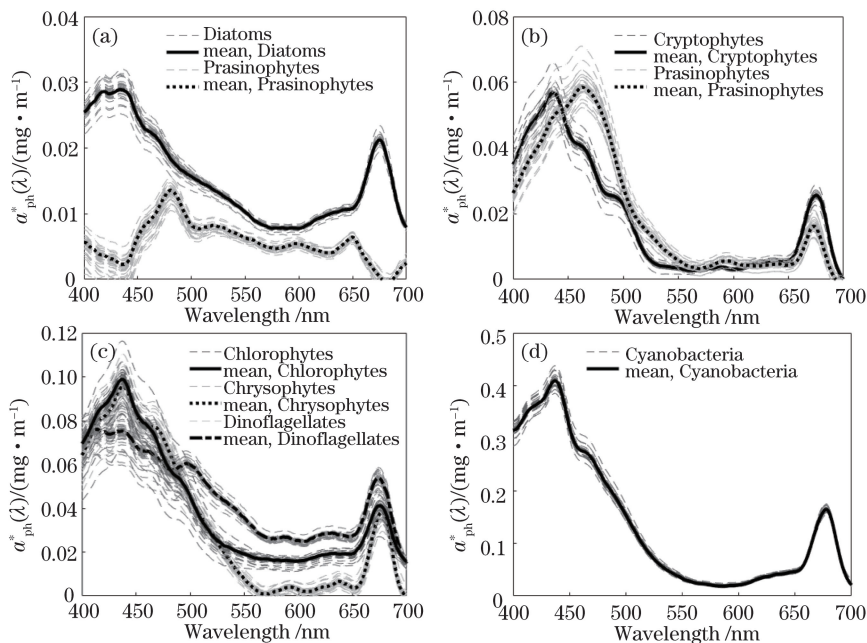


图 2 留一法中 8 个优势藻类的比较吸收光谱及其平均值

Fig. 2 Specific absorption spectra and mean values of 8 dominant alga species in LOO-CV

度(图 1)有关,藻类浓度越小,藻类比系数越大,这与已有研究结果一致^[17-18]。

3.2.2 种群比吸收系数验证

基于留一法每次反演得到的比吸收光谱 $a_i^*(\lambda)$ 与各种群浓度检验样本 C_i ,通过(1)式重构浮游植物的总吸收光谱,并与实测吸收系数作误差分析,如

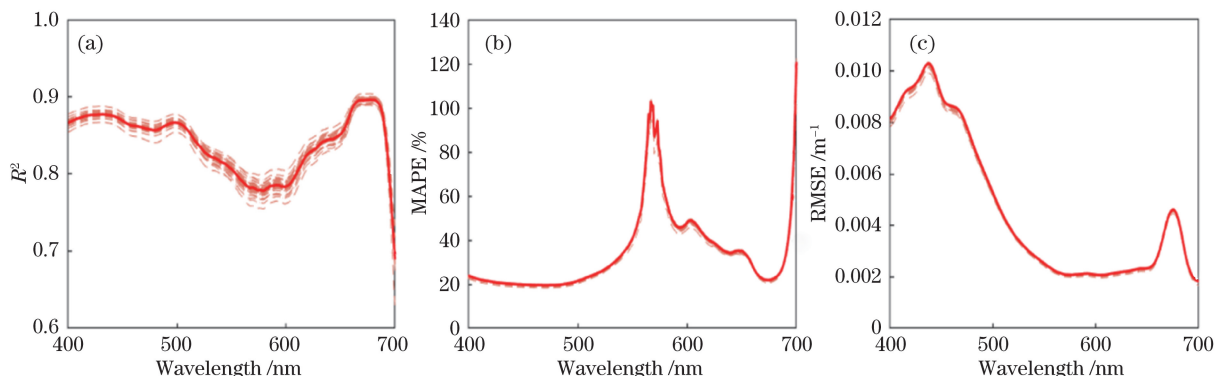


图 3 吸收系数反演误差分布图(虚线为误差曲线,实线为平均值)。(a) R^2 ; (b) MAPE; (c) RMSE

Fig. 3 Error distribution of retrieved absorption coefficient (dotted line is error curve, and solid line is average curve).

