

基于高光谱吸收的南海浮游植物色素浓度估算

王桂芬^{1,2*}, 张银雪^{1,2}, 徐文龙^{1,2}, 周雯³, 吴华莲⁴, 许占堂³, 曹文熙³¹ 河海大学自然资源部海洋灾害预报技术重点实验室, 江苏 南京 210098;² 河海大学海洋学院, 江苏 南京 210098;³ 中国科学院南海海洋研究所热带海洋环境国家重点实验室, 广东 广州 510301;⁴ 中国科学院南海海洋研究所中国科学院热带海洋生物资源与生态重点实验室, 广东 广州 510301

摘要 基于南海海区 2006 年至 2015 年 8 个航次调查数据, 采用导数光谱分析方法研究了浮游植物光谱吸收系数与南海典型色素浓度之间的相关特征, 进一步建立了用于色素浓度估算的偏最小二乘回归模型(简称 PLS 回归模型)。研究结果表明: 浮游植物吸收系数的导数光谱变化特征可用于关键色素浓度的定量估算, 基于二阶导数光谱估算的结果稍优于四阶导数光谱; 模型对总叶绿素 a(TChl a)、光合有效类胡萝卜素(PSC)、岩藻黄素(Fuco)、19'-丁酰基氧化岩藻黄素(19But)、19'-乙酰基氧化岩藻黄素(19Hex)、硅甲藻黄素(Diadino)等表现出较高的精度, 预测值与实测值之间的线性相关性较强, 但对于光保护类胡萝卜素(PPC)和玉米黄素(Zea)的估算精度相对较低。与基于总叶绿素 a 浓度的经验模型相比, 基于导数光谱的 PLS 回归模型对于 PSC, Fuco, 19Hex, Diadino 等色素的估算效果相当, 而对于 19But, PPC, Zea 等表现出一定的优势。不同种类色素浓度与吸收系数导数光谱之间的内在联系可能是造成不同色素估算精度差异的重要因素。建立的基于浮游植物吸收系数的导数光谱定量提取色素浓度的方法, 可为深入细致研究浮游植物种群结构的高光谱水色卫星遥感提供参考。

关键词 海洋光学; 吸收系数; 浮游植物色素; 导数光谱; 高光谱; 南海

中图分类号 P733.3

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.0601002

Estimation of Phytoplankton Pigment Concentration in the South China Sea from Hyperspectral Absorption Data

Wang Guifen^{1,2*}, Zhang Yinxue^{1,2}, Xu Wenlong^{1,2},
Zhou Wen³, Wu Hualian⁴, Xu Zhantang³, Cao Wenxi³

¹ Key Laboratory of Marine Hazards Forecasting, Ministry of Natural Resources,
Hohai University, Nanjing, Jiangsu 210098, China;

² College of Oceanography, Hohai University, Nanjing, Jiangsu 210098, China;

³ State Key Laboratory of Tropical Oceanography, South China Sea Institute of Oceanology,
Chinese Academy of Sciences, Guangzhou, Guangdong 510301, China;

⁴ CAS Key Laboratory of Tropical Marine Bio-Resources and Ecology, South China Sea Institute of Oceanology,
Chinese Academy of Sciences, Guangzhou, Guangdong 510301, China

Abstract On the basis of the survey data collected over eight cruises from 2006 to 2015 in the South China Sea, the correlation features between the spectral absorption coefficient of phytoplankton and the typical pigment concentrations in the South China Sea were investigated by the derivative spectral analysis method, and partial least squares (PLS) regression models were then developed for estimating the pigment concentrations. The study results show that the derivative spectral variation of phytoplankton absorption coefficients can be used for quantitatively

收稿日期: 2020-09-14; 修回日期: 2020-10-20; 录用日期: 2020-11-09

基金项目: 国家自然科学基金(41776045, 41976172, 41976170)、中央高校基本科研业务费专项资金(2017B06714)

* E-mail: guifenwang@hhu.edu.cn

estimating the key pigment concentrations, and the estimation results based on the second-order derivative spectra are slightly better than those based on the fourth-order spectra. The proposed models achieve high accuracy for TChl a, PSC, Fuco, 19But, 19Hex, and Diadino, with a high linear correlation between the predicted and measured values. However, the estimation accuracy of PPC and Zea is relatively low. Compared with the empirical models based on the TChl a concentration, the PLS regression models based on derivative spectra have an equivalent effect on estimating the pigments such as PSC, Fuco, 19Hex, and Diadino, and show certain advantages for 19But, PPC, and Zea. The internal relationship between the concentration of different types of pigments and the derivative spectra of absorption coefficients may be an important factor for the difference in the estimation accuracy of different pigments. In conclusion, the method of quantitatively extracting the pigment concentration by the derivative spectra based on the phytoplankton absorption coefficients established in this paper can provide a reference for deeply investigating the hyperspectral remote sensing of phytoplankton population structures based on the ocean color satellites.

Key words ocean optics; absorption coefficient; phytoplankton pigments; derivative spectra; hyperspectra; South China Sea

OCIS codes 010.1030; 010.4450; 300.6320

1 引言

浮游植物不仅是初级生产过程的核心,也是海洋生物地球化学循环的主要组成成分。浮游植物的色素组成是用于区分浮游植物种群结构的重要指标^[1-2]。叶绿素、类胡萝卜素和藻胆蛋白是浮游植物细胞中的三大类主要色素,所有藻类均含有叶绿素和类胡萝卜素,但只有蓝藻、红藻、隐藻和某些原绿球藻中含有藻胆蛋白^[3]。叶绿素又可细分为叶绿素 a、叶绿素 b 和叶绿素 c,类胡萝卜素又可以分为光合有效类胡萝卜素(PSC)及光保护类胡萝卜素(PPC)^[4-5]。不同的色素结构及特征色素可用来区分具有不同功能的浮游植物种群^[6-8],相应的光学特性(如吸收、散射特性等)都表现出一定的差异,从而为采用光学手段探测浮游植物的种群结构提供了重要的理论基础^[9]。

叶绿素 a 作为浮游植物参与光合作用的主要色素,采用水色遥感反演技术可获取全球海区叶绿素 a 浓度的时空分布特征,并且基于有限波段的遥感数据可以得到较好的结果。而能否进一步探测更为丰富的色素信息从而识别重要浮游植物类群成为了近十几年海洋光学和水色遥感研究的热点问题^[9-12]。国内外学者建立了基于生物量、光谱信号变化以及生态学规律等三大类浮游植物种群结构的遥感反演模式。经过两轮的比较测试分析^[11-12],科学家们发现,已有的反演模型在“一阶”信号上存在较好的一致性。然而,将模型应用于区域研究时其精度仍遇到很大挑战,其中水色传感器的有限波段一定程度上制约了新方法的研究^[10-12]。

能否通过增加光谱波段来提高浮游植物种群信息的判别精度成为人们关注的一个突破点^[10-14]。鉴

于当前水色传感器波段的限制,已有研究首先基于大量现场观测的高光谱浮游植物吸收系数尝试建立色素组分的估算方法,为进一步应用于水色遥感光谱反演提供重要参考。在化学计量学的发展过程中,吸收光谱法与数学方法相结合来检测浮游植物色素已有很多的文献报道。人们尝试利用不同的数学方法分析浮游植物吸收光谱与色素组成之间的关系,主要包括导数光谱分析法、聚类分析、主成分分析、高斯分解法、经验正交函数分析、偏最小二乘法、神经网络模型等^[15-29]。初步研究发现,根据光谱相似性的原理,浮游植物吸收系数及其导数光谱形状的变化中隐含了粒级结构及典型色素变化信息,可为特定种群估算的关键波段选择提供依据^[15-18,30];通过对实测高光谱数据及其导数光谱数据进行主成分分析可实现对关键色素浓度的定量估算^[15,19-20]。很多科学家采用浮游植物吸收系数的四阶导数光谱实现主要种群的分类识别或色素浓度的估算^[17,21-22]。Bidigare 等^[21]曾基于实测数据分析发现,色素浓度与四阶导数光谱之间具有较强的线性相关特征,二阶导数光谱可用于定性分析色素吸收峰值的分布,但与色素浓度之间相关关系相对于四阶导数光谱较低;Organelli 等^[22]建立了从颗粒物吸收系数的四阶导数光谱推算浮游植物粒级结构的偏最小二乘法模型。二阶导数光谱应用于色素估算或种群识别也有较多的研究报道。Catlett 等^[19]基于浮游植物吸收系数的一阶和二阶导数光谱和关键色素浓度之间的关系,建立了基于主成分分析方法估算关键色素组分(包括 Fuco、Perid、TChl b、19Hex、Allo、Zea 等)的模型。基于分层聚类的方法,Torrecilla 等^[16]、Uitz 等^[18]发现二阶导数光谱可用于识别主要浮游植物种群的信息。将浮游植物

吸收光谱分解为多种色素高斯带叠加的形式,进而从吸收光谱或遥感反射率光谱中反演得到色素浓度的方法在近年来获得了推广应用^[23-28]。我国学者也对基于吸收光谱等光学特性提取藻类色素浓度或种群结构的方法进行了研究^[27,30-33],并尝试将其应用于典型赤潮藻的识别估算^[33]。根据浮游植物的生物光学特性,可知当色素打包效应影响较强时,浮游植物吸收光谱与色素组成之间不是简单的线性关系,而是一种复杂的非线性关系,由此决定了色素组分高光谱反演算法的复杂性和区域性^[4,22]。

