

# 光学学报

## 基于 SWTATLD 算法的藻类群落离散三维荧光光谱识别方法

程钊<sup>1,2,3</sup>, 赵南京<sup>1,3\*</sup>, 殷高方<sup>1,3</sup>, 张小玲<sup>4</sup>, 刘建国<sup>1,3</sup>, 刘文清<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>中国科学院环境光学与技术重点实验室, 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031;

<sup>2</sup>中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026;

<sup>3</sup>安徽省环境光学监测技术重点实验室, 安徽 合肥 230031;

<sup>4</sup>安徽大学, 安徽 合肥 230601

**摘要** 针对水体藻类群落离散三维荧光光谱的识别, 以 5 种常见门类藻种(铜绿微囊藻、斜生栅藻、菱形藻、椭圆形多甲藻和隐藻)为对象, 研究了基于自加权交替三线性分解(SWTATLD)算法的藻类离散三维荧光光谱识别方法, 并将识别结果与平行因子(PARAFAC)算法的解析结果进行了对比分析。结果表明: PARAFAC 算法解析得到的铜绿微囊藻的平均回收率为  $92.73\% \pm 13.99\%$ , 斜生栅藻的平均回收率为  $105.51\% \pm 11.58\%$ , 菱形藻的平均回收率为  $89.25\% \pm 13.68\%$ , 椭圆形多甲藻的平均回收率为  $109.48\% \pm 13.47\%$ , 隐藻的平均回收率为  $88.76\% \pm 13.60\%$ ; SWTATLD 算法解析得到的铜绿微囊藻的平均回收率为  $96.70\% \pm 3.94\%$ , 斜生栅藻的平均回收率为  $98.07\% \pm 4.48\%$ , 菱形藻的平均回收率为  $101.71\% \pm 3.97\%$ , 椭圆形多甲藻的平均回收率为  $97.26\% \pm 4.11\%$ , 隐藻的平均回收率为  $103.57\% \pm 4.34\%$ ; 相比于 PARAFAC 算法, SWTATLD 算法的解析结果更接近于真实浓度且偏差更小。研究结果为水体浮游藻类群落的有效识别及定量分析提供了一种良好的方法。

**关键词** 光谱学; 光谱识别; 平行因子算法; 自加权交替三线性分解算法; 浮游藻类群落; 离散三维荧光光谱

中图分类号 TN929.11

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.1430001

### Identification of Algae Community Discrete Three-Dimensional Fluorescence Spectrum Based on SWTATLD

Cheng Zhao<sup>1,2,3</sup>, Zhao Nanjing<sup>1,3\*</sup>, Yin Gaofang<sup>1,3</sup>, Zhang Xiaoling<sup>4</sup>,  
Li Jianguo<sup>1,3</sup>, Liu Wenqing<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China;

<sup>2</sup>University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China;

<sup>3</sup>Key Laboratory of Environmental Optical Monitoring Technology of Anhui Province, Hefei, Anhui 230031, China;

<sup>4</sup>Anhui University, Hefei, Anhui 230601, China

**Abstract** To identify the phytoplankton community by discrete three-dimensional fluorescence spectra, we studied a method based on a self-weighted alternating trilinear decomposition (SWTATLD) algorithm for five common alga species (*Microcystis aeruginosa*, *Scenedesmus obliquus*, *Nitzschia sp.*, *Peridinium umbonatum var. inaequale*, and *Cryptomonas obovata*). Then, the results were compared with those of the parallel factor (PARAFAC) algorithm. The recovery of the PARAFAC algorithm is  $92.73\% \pm 13.99\%$  for *Microcystis aeruginosa*,  $105.51\% \pm$

收稿日期: 2020-12-29; 修回日期: 2021-01-24; 录用日期: 2021-02-05

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFC1400600)、安徽省重点研发计划(1804a0802192)、安徽省自然科学基金(2008085QF316)

通信作者: \* njzhao@aiofm.ac.cn

11.58% for *Scenedesmus obliquus*, 89.25% ± 13.68% for *Nitzschia sp.*, 109.48% ± 13.47% for *Peridinium umbonatum var. inaequale* and 88.76% ± 13.60% for *Cryptomonas obovata*. The recovery of the SWTATLD algorithm is 96.70% ± 3.94% for *Microcystis aeruginosa*, 98.07% ± 4.48% for *Scenedesmus obliquus*, 101.71% ± 3.97% for *Nitzschia sp.*, 97.26% ± 4.11% for *Peridinium umbonatum var. inaequale*, and 103.57% ± 4.34% for *Cryptomonas obovata*. The recovery results based on the SWTATLD algorithm were closer to the real concentration and have smaller deviations than those based on the PARAFAC algorithm. Our results provide a method for the effective identification and quantitative analysis of phytoplankton communities.

