

基于奇异值分解技术的近海水体硅藻浓度反演模型研究

陈宇航¹, 孙德勇^{1,2,3}, 陈薇薇¹, 樊杰¹, 王胜强^{1,2,3}, 张海龙^{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. 江苏省海洋环境监测工程技术研究中心, 江苏 南京 210044)

摘要: 浮游植物是水体生态系统中的重要初级生产者, 其中硅藻贡献海洋初级生产力约 40%, 因此估算硅藻浓度对了解海洋生物地球化学过程和生态系统演变至关重要。本文基于 2016 年 6 月黄渤海和 2018 年 7 月黄渤海航次实测色素浓度数据集, 利用 CHEMTAX 软件获取硅藻浓度信息; 之后, 结合实测遥感反射率数据, 利用奇异值分解方法, 构建硅藻浓度反演模型。检验结果表明: 模型的决定系数为 0.80 ($P < 0.001$), 平均绝对百分比误差和中值误差分别为 58.62% 和 39.12%, 模型适用度较高; 经过卫星验证, 该模型适用于 GOCI (Geostationary Ocean Color Imager) 传感器 ($R^2 = 0.78$, $P < 0.001$, 平均绝对百分比误差和中值误差分别为 44.43% 和 35.55%)。将模型应用于 2020 年 6 月份 GOCI 月平均数据, 其硅藻浓度空间分布趋势与前人研究一致。本研究成果可为近海水体硅藻生物量的遥感估算研究提供技术支持。

关键词: 硅藻浓度; 奇异值分解; CHEMTAX; GOCI; 中国近海

中图分类号: P733.3 文献标识码: A 文章编号: 1000-3096(2022)09-0025-11

DOI: 10.11759/hyhx20220218002

浮游植物以其细胞形态、生物地理化学功能和元素需求等一系列特征在调节海洋生物地球化学中起着关键作用^[1]。通过对浮游植物进行探测, 可以刻画出海洋水体浮游植物种群结构及分布特征, 这将为深入理解海洋中浮游植物功能多样性提供重要支撑, 为揭示海洋生物地球化学过程提供科学依据。中国近海浮游植物种群结构复杂多样, 主要的优势藻种为硅藻 (*Diatoms*)、甲藻 (*Dinoflagellate*)、绿藻 (*Chlorophytes*) 和定鞭金藻 (*Prymnesiophytes*) 等^[2-6]。不同浮游植物种群呈现出不同的功能性差异, 研究浮游植物种群生物量, 掌握浮游植物种群结构特征, 这对研究海洋生态动力学和碳、硅等多种元素循环等均具有重要意义^[7-10]。

针对中国近海浮游植物种群生物量, 很多学者进行过一定研究。王俊等^[11]通过分析 1992 年至 1993 年渤海生态基础调查资料, 发现渤海共有浮游植物 31 属 70 种, 其中硅藻门的种类和数量占绝对优势; 孙军等^[7]基于渤海浮游植物群落的分析和模拟资料, 研究发现硅藻和甲藻的占比最高; 赵越等^[12]利用流式细胞仪和形态学观察等方法对 2015 年黄海及东海的浮游植物样品进行处理分析, 发现硅藻是黄海海域的特征藻种; 陈楠生等^[13]研究分析了 1957—

2019 年间渤海 46 次航次调查数据, 结果显示渤海浮游植物的生物多样性很高, 在已鉴定的 140 个赤潮物种中, 硅藻类占一半以上。现有研究表明, 硅藻的生物量在中国近海浮游植物种群生物量中拥有较大的占比。

硅藻也是海洋食物链的重要组成部分。在海洋富营养化的情况下, 硅藻生物量会剧增, 从而极易引起赤潮, 对海洋生态环境造成严重破坏。同时, 硅藻还会产生有害的次生代谢物, 使得有毒物质在海洋中富集, 最终通过食物链对捕食动物的发育甚至是生命造成巨大威胁^[14-15]。由于其独特的主导地位

收稿日期: 2022-2-18; 修回日期: 2022-4-22

基金项目: 国家自然科学基金项目(42176179, 41876203, 42176181, 42106176); 江苏省基础研究计划(自然科学基金)项目(BK20211289, BK20210667); 自然资源部空间海洋遥感与应用重点实验室开放基金(202102005); 江苏省研究生研究与实践创新项目(KYCX21_0975)

[Foundation: National Natural Science Foundation of China, Nos. 42176179, 41876203, 42176181, 42106176; Jiangsu Basic Research Program (Natural Science Foundation) Project, Nos. BK20211289, BK20210667; Open Fund of Key Laboratory of Spatial Marine Remote Sensing and Application, Ministry of Natural Resources, No. 202102005; Jiangsu Province Postgraduate Research and Practice Innovation Project, No. KYCX21_0975]

作者简介: 陈宇航(1998—), 福建省莆田市人, 硕士研究生, 主要研究方向为海洋光学遥感, E-mail: 570274708@qq.com; 孙德勇(1984—), 通信作者, 主要从事水体光学、水色遥感, E-mail: sundeyong@nuist.edu.cn

与功能优势,硅藻已成为多个种群中的研究重点,对硅藻生物量的反演研究成为当务之急。

目前研究硅藻生物量的方法大多基于实测采集数据。例如,利用实验室光学显微镜、流式细胞术等获取采集水体样本中的硅藻丰富度信息;利用高效液相色谱法(High Performance Liquid Chromatography, HPLC)求得现场采集水体样本的色素浓度信息,并通过 CHEMTAX 软件或诊断色素分析法获得硅藻浓度信息^[16-21]。这些测量方法获取的硅藻浓度较精确,但实测数据获取难度大,且无法长时序、大范围地对硅藻进行观测研究。随着卫星遥感的快速发展,遥感技术在探测宏观大范围 and 长时序变化的目标对象上,具有得天独厚的优势。Xi 等^[22]基于诊断色素分析法获得硅藻浓度信息,利用奇异值分解方法(Singular Value Decomposition, SVD)对星地匹配遥感反射率(Remote sensing reflectance, R_{rs})数据进行处理,探究硅藻浓度信息与 R_{rs} 之间的潜在关联,获取全球硅藻浓度时空分布特征。现有反演方法在一定程度上可以获得硅藻浓度信息,但主要是针对大洋水体的硅藻浓度研究。中国近海水体成分复杂,宏观大洋水体尺度上的硅藻浓度反演模型未必适用于区域性的近海水体,而目前专门针对中国近海水体硅藻浓度的遥感反演研究仍属空白,估算模型的缺失阻碍了中国近海硅藻生物量的卫星反演,更无法实现周期性对硅藻生物量的时空监测。