作为西太平洋最大的边缘海,南海一直是我国海洋生态系统和生物地球化学过程研究的关键区域。南海有较强的光照条件,但表层营养盐含量贫乏。季风作用在多尺度动力过程中沿水平及径向对营养盐分布进行调整,对南海生态动力过程变化具有重要影响^[34-35],这使得浮游植物分布表现出明显的区域差异和季节特征。针对南海生物光学特性的研究表明,浮游植物是决定南海水体光学特性变化的主要光学组分,其粒径结构和色素组成对浮游植物吸收光谱和水色光谱的影响显著^[36]。基于区域调查数据,国内外学者建立了基于生物量变化的南海浮游植物粒径结构和典型色素的经验模型、多层感知器模型等^[37-39]。本文基于现场观测数据,深入研究了高光谱浮游植物吸收的导数光谱与色素浓度之间的关系,采用偏最小二乘法(简称 PLS 模型)建立了浮游植物关键色素组分的估算模型。

2 数据和方法

2.1 数据的采集和测量

本文采用的数据来自 2006 年至 2015 年南海多个综合调查航次,表 1 为航次信息,其中匹配浮游植物吸收系数和色素浓度的数据一共有 431 组,覆盖了多个季节。航次调查中,采用 Niskin 采水器分别采集标准层深度的海水,并在低压情况下(<16.625 kPa,即 125 mmHg)采用孔径为 $0.7 \mu\text{m}$ 的 Whatman GF/F 滤膜对采集的海水进行过滤,过滤后的滤膜放入冰箱或液氮瓶中保存,用于后续实验室中颗粒物吸收光谱的测量和色素的分析。海水中颗粒物吸收光谱利用可见-紫外分光光度计进行测量,采用了定量滤膜技术的透射法,光谱的波段范围为 $350 \sim 750$ nm,波长分辨率为 1 nm。2006—2008 航次采用的分光光度计型号为美国热电 Helios- γ ,2009 年之后为岛津 UV2550。参比滤膜为在 $0.22 \mu\text{m}$ 过滤海水中浸泡的空白滤膜。测量

后的滤膜用甲醇萃取 90~180 min,以萃取样品滤膜上的色素。进一步利用分光光度计测量非藻类颗粒物的吸收强度,浮游植物的吸收强度则为测量值与非藻类颗粒吸收强度之差。分光光度计直接测量的是光学密度或透过率,光谱吸收系数需进一步计算获得,计算时需要考虑过滤体积、滤膜的有效面积以及光程方法因子。本研究采用 Stramski 等^[40]针对透射法提出的光程放大因子校正公式进行处理。

表 1 2006~2015 年南海航次调查信息表

Table 1 Cruise information in the South China Sea between 2006—2015

Cruise	Period	Number of samples
200609 KFHC	2006.09	24
200708 KFHC	2007.08	27
200808 KFHC	2008.08	14
200909 KFHC	2009.09	48
201004 NSFC	2010.04	89
201212 NSFC	2012.12	97
201308 NSFC	2013.08	37
201506 NSFC	2015.06	95

浮游植物色素组成按照 NASA《海洋光学规范》中的要求进行样品采集,采用高效液相色谱(HPLC)分析技术进行测定,所用仪器为 Waters 液相色谱仪(Waters 1525 Binary HPLC Pump),色谱柱为 Symmetry Shield C8 柱,用二极管阵列(Waters 2996 Photodiode Array Detector)检测信号,采用两相梯度洗脱程序,具体方法可参考文献[41]。实验测量的主要色素名称、简称见表 2,特征色素对应的主要藻群分类可参考文献[8,19]。本文

表 2 文中主要色素名称及缩写

Table 2 Used pigments and their abbreviations

Pigment name	Abbreviation
Chlorophyll a	Chl a
Chlorophyll b	Chl b
Chlorophyll c_1, c_2	Chl c_{1+2}
Chlorophyll c_3	Chl c_3
Divinyl Chlorophyll a	DV Chla
Fucoxanthin	Fuco
Peridinin	Perid
19'-hexanoyloxyfucoxanthin	19Hex
Zeaxanthin	Zea
19'-butanoyloxyfucoxanthin	19But
Alloxanthin	Allo
Diadinoxanthin	Diadino
β -carotene	β caro

参考文献[4]对色素进行分类:总叶绿素 a(TChl a)浓度表示为 Chl a 和 DV Chl a 浓度之和;光合有效类胡萝卜素(PSC)包括 Fuco、Perid、19Hex 和 19But;光保护类胡萝卜素(PPC)主要包括 Allo、Diadino、 β caro 和 Zea。

2.2 色素浓度数据的处理

浮游植物的色素浓度数据处理主要参考 Aiken 等^[42]的方法进行质量控制,分别作如下处理:1)总叶绿素 a 浓度和总辅助色素(AP)浓度(c_{AP} ,表征除了总叶绿素 a 浓度之外的其他色素浓度的总和)之差必须低于总色素(TP)浓度(c_{TP} ,即所有色素浓度的总和)的 30%;2)TChl a 和 AP 的浓度之间线性回归的斜率在 0.6~1.4 之间,且决定系数(R^2)高于 0.7。图 1 为质量控制后 AP 与 TChl a 的浓度之间的线性回归分布图,两者之间线性回归的斜率为 0.867,决定系数为 0.78。对于文中讨论的主要类胡萝卜素(Fuco、19Hex、19But、Diadino 和 Zea),本文剔除了浓度值低于 $0.001 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 的样品。

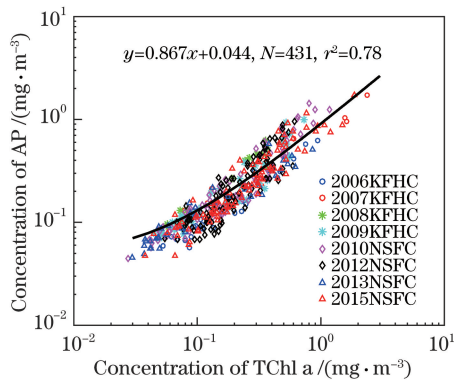


图 1 总叶绿素 a 浓度(TChl a)与辅助色素浓度(AP)的回归关系
Fig. 1 Regression relationship between concentration of TChl a and concentration of accessory pigments (AP)

2.3 光谱数据的处理及 PLS 模型介绍

光谱数据处理过程中,首先对原始浮游植物吸收光谱进行平滑处理,再采用有限差分的方法计算导数光谱。

一阶导数光谱的计算公式为

$$\frac{ds}{d\lambda} \approx \frac{s(\lambda + \Delta\lambda) - s(\lambda - \Delta\lambda)}{2\Delta\lambda}, \quad (1)$$

式中: s 是光谱数据, $\Delta\lambda$ 是所选步长。参考文献[22],本研究选用 $\Delta\lambda = 8 \text{ nm}$ 的步长。二阶以及四阶导数的计算公式可进一步由一阶导数计算公式推导得出^[20,22]。

光谱测量等产生的噪声在导数光谱计算过程中会造成较强的干扰,因此,对浮游植物吸收光谱进行平滑处理是数据预处理中的必要步骤。本研究基于

Matlab 软件比较了滑动窗口和 Savitzky-Golay 滤波两种数据平滑方法,通过改变窗口大小比较了原始光谱和导数光谱的分布特征。经比较分析发现,相对于滑动窗口的平滑方法,采用 Savitzky-Golay 滤波方法,步长设为 21 nm 时,处理得到的原始吸收光谱、二阶和四阶导数光谱峰值相对稳定,既去除了杂乱的噪声又保留了主要的光谱变化信息,且对应波长不会发生平移^[16-18]。

偏最小二乘法是化学计量学中多元校正技术的代表,具有很强的抗干扰能力,因此本研究在 Matlab 平台上建立基于二阶和四阶导数光谱提取色素浓度的偏最小二乘法回归模型。模型训练时采用留一交叉验证法,通过比较模型估测值与实测值之间的相关系数和均方根偏差来选择合适的主成分个数 N ,并对高光谱数据进行降维^[22]。

根据选定的主成分个数,基于建模数据分别将浮游植物吸收系数的二阶导数光谱和四阶导数光谱与对应的色素浓度进行偏最小二乘法回归,获得模型的系数。进一步采用独立的数据进行验证,检验过程中采用比较模型预测值与实测值的均方根偏差(RMSE, R_{MSE} , $\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$)、线性回归的决定系数(R^2)、斜率(a)、截距(b)、预测值中负值的个数(N)、中值相对偏差(MDPD, Δ_{MDPD})以及平均相对偏差(MPD, Δ_{MPD})等指标对模型进行评价。中值相对偏差和平均相对偏差的表达式为

$$\Delta_{MDPD} = \text{median} \left[\frac{\text{abs}(x_{mi} - x_{ei})}{x_{mi}} \right] \times 100\%, \quad (2)$$

$$\Delta_{MPD} = \text{mean} \left[\frac{\text{abs}(x_{mi} - x_{ei})}{x_{mi}} \right] \times 100\%, \quad (3)$$

