

结合 GOCI 数据反演近海浮游植物叶绿素和类胡萝卜素浓度

李正浩¹, 陈志钊¹, 王力彦^{3*}, 孙德勇^{1,2**}, 赵彬如³, 王胜强^{1,2}

¹南京信息工程大学海洋科学学院, 江苏南京 210044;

²江苏省海洋环境探测工程技术研究中心, 江苏南京 210044;

³国家海洋信息中心, 天津 300171

摘要 基于 2016—2018 年渤海、黄海和东海 7 个航次中采集的实测遥感反射率和浮游植物色素浓度数据, 利用静止海洋水色成像仪(GOCI)遥感反射率产品建立中国近海水体中总叶绿素 a、叶绿素 b、总叶绿素 c、光保护类胡萝卜素和光合有效类胡萝卜素浓度的反演模型, 并进一步得到 2014—2018 年渤海、黄海和东海各色素浓度分布图。研究结果显示: 采用遥感反射率波段组合建立的反演模型可实现色素浓度的定量反演, 建立的模型反演精度较高 ($R^2 > 0.72$)。由卫星反演结果可以看出, 浮游植物色素浓度整体呈由近岸向离岸水域递减的趋势, 并存在显著的季节变化特征。本文建立的浮游植物色素浓度反演模型, 可为深入认识我国近海水体浮游植物种群结构及时空变化规律提供方法支撑。

关键词 海洋光学; 叶绿素; 类胡萝卜素; 遥感反演; GOCI; 时空分布; 近海水体

中图分类号 P733.3

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.0201001

Remote Sensing Inversion of Concentration of Phytoplankton Chlorophyll and Carotenoid from GOCI Measurements in Coastal Waters

Li Zhenghao¹, Chen Zhizhao¹, Wang Liyan^{3*}, Sun Deyong^{1,2**}, Zhao Binru³, Wang Shengqiang^{1,2}

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

² Jiangsu Research Center for Ocean Survey Technology, Nanjing, Jiangsu 210044, China;

³ National Marine Data and Information Service, Tianjin 300171, China

Abstract Based on the measured remote sensing reflectance (R_{rs}) and phytoplankton pigment concentrations collected during seven cruises in the Bohai Sea, Yellow Sea and East China Sea from 2016 to 2018, we established the inversion models of total chlorophyll-a, chlorophyll-b, total chlorophyll-c, photoprotective carotenoid, and photosynthetic carotenoid concentrations from the geostationary ocean color imager (GOCI) R_{rs} products in the coastal waters of China. Furthermore, we obtained the concentration distribution of each pigment from 2014 to 2018 in the Bohai Sea, Yellow Sea and East China Sea. The research results showed that the inversion model established by the R_{rs} band combinations could achieve the quantitative inversion of pigment concentration, and the inversion accuracy of the established model was relatively high ($R^2 > 0.72$). As can be seen from the satellite inversion results, the phytoplankton pigment concentration presented a trend of decreasing from nearshore to offshore waters,

收稿日期: 2020-05-15; 修回日期: 2020-07-13; 录用日期: 2020-08-12

基金项目: 国家自然科学基金(41876203, 41576172)、国家海洋信息中心基金项目(K2020068)、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)

* E-mail: wly_smile@163.com; ** E-mail: sundeyong@nuist.edu.cn

displaying a significant seasonal variation. In conclusion, the inversion model of phytoplankton pigment concentration established in this paper can provide method support for the in-depth understanding of phytoplankton population structure and spatial-temporal variation rules in the coastal waters of China.

Key words ocean optics; chlorophyll; carotenoid; remote sensing inversion; GOCCI; spatial-temporal distribution; coastal waters

OCIS codes 010.1690; 010.4450; 010.7340

1 引言

浮游植物广泛分布于海洋水体中,是全球初级生产力的重要贡献者,在物质循环和能量流动中发挥着重要作用^[1-3]。浮游植物色素是浮游植物的重要组成部分,不同种类的浮游植物往往含有不同成分及比例的色素,因此对浮游植物色素的研究可以更好地描述浮游植物群落的变化^[4-6]。叶绿素 a 是浮游植物光合作用的重要参与者,在海洋初级生产力、全球碳循环等方面都是必要的研究内容^[7-9]。随着高效液相色谱法(HPLC)等色素分析方法的发展^[10],学者们发现除叶绿素 a 外,浮游植物内包含的其他色素也能用于浮游植物种群结构的精细化判别^[11-12]。基于卫星遥感技术进行长时间大范围的监测研究,利用浮游植物色素在光合作用过程中对海洋光信号的影响,建立遥感反演模型,实现色素浓度的监测,已成为近年来海洋水色遥感研究的热点问题^[13-14]。

近年来很多学者开展了浮游植物色素浓度的遥感反演研究。Pan 等^[15]建立了遥感反射率与色素浓度之间的经验模型,并将该模型应用到 MODIS 卫星数据上,获得美国东北海岸总叶绿素 a、墨角藻黄素、玉米黄素和多甲藻素的空间分布特征。Catlett 等^[16]对浮游植物吸收系数使用光谱导数分析法得到其特征波段,再通过多元线性回归建立色素浓度与不同特征波段的反演模型。Chase 等^[17]使用高斯函数分解法建立了基于原位高光谱遥感反射率的反演模型,实现了叶绿素和类胡萝卜素浓度的反演。Wang 等^[18]利用逐步回归法在 Chase 模型基础上进一步优化高斯参数与色素浓度的回归模型,并将其应用到全球遥感反射率卫星产品上,得到 2007 年叶绿素和类胡萝卜素的全球分布图。Liu 等^[19]对比了基于高斯分解法和非负最小二乘法的两种浮游植物色素浓度反演模型的精度,发现两种方法在反演特定色素种类的浓度时具有较好的效果。El Hourany 等^[20]利用人工神经网络方法训练了 12000 个现场实测数据,利用自组织映射模型识别实测数据与卫星数据之间的非线性关系,实现了

色素浓度的反演。

现有的研究多聚焦于大洋水体的浮游植物色素浓度反演,而针对近海二类水体,特别是针对我国近海水体的色素遥感反演模型的研究较少,且尚未实现大尺度时空分布研究。本文基于实测遥感反射率和浮游植物色素浓度数据,建立基于遥感反射率波段组合的浮游植物色素浓度反演模型,并将该模型应用于静止海洋水色成像仪(GOCCI)卫星数据上,分析浮游植物色素浓度的时空变化规律。这将为认识我国近海水体浮游植物种群结构及时空变化规律提供方法支撑。

2 数据与方法

2.1 研究区域

本文的研究区域为黄海(Yellow Sea, YS)、渤海(Bohai Sea, BS)和东海(East China Sea, ECS)。渤海是中国最浅的半封闭内海。黄海是位于太平洋西北部的边缘海。东海是西太平洋典型的开放性边缘海,是世界高浊度的海区之一。渤海、黄海和东海有着复杂的水动力环境,其入海河流会输入大量的营养盐和泥沙等沉积物,属于二类水体,在光学性质上较为复杂。本文所使用的现场实测数据采集于 2016 年夏、冬季黄渤海和春、秋季东海航次,2017 年夏季东海航次以及 2018 年春、夏季黄渤海航次。