为此,针对渤海和北黄海水体,本文基于2016年6月黄渤海和2018年7月黄渤海航次实测数据,首先利用 CHEMTAX 软件,将色素浓度数据转化为对应的藻种浓度数据,提取硅藻浓度信息;之后,利用 SVD,提取标准化后的反射率光谱特征,将 SVD 后得到协方差矩阵,探究硅藻浓度与矩阵之间的潜在联系,构建硅藻浓度反演模型;将模型应用于2020年的6月份 GOCI(Geostationary Ocean Color Imager)数据,获取硅藻浓度月平均分布产品;并与已有硅藻浓度反演模型进行定性探讨比较。

1 数据与方法

1.1 研究区域概况

本文研究区域是渤海和北黄海。渤海位于 37°N~41°N、117°E~121°E 之间,是我国最北部的半封闭内海,仅在东部以渤海海峡与北黄海相通。受黄河、

辽河与海河等河流影响,大量泥沙冲积推挤海床,造成海底平坦。渤海平均深度只有 18 m,丰富的营养物质经过河流进入渤海,为浮游植物提供良好的生存条件^[23]。北黄海是一个半封闭海域,被山东半岛、辽东半岛和朝鲜半岛围绕,受黄海暖流、季节性黄海冷水团和河流淡水的共同作用影响,其生态环境复杂多样^[24]。

1.2 数据获取与处理

本研究所采用的是2016年6月黄渤海和2018年7月黄渤海航次的实测数据,主要包括遥感反射率 R_{rs} 数据以及基于 HPLC 方法获取的色素浓度数据,通过质量控制后参与模型构建的实测航次数据具体信息与采样的航次站点分布分别如表 1 与图 1 所示。

表 1 现场航次及其实验参数信息

Tab. 1 Details of the parameters collected from the cruises

航次时间	测量参数	样本数量
2016-06-29—2016-07-18	HPLC 色素浓度、 R_{rs}	42
2018-07-24—2018-08-08	HPLC 色素浓度、 R_{rs}	31

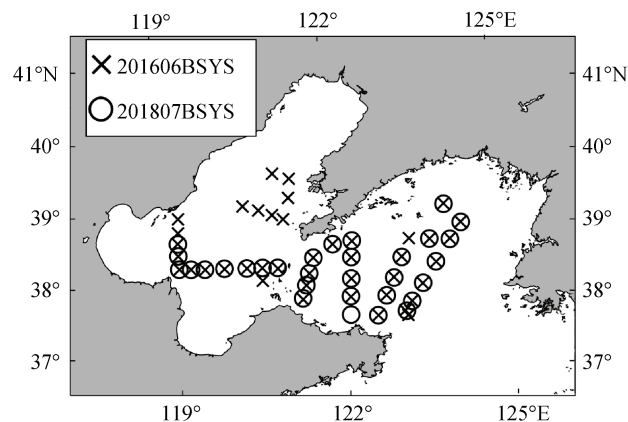


图 1 研究区域及航次站点信息

Fig. 1 Map of the study area with the different cruise stations

1.2.1 遥感反射率数据获取与处理

现场测量 R_{rs} 数据是由美国 ASD 公司生产的 FieldSpec4Hi-ResNG 地物光谱仪测量获得,它可以测量的光谱波长介于 350~2 500 nm 之间,其中在 700 nm 以内的光谱分辨率是 3 nm。在进行作业的过程中,选择天气晴朗的环境,使用 ASD 测量目标地物完毕后使用 ASD 自带的 RS3 软件对采集到的数据进行处理。本航次所采用的光谱范围在 400~700 nm 之间,对数据进行重采样的采样间隔为 1 nm。为保证模型的准确性,剔除实测 R_{rs} 数据中小于零异常值,

经过处理后的 R_{rs} 光谱如图 2 所示, 其中不同颜色的光谱曲线代表不同站点的 R_{rs} 光谱。

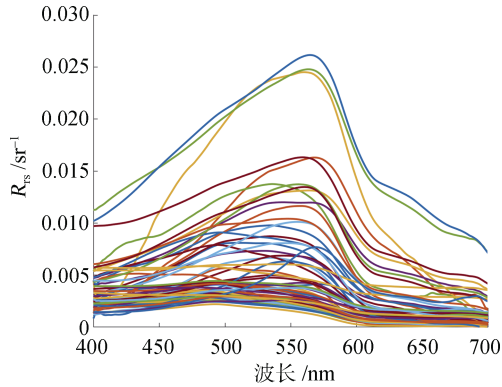


图 2 实测 R_{rs} 光谱图

Fig.2 R_{rs} spectra collected from the cruises

1.2.2 浮游植物种群浓度数据获取与处理

参照 Aiken 的质量控制方法^[25]: 1) 剔除总叶绿素 a 浓度和辅助色素浓度之差大于两者之和的 30%; 2) 剔除 12 种辅助色素中浓度小于 $0.001 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 的数目小于 6 个的样本^[26]。在航次所采集色素浓度基础上, 利用 CHEMTAX (CHEMical TAXonomy, CHEMTAX) 软件获取浮游植物种群浓度。CHEMTAX 软件可通过由每种浮游植物不同色素的比例组成的初始比率矩阵, 将色素信息转化为对应的藻种浓度信息。本研究的 CHEMTAX 软件计算所得藻种及其藻种包含色素信息是参考 Aiken 等^[25]和 Zhang 等^[26]的研究, CHEMTAX 软件计算是使用 Pan 等^[27]和 Sun 等^[28]研究中的初始色素比率矩阵。在 CHEMTAX 软件计算时, 本研究定义 64 个矩阵, 每个矩阵各藻种和对应藻种色素之间的比率均是初始比率矩阵乘以 0.65~1.35 之间的随机数。在获取的 64 组种群浓度中, 选取 6 组种群浓度均方根误差 (R_{MSE}) 最低的平均值作为最终藻种浓度, 并且为保证后续模型的准确性, 只保留 CHEMTAX 软件计算所得大于 $0.005 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 的藻种浓度。

1.2.3 GOCI 卫星数据获取与处理

本研究使用的卫星数据为 GOCI 数据, GOCI 是韩国航天局于 2009 年发射的 COMS (Communication Ocean and Meteorological Satellite) 卫星上搭载的水色遥感器, 它可以覆盖我国渤海、黄海以及东海部分区域, 空间分辨率约为 500 m, 时间分辨率可达 1 h, 每天可连续进行 8 次观测, 并设有 6 个可见光波段 (412 nm、443 nm、490 nm、555 nm、660 nm

和 680 nm)。

为研究渤海和北黄海硅藻的长时序变化特征, 本研究收集的卫星数据均来自于韩国海洋卫星中心 (KOSC, Korea Ocean Satellite Center, http://kosc.kiost.ac.kr/eng/p10/kosc_p11.html)。从 KOSC 下载 2020 年 6 月 1 日至 2020 年 6 月 30 日 Level-1B 级日产品, 并使用 GOCI 官方自带数据处理软件 GDPS (GOCI Data Processing Solutions) 进行预处理, 获得 Level-2P 级 R_{rs}^{sat} 日产品, 并计算得到 R_{rs}^{sat} 月平均产品。