式中: x_{mi} , x_{ei} 分布代表实测值与预测值。

本文选取 2006—2013 年间 7 个南海航次累计 336 个匹配数据点,约占全部数据集的 78%,作为 PLS 模型的训练数据集。训练数据集中调查站点几乎覆盖了整个南海海域,从近海岸富营养的浅水区至远海岸寡营养盐的深水区;同时调查时间涵盖了不同季节。建模过程中采用 2015 年 6 月航次收集的 95 个匹配数据点作为独立的验证数据集,约占全部数据集的 22%。此外,本文还分别采用其他月份(4 月、8 月和 9 月、12 月等)采集的数据用于比较,进一步对模型的季节差异进行了讨论。

3 分析与讨论

3.1 浮游植物色素浓度的统计分布特征

表 3 给出了南海主要色素浓度的变化范围,并

同时给出了对数转化后辅助色素与海水总叶绿素 a 浓度(TChl a)之间的相关系数(表 3)。由于大部分调查站点位于南海的开阔大洋水体,海水生物量相对较低,TChl a 的浓度在 $0.027\sim 2.317\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间变化,平均值仅为 $0.262\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,绝大部分水体的 TChl a 浓度在 $1.0\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$ 以内。总叶绿素 a 浓度中 DV Chl a 的浓度贡献占 23.88%,这表明南海外海水体中原绿球藻具有广泛的分布。辅助色素的浓度含量相对较低,测量所得的部分辅助色素均低于检测限,与 TChl a 之间的相关程度存在明显差异。

表 3 不同色素浓度的统计分布及对数转化后辅助色素与总叶绿素 a 浓度之间的相关系数 R ($N=431$)

Table 3 Statistical distribution of different pigments, and the correlation coefficients R of log-transformed concentrations between accessory pigments and total Chlorophyll a ($N=431$)

Pigment	Range	Mean	Standard deviation	Correlation coefficient R
TChl a	[0.027,2.317]	0.262	0.261	1.00
PSC	[0.007,1.029]	0.087	0.115	0.87
PPC	[0.011,0.442]	0.091	0.047	0.58
19But	[0.001,0.205]	0.020	0.029	0.78
Fuco	[0.001,0.888]	0.027	0.072	0.78
19Hex	[0.004,0.209]	0.035	0.036	0.84
Diadino	[0.001,0.070]	0.007	0.008	0.72
Zea	[0.001,0.355]	0.062	0.034	0.03

光合有效类胡萝卜素(PSC)浓度的分布范围是 $0.007\sim 1.029\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,平均值为 $0.087\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,与 TChl a 表现出一致的变化特征,对数相关系数 R 高达 0.87,即随着总叶绿素 a 浓度的增大,水体中光合有效类胡萝卜素的含量也逐渐增大。光保护类胡萝卜素(PPC)的浓度在 $0.011\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$ 到 $0.442\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间分布,平均值为 $0.091\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,与 TChl a 之间的相关性较弱, R 仅为 0.58。19Hex 是 PSC 的主要贡献者,其浓度在 $0.004\sim 0.209\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间分布,平均值为 $0.035\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,对 PSC 的贡献占比平均为 40.4%,与 TChl a 具有较好的相关性, R 为 0.84。Fuco 和 19But 是 PSC 的另外两个主要组分,其浓度的平均值分别为 $0.027\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$ 和 $0.020\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,对 PSC 的平均贡献占比分别为 30.9%和 23.37%,Fuco、19But 表现出与 TChl a 之间较好的相关性, R 均为 0.78 左右。Zea 是南海外海水体的主要辅助色素之一,其浓度平均值为

$0.062\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,是贫营养水体中 PPC 的主要贡献者,其平均贡献占比为 68.2%,但 Zea 与 TChl a 浓度之间没有表现出明显的相关特征。Diadino 是 PPC 的另外一个贡献者,平均贡献占比相对较低,仅为 8.2%,浓度平均值为 $0.007\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$,但与 TChl a 之间的相关性较强(R 为 0.72)。

3.2 导数光谱与浮游植物色素浓度之间的关系分析

不同类别浮游植物色素的吸收光谱之间有明显差异^[4],这种差异可进一步通过导数光谱较为清晰地展示出来,能精确确定吸收峰的位置,并可进一步用于定量分析^[15-19]。图 2 为代表性样品的吸收光谱及其导数光谱分布:一阶导数光谱为零的位置对应色素峰值所在的波段,主要在 440,573,591,640,674 nm 附近;二阶导数光谱的波谷主要在 440,464,493,590,616,636,674 nm 附近,对应主要色素吸收峰;四阶导数光谱对于色素峰的分​​离效果相对更为清晰,其主要峰值分别位于 410,440,464,493,523,539,590,616,637,674 nm 附近,这与 Chase 等^[26]、Hoepffner 和 Sathyendranath^[23] 等应用于浮游植物吸收光谱高斯分解的中心波长相近。相对于

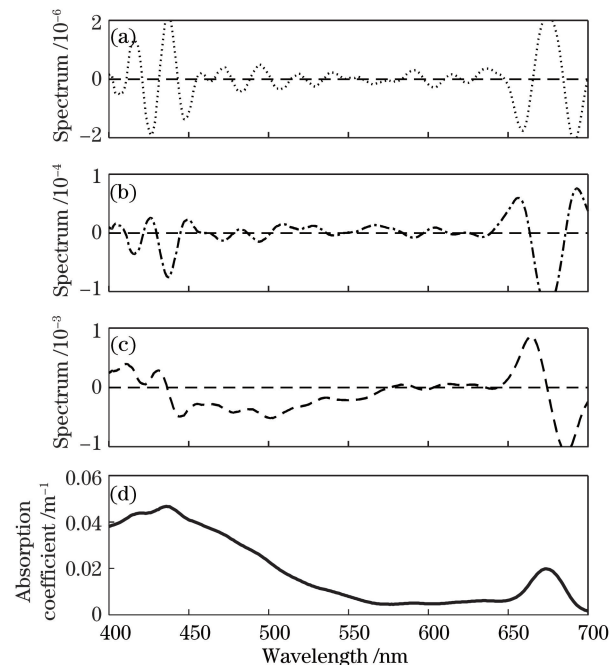


图 2 浮游植物吸收光谱及其导数光谱的示例。(a)四阶导数光谱;(b)二阶导数光谱;(c)一阶导数光谱;(d)吸收光谱系数

Fig. 2 Representative spectral absorption coefficients and their derivatives. (a) 4th derivative spectrum; (b) 2nd derivative spectrum; (c) 1st derivative spectrum; (d) absorption coefficient

一阶导数光谱,二阶和四阶导数光谱对于色素峰的分离效果相对较好。

为了分析不同色素组分与浮游植物吸收光谱之间的关系,本研究分别对色素浓度与吸收系数的一阶、二阶和四阶导数光谱之间的相关性进行分析。如图 3(a)(c)(e)可见,三大类色素(TChl a, PSC, PPC)与导数光谱相关系数的光谱分布具有一定的相似性和差异。TChl a 和 PSC 与导数光谱的相关系数 R 相对较高(最高值可达 0.8),且光谱分布较为类似;PPC 与导数光谱的相关系数 R 相对较低。以一阶导数为例,光谱分布差异主要在 450~600 nm 范围内,与 PPC 的主要吸收峰值范围相对应。本文进一步选取了 5 种典型的类胡萝卜素(19But, Fuco, 19Hex, Diadino, Zea)进行分析,如

图 3(b)(d)(f)所示,讨论了导数分析对特征色素吸收峰的分离程度,其中 19But、Fuco 和 19Hex 都可归为 PSC, Diadino 和 Zea 归为 PPC,其中 Zea 是 PPC 的主要贡献者。根据 Bricaud 等^[4]给出的结果,可得 19But、Fuco 和 19Hex 的吸收主要表现在 450~550 nm 范围内,其峰值大概在 490 nm 和 520 nm 附近,吸收峰较宽,但是由图 3(b)(d)(f)可以看出,Fuco 与导数光谱之间的相关系数分布与 19But 和 19Hex 存在一定的差异,并且该差异在一阶、二阶和四阶导数光谱内均存在。Zea 作为南海海区 PPC 色素的主要贡献者,与其他三种色素之间的差异更大,与导数光谱之间的相关系数较弱,且光谱分布存在明显的不同。同属于 PPC 的 Diadino 色素浓度与导数光谱之间的相关性与 Fuco 色素的分