2.2 实测数据

本研究使用的实测数据主要有遥感反射率(R_{rs})以及浮游植物色素浓度,其中 R_{rs} 与浮游植物色素浓度相匹配的数据共有 161 条。采集数据的调查站点覆盖了近岸富营养的浅水区和寡营养开阔的外海深水区,采集时间涵盖了多个季节。实测 R_{rs} 数据主要通过美国 ASD (Analytica Spectra Devices., Inc)公司生产的 FieldSpec 4 Hi-Res NG 地物光谱仪,使用水面之上测量法得到^[21]。本文采用的 R_{rs} 光谱范围在 400~700 nm 之间。去除异常 R_{rs} 数据后,对其进行重采样,重采样分辨率为 1 nm。

浮游植物色素浓度的获取步骤是:1) 通过 Niskin 采水器采集深度小于 10 m 的海水样本,使用直径为 47 mm、孔径为 0.7 μm 的 Whatman

GF/F 滤膜过滤,吸干滤膜上残留的水分后,立即将滤膜放入 -80°C 液氮罐中保存;2)根据 Van Heukelom^[22]的测量标准,参考 Vidussi 等^[23]的方法使用 HPLC 分析方法测得浮游植物色素浓度。同时依据数据质量控制规范^[24],对色素浓度数据进行质控。质控要求具体如下:1)总叶绿素 a 和总辅助色素浓度之差低于总色素浓度的 30%;2)总叶绿素 a 和总辅助色素浓度之间线性回归的斜率在

0.7~1.4 之间,决定系数 R^2 高于 0.9;3)为了进一步保证模型的反演效果,剔除了浮游植物色素浓度小于 $0.001 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 的站点数据;4)同时,根据 Bricaud 等^[25]的方法进一步对浮游植物色素进行分类,最终对总叶绿素 a(TChl-a)、叶绿素 b(Chl-b)、总叶绿素 c(TChl-c)、光保护类胡萝卜素(PPC)、光合有效类胡萝卜素(PSC)等色素进行反演。各色素的名称及描述如表 1 所示,表中 SD 为标准差。

表 1 本文研究的浮游植物色素种类及描述

Table 1 Species and description of phytoplankton pigments

| Symbol | Pigment | Mean \pm SD unit: $\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$ |
|--------|--------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| TChl-a | Total Chlorophyll-a ^① | 1.25 ± 2.17 |
| Chl-b | Chlorophyll-b | 0.23 ± 0.36 |
| TChl-c | Total Chlorophyll-c ^② | 0.17 ± 0.36 |
| PPC | Photoprotective carotenoid pigments ^③ | 0.32 ± 0.49 |
| PSC | Photosynthetic carotenoid pigments ^④ | 0.42 ± 0.96 |

Note: ① Total Chlorophyll-a=Chlorophyll-a+Divinyl Chlorophyll-a+Chlorophyllide-a;

② Total Chlorophyll-c=Chlorophyll-c2+Chlorophyll-c3;

③ Photoprotective carotenoid pigments = α -carotene + β -carotene + Zeaxanthin + Alloxanthin + Diadinoxanthin + Diatoxanthin;

④ Photosynthetic carotenoid pigments = 19'-hexanoyloxyfucoxanthin + 19'-butanoyloxyfucoxanthin + Fucoxanthin + Peridinin + Prasinoxanthin.

2.3 卫星数据

本文使用的卫星数据来自于韩国海洋卫星中心(KOSC)发射的地球静止卫星上搭载的 GOCI 传感器。GOCI 卫星数据的时间分辨率为 1 h(8 景/天, UTC:0:00~8:00),空间分辨率为 500 m。本研究收集了 KOSC(<http://kosc.kiost.ac.kr/eng/>)2014 年 1 月 1 日至 2018 年 12 月 31 日的所有 GOCI 日数据(L1b),使用 GDPS(GOBI Data Processing Solutions)对数据进行处理,得到 412,443,490,555,660,680 nm 波段的 GOBI 遥感反射率产品。

2.4 浮游植物色素浓度反演模型

根据 GOBI 传感器的波段设置,通过研究不同遥感反射率单波段或多波段组合值与实测浮游植物色素浓度之间的关系,选出最优波段组合类型,建立反演模型。尝试的波段组合形式(X)如表 2 所示。使用 SPSS (Statistical Product and Service Solutions)软件分析不同波段组合形式与 TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 浓度的相关性,根据相关系数找出最佳波段组合形式。在此基础上,由实测浮游植物色素浓度与 R_{rs} 波段组合值之间的关系,建立色素浓度反演模型。

2.5 精度评价指标

本研究所使用的精度评价指标为决定系数

表 2 本研究使用的遥感反射率波段组合表达式,

其中 λ_i 和 λ_j 分别代表 GOBI R_{rs} 数据的第 i 和第 j 个波段
Table 2 Remote sensing reflectance band combination form
in this paper, in which λ_i and λ_j represent the i -th and
 j -th band of the GOBI R_{rs} data

| X | Band combination form |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| X_1 | $R_{\text{rs}}(\lambda_i)$ |
| X_2 | $\lg[R_{\text{rs}}(\lambda_i)]$ |
| X_3 | $R_{\text{rs}}(\lambda_i) + R_{\text{rs}}(\lambda_j)$ |
| X_4 | $R_{\text{rs}}(\lambda_i) - R_{\text{rs}}(\lambda_j)$ |
| X_5 | $R_{\text{rs}}(\lambda_i) / R_{\text{rs}}(\lambda_j)$ |
| X_6 | $[R_{\text{rs}}(\lambda_i) - R_{\text{rs}}(\lambda_j)] / [R_{\text{rs}}(\lambda_i) / R_{\text{rs}}(\lambda_j)]$ |
| X_7 | $[R_{\text{rs}}(\lambda_i) + R_{\text{rs}}(\lambda_j)] / [R_{\text{rs}}(\lambda_i) / R_{\text{rs}}(\lambda_j)]$ |
| X_8 | $[R_{\text{rs}}(\lambda_i) - R_{\text{rs}}(\lambda_j)] / [R_{\text{rs}}(\lambda_i) + R_{\text{rs}}(\lambda_j)]$ |

(R^2)、均方根误差(RMSE, E_{RMSE})、平均绝对百分误差(MAPE, E_{MAP})以及中值绝对百分误差(ME, E_{M}),其中 RMSE、MAPE、ME 的表达式为

$$E_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}, \quad (1)$$

$$E_{\text{MAP}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_i - y_i}{x_i} \right| \times 100\%, \quad (2)$$

$$E_{\text{M}} = \text{Median} \left| \frac{x_i - y_i}{x_i} \right| \times 100\%, \quad (3)$$

式中: n 表示样本数; x_i 表示第 i 个样本的实测值;

y_i 表示第 i 个样本的模型反演值。

3 结果分析

3.1 浮游植物色素浓度反演模型构建与验证

通过分析浮游植物色素浓度与 R_{rs} 波段组合值之间的关系, TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 的最优波段组合形式分别为 X_8 、 X_8 、 X_8 、 X_5 和 X_5 ,

表 3 最优波段组合形式及浮游植物色素浓度反演模型

Table 3 Optimal band combination and phytoplankton pigment concentration inversion model

| Pigment | X | Model | a | b | R^2 |
|---------|-------|---------------------|--------|--------|-------|
| TChl-a | X_8 | $a \times \exp(bX)$ | 0.7158 | -8.977 | 0.85 |
| Chl-b | X_8 | $a \times \exp(bX)$ | 0.1612 | -6.514 | 0.76 |
| TChl-c | X_8 | $a \times \exp(bX)$ | 0.1101 | -8.556 | 0.80 |
| PPC | X_5 | $a \times X^b$ | 0.2097 | -3.209 | 0.80 |
| PSC | X_5 | $a \times X^b$ | 0.2836 | -4.102 | 0.75 |