1.3 精度指标

本研究通过决定系数 (R^2)、均方根误差 (R_{MSE})、平均绝对百分比误差 (M_{APE}) 和中值误差 (M_E) 来对建模效果进行精度校验, 相应的计算公式如下所示:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_{oi} - \bar{y}_o)(y_{pi} - \bar{y}_p)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_{oi} - \bar{y}_o)^2 \sum_{i=1}^N (y_{pi} - \bar{y}_p)^2}}, \quad (1)$$

$$R_{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_{oi} - y_{pi})^2}, \quad (2)$$

$$M_{APE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_{oi} - y_{pi}}{y_{oi}} \right| \times 100\%, \quad (3)$$

$$M_E = \text{Median} \left| \frac{y_{oi} - y_{pi}}{y_{oi}} \right| \times 100\%, \quad (4)$$

式中, y_{oi} 为第 i 个实测硅藻浓度, y_{pi} 为第 i 个预测硅藻浓度, \bar{y}_o 为实测硅藻浓度平均值, \bar{y}_p 为预测硅藻浓度平均值, N 为样品数, 并利用留一交叉验证法验证模型精度。

2 硅藻浓度反演模型开发

利用 SVD, 可以提取浮游植物 R_{rs} 特征, 进而获取浮游植物色素或种群生物量信息, 这种方法已经被初步应用于色素浓度反演模型的构建^[29-30]。本研究基于 SVD, 提取标准化后的反射率光谱特征, 利用 SVD 后的协方差矩阵与 CHEMTAX 软件计算的硅藻浓度进行线性拟合, 建模流程如图 3 所示。

首先将实测 R_{rs} 数据作标准化处理: 用实测 R_{rs} 数据减去平均实测 R_{rs} 值, 之后除以实测 R_{rs} 的标准差, 提取标准化后的 R_{rs} 数据中与 GOCI 相同的 6 个波段数据, 记为矩阵 X 。矩阵 X 根据公式(5)进行 SVD 后得到 3 个矩阵: PCs (左奇异值向量矩阵 U)、EOFs (右奇异值向量矩阵 V)、奇异值矩阵 Σ 。

$$X = U \Sigma V^T, \quad (5)$$

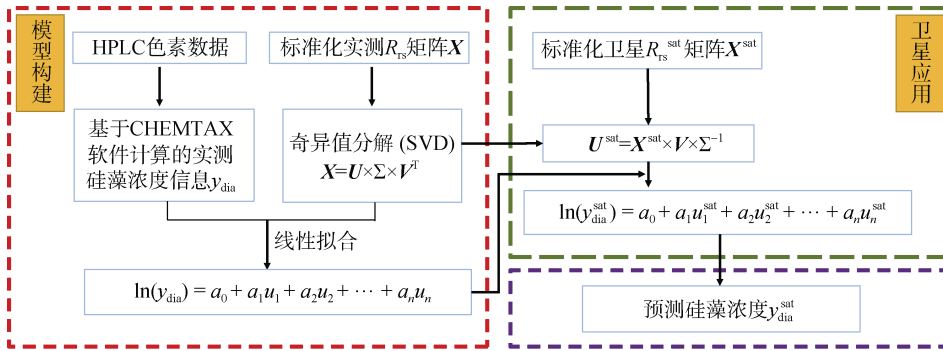


图3 硅藻反演模型构建与卫星应用流程

Fig. 3 Schematic flowchart of building the diatom concentration prediction model

式中, V 为 N 行 N 列矩阵; U 为 M 行 N 列矩阵; Σ 为 N 行 N 列矩阵, 是矩阵 X 在对角线上的奇异值, 并按递减顺序排列, 其中 M 为样品数, N 为波段数。将 CHEMTAX 计算的硅藻浓度取对数, 结合公式(6)与协方差矩阵 U 进行线性拟合。本研究使用留一交叉验证法(Leave-One-Out Cross Validation)进行建模, 即每次使用 $N-1$ 个样品数建模, 留下 1 个作为验证点, 循环 N 次建模, 最后取模型的平均作为最终模型。

$$\ln(y_{\text{dia}}) = a_0 + a_1u_1 + a_2u_2 + \dots + a_nu_n, \quad (6)$$

式中, y_{dia} 为硅藻浓度, a_0 为截距, a_1, a_2, \dots, a_n 为回归系数, u_1, u_2, \dots, u_n 为矩阵 U 中列向量的前 n 个元素。这里引入赤池信息量准则(AIC)来决定 n 的取值, 以此来寻找最优拟合^[29-30]。

将 GOCI 的 $R_{\text{rs}}^{\text{sat}}$ 数据标准化处理, 得到矩阵 X^{sat} , 根据公式(7)将 X^{sat} 投影到 V 上来获取 U^{sat} , 利用公式(8)进行线性合成, 即可得到硅藻反演浓度 $y_{\text{dia}}^{\text{sat}}$, 反演流程如图 3 所示。

$$U^{\text{sat}} = X^{\text{sat}} \times V \times \Sigma^{-1}, \quad (7)$$

式中, X^{sat} 为 GOCI 卫星标准化后 $R_{\text{rs}}^{\text{sat}}$ 数据, V 为实测数据 SVD 后矩阵 V^T 的转置矩阵, Σ 为实测数据 SVD 后奇异值矩阵的逆矩阵。

$$\ln(y_{\text{dia}}^{\text{sat}}) = a_0 + a_1u_1^{\text{sat}} + a_2u_2^{\text{sat}} + \dots + a_nu_n^{\text{sat}}, \quad (8)$$

式中, a_0 为模型截距, a_1, a_2, \dots, a_n 为模型回归系数, $u_1^{\text{sat}}, u_2^{\text{sat}}, \dots, u_n^{\text{sat}}$ 为矩阵 U^{sat} 中列向量的前 n 个元素, n 与建模时一致。