(a) R^2 ; (b) MAPE; (c) RMSE

3.2.3 浮游植物吸收系数不同波段检验分析

为了进一步对比分析吸收系数反演结果的精确性,选取 6 个波段(412, 443, 490, 555, 660, 680 nm)

图 3 所示。可以看出,比吸收系数的三种误差波动不大。其中,在蓝光(400~500 nm)和红光波段(650~700 nm)之间,吸收系数反演精度较高, R^2 大于 0.85,MAPE 小于 30%。而在黄绿光波段(550~610 nm)附近,误差较大,MAPE 最大值约为 100%。RMSE 在不同检验过程中较为稳定。

的 $a_{ph}(\lambda)$ 反演结果与实测值的散点图,如图 4 所示,其中 N 为样本数量。可以看到, $a_{ph}(\lambda)$ 模型重构值与实测值都非常靠近 1:1 线。除 555 nm 波段外

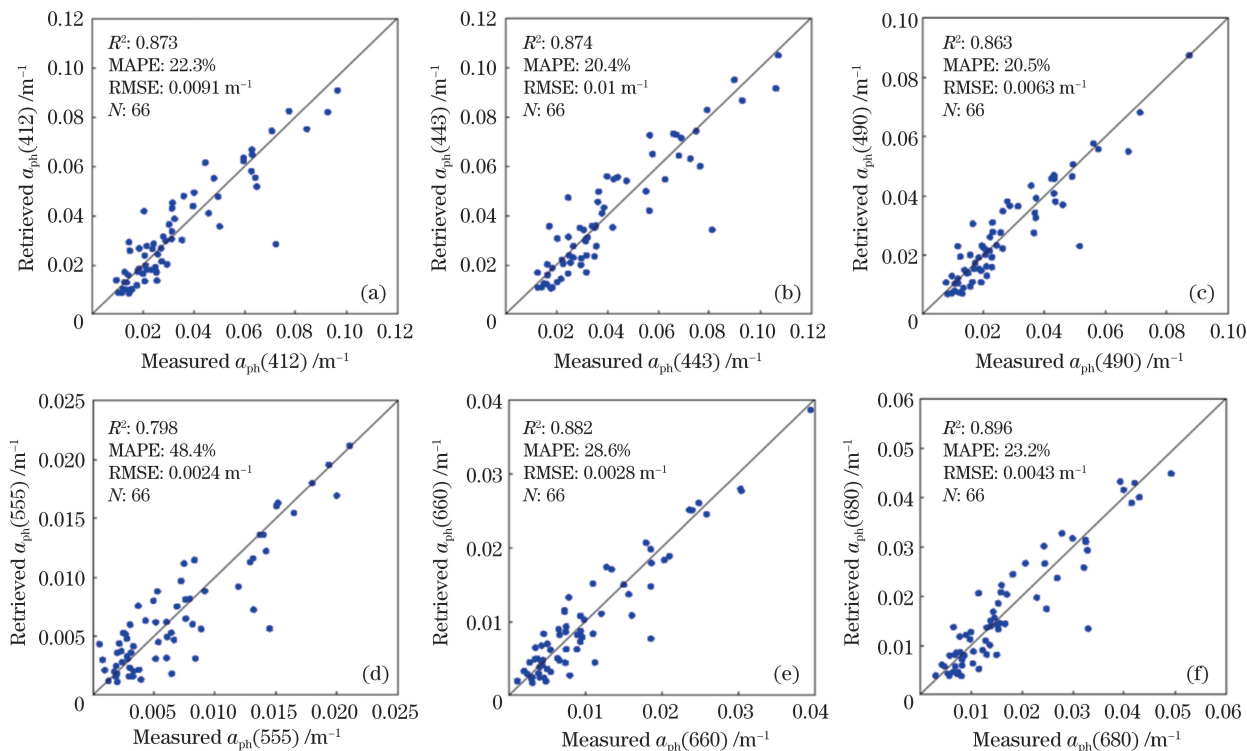


图 4 不同波段处反演结果与实测值的散点图(实线为 1:1 线)。(a) 412 nm; (b) 443 nm;

(c) 490 nm; (d) 555 nm; (e) 660 nm; (f) 680 nm

Fig. 4 Scatter diagrams of retrieved results and measured values at different wavebands (solid line is 1:1 line).