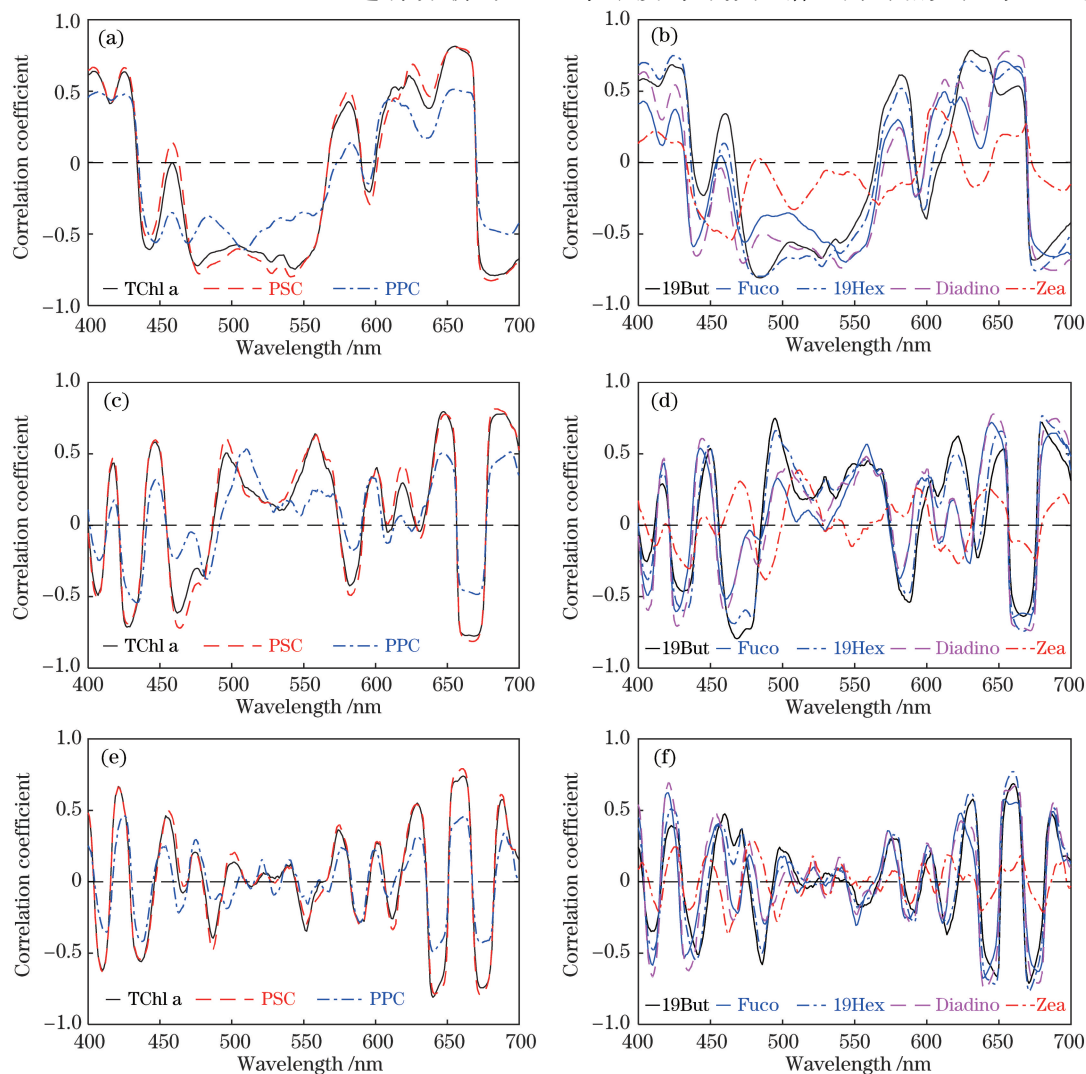


图 3 色素浓度与浮游植物吸收系数不同导数光谱之间相关系数的分布图。(a)(b)一阶导数光谱;
(c)(d)二阶导数光谱;(e)(f)四阶导数光谱

Fig. 3 Correlation coefficients between selected phytoplankton pigments concentration and derivative spectra.

(a)(b) 1st derivative spectra; (c)(d) 2nd derivative spectra; (e)(f) 4th derivative spectra

布结果较为类似。本文的光谱分析结果与 Catlett 等^[19]类似,不同色素浓度与二阶、四阶导数光谱之间均表现出一定的相关性,且不同类别的色素存在光谱差异。

3.3 偏最小二乘回归模型的建立及验证

3.3.1 模型的建立

为了最大限度地提取光谱变化信息,实现对不同色素成分的光学估算,本研究分别采用浮游植物吸收系数的二阶和四阶导数光谱进行偏最小二乘法(PLS)回归模型的构建,建模数据来自 2006 年至 2013 年的调查航次,共 336 组,另外采用 2015 年调查航次的 95 组数据进行实验验证。

基于建模数据的二阶导数光谱进行 PLS 回归,采用留一交叉验证的方法,改变所用的主成分个数($N=2\sim 15$),比较模型预测值与实测值之间的均方根偏差(RMSE)及相关系数(R)随主成分个数的变化特征。根据较低 RMSE 和较高相关系数 R 的原则,确定每种色素估算所需要的主成分个数在 3~8 之间^[22]。表 4 给出了利用训练数据集对色素浓度与浮游植物吸收系数的二阶导数光谱建立的 PLS 模型回归的参数分布。可见,不同种类色素浓度对二阶导数光谱变化的贡献有明显差异,PLS 回归中的因变量(色素浓度)的累积解释率 η_y 和自变量(导数光谱)的累积解释率 η_x 也有所差异。对于

某些色素如 TChl a、PSC、Fuco、19Hex、19But、Diadino 等的解释率相对较高, η_y 在 63%~84% 之间;同时这些色素的估算结果相对较好,预测值与实测值之间线性相关的斜率(a)较高,在 0.617~0.761 之间;决定系数(R^2)较高,在 0.57~0.74 之间分布。而对于另外一些色素如 PPC、Zea,PLS 回归算法对色素浓度变量的解释率相对较低, η_y 分别为 47.33% 和 39.18%,回归模型的估算精度较低,线性拟合斜率(a)分别为 0.413 和 0.315,截距(b)也明显较高。

采用同样的处理方法对浮游植物吸收光谱的四阶导数与色素浓度之间的关系进行 PLS 回归分析(表 4),选择合适的主成分个数来保证较低的偏差,建立 PLS 回归模型。由表 4 可见,选用的主成分个数在 2~12 之间,与输入二阶导数光谱的建模效果相比表现出类似的特征,即对某些色素如 TChl a、PSC、Fuco、19Hex、19But、Diadino 等的建模效果较优,对因变量的解释率 η_y 在 61.5% 以上,预测值与实测值之间线性拟合斜率在 0.604~0.718 之间;同样对于另外一些色素如 PPC、Zea 的估算效果相对较差,对色素浓度变化的解释率 η_y 分别为 52.55% 和 43.45%,预测值与实测值之间具有相对较大的偏差。综合建模数据比较,可见基于二阶和四阶导数光谱回归的结果较为类似。

表 4 基于二阶及四阶导数光谱建立的 PLS 模型的参数分布

Table 4 PLS parameters of 2nd derivative spectrum and 4th derivative spectrum models

PLS model	Pigment	N	$R_{MSE} / (\text{mg} \cdot \text{m}^{-3})$	$\eta_x / \%$	$\eta_y / \%$	R^2	a	b
Based on 2 nd derivative spectrum	TChl a	7	0.129	87.92	79.27	0.72	0.761	0.060
	PSC	4	0.054	82.69	79.11	0.74	0.748	0.019
	PPC	4	0.034	82.23	47.33	0.38	0.413	0.052
	19But	3	0.017	80.15	66.52	0.63	0.646	0.006
	Fuco	5	0.035	84.62	83.76	0.72	0.725	0.006
	19Hex	3	0.023	79.49	63.27	0.57	0.617	0.013
	Diadino	8	0.004	89.86	80.58	0.72	0.745	0.002
Based on 4 th derivative spectrum	Zea	4	0.027	82.22	39.18	0.28	0.315	0.044
	TChl a	6	0.139	75.27	75.94	0.68	0.716	0.071
	PSC	5	0.057	72.36	77.62	0.70	0.718	0.022
	PPC	12	0.036	89.42	52.55	0.30	0.392	0.054
	19But	5	0.018	73.88	66.35	0.59	0.626	0.006
	Fuco	5	0.040	69.85	78.20	0.64	0.647	0.008
	19Hex	2	0.022	58.22	61.50	0.58	0.604	0.013
	Diadino	6	0.004	75.04	76.45	0.67	0.711	0.002
	Zea	12	0.028	89.44	43.45	0.20	0.274	0.046

3.3.2 模型的验证

采用 2015 年航次观测数据,对基于二阶和四阶

导数光谱建立的 PLS 回归模型进行独立验证,如图 4、图 5 和表 5,给出了模型预测值与实测数据之

间比较的统计参数。

基于二阶导数光谱的 PLS 模型对 TChl a、PSC、19But、19Hex、Diadino 等色素的估算效果较好(图 4), 预测值与实测值之间线性相关的决定系数(R^2)在 0.73 以上, 预测值与实测数据较为均匀地分布在 1:1 线上, 线性相关斜率(a)在 0.543~0.714 之间, 平均相对偏差(MPD)在 37.83%~62.03%之间, 中值相对偏差低于 31%。对于 Fuco

色素, 预测值与实测值之间的线性相关程度较高, R^2 达到 0.88, 但是模型得到的无效值(即小于 0)比例相对较高, 导致模型计算的平均相对偏差(118.31%)较高。模型对于 PPC 和 Zea 的估算精度相对较低, 预测值与实测值之间线性相关的决定系数(R^2)分别为 0.54 和 0.59, 线性相关斜率(a)也较低, 分别为 0.296 和 0.283, MPD 分别为 31.41% 和 114.26%。