**Key words** spectroscopy; spectral identification; parallel factor algorithm; self-weighted alternating trilinear decomposition algorithm; phytoplankton community; discrete three-dimensional fluorescence spectrum

**OCIS codes** 300.6280; 170.1420

## 1 引言

近年来,自然水域由于外源性污染而引发了严重的生态破坏现象,包括赤潮、藻类富营养化、有毒有害藻类过量繁殖等,对整个水体生态产生了不良影响<sup>[1-3]</sup>。浮游藻类群落的实时在线检测可为水质监测预警及水生态环境保护提供重要的基础数据<sup>[4-5]</sup>,具有重要的研究价值。

荧光检测技术基于藻类体内发光色素的荧光效应获得群落的结构组成和含量信息<sup>[6-7]</sup>。早期的荧光法能对一些特定藻类发光色素的荧光进行有效捕捉并进行区分,近些年在藻类群落检测中常使用三维荧光光谱对藻类按门类进行划分<sup>[8-10]</sup>。离散三维荧光光谱是在三维荧光光谱的基础上通过离散化特征提取得到的特征光谱。三维荧光数据解析主要分为两种方法:一种是将三维数据降维,联合一阶校正算法来解析荧光特性;另一种是直接使用二阶校正算法对三维数据进行数学化解离<sup>[11-13]</sup>。张小玲<sup>[14]</sup>采用基于非负加权最小二乘的多元线性回归完成了对藻类荧光光谱的解析,实现了藻种在门类水平上的定量研究。张前前等<sup>[15]</sup>基于藻类的三维荧光特征光谱结合主成分分析和非负最小二乘回归法对浮游植物进行了逐层分类。

自然水体中的藻类大部分是以多种类混合共存的形式存在的。在实际测量中,由于藻类荧光光谱具有较宽的荧光峰区域,不同藻类荧光光谱的荧光峰区域存在重叠,同时藻类荧光光谱还受到水体荧光背景的干扰,因此藻类的多组分识别及定量分析难以达到精准水平。本文以自然水体中常见的藻种为例,分别制取不同浓度的纯种和混合藻样,测量其三维荧光光谱;然后提取特征波段重构离散三维荧光光谱,研究自加权交替三线性分解(SWTATLD)算法在混合藻类离散三维荧光光谱识别与定量中的应用,建立混合藻类的 SWTATLD 解析模型,并将解析结果与平衡因子

(PARAFAC)算法的解析结果进行比对,以验证 SWTATLD 解析模型对浮游藻类群落多组分准确识别和定量分析的可行性。

## 2 实验与方法

### 2.1 实验藻种的培养

选取铜绿微囊藻(*Microcystis aeruginosa*)、斜生栅藻(*Scenedesmus obliquus*)、菱形藻(*Nitzschia sp.*)、椭圆形多甲藻(*Peridinium umbonatum var. inaequale*)和隐藻(*Cryptomonas obovata.*)等 5 种门类藻种,在培养箱中培养。培养过程严格按照 GB/T 21805—2008《化学品-藻类生长抑制试验》规范进行。实验藻样在光照培养箱中储存培养,光源为白色冷荧光灯管,固定光暗周期为 12 h/12 h,温度为(25 ± 1) °C。实验中配制的各藻样的浓度如表 1 所示。

### 2.2 荧光测量仪器

采用 F7000 型荧光分光光度计扫描上述藻类样品活体,获得三维荧光光谱。仪器参数设定如下:激发波长 380~650 nm,发射波长 420~750 nm,波长间隔 5 nm/5 nm,狭缝宽度 5 nm/5 nm,扫描速度 12000 nm/min,光电倍增管电压 650 V。

### 2.3 SWTATLD 的原理

离散三维荧光光谱数据是典型的三线性模型数据,数据阵列  $X$  由三个负载矩阵  $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$ 、 $\mathbf{C}$  构成,表达式为

$$X_{ijk} = \sum_{n=1}^N a_{in} b_{jn} c_{kn} + e_{ijk}, \quad (1)$$

式中: $a_{in}$ 、 $b_{jn}$ 、 $c_{kn}$  分别表示各自的目标函数,代表相对浓度阵  $\mathbf{A}$  ( $I \times N$ ) 中  $(i, n)$ 、 $\mathbf{B}$  ( $J \times N$ ) 中  $(j, n)$ 、 $\mathbf{C}$  ( $K \times N$ ) 中  $(k, n)$  处的元素; $e_{ijk}$  表示残差矩阵  $\mathbf{E}$  ( $I \times J \times K$ ) 中  $(i, j, k)$  处的元素。