(a) 412 nm; (b) 443 nm; (c) 490 nm; (d) 555 nm; (e) 660 nm; (f) 680 nm

($R^2=0.798$),其他波段 R^2 都大于 0.850,且 MAPE 都低于 30%。从不同波段参数化的结果来看,680 nm 模型的结果最好,而在 555 nm 结果误差相对较大。原因可能是绿光波段浮游植物种群吸收能力较低,导致比吸收系数波动较大^[6]。

3.3 各藻类吸收对总吸收贡献的空间分布规律

浮游植物各种群比吸收系数是描述浮游植物种群吸收特性,研究水下光场环境变化的重要参数。通过不同藻类的比吸收系数与浓度数据,探究黄渤海水体中不同藻类吸收系数(a_i)对总浮游植物吸收(a_{ph})的贡献(以下简称 ATA),即 a_i/a_{ph} 。青绿藻、甲藻、隐藻、绿藻、蓝藻、硅藻金藻和定鞭藻在 2016 年夏季黄渤海 443 nm 处的吸收贡献空间分布不同。隐藻 ATA 高值区域分布于渤海近岸地区以及山东半岛附近,且离岸越远越小;定鞭藻整个区域 ATA 在 30%~70% 范围内,极大值点出现在渤海东部和黄海南部($a_i/a_{ph}>50%$),近岸 ATA 小于离岸海域;硅藻在黄海近岸区域有较大的 ATA 值;而绿藻在渤海中部出现 ATA 高值区($a_i/a_{ph}>60%$);金藻高吸收比例主要集中在黄海;蓝藻的高 ATA 值分布在整个渤海以及黄海近岸区域,离岸地区 ATA 较低。此外,青绿藻和甲藻在整个研究区域具

有相似的分布,ATA 值最小($a_i/a_{ph}<30%$)。总的来说,定鞭藻对浮游植物吸收贡献最大,蓝藻次之。

4 讨 论

结合浮游植物种群浓度与吸收光谱的线性分解模型依赖于各藻种比吸收光谱。在已知比吸收系数的前提下,依据(1)式,可以估算浮游植物种群吸收。该模型需要测得各个种群的比吸收光谱,然而实验室中培养藻类的比吸收光谱是在受控条件下测得的,与海洋中种群比吸收的测量值相差较大。此外,浮游植物种群的比吸收光谱可能会随环境条件(如光和养分)的改变而变化^[33,36]。因此,实验室中测得的活体藻类的比吸收光谱只能作为观察本文中获得的种群比吸收特征的辅助手段,无法直接验证比吸收光谱。本文选取周虹丽等^[18]、王瑜^[17]测得的小球藻(*Chlorella*, 绿藻门)、裸甲藻(*Gymnodinium aerucinosum* Stein, 甲藻门)、铜绿微囊藻(*Microcystis aeruginosa*, 蓝藻门)、梅尼小环藻(*Cyclotella meneghiniana*, 硅藻门)、卵形隐藻(*Cryptomonas ovata*, 隐藻门)的比吸收光谱进行对比分析,在 440 nm 处的归一化比吸收光谱曲线如图 5 所示。