使用留一交叉验证法进一步检验模型反演效果, 实测 TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 浓度与其对应的模型反演值散点图如图 1 所示, 可以看到 5 种色素的模型反演值与实测值大多集中在图中对角线附近, R^2 达到了 0.72 以上。观察模型反演值与实测值之间的误差, TChl-a 相对其他色素的反演

其中所有色素模型使用的 λ_i 和 λ_j 都为 490 nm 和 555 nm(相关系数分别为 0.71, 0.60, 0.64, 0.70, 0.65)。根据最优波段组合形式与实测浮游植物色素浓度建立的反演模型如表 3 所示。TChl-a 和 PPC 模型的 R^2 达到 0.80 以上, Chl-b、TChl-c 和 PSC 的 R^2 达到 0.75 以上, 可以看到本文建立的模型的拟合度较高, 具有较高的建模精度。

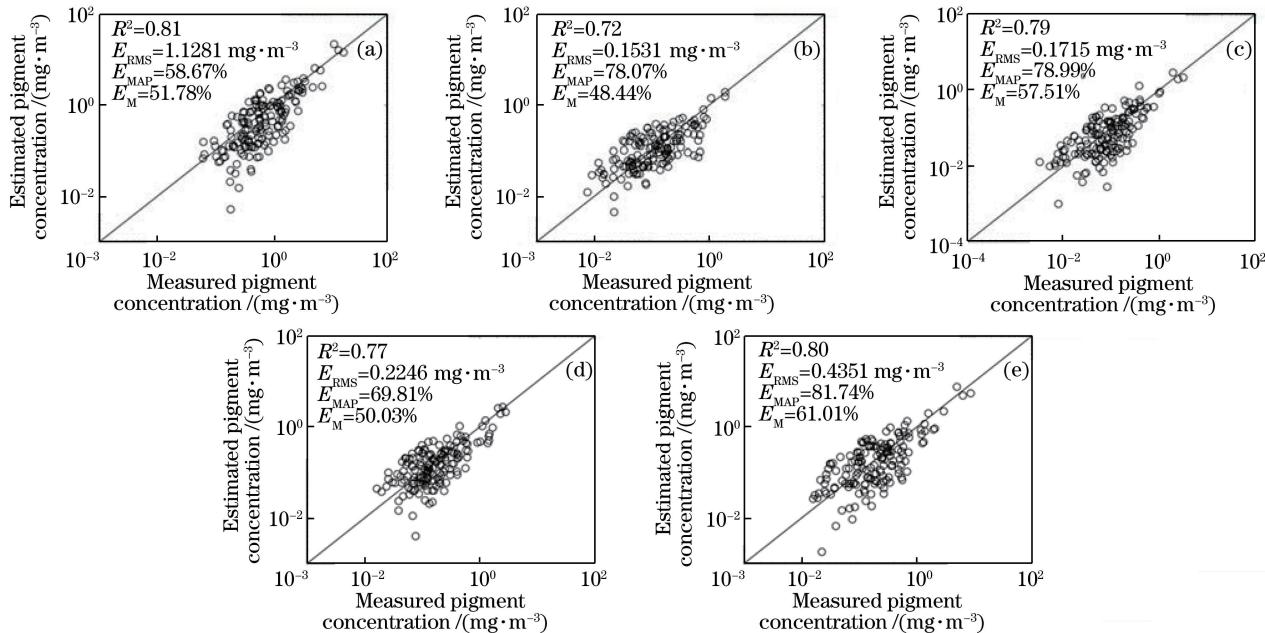


图 1 比较模型反演与实测的色素浓度。(a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

Fig. 1 Comparison between the estimated and measured pigment concentration. (a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

3.2 卫星反演结果检验

为了检验卫星反演结果, 根据实测数据的采集位置及时间, 由 3×3 网格的空间窗口以及 0.5 h 的时间窗口, 提取对应实测站点 GOCT 数据的 R_{rs} 有效值, 共提取获得 12 组匹配点数据。应用表 3 中的

模型, 由卫星反演 R_{rs} 分别计算得到 TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 浓度, 卫星反演值与实测值散点图如图 2 所示。由图 2(b)、(c) 和 (e) 可以看到, Chl-b、TChl-c 和 PSC 的卫星反演值与其对应的实测值点基本集中在图中对角线上, 3 种色素的卫星

反演效果较好 (E_{MAP} 分别为 47.82%, 40.18%, 43.00%)。从图 2(a)、(d) 可知, TChl-a 和 PPC 的一些卫星反演值较实测值低, 但从 MAPE 来看误差

较低, 分别为 39.45% 和 50.23%, 浓度反演结果可以接受, 这说明在 GOCI 卫星上用本文建立的反演模型得到的色素浓度结果是可信的。

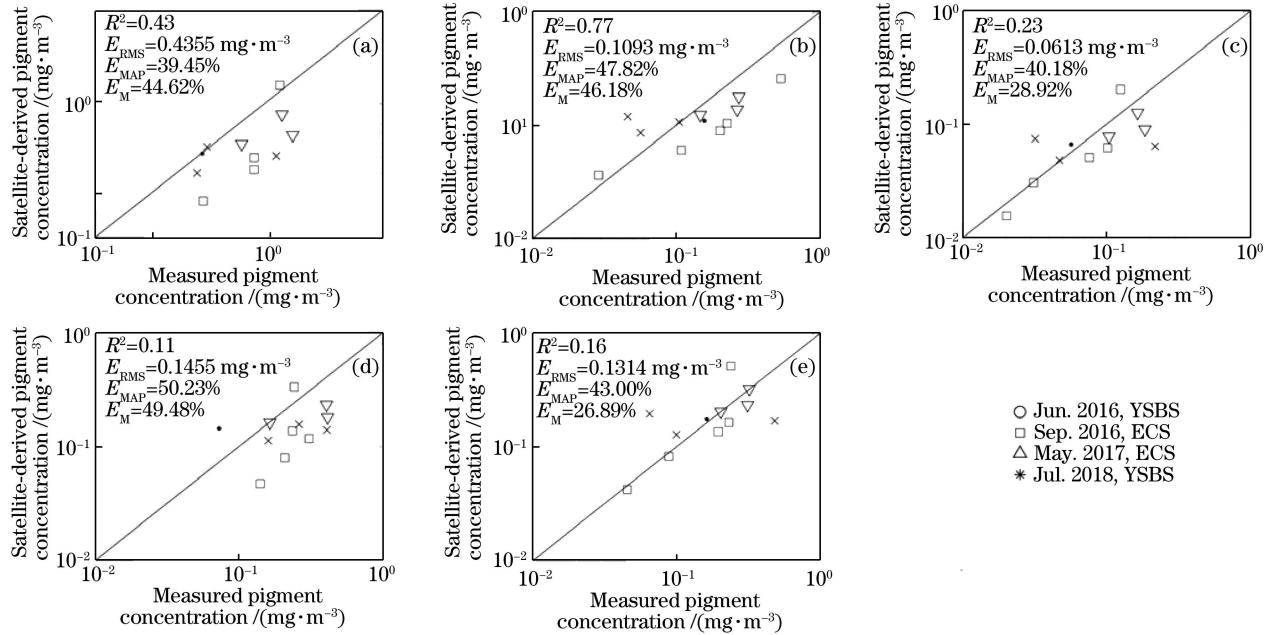


图 2 比较实测与卫星反演的色素浓度。(a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

Fig. 2 Comparison between the measured and satellite-derived pigment concentration. (a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