SWTATLD 在三线性模型残差的基础上添加加权项,目的是使三个负载矩阵通过交替最小化方法处理得到最优解。SWTATLD 的函数表达式为

表 1 配制的各藻样的浓度

Table 1 Concentration of each alga sample

Sample No.	Mass concentration / ( $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ )				
	<i>Microcystis aeruginosa</i>	<i>Scenedesmus obliquus</i>	<i>Nitzschia sp.</i>	<i>Peridinium umbonatum var. inaequale</i>	<i>Cryptomonas obovata.</i>
1	77.16	26.08	55.61	70.66	125.77
2	36.69	14.78	26.42	32.75	64.52
3	21.67	6.93	14.95	27.91	39.46
4	14.98	3.91	9.11	6.92	25.05
5	7.95	2.68	5.08	45.65	12.95
6	58.42	0.80	44.81	21.58	1.36
7	29.78	49.57	21.26	7.65	9.09
8	17.56	25.61	13.51	36.85	27.85
9	11.84	14.82	7.74	63.29	40.13
10	8.20	9.25	4.12	45.9	25.67
11	27.33	4.54	8.80	2.40	13.21
12	12.81	58.41	3.31	4.41	25.09
13	7.23	27.90	1.45	20.18	9.89
14	4.86	16.60	18.12	9.67	2.67
15	30.12	10.95	66.02	34.50	7.51

$$S_{\text{SSR}} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K (X_{ijk} - \sum_{n=1}^N a_{in} b_{jn} c_{kn})^2, \quad (2)$$

式中:  $S_{\text{SSR}}$  代表残差平方和。

对三个目标函数分别进行迭代,公式为

$$\mathbf{a}_i^{\text{T}} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\text{diag}(\mathbf{C} + \mathbf{X}_{i..}^{\text{T}} \mathbf{B})}{\text{diag}(\mathbf{B}^{\text{T}} \mathbf{B})} + \frac{\text{diag}(\mathbf{B} + \mathbf{X}_{i..}^{\text{T}} \mathbf{C})}{\text{diag}(\mathbf{C}^{\text{T}} \mathbf{C})} \right], \quad i = 1, \dots, I, \quad (3)$$

$$\mathbf{b}_j^{\text{T}} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\text{diag}(\mathbf{A} + \mathbf{X}_{.j.}^{\text{T}} \mathbf{C})}{\text{diag}(\mathbf{C}^{\text{T}} \mathbf{C})} + \frac{\text{diag}(\mathbf{C} + \mathbf{X}_{.j.}^{\text{T}} \mathbf{A})}{\text{diag}(\mathbf{A}^{\text{T}} \mathbf{A})} \right], \quad j = 1, \dots, J, \quad (4)$$

$$\mathbf{c}_k^{\text{T}} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\text{diag}(\mathbf{B} + \mathbf{X}_{.k.}^{\text{T}} \mathbf{A})}{\text{diag}(\mathbf{A}^{\text{T}} \mathbf{A})} + \frac{\text{diag}(\mathbf{A} + \mathbf{X}_{.k.}^{\text{T}} \mathbf{B})}{\text{diag}(\mathbf{B}^{\text{T}} \mathbf{B})} \right], \quad k = 1, \dots, K, \quad (5)$$

式中:  $\text{diag}(\ast)$  表示由括号中的矩阵对角元素组成的新矢量。等式左侧代表矩阵  $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$  和  $\mathbf{C}$  的行矢量。迭代过程作逐列归一化处理,然后交替迭代求解直至损失函数收敛为止。收敛准则为  $S_{\text{SSR}} < 1 \times 10^{-6}$ 。SWTATLD 算法具有稳定性能好、收敛速度快等优势。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 藻类荧光信号特征的提取

图 1 所示第一列图为各藻种的三维荧光光谱图,第二列图为根据三维荧光特征波段提取的离散三维荧光光谱图。铜绿微囊藻的吸收峰在 620 nm/

660 nm(激发/发射波长)处;斜生栅藻的主要吸收峰在 435 nm/685 nm 处,次一级吸收峰在 470 nm/685 nm 处;菱形藻的主要吸收峰分别在 455 nm/685 nm 和 390 nm/685 nm 处;椭圆形多甲藻的吸收峰在 400 nm/685 nm 处;隐藻的主要吸收峰在 570 nm/620 nm 处,次一级吸收峰在 450 nm/685 nm 处。对 5 种单一藻类的同一样品分别进行三次重复测量,铜绿微囊藻、斜生栅藻、菱形藻、椭圆形多甲藻、隐藻测量时的标准偏差分别为 3.25%、2.68%、4.10%、3.87% 和 4.61%,实验结果相对稳定,因此取三次重复测量的平均值作为实验的最终结果。