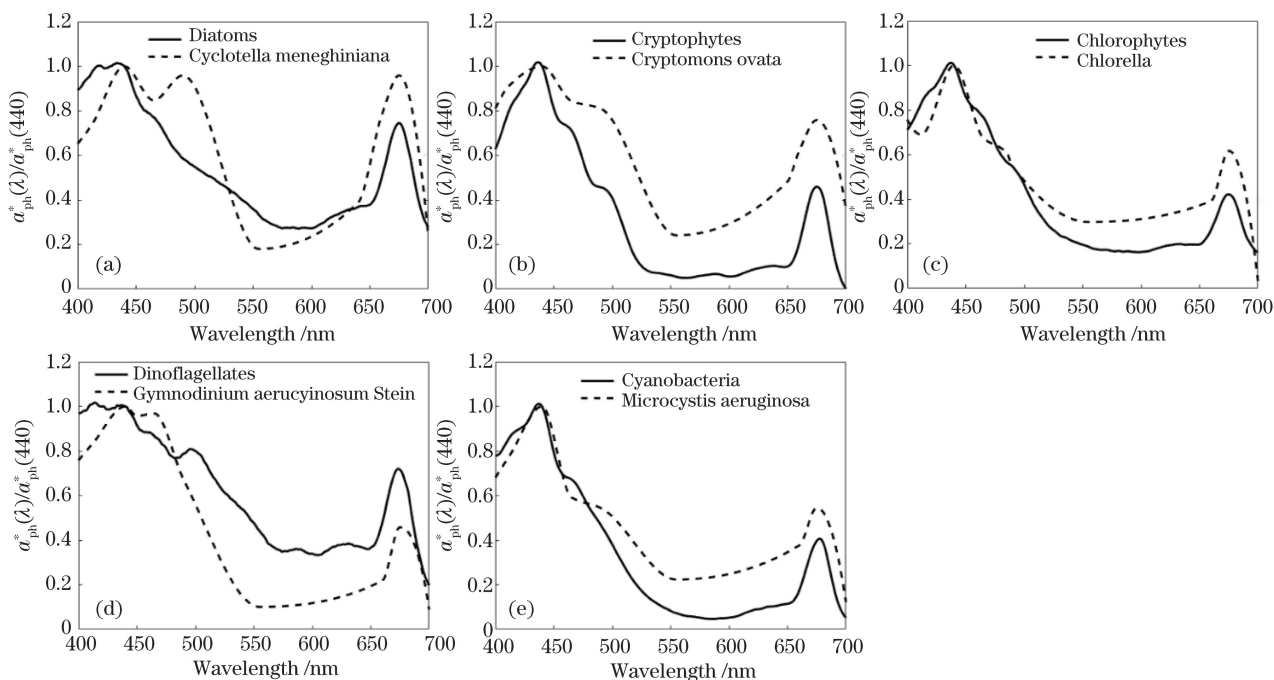


图 5 不同浮游植物种群 440 nm 处归一化的比吸收光谱曲线对比图

Fig. 5 Comparison of normalized specific absorption coefficient of different phytoplankton species at 440 nm waveband

本文中的比吸收光谱是一个种群下的总的比吸收光谱,与实验室具体藻种比吸收光谱存在一定差异。为了比较不同类别下的比吸收光谱形状特征,

将所有比吸收系数都除以 440 nm 处的比吸收系数,再进行对比,如图 5 所示。色素组成的差异会造成比吸收光谱具有不同的特征。因此,从吸收光谱

形状上看,硅藻与梅尼小环藻在 450~500 nm 处均有一个峰值,梅尼小环藻吸收峰与硅藻相比较为尖锐;隐藻与卵形隐藻的比吸收光谱形状相似,在 400~500 nm 处均有两个峰,但是卵形隐藻的吸收峰较平缓;绿藻与小球藻具有类似的光谱特征,且在 490 nm 处有一个叶绿素 b 吸收形成的肩峰;甲藻在 400~500 nm 处的两个吸收峰对应的波长相近,裸甲藻与甲藻有相同的特征,但是裸甲藻吸收峰位置离红光波段更近;与蓝藻相比,铜绿微囊藻在 450~550 nm 处的吸收峰向红光波段偏移^[17-18]。

5 结 论

通过吸收分解模型,计算得到 2016 年夏季黄渤海八种浮游植物种群的比吸收系数。该方法的关键步骤是确定各个浮游植物种群的比吸收光谱。使用 CHEMTAX 软件,结合色素浓度数据,计算得到各优势种群浓度。利用吸收分解模型,求解得到各个种群的比吸收光谱最优解,并通过重建浮游植物吸收光谱对比吸收系数进行检验。该方法的模型评估显示出良好的性能,蓝、红光波段的吸收系数反演精度较高, R^2 大于 0.85, MAPE 小于 30%,蓝光波段 RMSE 小于 $0.0105 \text{ m}^2 \cdot \text{mg}^{-1}$,红光波段 RMSE 小于 $0.005 \text{ m}^2 \cdot \text{mg}^{-1}$ 。将各优势种群比吸收系数用于分析吸收系数贡献比例,发现定鞭金藻在 443 nm 波段处对浮游植物总吸收的贡献最大。同时发现各优势种群的吸收系数贡献比例在空间分布上呈现出不同的分布特征。在已知研究区域的 $a_{\text{ph}}(\lambda)$ 情况下,通过浮游植物种群比吸收系数监控各优势种群浓度变化还需要进一步验证与探索。