3 结果与分析

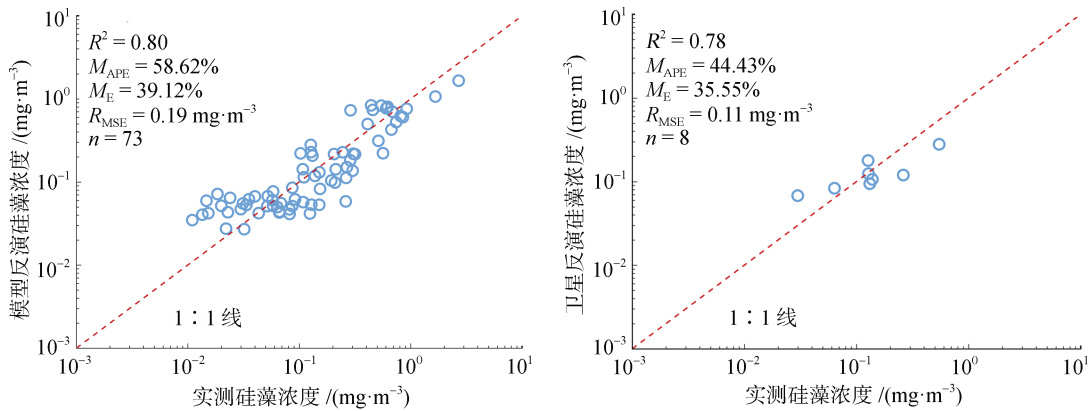
3.1 硅藻浓度反演模型验证

基于硅藻浓度反演模型, 反演得到对应站点处的硅藻浓度信息。图 4(a)是实测硅藻浓度与反演硅藻浓度之间的散点对比图, 中间的红色虚线为 1:1 线。

从图中可以看出, 实测硅藻浓度和反演硅藻浓度相关性较高(决定系数 $R^2=0.80, P<0.001$), 散点均匀地分散在 1:1 线两侧, M_{APE} 为 58.62%, M_E 为 39.12%, R_{MSE} 为 $0.19 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。基于实测 R_{rs} 数据, 通过与 GOCI 匹配获得卫星 $R_{\text{rs}}^{\text{sat-mp}}$ 数据(时间窗口为 $\pm 3 \text{ h}$ 、空间窗口为 $\pm 0.01^\circ \times 0.01^\circ$), 得到实测硅藻浓度与匹配卫星 $R_{\text{rs}}^{\text{sat-mp}}$ 数据反演得到的硅藻浓度之间的散点对比图。如图 4(b)所示, 其中 R^2 为 $0.78(P<0.001)$ 、 M_{APE} 为 44.43%, M_E 为 35.55%, R_{MSE} 为 $0.11 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。匹配的卫星 $R_{\text{rs}}^{\text{sat-mp}}$ 数据反演硅藻浓度模型反演值与实测硅藻浓度之间拟合程度较高, 这表明本研究构建的硅藻浓度反演模型具有良好的适用性。

3.2 硅藻浓度反演模型示范应用

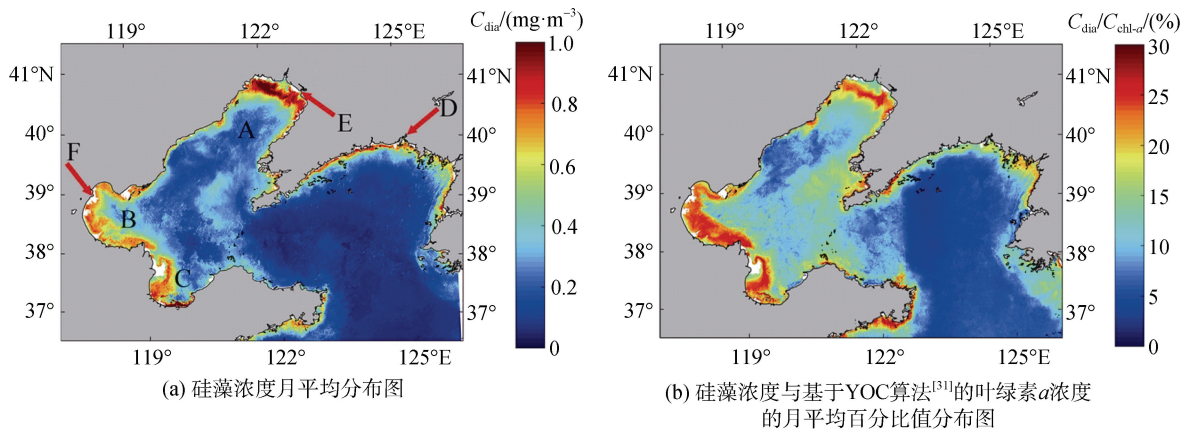
考虑到建模所用的实测航次为夏季, 因此将本文建立的硅藻浓度反演模型应用于 2020 年 6 月份 GOCI 卫星 Level-2 级 $R_{\text{rs}}^{\text{sat}}$ 月平均产品, 获取 2020 年 6 月渤海和北黄海的硅藻浓度月平均分布图(图中多处空白区域是由于 GOCI 中 R_{rs} 产品缺测造成), 如图 5a 所示。整体上, 渤海硅藻浓度明显高于北黄海。对于渤海海域, 辽东湾、渤海湾、莱州湾, 硅藻浓度整体保持在同一水平, 约 $0.4 \sim 1.0 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。硅藻浓度高值主要位于辽河和海河等河流入海口及沿岸海域, 约 $0.9 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 以上; 随着离岸距离的增加, 硅藻浓度呈递减趋势, 在海盆中心部分水域硅藻浓度达到最低值, 约 $0.3 \sim 0.4 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。对于北黄海海域, 近岸水域的硅藻浓度较高, 北黄海中心绝大部分海域, 硅藻浓度相对较低, 约 $0.1 \text{ mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。基于 2020 年 6 月 GOCI $R_{\text{rs}}^{\text{sat}}$ 月平均数据, 通过 YOC(The Yellow Sea Large Marine Ecosystem Ocean Color Work Group, YOC)模型^[31]获得相应的叶绿素 a 渤海与北黄海浓度空间分布, 进一步获取硅藻浓度与叶绿素 a 浓度占比(如图 5b 所示)。可以发现, 硅藻浓度与叶绿素 a 浓度百



(a) 基于实测 R_{rs} 数据反演硅藻浓度之间的散点对比图 (b) 基于星地匹配 R_{rs}^{sat-mp} 数据反演硅藻浓度之间的散点对比图

图 4 实测硅藻浓度分别与基于实测 R_{rs} 数据反演硅藻浓度和基于星地匹配 R_{rs}^{sat-mp} 数据反演硅藻浓度之间的散点对比图 (图中坐标轴已用 \lg 表示), 图中红色虚线为 1 : 1 线

Fig. 4 Scatter comparison plots between the measured diatom concentrations and the retrieved diatom concentration based on measured R_{rs} data and based on satellite-ground matched R_{rs}^{sat-mp} data. The red dotted line is a 1 : 1 line



(a) 硅藻浓度月平均分布图

(b) 硅藻浓度与基于 YOC 算法^[31]的叶绿素 a 浓度的月平均百分比分布图

图 5 2020 年 6 月渤海与北黄海的硅藻浓度月平均分布图、硅藻浓度与基于 YOC 算法^[31]的叶绿素 a 浓度的月平均百分比分布图

Fig. 5 Monthly average spatial distribution of diatom concentrations, percentage of *diatoms*, and chlorophyll a concentration derived from YOC^[31] in the Bohai Sea and the North Yellow Sea in June 2020