通过三维荧光光谱的特征峰可以识别一些藻种的具体门类,但是实际水体中的藻类通常不是单一品种,因此更多情况下受重叠的特征波段的影响,群落组成和含量信息无法识别。离散三维荧光光谱是基于保留主要荧光特征信息,排除过多无用数据干扰的目的,有选择性地测量特定激发波长与发射波长下的荧光信息,以最优化的结果代替连续三维荧光光谱而得到的。本文基于不同门类藻的荧光光谱特征,提取了 12 个激发波段与 8 个发射波段组成的离散三维荧光光谱。离散三维荧光光谱具有荧光特征更加直观明显,解析数据更加快速、灵敏的优势。下文使用测量得到的藻类离散三维荧光数据对待测藻样进行组分识别和定量分析。

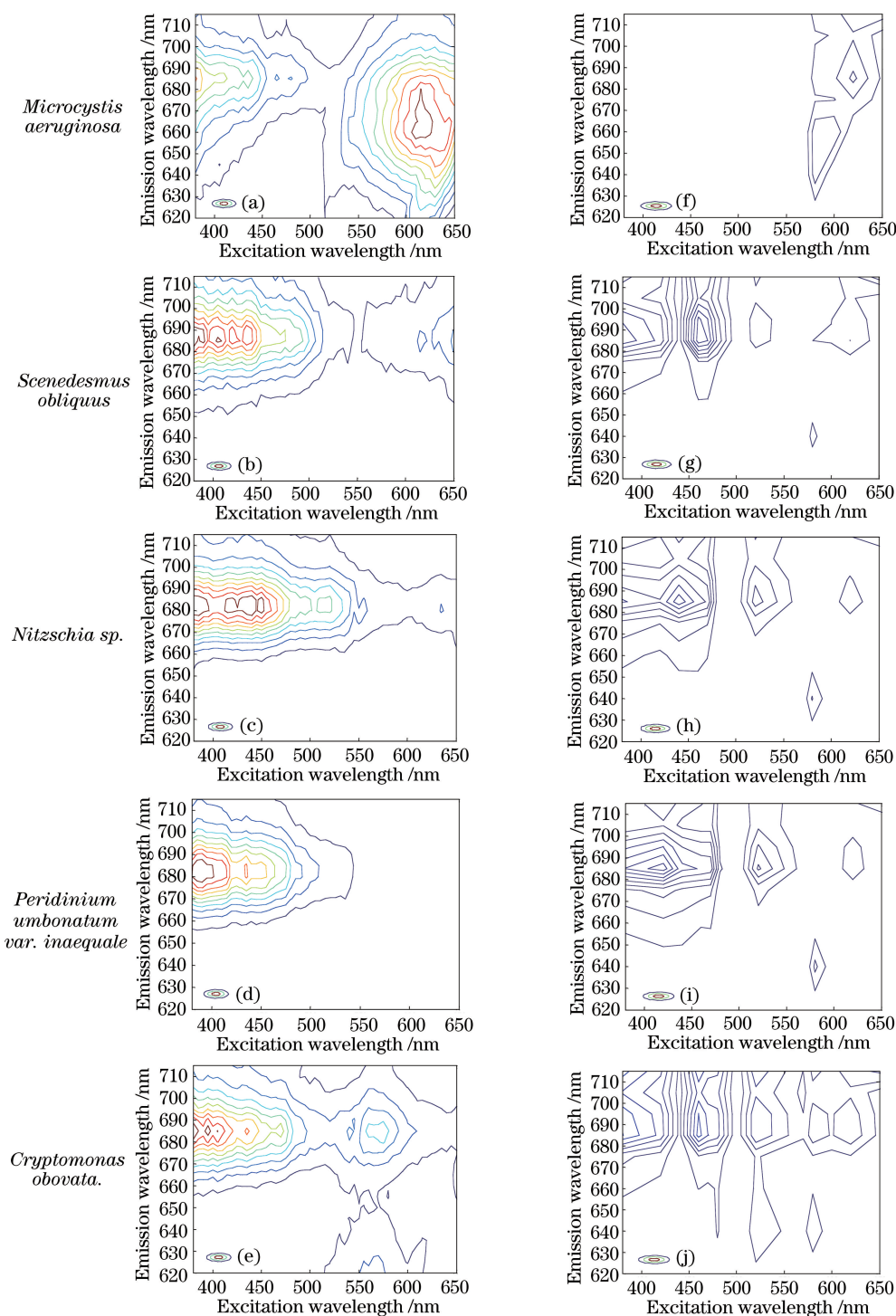


图 1 各藻种的荧光光谱图。(a)~(e)三维荧光光谱;(f)~(j)离散三维荧光光谱

Fig. 1 Fluorescence spectra of each alga. (a)–(e) Three-dimensional fluorescence spectra; (f)–(j) discrete three-dimensional fluorescence spectra