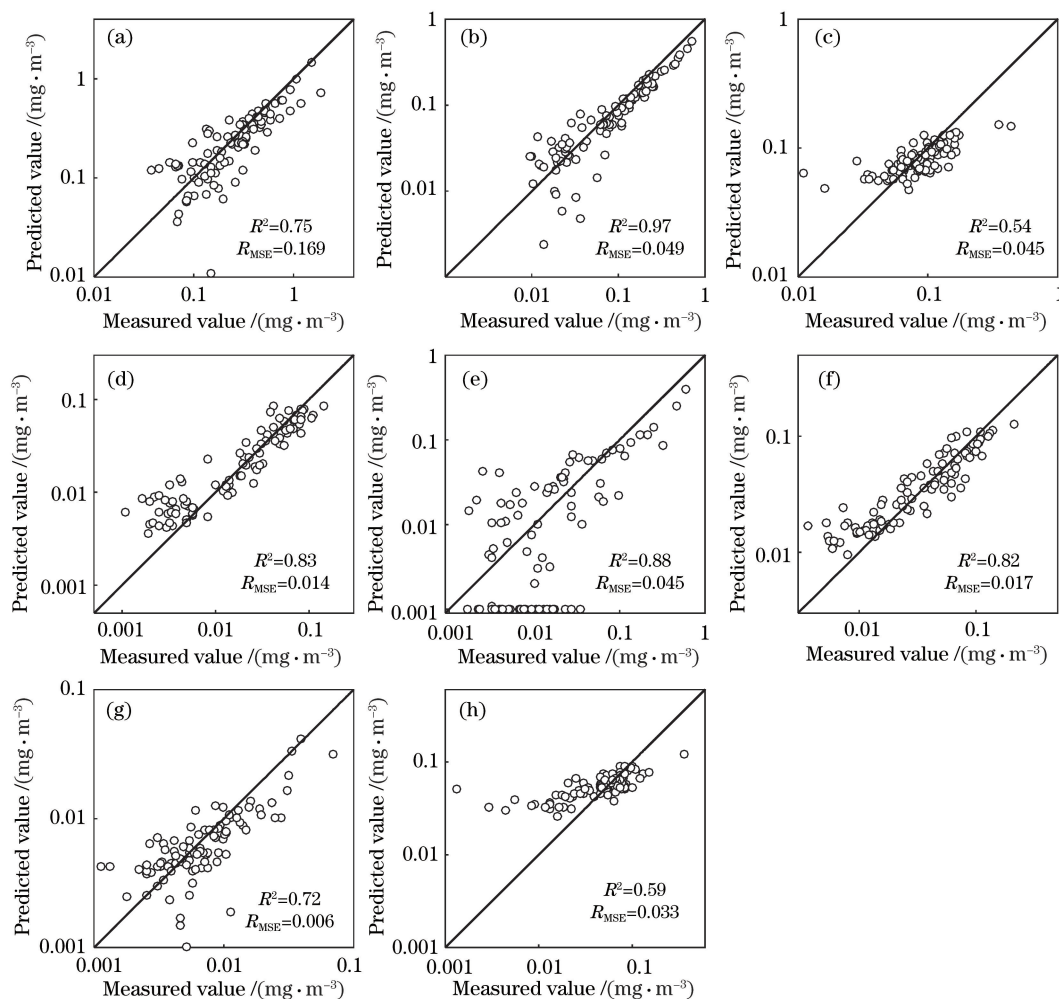


图 4 基于二阶导数光谱建立的 PLS 回归模型估算得到的色素浓度值与实测值的对比, 图中黑色实线为 1:1 线。

(a) TChl a; (b) PSC; (c) PPC; (d) 19But; (e) Fuco; (f) 19Hex; (g) Diadino; (h) Zea

Fig. 4 Comparison between the predicted value from the PLS model based on 2nd derivative spectrum and the measured pigment concentrations for the validation data set, in which the 1:1 ratio is shown as a solid line. (a) TChl a; (b) PSC; (c) PPC; (d) 19But; (e) Fuco; (f) 19Hex; (g) Diadino; (h) Zea

基于四阶导数光谱的 PLS 模型针对色素浓度的估算结果呈现出类似的分布特征(图 5 和表 5), 但总体的估算效果稍差, 表现为较低的 R^2 和斜率 a , 均方根偏差 RMSE 和平均相对偏差 MPD 也稍高。与已有的研究报道相比^[15,23], 本文针对色素类群或特种色素浓度的估算表现出类似的特征, PPC 和 Zea 的估算效果相对较弱, 预测值与实测值之间线性相关的决定

系数 R^2 相对较低, 但是从多数文献中采用的中值相对偏差 MDPD 来看, 模型对 PPC 和 Zea 的估算与文献中报道的结果具有一定的可比性。除了色素 Fuco 之外, 对于二阶导数光谱的估算结果, 得到的中值相对偏差在 21%~31%之间; 对于四阶导数光谱的估算结果来说, 该参数在 21%~36%之间。由此证实了采用导数光谱变化提取色素浓度的可行性。

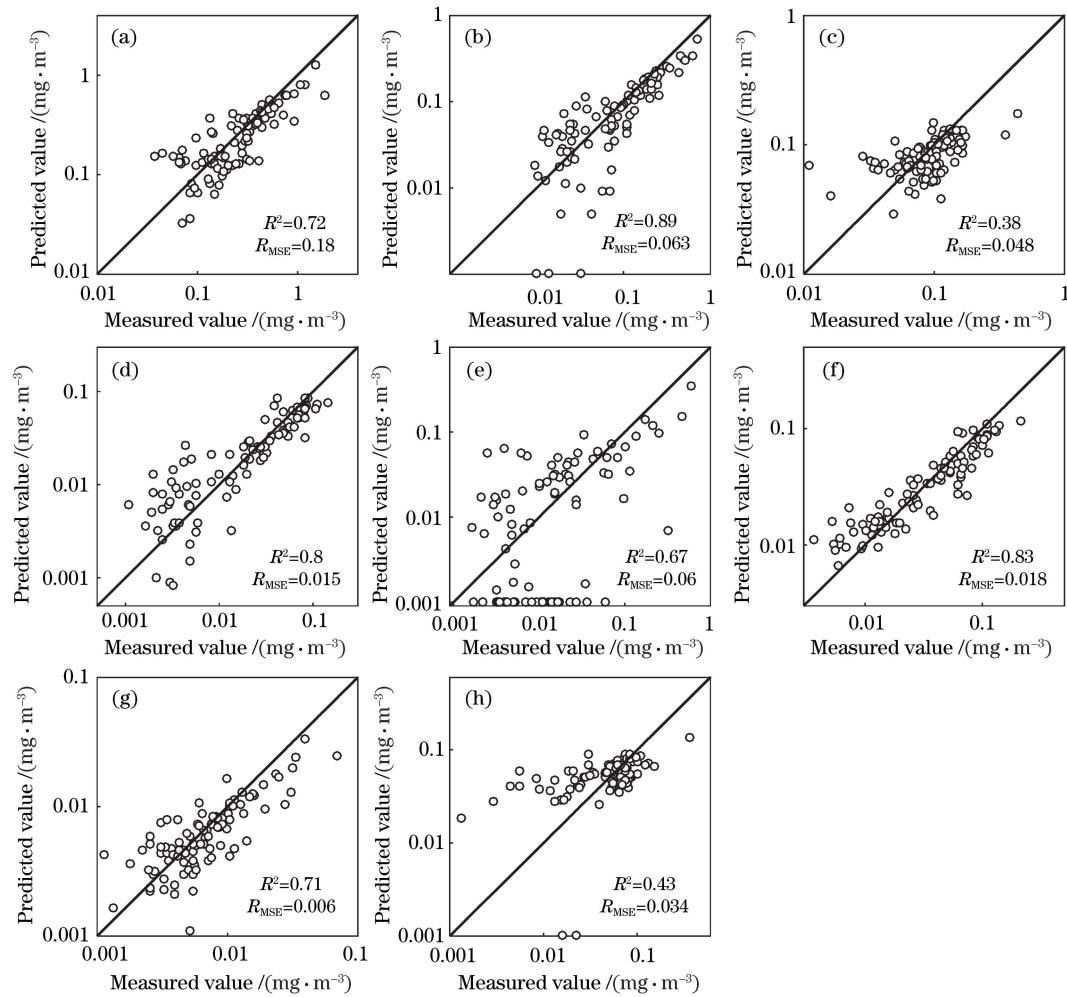


图 5 基于四阶导数光谱建立的 PLS 回归模型估算的色素浓度值与实测值之间的对比,黑色实线为 1:1 线。

(a) TChl a; (b) PSC; (c) PPC; (d) 19But; (e) Fuco; (f) 19Hex; (g) Diadino; (h) Zea

Fig. 5 Comparison between the predicted value from the PLS model based on 4th derivative spectrum and the measured pigment concentrations for the validation data set, in which the 1:1 ratio is shown as a solid line. (a) TChl a;

(b) PSC; (c) PPC; (d) 19But; (e) Fuco; (f) 19Hex; (g) Diadino; (h) Zea

表 5 基于二阶和四阶导数光谱的 PLS 模型的验证结果比较

Table 5 Validation results for the PLS model based on the 2nd and 4th derivative spectra