注: A) 辽东湾; B) 渤海湾; C) 莱州湾; D) 鸭绿江入海口; E) 辽河入海口; F) 海河入海口

分比值在近岸较高, 可达 30%, 随着离岸距离增加而降低。渤海远岸的百分比值高于北黄海远岸, 分别在 12% 与 5% 左右。

4 讨论

4.1 硅藻浓度空间分布的潜在因素分析

就上述反演得到的 2020 年 6 月渤海和北黄海水体硅藻浓度的空间分布而言, 整体上, 硅藻浓度的分布呈现出近岸浓度高、离岸浓度低的趋势特点, 与前人研究一致^[32-34]。海水温度、盐度以及营养盐等是影响浮游植物空间分布的重要因素。其中, 营养盐的作用更显著^[35-36]。在众多浮游植物种群中, 硅藻偏

爱在低温、高营养盐的水环境中生存^[37], 而近岸海域水深较浅, 携带大量营养盐的地表径流与海水能够充分混合, 使得河口区营养物质较为丰富, 并且水流逐渐变缓, 水体浊度降低, 有利于硅藻等浮游植物的生长繁殖^[38], 因此可能造成硅藻浓度较高。随着离岸距离的增加, 海水的深度增大, 营养物质的丰度不及近岸水域, 所以硅藻浓度也逐渐降低。

渤海的硅藻浓度整体上高于北黄海, 这可能是由于渤海整体是一个近封闭内海, 受海河、黄河和辽河等陆源输入的影响较大, 河流冲淡水带来了丰富的营养物质与海水进行交汇, 为硅藻的生长提供了良好条件^[11, 35, 39]。相较于渤海, 北黄海受陆源输入

的影响比较小,同时又具备低盐度、高营养的渤海沿岸水与高盐度、低营养的黄海水,所以可能导致硅藻浓度相对于渤海较低^[24]。

4.2 硅藻浓度反演模型的合理性和局限性分析

近年来,许多学者对浮游植物种群生物量有专门的探究^[9, 40-42],但目前准确计算浮游植物各种群生物量仍然是个严峻的挑战。在水色遥感中,太阳辐射光进入水中经过浮游植物等水体组分散射后,其中一部分离开水面被搭载在卫星的传感器所接收,所以通过 R_{rs} 可以获取浮游植物信息^[43-45]。由于多维度数据集难以提取其特征信息,而 SVD 方法可以通过降低数据维度来寻找描述数据集内的主导特征信息^[46]。因此本研究通过 SVD 方法来降低 R_{rs} 时间和空间维度,获取能够描述 R_{rs} 光谱特征的主导信号^[29, 47]。

以往硅藻浓度反演模型研究中, Xi 等^[22, 48]基于共享航次 HPLC 色素数据和卫星 R_{rs}^{sat} 数据,通过 SVD 方法构建全球硅藻浓度反演模型,而后又加入海表温度(SST)优化模型,得到精度较高的硅藻浓度反演模型。本研究利用 Xi 等模型用于区域的中国近海水体,反演硅藻浓度的模型表现并未尽如人意(模型用于本研究区域的精度效果: R^2 及 M_E 分别为 0.51 与 70.38%)。分析其原因可能是由于模型匹配的卫星 $R_{rs}^{sat_mp}$ 数据,受到时间和空间窗口、大气校正等过程的误差引入,导致其与浮游植物信息之间关系的精度受到限制。同时中国近海水体为典型二类水体,其含量和光学特性复杂,浑浊近海浮游植物群落结构可能与大洋开阔一类水体浮游植物群落结构有所差

异^[49-50],导致全球宏观尺度的硅藻浓度反演模型不适用于中国近海。

叶绿素 a 可以描述浮游植物生物量变化^[51],因此通过实测总叶绿素浓度与硅藻浓度的数据, Sun 等^[28]建立了二者之间的经验关系模型,虽然在其研究中表现出较好的模拟精度(R^2 与 M_{APE} 分别为 0.808 与 54.2%),但是经验模型归根结底对于时空的依赖性较强,并且浮游植物种群结构成分变化复杂^[52-53],因此经验模型是否适合于其他区域和时间仍需进行进一步比较验证。此外,根据浮游植物吸收可加性理论,总浮游植物吸收可分解成不同藻种吸收^[54],基于此,樊杰等^[55]寻找硅藻吸收光谱不同波段处的高斯峰与实测硅藻浓度之间的关系来构建硅藻浓度反演模型并且具有较高的精度。基于本研究数据,利用樊杰等^[55]的硅藻浓度反演模型,反演得到相应的硅藻浓度,并与本研究所反演硅藻浓度进行比较,如图 6 所示。可以发现本研究反演的硅藻浓度与实测的硅藻浓度之间的 R^2 (图 6a)虽然低于与基于樊杰等^[55]的硅藻反演模型(图 6b),分别为 0.80 与 0.83,但在 M_{APE} 、与 M_E 均好于基于樊杰等^[55]硅藻反演模型,分别为 58.62%与 61.15%, 39.12%与 52.25%。由于樊杰等^[55]是针对黄渤东海的硅藻浓度所构建的硅藻反演模型,该模型可能具有区域性,而本研究针对渤海和北黄海的硅藻浓度构建硅藻浓度反演模型,因此可能造成本研究模型精度高于樊杰等^[55]模型。再者,卫星浮游植物吸收系数产品是由 R_{rs} 产品转化而来,因此在经过多个经验关系的步骤过程中可能会引入累积误差,樊杰等^[55]模型精度可能会受到限制。

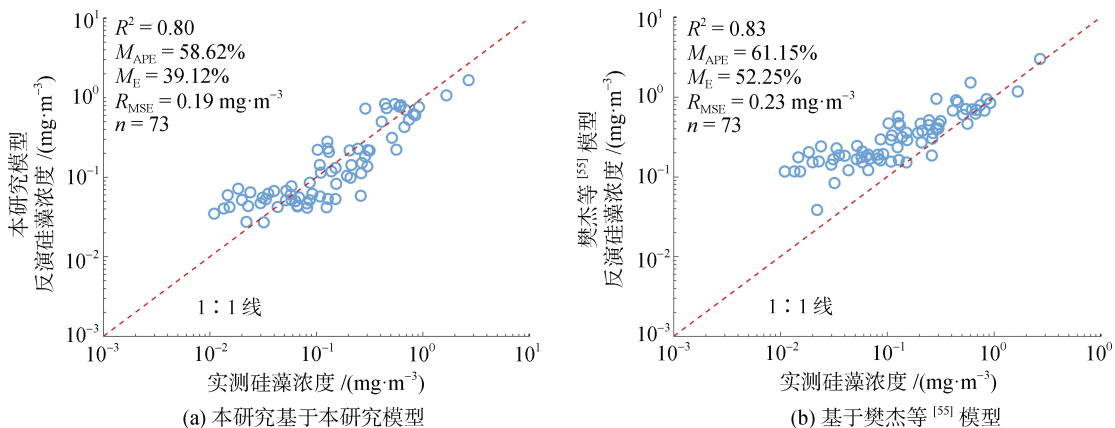


图 6 本研究实测硅藻浓度与基于本研究模型所反演的硅藻浓度之间以及基于樊杰等^[55]模型所反演的硅藻浓度之间散点对比图

Fig. 6 Scatter comparison plots between the measured diatom concentration in this study and the diatom concentration retrieved based on this study model and based on the model in the paper by Fan et al^[55]