### 3.2 混合藻种的识别分类

浮游藻类群落的结构组成很复杂,实际测量获得的荧光是由多种类藻的荧光叠加而成的,这为识别样品的组分信息造成了一定困难,因此本文引入三线性模型对离散三维数据进行解析。平行因子

(PARAFAC) 算法是一种典型的三线性模型 (trilinear model),常被用于浮游藻类荧光光谱的解析中,是理论上误差最小、最稳定的模型,结果具有唯一性。本文采用 PARAFAC 法解析混合藻样的离散三维荧光数据得到了激发光谱和发射光谱,如

图 2 所示,实线表示纯种藻的实际光谱数据,虚线表示混合数据解离后单组分在各自矢量上的预测结果。得到各种藻的主峰位置(激发/发射波长)分别是铜绿微囊藻 620 nm/660 nm、斜生栅藻 620 nm/

685 nm、菱形藻 440 nm/685 nm、椭圆形多甲藻 460 nm/685 nm、隐藻 460 nm/620 nm。结果显示,解析后各单组分藻样的特征峰与纯种藻样的特征峰位置吻合,轮廓相似。

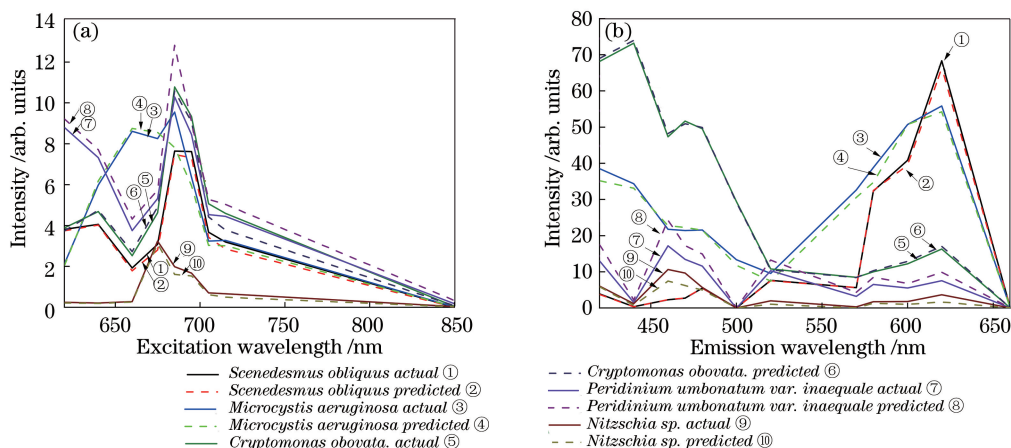


图 2 PARAFAC 法解析混合样的光谱轮廓图。(a)激发光谱;(b)发射光谱

Fig. 2 Spectrum profiles of algal mixtures by PARAFAC. (a) Excitation spectra; (b) emission spectra

PARAFAC 法解析藻类样品数据所得的结果如表 2 所示,包括混合藻样中单组分成分的预测浓度 C、回收率 R、平均回收率  $R_A$ 。其中铜绿微囊藻的平均回收率为 92.73%±13.99%,斜生栅藻的平均回收率为 105.51%±11.58%,菱形藻的平

均回收率为 89.25%±13.68%,椭圆形多甲藻的平均回收率为 109.48%±13.47%,隐藻的平均回收率为 88.76%±13.60%。可以看出,除斜生栅藻以外,各藻的平均回收率都在 90%左右,相对标准偏差偏大。