3.3 渤海、黄海和东海浮游植物色素浓度分布

将本文提出的反演模型应用于 2014—2018 年 GOCI 卫星的 R_s 数据上, 2014—2018 年渤海、黄海和东海各色素平均浓度分布如图 3 所示。可以看出, 叶绿素 a 作为绝大多数浮游植物都含有的色素, 其浓度比其他 4 种色素浓度高。整体上 TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 的年平均分布状况类似, 呈现近岸浓度高、离岸浓度低的特点。5 种色素的浓度在渤海比黄海和东海高, 色素浓度最高值出现在渤海沿岸区域。渤海中心浓度相对较低, 因为渤海属于近封闭内

海, 受黄河、滦河等陆源输入的影响较大, 浮游植物较为丰富。在山东半岛沿岸、江苏浅滩、长江口、浙闽沿岸的色素浓度较黄海、东海离岸水域高, 色素浓度呈现由近岸向离岸递减的趋势。受长江输入的影响, 在长江口上方可见一块三角状向离岸水域延伸的高浓度区域。综合来看, 5 种色素浓度分布都较为相近, 色素浓度在近岸区域较高, 离岸区域较低, 近岸浮游植物生长较离岸水域更为丰富, 这主要是由于近岸区域水深较浅, 陆源径流与海水之间混合度较高, 同时陆源径流带来了丰富的营养盐所致。

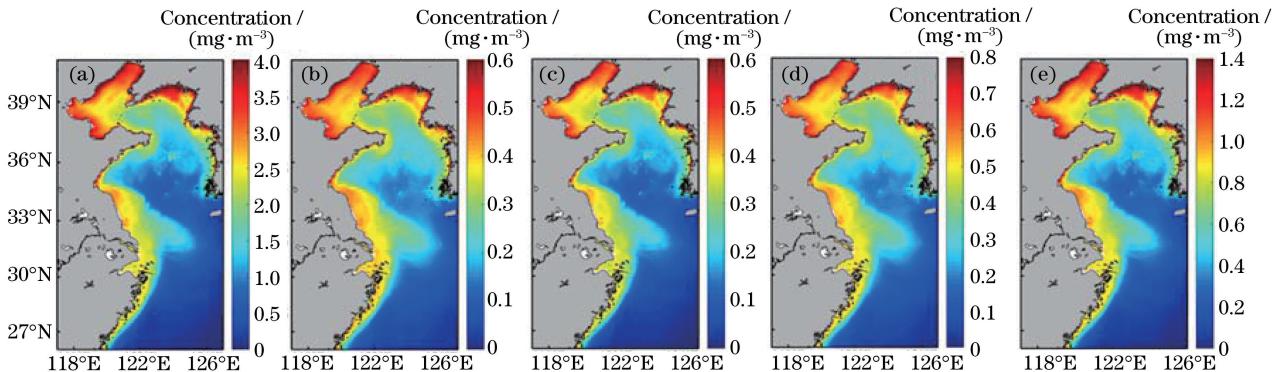


图 3 渤海、黄海、东海 2014—2018 年色素浓度年平均分布图。(a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

Fig. 3 Annual average spatial distribution of pigment concentrations from 2014 to 2018 in Bohai Sea, Yellow Sea and East China Sea. (a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

3.4 渤海、黄海和东海浮游植物色素浓度月平均分布

2014—2018 年 GOCI 遥感反射率数据应用反演模型得到的各色素月平均分布图如图 4 所示。

在渤海,1 月色素浓度较高,之后浓度减小,在 7 月达到谷值,接着逐渐升高,在 12 月达到另一个

峰值,色素浓度整体呈现冬季高、夏季低的趋势,与文献[26-28]的研究结果一致。这是因为:冬季渤海水温较低,表面海水下沉,下层营养物质随海水向上流动,造成浮游植物大量繁殖,色素浓度升高^[26,29];而夏季水温升高,温度跃层导致垂向水体的物质和能量交换受阻,色素浓度较冬季变低^[26,30-31]。

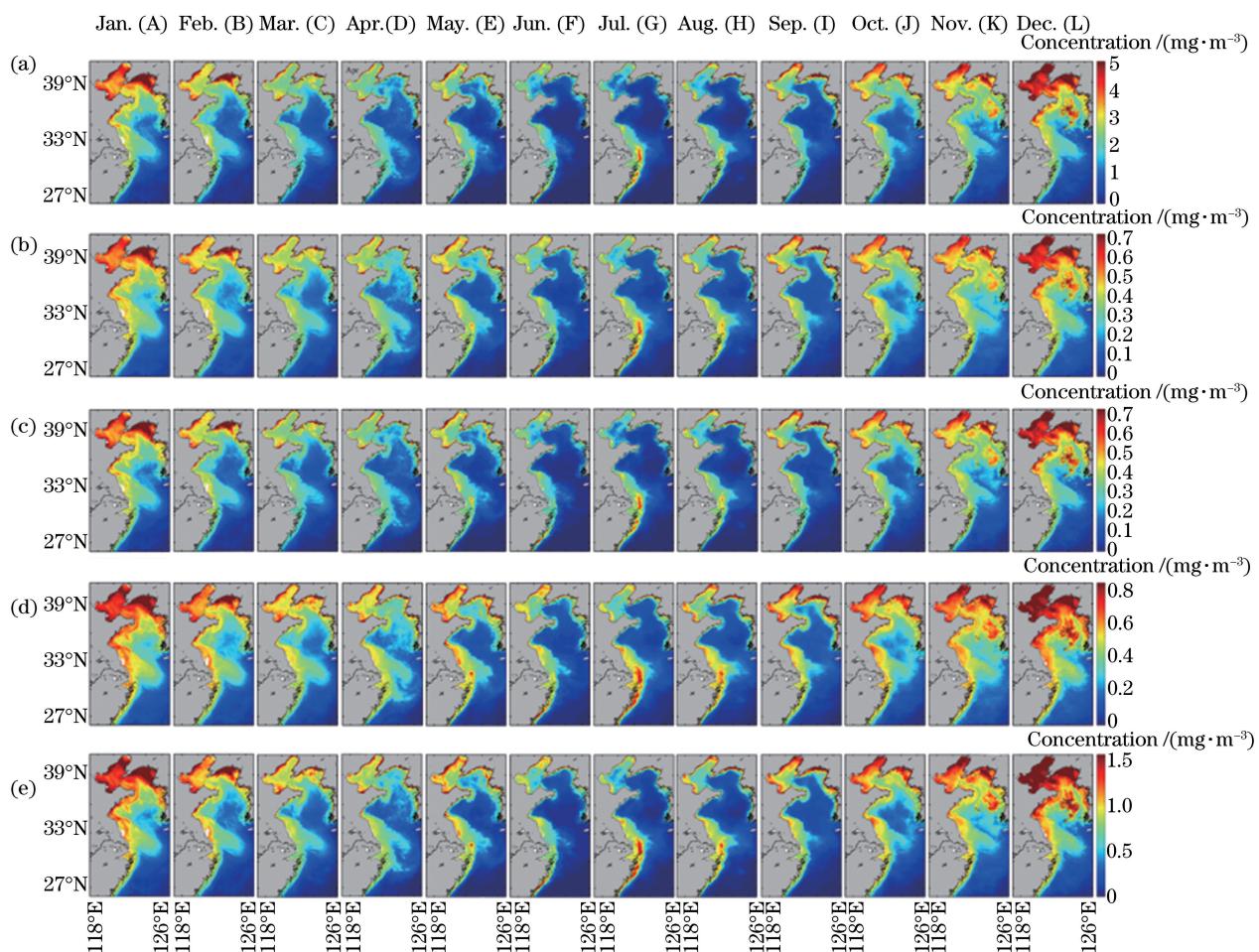


图 4 渤海、黄海、东海 2014—2018 年色素浓度月平均分布图。(a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