相比上述研究,本研究构建硅藻浓度反演模型中 HPLC 色素浓度数据和 R_{rs} 数据是于中国近海站点同步测量获得,在空间上和时间上是同步的,以便准确获取近海浮游植物信息,保证建模精度。由于模型是利用实测 R_{rs} 数据和实测硅藻浓度信息建立,避免多个经验关系带来的累积误差。此外通过 GOCI 卫星匹配 $R_{rs}^{sat-imp}$ 数据并应用于构建的模型,得到的反演硅藻浓度与实测值比较,在一定程度上表明该模型适用于 GOCI 卫星 R_{rs}^{sat} 产品。

然而,本研究所开发模型的表现仍受到一些局限。本研究基于 2 个夏季航次实测 R_{rs} 数据和 HPLC 色素浓度数据中,由于 R_{rs} 随季节变化而变化,构建的模型是否适用于 4 个季节还未知,后续在模型构建中将考虑加入更多不同季节航次数据。模型构建中所需的硅藻浓度是基于 CHEMTAX 软件转化 HPLC 色素浓度获取,尽管 CHEMTAX 软件被普遍认为是一种计算浮游植物群落生物量的有效方法^[56-60],但由于其初始色素比率矩阵受时间和空间影响较大,需要在未来工作中进一步研究获取更准确的最优初始比率矩阵,提高模型反演精度。

5 结论

针对中国近海硅藻浓度卫星估算的模型方法仍较为欠缺的问题,本研究基于航次实测数据构建了硅藻浓度的遥感反演模型,模型展现出较好的精度效果 ($R^2 = 0.80$, $P < 0.001$; $M_{APE} = 58.62\%$, $M_E = 39.12\%$), 实测硅藻浓度与模型反演值之间表现出较好的一致性。同时将模型应用于 GOCI 2020 年 6 月份的 R_{rs}^{sat} 月平均产品,由于近海硅藻可能受水温度、盐度以及营养盐等影响,其浓度呈现近岸高,离岸低的空间分布特征。总体而言,基于 SVD 技术所构建的硅藻浓度反演模型具有较好的卫星应用潜力,一定程度上弥补了中国近海水体硅藻浓度卫星遥感估算能力上的不足。后续可以尝试将该模型方法扩展到其他浮游植物优势藻种之上,为海洋水体浮游植物群落结构的卫星遥感研究提供方法论基础,服务于海洋水体生态环境的精细化监测。

参考文献:

[1] DUTKIEWICZ S, CERMENO P, JAHN O, et al. Dimensions of marine phytoplankton diversity[J]. *Biogeosciences*, 2020, 17(3): 1-46.
 [2] MOISAN J R, MOISAN T A H, LINKSWILER M A. An inverse modeling approach to estimating phyto-

plankton pigment concentrations from phytoplankton absorption spectra[J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2011, 116(C9): C09018.
 [3] CLEVELAND J S. Regional models for phytoplankton absorption as a function of chlorophyll a concentration[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1995, 100(C7): 13333-13344.
 [4] 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. ZHOU Hongli, ZHU Jianhua, HAN Bing, et al. Comparison of spectral absorption characteristics of several typical algae[J]. *Marine Technology*, 2010, 29(3): 78-81, 92.
 [5] 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. ZHANG Qiangqiang, WANG Lei, LEI Shuhe, et al. Characteristics of absorption spectra of phytoplankton[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2006, 26(9): 1676-1680.
 [6] 李楠. 顾及种群结构特征的东中国海浮游植物吸收光谱分解研究[D]. 南京: 南京信息工程大学, 2020. LI Nan. Decomposition of phytoplankton absorption spectra based on phytoplankton community structure characteristics in the East China Sea[D]. Nanjing: Nanjing University of Information Science & Technology, 2020.
 [7] 孙军, 刘东艳, 钱树本. 浮游植物生物量研究 I. 浮游植物生物量细胞体积转化法[J]. *海洋学报*, 1999, 21(2): 75-85. SUN Jun, LIU Dongyan, QIAN Shuben. Study on phytoplankton biomass I. Phytoplankton measurement biomass from cell volume or plasma volume[J]. *Acta Oceanologica Sinica*, 1999, 21(2): 75-85.
 [8] BRUCKMAN L S, RICHARDSON T L, SWANSTROM J A, et al. Linear discriminant analysis of single-cell fluorescence excitation spectra of five phytoplankton species[J]. *Applied Spectroscopy*, 2012, 66(1): 60-65.
 [9] LING Z B, SUN D Y, WANG S Q, et al. Retrievals of phytoplankton community structures from in situ fluorescence measurements by HS-6P[J]. *Optics Express*, 2018, 26(23): 30556-30575.
 [10] 李捷, 李超伦. 高浓度硅藻对桡足类繁殖的抑制作用[J]. *生态学报*, 2004, 24(11): 2664-2670. LI Jie, LI Chaolun. Deleterious effects of diatom in high concentration on copepod reproduction[J]. *Acta Ecologica Sinica*, 2004, 24(11): 2664-2670.
 [11] 王俊, 康元德. 渤海浮游植物种群动态的研究[J]. *海洋水产研究*, 1998, 19(1): 43-52. WANG Jun, KANG Yuande. Study on population dynamics of phytoplankton in the Bohai Sea[J]. *Marine Fisheries Research*, 1998, 19(1): 43-52.