PLS model	Pigment	R^2	a	b	$R_{MSE} / (\text{mg} \cdot \text{m}^{-3})$	N	$\Delta_{MDPD} / \%$	$\Delta_{MPD} / \%$
PLS model based on 2 nd derivative spectrum	TChl a	0.75	0.615	0.074	0.169	0	24.99	37.83
	PSC	0.97	0.714	0.011	0.049	0	25.83	36.00
	PPC	0.54	0.296	0.056	0.045	0	21.85	31.41
	19But	0.83	0.704	0.007	0.014	0	30.95	62.03
	Fuco	0.88	0.558	0.006	0.045	31	75.01	118.31
	19Hex	0.82	0.699	0.012	0.017	0	27.03	42.87
	Diadino	0.73	0.543	0.002	0.006	1	30.72	37.83
	Zea	0.59	0.283	0.040	0.033	0	28.69	114.26
PLS model based on 4 th derivative spectrum	TChl a	0.72	0.563	0.089	0.180	1	27.29	43.65
	PSC	0.89	0.636	0.020	0.063	3	33.22	51.14
	PPC	0.38	0.289	0.056	0.048	0	23.79	37.18
	19But	0.80	0.688	0.007	0.015	1	32.13	70.45
	Fuco	0.67	0.415	0.010	0.060	33	80.94	153.48
	19Hex	0.83	0.669	0.009	0.018	1	21.65	33.50
	Diadino	0.71	0.461	0.003	0.006	0	24.08	35.88
	Zea	0.43	0.290	0.038	0.034	2	35.64	103.47

3.4 模型估算精度的影响因素讨论

3.4.1 PLS 回归模型与基于海水总叶绿素 a 浓度的经验模型比较

已有很多的研究发现浮游植物辅助色素浓度与总叶绿素 a 浓度之间存在一定的共变性。如: Trees 等^[43]的研究数据表明总叶绿素 a 浓度与辅助色素浓度之间存在很好的对数-线性关系,其斜率约为 0.93; Pan 等^[44]基于美国东北沿岸海域的数据发现, TChl a 与 TChl c、胡萝卜素(Caro)、Diadino、Fuco 等色素之间存在较高的相关系数,但是与其他色素比如 Perid、Zea 等之间的相关系数相对较低; Chase 等^[25]基于 Tara 航次在地中海、大西洋、赤道太平洋等全球多个海域数据建立了由遥感叶绿素 a 浓度推算 TChl b、Chl c_{1+2} 、PPC 等色素的经验关系模型($C_p(j) = A_j \times C_{TChl a}^B$, $C_p(j)$ 表示第 j 种色素的浓度, $C_{TChl a}$ 表示 TChl a 的浓度), 该模型表现出较好的估算精度。

本文基于南海多年实测数据分析发现部分辅助色素浓度与 TChl a 之间表现出较好的相关性, 如表 3 所示。TChl a 与 Fuco、Diadino、19But、19Hex 等色素之间存在较为一致的变化特征, 对数转换后线性相关系数分别为 0.78、0.72、0.78 和 0.84, 与

表 6 基于总叶绿素 a 浓度的经验模型系数 A, B 以及模型验证结果比较

Table 6 Empirical model's coefficients (A, B) based on TChl a and the validation results

Pigment	A	B	R^2	a	b	$R_{MSE} / (\text{mg} \cdot \text{m}^{-3})$	$\Delta_{MPD} / \%$	$\Delta_{MPD} / \%$
PSC	0.372	1.144	0.83	0.808	0.013	0.057	34.91	41.82
PPC	0.149	0.310	0.28	0.236	0.075	0.049	20.62	42.17
19But	0.063	0.805	0.44	0.366	0.013	0.025	63.85	118.41
Fuco	0.172	1.912	0.59	0.656	0.009	0.058	48.25	63.89
19Hex	0.099	0.701	0.75	0.583	0.016	0.021	33.35	56.19
Diadino	0.026	0.977	0.84	0.742	0.002	0.004	24.17	28.44
Zea	0.079	0.128	0.00	0.009	0.066	0.044	26.78	212.20

总叶绿素 a 浓度与浮游植物吸收系数之间具有密切的相关性, 尤其表现为对吸收系数强度的“一阶”影响^[4], 因此 PSC、Fuco、19Hex、Diadino 等色素表现为较好的估算效果, 目前也有模型选择从总叶绿素 a 浓度或遥感反射率光谱波段比值直接推算 PSC、Fuco 等色素浓度^[25, 38, 44]。然而对于与总叶绿素 a 浓度共变性较差的色素, 尤其是 PPC、Zea, 从总叶绿素 a 浓度推算的模型精度相对较低; 相比较而言, 基于浮游植物吸收系数的导数光谱变化特征对该类色素浓度的估算表现出一定的优越性。

3.4.2 二阶导数光谱和四阶导数光谱的估算结果比较

导数光谱分析方法在浮游植物种群结构的高光

Zea 的相关性最弱 ($R = 0.03$), 这与 Pan 等^[38]的研究较为类似。TChl a 与光合有效类胡萝卜素 (PSC) 之间的相关性最强, 线性相关系数达到了 0.87。TChl a 与 PPC 之间的相关性较弱, 相关系数仅为 0.58 左右, 这主要是因为南海海域 Zea 色素是 PPC 的主要贡献者。这一点与 Chase 等^[25]的研究有较为明显的差异。

根据不同色素与总叶绿素 a 浓度之间的相关特征, 本文也尝试建立经验关系模型, 以实现针对不同色素的估算, 表 6 和图 6 给出了采用同样数据集的经验模型参数和验证结果。对比可见, 采用经验模型基于总叶绿素 a 浓度对部分色素 (如 PSC、Fuco、19Hex、Diadino) 的估算结果较好, 具有相对较低的偏差和相对较高的线性相关性; 与基于导数光谱的 PLS 回归模型估算效果类似。经验模型对某些色素 (如 PPC、19But 和 Zea) 的估算效果较差, 相应的线性回归的斜率值和 R^2 明显偏低 (表 6)。经验模型估算 Fuco 色素浓度时能避免负值的出现, 相应的中值相对偏差和平均相对偏差稍低, 但 RMSE 仍相对偏高, 且线性回归的 R^2 低于导数光谱 PLS 回归的结果。

谱反演中发挥了重要的作用, 许多科学家曾讨论一阶、二阶或四阶导数光谱用于光学识别主导种群的优越性^[15-22]。本文对比了采用二阶和四阶导数光谱建立的 PLS 回归模型对不同色素浓度的估算效果, 在选取最佳主成分个数的情况下, 两者表现出较为类似的估算精度。如表 5 和图 6 所示, 对于本文讨论的部分色素 (如 TChl a、PSC 和 Fuco 等), 基于二阶导数光谱的 PLS 回归结果稍优于四阶导数光谱的估算结果, 线性回归的斜率和决定系数 R^2 相对较高, 偏差相对较低; 对于 PPC、19Hex、Diadino 和 Zea 色素, 两者的效果较为类似。

3.4.3 不同色素估算结果的差异分析

本文利用偏最小二乘法从二阶和四阶导数光谱

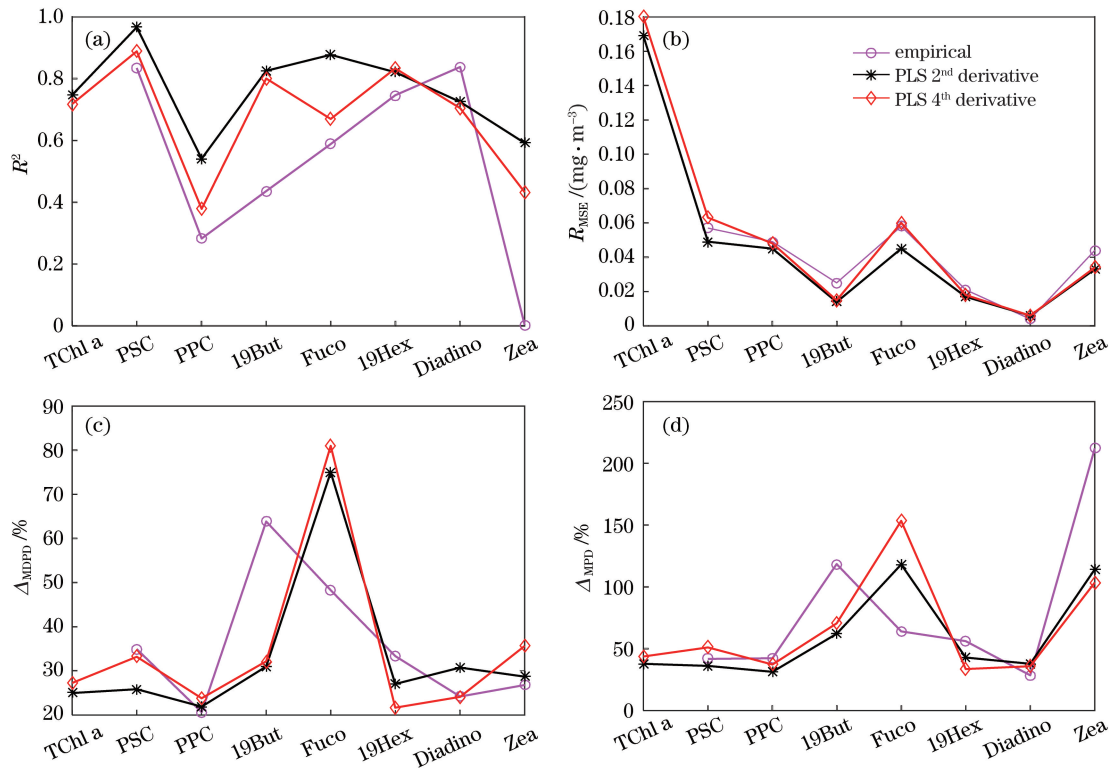


图 6 基于二阶和四阶导数光谱建立的 PLS 回归模型与基于海水总叶绿素 a 浓度的经验模型的验证结果比较。

(a) 预测值与实测值线性相关的决定系数 R^2 ; (b) 均方根偏差; (c) 中值相对偏差; (d) 平均相对偏差

Fig. 6 Comparison of the validation results between the PLS regression model based on the 2nd and 4th derivative spectra and the empirical model based on total TChl a concentration. (a) Determination coefficient R^2 for linear regression between the predicted and measured pigment concentrations; (b) RMSE; (c) median percent difference; (d) mean percent difference