参 考 文 献

- [1] Roy S, Sathyendranath S, Bouman H, et al. The global distribution of phytoplankton size spectrum and size classes from their light-absorption spectra derived from satellite data[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2013, 139: 185-197.
- [2] Sosik H M, Mitchell B. Light absorption by phytoplankton, photosynthetic pigments and detritus in the California Current System[J]. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 1995, 42(10): 1717-1748.
- [3] Huan Y. Remote sensing algorithm and spatiotemporal distribution of phytoplankton size classes in coastal waters[D]. Nanjing: Nanjing University of Information Science and Technology, 2018.
环宇. 近海水体浮游植物粒径等级的遥感反演及时空变异研究[D]. 南京: 南京信息工程大学, 2018.
- [4] Sun D Y, Li Y M, Wang Q, et al. Specific absorption characteristics of suspended particles in Lake Taihu and parameter analysis[J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2009, 29(9): 1820-1829.
孙德勇, 李云梅, 王桥, 等. 太湖水体中悬浮颗粒物的比吸收光谱特性及其参数化分析[J]. *环境科学学报*, 2009, 29(9): 1820-1829.
- [5] Berthon J F, Morel A. Validation of a spectral light-photosynthesis model and use of the model in conjunction with remotely sensed pigment observations[J]. *Limnology and Oceanography*, 1992, 37(4): 781-796.
- [6] Ye H P. A study on the accurate correction of case II water absorption coefficient and its remote sensing inversion[D]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2017.
叶虎平. 二类水体吸收系数精确校正及其遥感反演研究[D]. 北京: 中国科学院大学, 2017.
- [7] Timmermann A, Jin F F. Phytoplankton influences on tropical climate[J]. *Geophysical Research Letters*, 2002, 29(23): 19-1-19-4.
- [8] Hoepffner N, Sathyendranath S. Determination of the major groups of phytoplankton pigments from the absorption spectra of total particulate matter[J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 1993, 98(C12): 22789.
- [9] Bricaud A. Natural variability of phytoplanktonic absorption in oceanic waters: Influence of the size structure of algal populations[J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2004, 109(C11): C11010.
- [10] Xi H Y, Hieronymi M, Röttgers R, et al. Hyperspectral differentiation of phytoplankton taxonomic groups: a comparison between using remote sensing reflectance and absorption spectra[J]. *Remote Sensing*, 2015, 7(11): 14781-14805.
- [11] Hoepffner N, Sathyendranath S. Effect of pigment composition on absorption properties of phytoplankton[J]. *Marine Ecology Progress Series*, 1991, 73: 11-23.
- [12] MacKey M D, MacKey D J, Higgins H W, et al. CHEMTAX—a program for estimating class abundances from chemical markers: application to HPLC measurements of phytoplankton[J]. *Marine Ecology Progress Series*, 1996, 144: 265-283.
- [13] Ficek D, Kaczmarek S. Spectra of light absorption by phytoplankton pigments in the Baltic; conclusions to be drawn from a Gaussian analysis of empirical data[J]. *Oceanologia*, 2004, 46(4): 581-598.
- [14] Moisan J R, Moisan T A, Matthew A L. An inverse modeling approach to estimating phytoplankton