Fig. 4 Monthly average spatial distribution of pigment concentrations from 2014 to 2018 in Bohai Sea, Yellow Sea and East China Sea. (a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

在北黄海区域,先是从 1 月开始色素高浓度区域面积随时间逐渐减小,6—7 月达到谷值,之后 8—9 月北部沿岸地区色素浓度增加,10—12 月山东半岛和朝鲜半岛中间海域逐渐有色素高浓度区域出现。在山东半岛区域,从 1 月开始高浓度区域逐渐向近岸收缩,6—7 月只在近岸有高值区,之后高值区又逐渐由近岸向东推移,在 12 月达到峰值。

江苏浅滩及浙闽沿岸地区,色素浓度全年保持一个较高的水平。1 月色素浓度较高,随着时间推移在 3—5 月色素浓度逐渐降低,而 6 月在浙闽沿岸有面积较小的色素高浓度区域出现,接着高值区在 7—8 月由浙闽沿岸扩展至长江口,之后逐渐消失。

此外,长江口处三角状高浓度区域在冬季面积较大,之后逐渐减小,6—7 月几乎消失,在秋冬季又逐渐向外扩散。Yamaguchi 等^[32]的研究表明,高浓度三角区域与长江冲淡水的移动相吻合,长江冲淡水与色素浓度的变化成正相关,受长江冲淡水的影响,秋冬季三角状高浓度区域逐渐由长江口向东推移。而夏季长江口处海温升高,导致海水垂直混合度降低,离岸三角区浮游植物减少,导致其面积减小,但近岸由于得到长江带来的营养盐,近岸区域浮游植物大量繁殖,色素浓度反而升高^[17]。最后,在东海开阔外海深水区,各色素浓度全年保持较低的水平,色素浓度随季节变化较小。

4 分析与讨论

4.1 浮游植物色素浓度在典型区域的分布变化

进一步探究不同海域色素浓度的差异性,根据图 4 中色素浓度的月平均分布,在研究区内选择 5 处典型子区域分别代表渤海(半封闭内海的二类水体,S1)、北黄海和南黄海(典型二类水体^[33],S2 和 S3)、长江口(受到陆源输入影响的二类水体,S4)和东海开阔外海深水区(近一类水体,S5),提取子区域内 2014—2018 年 5 种色素的月平均浓度作对比分析,如图 5 所示,S1~S5 区域在 2014—2018 年各年浓度平均值和标准差如表 4 所示。总体上看,靠近陆地的区域(S1、S2、S4)含有的色素浓度要高于离岸区域(S3 和 S5),S1 区域各类色素浓度相对较高,S5 相对较低。由表 4 可以发现,各色素在

S1~S5 区域每年的浓度变化幅度相近,其中 S1 和 S2 区域色素浓度年标准差相对其他区域较大。各区域色素浓度随季节变化而变化,其中:S1、S2、S3 区域色素浓度在冬季达到最高,在春、秋季色素浓度各有一个峰值,夏季色素浓度较低,这 3 个区域具有相似的变化趋势,这表明渤海与黄海可能有着相同的浮游植物种类及演变趋势;S4 区域冬季色素浓度较高,之后逐渐减小,但在夏季色素浓度又出现峰值,这可能是由于夏季长江口输入大量的营养盐造成浮游植物爆发所致;S5 区域浓度在夏季相对较低,色素浓度在春、秋季达到峰值。最后,在绝对浓度值变化方面,由表 4 各色素年平均值可以看到,S1、S2、S3 区域的色素浓度在 5 年间呈升高的趋势,而 S4 和 S5 区域色素浓度虽然短期内存在一定程度的波动,但整体上保持平稳状态。

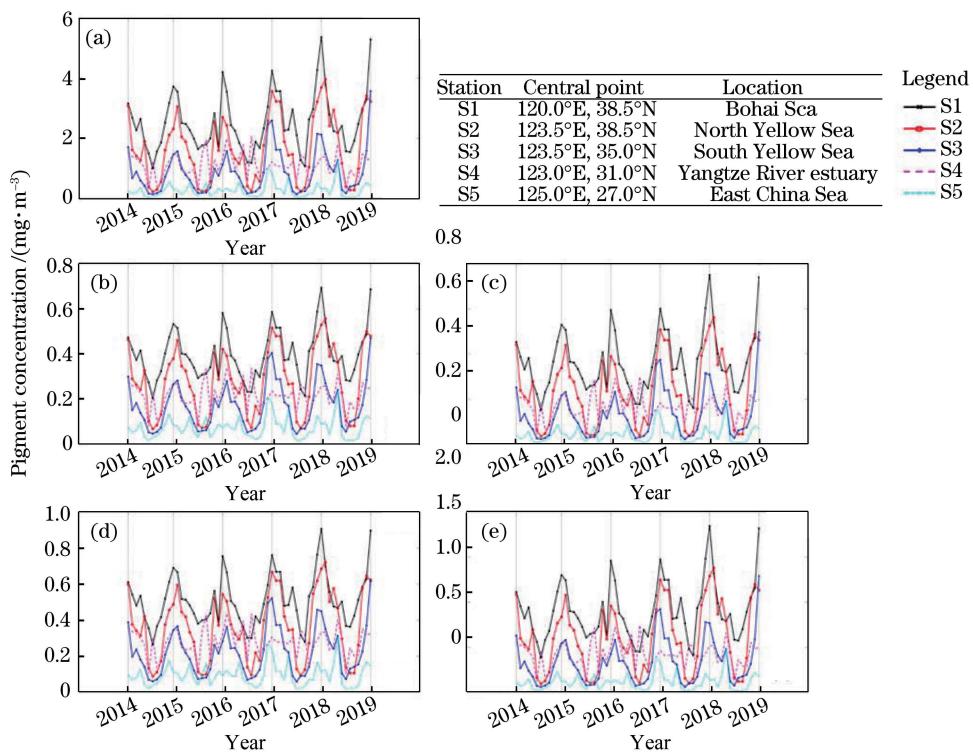


图 5 S1 ~ S5 区域在 2014—2018 年月平均色素浓度变化图。(a) TChl-a;(b) Chl-b;(c) TChl-c;(d) PPC;(e) PSC

Fig. 5 Monthly average distribution of pigment concentrations from 2014 to 2018 in S1-S5. (a) TChl-a; (b) Chl-b; (c) TChl-c; (d) PPC; (e) PSC

4.2 浮游植物色素之间的关系

建立色素浓度反演模型时,使用 GOBI 的 490 nm 和 555 nm 波段进行建模,由图 5 也可看到 TChl-a 与其他色素浓度变化存在一定的一致性,通过分析实测 TChl-a 与 Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 来进一步研究浮游植物色素之间的关系,如图 6 所示,显然可以看出 TChl-a 与 Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 之间都

有较好的关系, R^2 达到了 0.80 以上。同样地,Tress 等^[34]使用全球浮游植物色素浓度数据库研究了 TChl-a 与总辅助色素(AP,除 TChl-a 外的所有色素)之间的关系,发现 TChl-a 与 AP 的 R^2 达到 0.94;Pan 等^[15]和 Chase 等^[17]分别分析美国东海岸色素浓度数据以及全球色素浓度数据,结果显示 TChl-a 与本文中研究的几种辅助色素均有较高的相关性。结合本

表 4 TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC 和 PSC 在 S1~S5 区域 2014—2018 年各年浓度平均值和标准差