表 2 PARAFAC 算法预测混合藻样的结果

Table 2 Prediction results of algal mixture samples by PARAFAC

No.	<i>Microcystis aeruginosa</i>		<i>Scenedesmus obliquus</i>		<i>Nitzschia sp.</i>		<i>Peridinium umbonatum var. inaequale</i>		<i>Cryptomonas obovata.</i>	
	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %
1	65.04	84.29	29.27	112.23	46.63	83.85	81.25	114.99	103.46	82.26
2	42.78	116.59	13.10	88.63	30.79	116.54	38.63	117.95	51.24	79.42
3	18.63	85.97	7.52	108.51	11.26	75.32	34.36	123.11	32.53	82.44
4	12.92	86.25	4.74	121.22	7.45	81.78	7.29	105.35	25.68	102.52
5	7.03	88.43	2.64	98.51	4.28	84.25	53.36	116.89	9.59	74.05
6	48.01	82.18	0.89	111.25	36.85	82.24	20.23	93.74	1.41	103.68
7	25.87	86.87	47.70	96.23	18.4	86.55	7.57	98.95	7.18	78.99
8	13.79	78.53	28.31	110.54	15.32	113.40	41.48	112.56	22.89	82.19
9	13.12	110.81	13.68	92.31	8.42	108.79	77.31	122.15	48.50	120.86
10	7.03	85.73	10.91	117.95	3.52	85.44	40.62	88.50	22.69	88.39
11	31.40	114.89	5.07	111.67	8.93	101.48	2.14	89.17	10.26	77.67
12	12.37	96.57	50.78	86.94	2.74	82.78	4.17	94.56	25.87	103.11
13	8.22	113.69	34.09	122.19	1.13	77.93	26.35	130.57	7.14	72.19
14	3.85	79.22	15.89	95.72	14.79	81.62	11.62	120.17	2.43	91.01
15	24.35	80.84	11.91	108.77	50.67	76.75	39.18	113.56	6.96	92.68
$R_A$ / %	92.73±13.99		105.51±11.58		89.25±13.68		109.48±13.47		88.76±13.60	

PARAFAC 法解析离散三维数据的精度会受模型误差的影响。测量的浮游藻类群落荧光数据中

可能存在非目标模型数据,这些数据不仅会影响运行速度,还会导致未收敛就得到最优解,从而出现没

有化学意义的退化解。SWTATLD 算法在 PARAFAC 模型的基础上进行了改进,避免了该模型在混合样品组分数识别中精度要求高的限制,并且对非三线性数据运算有很好的适用性;因此,本文利用 SWTATLD 算法对上述藻类实验结果进行混合组分识别的定量分析。图 3 是 SWTATLD 算法解析离散三维荧光数据得到的光谱轮廓图,可以看

出,SWTATLD 算法得到的单组分藻种的解析结果与纯种样品的激发、发射光谱轮廓相似,趋势与 PARAFAC 算法的结果一致。这表明,通过三线性模型解析浮游藻类群落的离散荧光光谱,可以从多组分混合样品数据中分离出单组分藻种信息,解决了群落中相似或者相同的藻种色素混淆、荧光信息难以区分的问题。

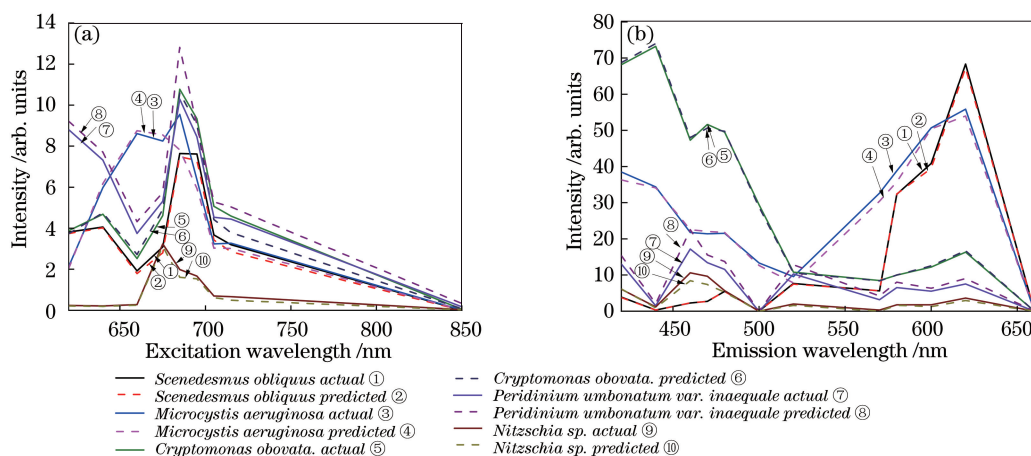


图 3 SWTATLD 法解析混合藻样的光谱轮廓图。(a)激发光谱;(b)发射光谱

Fig. 3 Spectrum profiles of algal mixtures by SWTATLD. (a) Excitation spectra; (b) emission spectra

SWTATLD 算法的分析结果如表 3 所示,可以看出,铜绿微囊藻的平均回收率为 96.70% ± 3.94%,斜生栅藻的平均回收率为 98.07% ±

4.48%,菱形藻的平均回收率为 101.71% ± 3.97%,椭圆形多甲藻的平均回收率为 97.26% ± 4.11%,隐藻的平均回收率为 103.57% ± 4.34%。