- [12] 赵越, 于仁成, 孔凡洲, 等. 黄、东海夏季浮游植物群落特征及其影响因素分析[J]. 海洋与湖沼, 2019, 50(4): 838-850.
ZHAO Yue, YU Rencheng, KONG Fanzhou, et al. Features of phytoplankton communities and their controlling factors in the Yellow Sea and the East China Sea in summer time[J]. *Oceanologia et Limnologia Sinica*, 2019, 50(4): 838-850.
- [13] 陈楠生, 黄海龙. 中国海洋浮游植物和赤潮物种的生物多样性研究进展(一): 渤海[J]. 海洋与湖沼, 2021, 52(2): 346-395.
CHEN Nansheng, HUANG Hailong. Advances in the study of biodiversity of phytoplankton and redtide species in China (I): The Bohai Sea[J]. *Oceanologia et Limnologia Sinica*, 2021, 52(2): 346-395.
- [14] 马健荣, 刘明, 徐信, 等. 硅藻研究与应用展望[J]. 山东农业科学, 2010(8): 52-56.
MA Jianrong, LIU Ming, XU Xin, et al. Prospect in research and application of diatoms[J]. *Shandong Agricultural Sciences*, 2010(8): 52-56.
- [15] IANORA A, MIRALTO A, POULET S A, et al. Aldehyde suppression of copepod recruitment in blooms of a ubiquitous planktonic diatom[J]. *Nature: International Weekly Journal of Science*, 2004, 429(6990): 403-407.
- [16] 杨洋. 南黄海网采浮游植物生物量及群落结构季节与年际变化[D]. 青岛: 中国科学院大学(中国科学院海洋研究所), 2016.
YANG Yang. Seasonal and interannual changes of net phytoplankton biomass and community structure in the South Yellow Sea[D]. Qingdao: University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Oceanology, CAS), 2016.
- [17] KEN F, MASATO H, YASUSHI 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*, 2003, 50(2): 367-387.
- [18] LI W K, DICKIE P M. Monitoring phytoplankton, bacterioplankton, and virioplankton in a coastal inlet (Bedford Basin) by flow cytometry[J]. *Cytometry*, 2001, 44(3): 236-246.
- [19] WRIGHT S W, ENDEN R L V D, PEARCE I, et al. Phytoplankton community structure and stocks in the Southern Ocean (30–80°E) determined by CHEMTAX analysis of HPLC pigment signatures[J]. *Deep-Sea Research Part II*, 2009, 57(9): 758-778.
- [20] 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.
- [21] ZEIDNER G, PRESTON C M, DELONG E F, et al. Molecular diversity among marine picophytoplankton as revealed by psbA analyses[J]. *Environmental Microbiology*, 2003, 5(3): 212-216.
- [22] XI H Y, LOSA S N, MANGIN A, et al. Global retrieval of phytoplankton functional types based on empirical orthogonal functions using CMEMS GlobColour merged products and further extension to OLCI data[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2020, 240: 111704.
- [23] 刘纪远. 中国科学院地理科学与资源研究所[J]. 科技开发动态, 2005(4): 18-20.
LIU Jiyuan. Institute of Geographic Sciences and Natural Resources Research, CAS[J]. *Science & Technology Development Trends*, 2005(4): 18-20.
- [24] 刘述锡, 樊景凤, 王真良. 北黄海浮游植物群落季节变化[J]. 生态环境学报, 2013, 22(7): 1173-1181.
LIU Shuxi, FAN Jingfeng, WANG Zhenliang. The seasonal changes of phytoplankton community in the North Yellow Sea, China[J]. *Ecology and Environmental Sciences*, 2013, 22(7): 1173-1181.
- [25] 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*, 2008, 56(15): 899-917.
- [26] ZHANG H L, Emmanuel D, Amane F, et al. Estimation of phytoplankton taxonomic groups in the Arctic Ocean using phytoplankton absorption properties: implication for ocean-color remote sensing[J]. *Optics Express*, 2018, 26(24): 32280-32301.
- [27] PAN H Z, LI A F, CUI Z G, et al. A comparative study of phytoplankton community structure and biomass determined by HPLC-CHEMTAX and microscopic methods during summer and autumn in the central Bohai Sea, China[J]. *Marine Pollution Bulletin*, 2020, 155: 111172.
- [28] SUN D Y, LAI W D, WANG S Q, et al. Synoptic relationships to estimate phytoplankton communities specific to sizes and species from satellite observations in coastal waters[J]. *Optics Express*, 2019, 27(16): A1156-A1172.
- [29] TAYLOR B B, TAYLOR M H, DINTER T, et al. Estimation of relative phycoerythrin concentrations from hyperspectral underwater radiance measurements—A statistical approach[J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2013, 118(6): 2948-2960.
- [30] 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.
- [31] SISWANTO E, TANG J, YAMAGUCHI H, et al. Em-