Table 4 Mean and standard deviation of the TChl-a, Chl-b, TChl-c, PPC and PSC concentrations in the S1~S5 region in each year from 2014 to 2018

| Pigment | Station | Mean \pm SD / ($\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$) | | | | |
|---------|---------|-----------------------------------------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| | | 2014 | 2015 | 2016 | 2017 | 2018 |
| TChl-a | S1 | 2.326 ± 0.766 | 2.396 ± 0.805 | 2.267 ± 0.804 | 2.856 ± 0.808 | 2.805 ± 0.801 |
| | S2 | 1.396 ± 0.862 | 1.472 ± 0.857 | 1.491 ± 0.875 | 1.902 ± 0.884 | 2.012 ± 0.883 |
| | S3 | 0.685 ± 0.496 | 0.676 ± 0.473 | 0.942 ± 0.479 | 0.948 ± 0.482 | 1.035 ± 0.479 |
| | S4 | 1.052 ± 0.408 | 1.077 ± 0.402 | 1.274 ± 0.378 | 1.067 ± 0.389 | 1.082 ± 0.373 |
| | S5 | 0.214 ± 0.145 | 0.247 ± 0.145 | 0.324 ± 0.146 | 0.239 ± 0.146 | 0.314 ± 0.165 |
| Chl-b | S1 | 0.374 ± 0.092 | 0.383 ± 0.096 | 0.366 ± 0.096 | 0.432 ± 0.097 | 0.427 ± 0.096 |
| | S2 | 0.249 ± 0.122 | 0.257 ± 0.121 | 0.262 ± 0.124 | 0.310 ± 0.125 | 0.323 ± 0.125 |
| | S3 | 0.146 ± 0.081 | 0.146 ± 0.078 | 0.180 ± 0.079 | 0.183 ± 0.080 | 0.192 ± 0.079 |
| | S4 | 0.207 ± 0.064 | 0.211 ± 0.063 | 0.238 ± 0.059 | 0.211 ± 0.061 | 0.211 ± 0.059 |
| | S5 | 0.064 ± 0.032 | 0.071 ± 0.032 | 0.083 ± 0.033 | 0.068 ± 0.033 | 0.079 ± 0.035 |
| TChl-c | S1 | 0.338 ± 0.107 | 0.347 ± 0.112 | 0.329 ± 0.112 | 0.410 ± 0.113 | 0.390 ± 0.111 |
| | S2 | 0.206 ± 0.123 | 0.216 ± 0.122 | 0.219 ± 0.125 | 0.276 ± 0.126 | 0.291 ± 0.126 |
| | S3 | 0.104 ± 0.072 | 0.103 ± 0.069 | 0.140 ± 0.070 | 0.142 ± 0.071 | 0.153 ± 0.070 |
| | S4 | 0.158 ± 0.059 | 0.161 ± 0.058 | 0.189 ± 0.055 | 0.160 ± 0.057 | 0.162 ± 0.054 |
| | S5 | 0.034 ± 0.022 | 0.039 ± 0.022 | 0.051 ± 0.023 | 0.038 ± 0.023 | 0.049 ± 0.025 |
| PPC | S1 | 0.484 ± 0.123 | 0.495 ± 0.125 | 0.473 ± 0.124 | 0.56 ± 0.126 | 0.500 ± 0.124 |
| | S2 | 0.323 ± 0.157 | 0.332 ± 0.156 | 0.339 ± 0.159 | 0.402 ± 0.161 | 0.418 ± 0.161 |
| | S3 | 0.189 ± 0.104 | 0.190 ± 0.101 | 0.234 ± 0.102 | 0.237 ± 0.103 | 0.250 ± 0.102 |
| | S4 | 0.268 ± 0.082 | 0.273 ± 0.081 | 0.308 ± 0.076 | 0.274 ± 0.079 | 0.273 ± 0.075 |
| | S5 | 0.083 ± 0.042 | 0.092 ± 0.043 | 0.108 ± 0.043 | 0.088 ± 0.043 | 0.102 ± 0.025 |
| PSC | S1 | 0.836 ± 0.258 | 0.860 ± 0.270 | 0.816 ± 0.271 | 1.012 ± 0.272 | 0.863 ± 0.269 |
| | S2 | 0.515 ± 0.300 | 0.540 ± 0.299 | 0.548 ± 0.305 | 0.686 ± 0.308 | 0.723 ± 0.308 |
| | S3 | 0.265 ± 0.180 | 0.263 ± 0.172 | 0.355 ± 0.174 | 0.357 ± 0.175 | 0.391 ± 0.174 |
| | S4 | 0.399 ± 0.146 | 0.408 ± 0.144 | 0.476 ± 0.135 | 0.406 ± 0.139 | 0.409 ± 0.133 |
| | S5 | 0.091 ± 0.058 | 0.104 ± 0.058 | 0.132 ± 0.059 | 0.100 ± 0.059 | 0.127 ± 0.065 |

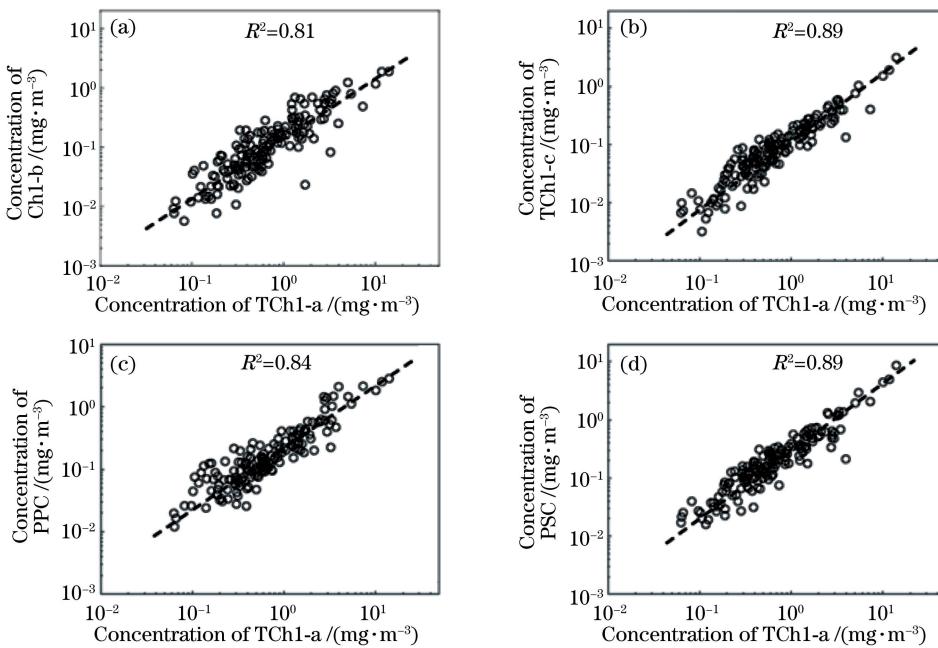


图 6 实测 TChl-a 与各色素浓度之间的关系。(a) TChl-a 和 Chl-b; (b) TChl-a 和 TChl-c; (c) TChl-a 和 PPC; (d) TChl-a 和 PSC

Fig. 6 Relationship of measured pigment concentration between TChl-a and Chl-b, TChl-c, PPC, PSC.