中提取浮游植物色素浓度变化的信息,旨在综合考虑基于浮游植物吸收系数强度和光谱形状的变化,建立关系模型。虽然二阶和四阶导数光谱都能较好地实现主要色素吸收峰的分离,但是对于每一种色素浓度的估算效果有所差异。不同种类色素浓度变化与浮游植物吸收光谱之间的共变关系可能是影响色素浓度估算精度的关键因素,如图 3 所示。

综合分析来看,不同种类色素与浮游植物吸收系数的导数光谱之间的相关性存在明显差异(图 3),光谱变化对 TChla、PSC、19But、Fuco、19Hex、Diadino 等色素的相关程度明显高于色素 PPC、Zea。据此建立 PLS 回归模型,由模型计算得到的各色素精度表现明显不同。如表 5 和图 6 所示,PLS 回归模型对 TChla、PSC、19But、19Hex、Diadino 等色素的估算精度相对较高,表现出较高的 R^2 和较低的偏差;对于 Fuco 色素 PLS 回归得到的 R^2 较高,表征了估算趋势的一致性,但是由于现场实测 Fuco 色素浓度普遍较低,预测值中负值的出现导致了相对较高的偏差;PLS 回归模型对 PPC 和

Zea 的估算精度相对较低。Catlett 等^[19]的研究结果中也发现 Zea 色素的估算效果相对要低于对 Fuco、19Hex 等色素。Bracher 等^[20]曾尝试采用主成分分析获取遥感反射率光谱的特征量提取色素浓度信息,也发现类似的特征,即对于 PPC 和 Zea 的估算精度明显低于 TChl a、PSC、Fuco、19But、19Hex 等的估算结果。Pan 等^[38]曾建立遥感反射率光谱波段比值与辅助色素浓度(包括 Fuco 和 Zea)之间的关系,同时也发现 Fuco 与光谱波段比值之间具有显著的相关关系,而 Zea 的关系要相对分散。如何精确获取 Zea(或 PPC)色素的信息可能要依赖于多个环境参数的耦合分析,比如 Pan 等^[38]的模型中加入了海表温度的参数。基于本文的实测数据分析发现,在南海调查海域,Zea 是光保护色素(PPC)的主要组分,其贡献平均为 73%;Zea 在外海水体中具有较高的浓度和贡献比,随着海水中生物量(TChla 浓度)的增加和水体温度的降低,Zea 与 TChla 或 PPC 的比值都呈现出明显减小的趋势,与已有的研究报道相一致。单位生物量的光保护色素

PPC 的变化要受到海水温度、光照强度、光衰减特征等多种环境因素的影响^[3-4],这可能是造成基于吸收光谱的估算模型精度较低的主要原因。

3.4.4 季节差异对估算结果的影响分析

航次调查季节或数据测量方法的差异可能也会对模型估算精度产生一定影响。虽然本研究对南海实测数据进行了较高标准的质量控制,仍然发现海水总叶绿素 a 浓度与典型波段吸收系数之间关系分布存在一定的航次或季节差异。本文数据主要来源于南海开阔海域的调查,色素浓度较低,浮游植物吸收光谱的主成分与色素浓度的关系分析中忽略了色素打包效应造成的影响。为了比较 PLS 回归模型反演效果的季节差异,本文尝试基于二阶导数光谱,采用不同月份航次调查数据进行模型的独立验证。图 7 为分别采用 2010 年 4 月航次($N=85$)、2006—2009 及 2013 年 8 月和 9 月调查航次($N=150$)、2012 年 12 月航次($N=97$)和 2015 年 6 月调查航次($N=95$)作为验证集得到的估算效果的比较。由

图 7 可见,采用 6 月数据进行验证的结果表现相对较好,具有相对较高的决定系数 R^2 和较小的相对偏差。12 月份数据验证得到的预测值与实测值之间线性相关的 R^2 值较低,表明 12 月份的预测值与实测值存在相对较大的离散性。通过比较 RMSE 和相对偏差可以发现,不同月份验证的模型效果对于不同色素也存在一定差异,比如采用 8、9 月份验证得到的结果显示出 TChl a 的 RMSE 和相对偏差较高;采用 4 月份验证的 Fuco 色素的平均相对偏差 MPD 相对较高;采用 12 月份验证的 PSC 和 Diadino 色素的相对偏差较高。模型估算结果所呈现出的季节差异可能会受到多种因素的影响,包括不同季节南海浮游植物的种群差异^[45]、不同环境要素影响下浮游植物的生理状态等^[46]。色素结构或粒径大小所反映出来的种群差异也会影响到浮游植物吸收光谱特征及其与色素浓度之间的相关关系,从而影响基于吸收光谱的色素浓度估算精度^[22]。

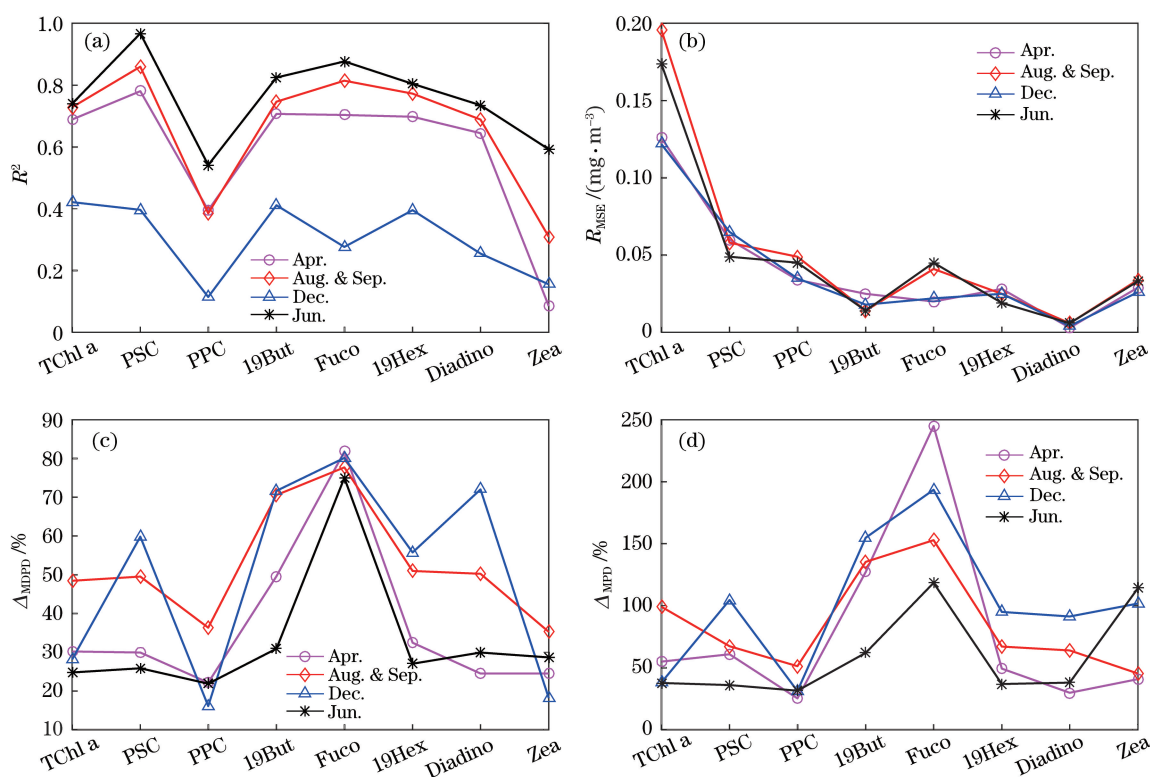


图 7 采用不同月份的调查数据对基于二阶导数光谱建立的 PLS 回归模型进行独立验证的结果比较。

(a) 预测值与实测值线性相关的决定系数 R^2 ; (b) 均方根偏差; (c) 中值相对偏差; (d) 平均相对偏差

Fig. 7 Validation results of the PLS regression model based on the 2nd derivative spectrum and data collected in different months. (a) Determination coefficient R^2 for linear regression between the predicted and measured pigment concentrations; (b) RMSE; (c) median percent difference; (d) mean percent difference