表 3 SWTATLD 算法预测混合藻样的结果

Table 3 Prediction results of algal mixture samples by SWTATLD

No.	<i>Microcystis aeruginosa</i>		<i>Scenedesmus obliquus</i>		<i>Nitzschia sp.</i>		<i>Peridinium umbonatum var. inaequale</i>		<i>Cryptomonas obovata.</i>	
	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %	C / ( $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )	R / %
1	75.34	97.64	24.37	93.44	56.33	101.29	67.24	95.16	134.46	106.91
2	34.25	93.34	13.41	90.73	24.59	93.07	31.36	95.76	62.93	97.54
3	19.72	91.00	7.04	101.59	15.36	102.74	28.49	102.08	41.35	104.79
4	15.06	100.53	3.87	98.98	9.01	98.90	6.83	98.69	27.64	110.34
5	7.83	98.49	2.74	102.24	5.26	103.54	42.74	93.63	13.41	103.55
6	54.28	92.91	0.76	95.00	47.2	105.33	19.72	91.38	1.45	106.62
7	28.75	96.54	45.82	92.43	20.41	96.00	7.76	101.44	8.96	98.57
8	16.29	92.77	27.15	106.01	14.64	108.36	33.58	91.13	28.63	102.80
9	12.16	102.70	14.42	97.30	7.92	102.32	59.78	94.45	43.59	108.62
10	8.34	101.71	9.53	103.02	4.27	103.64	46.35	100.98	24.83	96.73
11	25.42	93.01	4.38	96.48	8.94	101.59	2.33	97.08	14.57	110.29
12	12.04	93.99	55.72	95.39	3.35	101.21	4.47	101.36	25.82	102.91
13	7.12	98.48	26.8	96.06	1.52	104.83	20.98	103.96	10.03	101.42
14	4.99	102.67	16.37	98.61	17.68	97.57	9.53	98.55	2.71	101.50
15	28.53	94.72	11.36	103.74	69.45	105.19	32.15	93.19	7.58	100.93
$R_A / \%$	96.70 ± 3.94		98.07 ± 4.48		101.71 ± 3.97		97.26 ± 4.11		103.57 ± 4.34	

SWTATLD 和 PARAFAC 算法的运算结果比较如图 4 所示。可以看出, SWTATLD 算法得到的回收率更接近 100%, 预测值更加接近于真实值, 处理混合藻样的分离效果更好, 预测更加精确, 同时平均标准偏差更小。这说明 SWTATLD 算法预测的结果更加稳定。

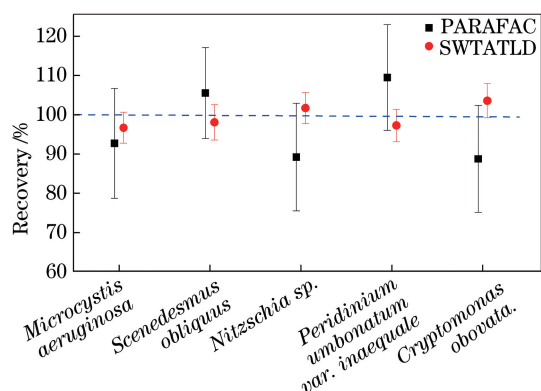


图 4 PARAFAC 与 SWTATLD 算法运算结果的对比分析  
Fig. 4 Contrastive analysis between PARAFAC and SWTATLD results

## 4 结 论

在浮游藻类群落的结构组成检测和定量分析时, 使用三维荧光法常面临光谱混叠难以剥离的问题。本文在三维荧光光谱的基础上提取特征重构离散三维荧光光谱, 采用 SWTATLD 算法解析藻类荧光光谱数据, 并分析得到了藻类群落的结构组成和浓度水平。SWTATLD 算法得到的铜绿微囊藻的平均回收率为  $96.70\% \pm 3.94\%$ , 斜生栅藻的平均回收率为  $98.07\% \pm 4.48\%$ , 菱形藻的平均回收率为  $101.71\% \pm 3.97\%$ , 椭圆形多甲藻的平均回收率为  $97.26\% \pm 4.11\%$ , 隐藻的平均回收率为  $103.57\% \pm 4.34\%$ 。与 PARAFAC 算法相比, SWTATLD 算法的预测浓度更接近真实值。另外, SWTATLD 解析结果还具有更加稳定、收敛速度更快、抗干扰能力更强的优点。因此, SWTATLD 算法能被用于浮游藻类群落的分类识别。