- pigment concentrations from phytoplankton absorption spectra[J]. *Journal of Geophysical Research Oceans*, 2011, 116(C9): C09018.
- [15] Woźniak B, Dera J, Dariusz F, et al. Modelling the influence of acclimation on the absorption properties of marine phytoplankton [J]. *Oceanology*, 1999, 41(2): 187-210.
- [16] Wang G F, Cao W X, Xu D Z, et al. Variations in specific absorption coefficients of phytoplankton in northern South China Sea [J]. *Journal of Tropical Oceanography*, 2005, 24(5): 1-10.
王桂芬, 曹文熙, 许大志, 等. 南海北部水体浮游植物比吸收系数的变化 [J]. *热带海洋学报*, 2005, 24(5): 1-10.
- [17] Wang Y. Study on estimation of microcystis aeruginosa proportion in Taihu lake based on optical absorption spectra [D]. Nanjing: Nanjing Normal University, 2014.
王瑜. 基于吸收光谱的太湖铜绿微囊藻比例估算研究 [D]. 南京: 南京师范大学, 2014.
- [18] Zhou H L, Zhu J H, Han B, et al. Comparison of spectral absorption characteristics of several typical algae[J]. *Ocean Technology*, 2010, 29(3): 78-81, 92.
周虹丽, 朱建华, 韩冰, 等. 几种典型藻种吸收光谱特性的比较 [J]. *海洋技术*, 2010, 29(3): 78-81, 92.
- [19] Feng S Z. An introduction to marine science [M]. Beijing: Higher Education Press, 1999.
冯士筭. 海洋科学导论 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1999.
- [20] Wang G F, Zhou W, Lin J F, et al. Validation and assessment on the bio-optical models for retrieving phytoplankton size structure in the northern South China Sea [J]. *Acta Laser Biology Sinica*, 2014, 23(6): 502-515.
王桂芬, 周雯, 林俊芳, 等. 南海北部海区浮游植物粒级结构生物光学反演模型的验证与评价 [J]. *激光生物学报*, 2014, 23(6): 502-515.
- [21] Cleveland J S, Weidemann A D. Quantifying absorption by aquatic particles: a multiple scattering correction for glass-fiber filters [J]. *Limnology and Oceanography*, 1993, 38(6): 1321-1327.
- [22] Thingstad T F, Zweifel U L, Rassoulzadegan F. P limitation of heterotrophic bacteria and phytoplankton in the northwest Mediterranean [J]. *Limnology and Oceanography*, 1998, 43(1): 88-94.
- [23] Wright S W, van den Enden R L. Phytoplankton community structure and stocks in the East Antarctic marginal ice zone (BROKE survey, January-March 1996) determined by CHEMTAX analysis of HPLC pigment signatures [J]. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 2000, 47(12/13): 2363-2400.
- [24] Xu Q N. Information extraction technique for harmful red tide phytoplankton based on absorption properties [D]. Qingdao: Ocean University of China, 2011.
徐青娜. 基于浮游植物吸收光谱的有害赤潮藻类信息提取方法 [D]. 青岛: 中国海洋大学, 2011.
- [25] Higgins H, MacKey D. Algal class abundances, estimated from chlorophyll and carotenoid pigments, in the western Equatorial Pacific under El Niño and non-El Niño conditions [J]. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 2000, 47(8): 1461-1483.
- [26] Aguirre-Gomez R, Weeks A R, Boxall S R. The identification of phytoplankton pigments from absorption spectra [J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2001, 22(2/3): 315-338.
- [27] Zhang Q Q, Wang L, Lei S H, et al. Characteristics of absorption spectra of phytoplankton [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2006, 26(9): 1676-1680.
张前前, 王磊, 类淑河, 等. 浮游植物吸收光谱特征分析 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2006, 26(9): 1676-1680.
- [28] Zhang T L, Du X Z, Xu Q N, et al. Application of 1D wavelet analysis in detecting species of harmful algae blooms with absorption spectra of phytoplankton [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2009, 29(10): 2743-2747.
张亭禄, 杜祥之, 徐青娜, 等. 一维小波分析在浮游植物吸收光谱有害赤潮藻类检测中的应用 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, 29(10): 2743-2747.
- [29] Furuya K, Hayashi M, Yabushita Y, et al. Phytoplankton dynamics in the East China Sea in spring and summer as revealed by HPLC-derived pigment signatures [J]. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 2003, 50(2): 367-387.
- [30] Zou X G. Study on the optical characteristic of phytoplankton and remote sensing inversion in north Yellow Sea [D]. Dalian: Dalian Maritime University, 2012.
邹晓阁. 北黄海浮游藻类的光学特性和遥感反演研究 [D]. 大连: 大连海事大学, 2012.
- [31] Chase A P, Boss E, Cetinić I, et al. Estimation of phytoplankton accessory pigments from hyperspectral reflectance spectra: toward a global algorithm [J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2017, 122(12): 9725-9743.
- [32] Kong F Z. Size-fraction structure, species component and pigments analyses of phytoplankton in the bloom

- zone near Changjiang estuary[D]. Beijing: Chinese Academy of Sciences, 2012.
- 孔凡洲. 长江口赤潮区浮游植物的粒级结构、种类组成和色素分析[D]. 北京: 中国科学院, 2012.
- [33] Zhang J F. Parameterization and variability of phytoplankton absorption properties in south adjacent coastal ocean of the Yangtze estuary[D]. Shanghai: East China Normal University, 2013.
- 张晋芳. 长江口南部邻近海域浮游植物的吸收特性及其参数化研究[D]. 上海: 华东师范大学, 2013.
- [34] Zhang X L, Yin G F, Zhao N J, et al. Construction of three-dimensional fluorescence standard spectra of algae *in vivo* based on weighted average method[J]. Acta Optica Sinica, 2018, 38(7): 0730001.
- 张小玲, 殷高方, 赵南京, 等. 基于加权平均法的活体藻类三维荧光标准光谱构建[J]. 光学学报, 2018, 38(7): 0730001.
- [35] Sathyendranath S, Lazzara L, Prieur L. Variations in the spectral values of specific absorption of phytoplankton[J]. Limnology and Oceanography, 1987, 32(2): 403-415.
- [36] Nair A, Sathyendranath S, Platt T, et al. Remote sensing of phytoplankton functional types[J]. Remote Sensing of Environment, 2008, 112(8): 3366-3375.