(a) TChl-a and Chl-b; (b) TChl-a and TChl-c; (c) TChl-a and PPC; (d) TChl-a and PSC

文及这几项研究的结果,说明在海洋中 TChl-a 与辅助色素之间相关性较高,存在共变关系。

尝试利用色素共变关系来进行色素浓度的反演。基于实测色素浓度数据,利用多种模型拟合形式描述 TChl-a 与 Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 色素之间的关系,其中最优模型形式为

$$C_{\text{pig}} = \eta_1 \cdot \exp(\eta_2 \cdot \lg C_{\text{TChl-a}}), \quad (4)$$

其中 η_1 和 η_2 是通过拟合 TChl-a 与 4 种辅助色素之间的关系确定的,对于 Chl-b、TChl-c、PPC、PSC, $\eta_1 = 0.2019, 0.1089, 0.2253, 0.2410$, $\eta_2 = 1.992, 2.800, 2.230, 2.998$ 。使用留一法检验由实测的 TChl-a 浓度根据(4)式计算获得 4 种色素浓度。同时考虑到色素共变模型的实际应用,先使用本文提出的 R_{rs} 色素浓度模型计算得到 TChl-a 浓度,再将其应用到色素共变模型上,对比直接由 R_{rs} 反演色素浓度得到的结果,检验结果如表 5 所示。

从表 5 可以看到,利用色素共变关系,使用 TChl-a 反演 TChl-c、PPC 和 PSC 浓度的效果较好,实测值与反演值的 R^2 都达到了 0.80 以上,MAPE 和 ME 分别小于 43% 和 35%,而 Chl-b 的反演效果相对较差, R^2 为 0.67, MAPE 达到了 66.94%,但

从总体上看,使用色素共变关系能由 TChl-a 浓度计算得到较为准确的 Chl-b、TChl-c、PPC 和 PSC 浓度。进一步使用反演的 TChl-a 浓度来计算 4 种色素浓度,对比直接由 R_{rs} 反演色素浓度得到的结果,可以看到由色素共变模型得到的 Chl-b 和 PPC 反演误差比直接由 R_{rs} 反演的误差大。而对于 TChl-c 和 PSC,虽然色素共变模型的 MAPE 比 R_{rs} 反演模型的小,但由 R^2 、ME 和 RMSE 可以看出反演效果没有 R_{rs} 反演模型好,说明色素共变关系模型的精度受到 TChl-a 准确性的限制。在由 R_{rs} 得到 TChl-a 浓度,进而得到其他几种色素浓度的过程中,叠加的误差会对最终色素浓度反演值的准确性产生影响,在使用 TChl-a 和色素共变关系反演色素浓度时应该考虑 TChl-a 反演中的误差。同时 Chase 等^[17]也指出,这种色素之间的共变关系也存在一定的不确定性,由于浮游植物色素组成的自然变化会导致这种共变关系存在一定的变化,因此不同浮游植物种群结构下色素之间的共变关系还需做进一步的研究。综上所述,在使用卫星 R_{rs} 数据反演色素浓度时,相比于色素共变模型,使用本文提出的 R_{rs} 波段组合模型能得到更好的反演结果。

表 5 色素共变关系模型以及 R_{rs} 反演模型的反演结果比较

Table 5 Comparison of inversion results of pigment covariation relationship model and R_{rs} inversion model

| Model type | Pigment | R^2 | MAPE / % | ME / % | RMSE / ($\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$) |
|--------------------------------------------------------------------------|---------|-------|----------|--------|--------------------------------------------|
| Pigment covariation relationship (From measured TChl-a concentration) | Chl-b | 0.67 | 66.94 | 41.36 | 0.224 |
| | TChl-c | 0.89 | 42.26 | 29.62 | 0.237 |
| | PPC | 0.83 | 34.69 | 25.15 | 0.206 |
| | PSC | 0.91 | 42.25 | 34.37 | 0.392 |
| Pigment covariation relationship (From measured R_{rs}) | Chl-b | 0.56 | 86.39 | 53.49 | 0.271 |
| | TChl-c | 0.74 | 75.68 | 61.19 | 0.239 |
| | PPC | 0.69 | 80.48 | 64.33 | 0.356 |
| | PSC | 0.76 | 80.36 | 69.41 | 0.764 |
| R_{rs} inversion model | Chl-b | 0.72 | 78.07 | 48.44 | 0.153 |
| | TChl-c | 0.79 | 78.99 | 57.51 | 0.171 |
| | PPC | 0.77 | 69.81 | 50.03 | 0.224 |
| | PSC | 0.80 | 81.74 | 61.01 | 0.435 |

5 结 论

以黄海、渤海和东海作为研究区,利用多个航次的实测遥感反射率和浮游植物色素浓度数据,根据 GOCCI 卫星波段设置,建立 TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC 和 PSC 共 5 种色素浓度反演模型,实测数据经留一法检验和卫星数据匹配检验后发现反演效果较好。将模型应用于 GOCCI 卫星数据上,得到 2014—2018 年 TChl-a、Chl-b、TChl-c、PPC、PSC 渤海、黄

海和东海色素浓度分布图,发现色素浓度整体上呈现由近岸向离岸水域递减的趋势。在近岸水域,色素浓度呈现冬季色素浓度高、夏季浓度低的特点。长江口处色素浓度较高,高浓度区域呈三角状,由西向东延伸,秋冬季三角区域面积较大,春夏季三角区域向沿岸区域收缩。夏季因长江中营养盐的输入,长江口区域出现浮游植物爆发的现象。对于外海深水区,浮游植物色素浓度相对较低,随季节浓度变化较小。