## 参 考 文 献

- [1] Zhang F. Study on the seasonal and spatial variation of phytoplankton around marine ranching area of the northern Yellow Sea [D]. Jinan: Shandong University, 2019: 1-20.  
张凡. 北黄海海洋牧场及周边海域浮游植物时空变动的研究[D]. 济南: 山东大学, 2019: 1-20.
- [2] Hu Z X. Study on biological diversity in different habitat type lakes and ecological classification of lakes [D]. Nanjing: Nanjing University, 2014: 1-30.  
胡志新. 不同生态类型湖泊生物多样性和湖泊分类方法研究[D]. 南京: 南京大学, 2014: 1-30.
- [3] Nankabirwa A, de Crop W, van der Meeren T, et al. Phytoplankton communities in the crater lakes of western Uganda, and their indicator species in relation to lake trophic status [J]. Ecological Indicators, 2019, 107: 105563.
- [4] Gao Y, Sun L, Wu C, et al. Inter-annual and seasonal variations of phytoplankton community and its relation to water pollution in Futian mangrove of Shenzhen, China [J]. Continental Shelf Research, 2018, 166: 138-147.
- [5] Devred E, Sathyendranath S, Stuart V, et al. A three component classification of phytoplankton absorption spectra: application to ocean-color data [J]. Remote Sensing of Environment, 2011, 115 (9): 2255-2266.
- [6] Escalas A, Catherine A, Maloufi S, et al. Drivers and ecological consequences of dominance in periurban phytoplankton communities using networks approaches [J]. Water Research, 2019, 163: 114893.
- [7] Xiao W P, Laws E A, Xie Y Y, et al. Responses of marine phytoplankton communities to environmental changes: new insights from a niche classification scheme [J]. Water Research, 2019, 166: 115070.
- [8] Wu Z S, Kong M, Cai Y J, et al. Index of biotic integrity based on phytoplankton and water quality index: do they have a similar pattern on water quality assessment? A study of rivers in Lake Taihu Basin, China [J]. Science of the Total Environment, 2019, 658: 395-404.
- [9] Zhu P, Liu C L, Zhu F. The implementation by PARAFAC decompose components analysis in the three-dimensional fluorescence spectroscopy data [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35 (6): 1611-1617.  
祝鹏, 刘成林, 祝飞. 平行因子法分解成分分析在三维荧光光谱数据中的实现 [J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(6): 1611-1617.
- [10] Wang Y T, Bian X, Shang F K, et al. Three-dimensional fluorescence spectra combined with a self-weighted alternating trilinear decomposition algorithm to detect pesticide mixtures [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(12): 3780-3784.  
王玉田, 边旭, 商凤凯, 等. 三维荧光光谱结合自加权交替三线性分解算法检测农药类混合物 [J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(12): 3780-3784.
- [11] Wang S T, Wu X, Zhu W H, et al. Fluorescence

- detection of polycyclic aromatic hydrocarbons by parallel factor combined with support vector machine [J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(5): 0530002.
- 王书涛, 吴兴, 朱文浩, 等. 平行因子结合支持向量机对多环芳烃的荧光检测 [J]. *光学学报*, 2019, 39(5): 0530002.
- [12] Kong D M, Zhang C X, Cui Y Y, et al. Detection of oil species in mixed oil based on alternating penalty trilinear decomposition [J]. *Acta Optica Sinica*, 2018, 38(11): 1130005.
- 孔德明, 张春祥, 崔耀耀, 等. 基于交替惩罚三线性分解的混合油液油种成分的检测 [J]. *光学学报*, 2018, 38(11): 1130005.
- [13] Wang J, Zhang F, Wang X P, et al. Three-dimensional fluorescence characteristics by parallel factor method coupled with self-organizing map and its relationship with water quality [J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(7): 0730003.
- 王娟, 张飞, 王小平, 等. 平行因子法结合自组织映射神经网络的三维荧光特征及其与水质的关系 [J]. *光学学报*, 2017, 37(7): 0730003.
- [14] Zhang X L. Study on quantitative method of chlorophyll *in vivo* planktonic algae based on three-dimensional fluorescence spectrum [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2019: 1-7.
- 张小玲. 基于三维荧光光谱的活体浮游藻叶绿素定量方法研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2019: 1-7.
- [15] Zhang Q Q, Lei S H, Wang X L, et al. Research on discrimination of 3D fluorescence spectra of phytoplanktons [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2004, 24(10): 1227-1229.
- 张前前, 类淑河, 王修林, 等. 浮游植物活体三维荧光光谱分类判别方法研究 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2004, 24(10): 1227-1229.