4 结 论

利用光学遥感手段实现浮游植物种群结构的识别和定量反演是近些年来水色遥感的热点研究问题,其中浮游植物色素组成与光学参数之间的关系是研究的关键。本研究采用南海海域多年航次调查数据,采用导数光谱分析方法,对浮游植物吸收系数与色素浓度之间的关系进行了相关性分析,并进一步建立了基于偏最小二乘法的色素浓度回归模型。

研究结果表明,导数光谱分析可有效实现关键色素吸收峰的分离,二阶导数光谱和四阶导数光谱与色素浓度之间均表现出一定的相关特征,进一步建立的 PLS 回归模型对主要色素种类 TChl a、PSC 和类胡萝卜素 (19But、19Hex、Fuco、Diadino) 等表现出较高的估算精度,基于二阶导数光谱估算的结果稍优于四阶导数光谱。与基于总叶绿素 a 浓度估算辅助色素的经验模型相比,PLS 回归模型针对某些色素如 PSC、Fuco、19Hex、Diadino 等色素估算效果类似,而对于 19But、PPC、Zea 等则表现出一定的优势。导数光谱在色素高光谱吸收信号分离中发挥了一定作用,基于偏最小二乘的主成分回归考虑到了多个主成分变化的信息,从而提升了色素的估算精度。不同种类色素的浓度与浮游植物吸收强度和光谱变化之间的相关特征及其所表征出来的季节差异,可能是影响模型估算效果的主要因素,应进一步在更多时空覆盖的海洋光学调查数据基础上,对采用吸收系数高光谱估算浮游植物色素浓度或种群结构的算法进行完善并推广应用。近年来,高光谱分辨率水色卫星如 PACE (Plankton, Aerosol, Cloud, and ocean Ecosystem) 卫星已列入美国国家航天局发射计划,其目的之一就是监测海洋中浮游植物群落结构的时空变化特征。本文基于高光谱的浮游植物吸收数据估算色素浓度的方法探索,对于实现南海浮游植物种群结构的高光谱水色卫星遥感反演具有参考意义。

参 考 文 献

- [1] 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.
- [2] Gao H F, Jiao N Z. Research progress on marine phytoplankton biomass and community composition determined from algal pigment analyses [J]. *Marine Sciences*, 1997, 21(3): 51-54.
- [3] Jeffrey S W, Wright S W, Zapata M. Microalgal classes and their signature pigments [M] // Roy S, Llewellyn C, Egeland E S, et al. *Phytoplankton Pigments*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011: 3-77.
- [4] Bricaud A, Claustre H, Ras J, et al. Natural variability of phytoplanktonic absorption in oceanic waters: influence of the size structure of algal populations [J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2004, 109(C11): C11010.
- [5] Vidussi F, Claustre H, Manca B B, et al. Phytoplankton pigment distribution in relation to upper thermocline circulation in the eastern Mediterranean Sea during winter [J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2001, 106(C9): 19939-19956.
- [6] 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.
- [7] Yao P, Yu Z G, Mi T Z. The chemotaxonomy of marine phytoplankton [J]. *Marine Environmental Science*, 2003, 22(1): 75-80.
- [8] 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.
- [9] International Ocean Colour Coordinating Group. Phytoplankton functional types from space [R] // Sathyendranath S. *Reports of the International Ocean-Colour Coordinating Group*. Dartmouth, Canada: IOCCG, 2014: 15.
- [10] 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.
- [11] Brewin R J W, Devred E, Sathyendranath S, et al. Model of phytoplankton absorption based on three size classes [J]. *Applied Optics*, 2011, 50(22): 4535-4549.
- [12] Kostadinov T S, Cabré A, Vedantham H, et al. Inter-comparison of phytoplankton functional type

- phenology metrics derived from ocean color algorithms and Earth System Models [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2017, 190: 162-177.
- [13] 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.
- [14] Wolanin A, Soppa M, Bracher A. Investigation of spectral band requirements for improving retrievals of phytoplankton functional types [J]. *Remote Sensing*, 2016, 8(10): 871.
- [15] Isada T, Hirawake T, Kobayashi T, et al. Hyperspectral optical discrimination of phytoplankton community structure in Funka Bay and its implications for ocean color remote sensing of diatoms [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2015, 159: 134-151.
- [16] Torrecilla E, Stramski D, Reynolds R A, et al. Cluster analysis of hyperspectral optical data for discriminating phytoplankton pigment assemblages in the open ocean [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2011, 115(10): 2578-2593.
- [17] 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.
- [18] Uitz J, Stramski D, Reynolds R A, et al. Assessing phytoplankton community composition from hyperspectral measurements of phytoplankton absorption coefficient and remote-sensing reflectance in open-ocean environments [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2015, 171: 58-74.
- [19] 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.
- [20] Bracher A, Taylor M H, Taylor B, et al. Using empirical orthogonal functions derived from remote-sensing reflectance for the prediction of phytoplankton pigment concentrations [J]. *Ocean Science*, 2015, 11(1): 139-158.
- [21] Bidigare R R, Morrow J H, Kiefer D A. Derivative analysis of spectral absorption by photosynthetic pigments in the western Sargasso Sea [J]. *Journal of Marine Research*, 1989, 47(2): 323-341.
- [22] Organelli E, Bricaud A, Antoine D, et al. Multivariate approach for the retrieval of phytoplankton size structure from measured light absorption spectra in the Mediterranean Sea (BOUSSOLE site) [J]. *Applied Optics*, 2013, 52(11): 2257-2273.
- [23] Hoepffner N, Sathyendranath S. Effect of pigment composition on absorption properties of phytoplankton [J]. *Marine Ecology Progress Series*, 1991, 73: 11-23.
- [24] 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: Oceans*, 1993, 98(C12): 22789-22803.
- [25] 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.
- [26] Chase A, Boss E, Zaneveld R, et al. Decomposition of *in situ* particulate absorption spectra [J]. *Methods in Oceanography*, 2013, 7: 110-124.
- [27] Ye H P, Zhang B, Liao X H, et al. Gaussian decomposition and component pigment spectral analysis of phytoplankton absorption spectra [J]. *Journal of Oceanology and Limnology*, 2019, 37(5): 1542-1554.
- [28] 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.
- [29] 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.
- [30] 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.
- [31] Zhang F, Guo J J, Li Z G, et al. Preliminary testing of chlorophyll-a concentration on offshore surface based on oceanographic lidar [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(5): 051201.
张锋, 郭金家, 李志刚, 等. 基于海洋激光雷达的近海表层叶绿素 a 浓度测量初步测试 [J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(5): 051201.
- [32] Yu X Y, Zhang Y J, Yin G F, et al. Feature wavelength selection of phytoplankton fluorescence spectra based on partial least squares [J]. *Acta Optica*

- Sinica, 2014, 34(9): 0930002.
- 余晓娅, 张玉钧, 殷高方, 等. 基于偏最小二乘回归的藻类荧光光谱特征波长选取[J]. 光学学报, 2014, 34(9): 0930002.
- [33] 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.
- [34] Ning X, Chai F, Xue H, et al. Physical-biological oceanographic coupling influencing phytoplankton and primary production in the South China Sea [J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 2004, 109(C10): C10005.
- [35] 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.
- [36] Wang G F, Cao W X, Xu D Z, et al. Effects of size structure and pigment composition of algal population on phytoplankton absorption coefficients in the South China Sea [J]. Acta Oceanologica Sinica, 2007, 29(1): 38-48.
- 王桂芬, 曹文熙, 许大志, 等. 南海北部藻类粒级结构及色素成分对浮游植物吸收系数的影响[J]. 海洋学报(中文版), 2007, 29(1): 38-48.
- [37] Zhou W, Cao W X, Wang G F, et al. Retrieval of pigment concentrations from the absorption spectra of phytoplankton by multilayered perceptrons[J]. Journal of Tropical Oceanography, 2010, 29(2): 46-51.
- 周雯, 曹文熙, 王桂芬, 等. 用多层感知器模型由吸收光谱反演浮游植物色素[J]. 热带海洋学报, 2010, 29(2): 46-51.
- [38] Pan X J, Wong G T F, Ho T Y, et al. Remote sensing of picophytoplankton distribution in the northern South China Sea [J]. Remote Sensing of Environment, 2013, 128: 162-175.
- [39] 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): 502-514.
- 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): 502-514.
- [40] Stramski D, Reynolds R A, Kaczmarek S, et al. Correction of pathlength amplification in the filter-pad technique for measurements of particulate absorption coefficient in the visible spectral region [J]. Applied Optics, 2015, 54(22): 6763-6782.
- [41] 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.
- [42] Aiken J, Pradhan Y, Barlow R, et al. Phytoplankton pigments and functional types in the Atlantic Ocean: a decadal assessment, 1995—2005 [J]. Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography, 2009, 56(15): 899-917.
- [43] 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.
- [44] 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.
- [45] 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.
- [46] Xie Y Y, Huang B Q, Lin L Z, et al. Photosynthetic parameters in the northern South China Sea in relation to phytoplankton community structure [J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 2015, 120(6): 4187-4204.