参考文献

- [1] Antoine D, André J M, Morel A. Oceanic primary production: 2. Estimation at global scale from satellite (Coastal Zone Color Scanner) chlorophyll [J]. *Global Biogeochemical Cycles*, 1996, 10(1): 57-69.
- [2] Beaugrand G, Reid P C. Long-term changes in phytoplankton, zooplankton and salmon related to climate[J]. *Global Change Biology*, 2003, 9 (6): 801-817.
- [3] Chen S, Yin G F, Zhao N J, et al. Measurement of primary productivity of phytoplankton based on photosynthetic electron transport rate [J]. *Acta Optica Sinica*, 2018, 38(11): 1126001.
陈双, 殷高方, 赵南京, 等. 基于光合电子传递速率的浮游植物初级生产力测量[J]. 光学学报, 2018, 38(11): 1126001.
- [4] Hirata T, Hardman-Mountford N J, Brewin R J W, et al. Synoptic relationships between surface Chlorophyll-a and diagnostic pigments specific to phytoplankton functional types[J]. *Biogeosciences*, 2011, 8(2): 311-327.
- [5] Zhai H C, Ning X R, Tang X X, et al. Application of HPLC pigment analysis in the study of phytoplankton community structure[J]. *Periodical of Ocean University of China*, 2010, 40(11): 71-78.
翟红昌, 宁修仁, 唐学玺, 等. HPLC 色素分析技术在海洋浮游植物群落结构研究中的应用[J]. 中国海洋大学学报(自然科学版), 2010, 40(11): 71-78.
- [6] Li N, Sun D Y, Huan Y, et al. Determination and application of specific absorption spectra of phytoplankton species in Yellow Sea and Bohai Sea [J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(6): 0601004.
李楠, 孙德勇, 环宇, 等. 黄渤海浮游植物种群比吸收光谱的确定及其应用[J]. 光学学报, 2020, 40 (6): 0601004.
- [7] Suikkanen S, Laamanen M, Huttunen M. Long-term changes in summer phytoplankton communities of the open northern Baltic Sea[J]. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 2007, 71(3/4): 580-592.
- [8] Li X, Chen W Z. The correlation between net primary productivity and environmental parameters of northwest Pacific based on MODIS satellite remote sensing data [J]. *Ocean Development and Management*, 2020, 37(4): 32-41.
李璇, 陈文忠. 基于 MODIS 卫星遥感数据的西北太平洋初级生产力与环境参数的相关性[J]. 海洋开发与管理, 2020, 37(4): 32-41.
- [9] Li Y Y. Remote sensing of ocean color for seasonal variation of phytoplankton community structure in the South China Sea[D]. Tianjin: Tianjin University of Science & Technology, 2015.
李月洋. 基于水色遥感研究南海浮游植物群落结构季节变化[D]. 天津: 天津科技大学, 2015.
- [10] Wright S W, Jeffrey S W, Mantoura R, et al. Improved HPLC method for the analysis of chlorophylls and carotenoids from marine phytoplankton[J]. *Marine Ecology Progress Series*, 1991, 77: 183-196.
- [11] Zhao Y F, Zheng S, Sun X X. Distribution of photosynthetic pigments and its indication to phytoplankton community in Yarp Y3 seamount in the tropical west Pacific in winter 2014 [J]. *Oceanologia et Limnologia Sinica*, 2019, 50(4): 830-837.
赵永芳, 郑珊, 孙晓霞. 2014 年冬季热带西太平洋雅浦 Y3 海山光合色素分布及其对浮游植物群落的指示作用[J]. 海洋与湖沼, 2019, 50(4): 830-837.
- [12] Chen J X, Huang B Q, Liu Y, et al. Phytoplankton community structure in the transects across East China Sea and northern South China Sea determined by analysis of HPLC photosynthetic pigment signatures[J]. *Advances in Earth Science*, 2006, 21 (7): 738-746.
陈纪新, 黄邦钦, 刘媛, 等. 应用特征光合色素研究东海和南海北部浮游植物的群落结构[J]. 地球科学进展, 2006, 21(7): 738-746.
- [13] Shubha S, Jim A, Severine A, et al. Phytoplankton functional types from space [C] // Reports of the International Ocean-Colour Coordinating Group. Dartmouth, Canada: IOCCG, 2014: 156.
- [14] Mouw C B, Ciochetto A B, Grunert B, et al. Expanding understanding of optical variability in Lake Superior with a 4-year dataset [J]. *Earth System Science Data*, 2017, 9(2): 497-509.
- [15] Pan X J, Mannino A, Russ M E, et al. Remote sensing of phytoplankton pigment distribution in the United States northeast coast[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2010, 114(11): 2403-2416.
- [16] Catlett D, Siegel D A. Phytoplankton pigment communities can be modeled using unique relationships with spectral absorption signatures in a dynamic coastal environment [J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2018, 123(1): 246-264.
- [17] Chase A P, Boss E, Cetinic 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.
- [18] Wang G Q, Lee Z, Mouw C. Concentrations of

- multiple phytoplankton pigments in the global oceans obtained from satellite ocean color measurements with MERIS [J]. Applied Sciences, 2018, 8(12): 2678.
- [19] Liu Y Y, Boss E, Chase A, et al. Retrieval of phytoplankton pigments from underway spectrophotometry in the fram strait [J]. Remote Sensing, 2019, 11(3): 318.
- [20] El Hourany R, Abboud-Abi Saab M, Faour G, et al. Estimation of secondary phytoplankton pigments from satellite observations using self-organizing maps (SOMs) [J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 2019, 124(2): 1357-1378.
- [21] Wang X Y, Tang J W, Li T J, et al. Key technologies of water spectra measurements with above-water method [J]. Ocean Technology, 2012, 31(1): 72-76.
汪小勇, 唐军武, 李铜基, 等. 水面之上法测量水体光谱的关键技术[J]. 海洋技术, 2012, 31(1): 72-76.
- [22] van Heukelom L, Thomas C S. Computer-assisted high-performance liquid chromatography method development with applications to the isolation and analysis of phytoplankton pigments [J]. Journal of Chromatography A, 2001, 910(1): 31-49.
- [23] Vidussi F, Claustre H, Bustillos-Guzmán J, et al. Determination of chlorophylls and carotenoids of marine phytoplankton: separation of chlorophyll a from divinylchlorophyll a and zeaxanthin from lutein [J]. Journal of Plankton Research, 1996, 18(12): 2377-2382.
- [24] Aiken J, Fishwick J, Moore G, et al. The annual cycle of phytoplankton photosynthetic quantum efficiency, pigment composition and optical properties in the western English Channel [J]. Journal of the Marine Biological Association of the United Kingdom, 2004, 84(2): 301-313.
- [25] Bricaud A, Mejia C, Blondeau-Patissier D, et al. Retrieval of pigment concentrations and size structure of algal populations from their absorption spectra using multilayered perceptrons [J]. Applied Optics, 2007, 46(8): 1251-1260.
- [26] Zou B, Zou Y R, Jin Z G. Analysis of characteristics of seasonal and spatial variations of SST and chlorophyll concentration in the Bohai Sea [J]. Advances in Marine Science, 2005, 23(4): 487-492.
邹斌, 邹亚荣, 金振刚. 渤海海温与叶绿素季节空间变化特征分析[J]. 海洋科学进展, 2005, 23(4): 487-492.
- [27] Sha H M, Li X S, Yang W B, et al. Annual variation in sea surface temperature and chlorophyll-a concentration retrieved by MODIS in East China Sea [J]. Journal of Dalian Fisheries University, 2009, 24(2): 151-156.
沙慧敏, 李小恕, 杨文波, 等. 用MODIS遥感数据反演东海海表温度、叶绿素a浓度年际变化的研究[J]. 大连水产学院学报, 2009, 24(2): 151-156.
- [28] Qian L, Liu W L, Zheng X S. Spatial-temporal variation of Chlorophyll-a concentration in Bohai Sea based on MODIS [J]. Marine Science Bulletin, 2011, 30(6): 683-687.
钱莉, 刘文岭, 郑小慎. 基于MODIS数据反演的渤海叶绿素浓度时空变化[J]. 海洋通报, 2011, 30(6): 683-687.
- [29] Sun X P. China offshore regional ocean [M]. Beijing: Ocean Press, 2006.
- 孙湘平. 中国近海区域海洋 [M]. 北京: 海洋出版社, 2006.
- [30] Shen G Y, Shi B Z. Marine ecology [M]. 2nd ed. Beijing: Science Press, 2002.
沈国英, 施并章. 海洋生态学 [M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 2002.
- [31] Shi F, Cui L, Jiang H Z, et al. Numerical analysis of the effects of seasonal variation on distributions and influences of surface chlorophyll-a in the Yellow Sea and the Bohai Sea [J]. Journal of Basic Science and Engineering, 2017, 25(4): 700-711.
石峰, 崔雷, 姜恒志, 等. 季节变化对黄渤海表层叶绿素浓度分布影响的数值分析[J]. 应用基础与工程科学学报, 2017, 25(4): 700-711.
- [32] Yamaguchi H, Kim H C, Son Y B, et al. Seasonal and summer interannual variations of SeaWiFS chlorophyll a in the Yellow Sea and East China Sea [J]. Progress in Oceanography, 2012, 105: 22-29.
- [33] Ye H P. Study on the spectral classification method in Yellow Sea and East China Sea [D]. Tianjin: National Ocean Technology Center, 2009.
叶虎平. 黄东海海洋光谱分类方法研究 [D]. 天津: 国家海洋技术中心, 2009.
- [34] Trees C C, Clark D K, Bidigare R R, et al. Accessory pigments versus chlorophyll a concentrations within the euphotic zone: a ubiquitous relationship [J]. Limnology and Oceanography, 2000, 45(5): 1130-1143.