- pirical ocean-color algorithms to retrieve chlorophyll-a, total suspended matter, and colored dissolved organic matter absorption coefficient in the Yellow and East China Seas[J]. *Journal of oceanography*, 2011, 67(5): 627-650.
- [32] 张丹. 黄渤海浮游植物与生物硅的研究[D]. 天津: 天津科技大学, 2018.
ZHANG Dan. The study of phytoplankton and biosilicon in the Yellow Sea and the Bohai Sea[D]. Tianjin: Tianjin University of Science and Technology, 2018.
- [33] 邹亚荣. 渤海叶绿素 *a* 时空分布特征分析[J]. *遥感信息*, 2004(3): 30-31, 62.
ZOU Yarong. Analysis spetial distribution characteristics for Chl *a* in Bohai Sea[J]. *Remote Sensing Information*, 2004(3): 30-31, 62.
- [34] 周艳蕾, 张传松, 石晓勇, 等. 黄渤海海水中叶绿素 *a* 的分布特征及其环境影响因素[J]. *中国环境科学*, 2017, 37(11): 4259-4265.
ZHOU Yanlei, ZHANG Chuansong, SHI Xiaoyong, et al. Distribution characteristics of chlorophyll *a* and its influencing enviromental factors in Bohai Sea and Yellow Sea[J]. *China Environmental Science*, 2017, 37(11): 4259-4265.
- [35] 张莹. 渤海中部浮游植物与环境因子的空间关系及季节差异分析[D]. 烟台: 中国科学院烟台海岸带研究所, 2016.
ZHANG Ying. Spatial correlation and seasonal variation of phytoplankton and environmental factors in the central Bohai Sea[D]. Yantai: Yantai Coastal Zone Research Institute, Chinese Academy of Sciences, 2016.
- [36] 刘西汉. 渤海湾营养盐与浮游植物群落结构的变化特征及关系分析[D]. 烟台: 中国科学院大学(中国科学院烟台海岸带研究所), 2019.
LIU Xihan. The variations of nutrients and phytoplankton assemblages in the Bohai Bay and their correlation analysis[D]. Yantai: Yantai Institute of Coastal Zone Research, University of Chinese Academy of Sciences, 2019.
- [37] XIAO W P, LIU X, IRWIN A J, et al. Warming and eutrophication combine to restructure diatoms and dinoflagellates[J]. *Water Research*, 2018, 128: 206-216.
- [38] 叶又茵, 项鹏, 王磊, 等. 南流江河口区春季浮游植物群落结构组成与分布特征[J]. *海洋学报*, 2017, 39(10): 111-123.
YE Youyin, XIANG Peng, WANG Lei, et al. The structure and distribution of phytoplankton community in the Nanliu River Estuary during spring[J]. *Haiyang Xuebao*, 2017, 39(10): 111-123.
- [39] 肖聪. 渤海与北黄海 CDOM 遥感反演算法及其时空分异规律研究[D]. 南京: 南京信息工程大学, 2018.
XIAO Cong. Study of remote sensing algorithm and the temporal-spatial distribution of CDOM in Bohai Sea and North Yellow Sea based on MODIS satellite data[D]. Nanjing: Nanjing University of Information Science & Technology, 2018.
- [40] ZHU Q, SHEN F, SHANG P, et al. Hyperspectral remote sensing of phytoplankton species composition based on transfer learning[J]. *Remote Sensing*, 2019, 11(17): 2001.
- [41] UITZ J, CLAUSTRE H, MOREL A, et al. Vertical distribution of phytoplankton communities in open ocean: An assessment based on surface chlorophyll[J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2006, 111(C8): C08005.
- [42] BREWIN R, HARDMAN-MOUNTFORD N J, LAVENDER S J, et al. An intercomparison of bio-optical techniques for detecting dominant phytoplankton size class from satellite remote sensing[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2011, 115(2): 325-339.
- [43] 谢文君, 陈君. 海洋遥感的应用与展望[J]. *海洋地质与第四纪地质*, 2001, 21(3): 123-128.
XIE Wenjun, CHEN Jun. The application and prospecting of marine remote sensing[J]. *Marine Geology & Quaternary Geology*, 2001, 21(3): 123-128.
- [44] 吴培中. 世界卫星海洋遥感三十年[J]. *国土资源遥感*, 2000(1): 2-10.
WU Peizhong. 30 Years for satellite ocena remote sensing in the world[J]. *Remote Sensing for Land and Resources*, 2000 (1): 2-10.
- [45] 潘德炉, DOERFFER R, 毛天明, 等. 海洋水色卫星的辐射模拟图像研究[J]. *海洋学报(中文版)*, 1997, 19(6): 43-55.
PAN Delu, DOERFFER R, MAO Tianming, et al. Study on radiation simulation image of ocean water color satellite[J]. *Acta Oceanologica Sinica*, 1997, 19(6): 43-55.
- [46] DAN K. A singularly valuable decomposition: The SVD of a matrix[J]. *The College Mathematics Journal*, 1996, 27(1): 2-23.
- [47] CRAIG S E, JONES C T, LI W K W, et al. Deriving optical metrics of coastal phytoplankton biomass from ocean colour[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2012, 119: 72-83.
- [48] XI H Y, LOSA S N, MANGIN A, et al. Global chlorophyll *a* concentrations of phytoplankton functional types with detailed uncertainty assessment using multisensor ocean color and sea surface temperature satellite products[J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2021, 126(5): e17127.
- [49] ZHOU M J, SHEN Z L, YU R C. Responses of a coastal phytoplankton community to increased nutrient input from the Changjiang (Yangtze) River[J]. *Continental Shelf Research*, 2007, 28(12): 1483-1489.

- [50] CHEN C. Chemical and physical fronts in the Bohai, Yellow and East China seas[J]. *Journal of Marine Systems*, 2009, 78(3): 394-410.
- [51] O'REILLY J E, MARITORENA S, MITCHELL B G, et al. Ocean color chlorophyll algorithms for SeaWiFS[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1998, 103: 24937-24953.
- [52] CIOTTI A M, BRICAUD A. Retrievals of a size parameter for phytoplankton and spectral light absorption by colored detrital matter from water-leaving radiances at SeaWiFS channels in a continental shelf region off Brazil[J]. *Limnology & Oceanography Methods*, 2006, 4(7): 237-253.
- [53] 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.
- [54] SUN D Y, FAN J, WANG S Q, et al. Understanding optical absorption associated with phytoplanktonic groups in the marginal seas[J]. *Science of The Total Environment*, 2021, 789(1): 147846.
- [55] 樊杰, 孙德勇, 王胜强, 等. 基于吸收系数的近海水体硅藻浓度反演模型研究[J]. *遥感学报*, 2021, DOI: 10.11834/jrs.20210475.
FAN Jie, SUN Deyong, WANG Shengqiang, et al. Inversion model of diatoms concentration in coastal water based on absorption coefficients[J]. *Journal of Remote Sensing*, 2021, DOI: 10.11834/jrs.20210475.
- [56] LIU X, HUANG B Q, HUANG Q, et al. Seasonal phytoplankton response to physical processes in the southern Yellow Sea[J]. *Journal of Sea Research*, 2015, 95: 45-55.
- [57] WANG S Q, ISHIZAKA J, HIRAWAKE T, et al. Remote estimation of phytoplankton size fractions using the spectral shape of light absorption[J]. *Optics Express*, 2015, 23(8): 10301-10318.
- [58] YAN G W, JIANG T, ZHANG Y Y, et al. Determining temporal and spatial distribution of autotrophic picoplankton community composition through HPLC-pigment method and flow cytometry in the central Bohai Sea (China)[J]. *Marine Pollution Bulletin*, 2020, 157: 111261.
- [59] 芦尚德, 刘婧婧, 冯一平, 等. 固定化小球藻产氧及光合速率的研究[J]. *生物技术通报*, 2021, 37(3): 92-98.
LU Shangde, LIU Jingjing, FENG Yiping, et al. Study on oxygen release and photosynthetic rate of immobilized *Chlorella*[J]. *Biotechnology Bulletin*, 2021, 37(3): 92-98.
- [60] ZHU Z Y, NG W M, LIU S M, et al. Estuarine phytoplankton dynamics and shift of limiting factors: A study in the Changjiang (Yangtze River) Estuary and adjacent area[J]. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 2009, 84(3): 393-401.

Inversion model of *diatom* concentrations based on singular value decomposition in coastal waters

CHEN Yu-hang¹, SUN De-yong^{1, 2, 3}, CHEN Wei-wei¹, FAN Jie¹,
WANG Sheng-qiang^{1, 2, 3}, ZHANG Hai-long^{1, 2, 3}, HE Yi-jun^{1, 2, 3}

(1. School of Marine Sciences, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China; 2. Jiangsu Key Laboratory of Ocean Dynamics Remote Sensing and Acoustics, Nanjing 210044, China; 3. Jiangsu Research Center for Ocean Survey Technology, Nanjing 210044, China)

Received: Feb. 18, 2022

Key words: diatom concentrations; SVD; CHEMTAX; GOCI; Chinese coastal seas

Abstract: Phytoplankton is a vital primary producer in marine ecosystems, and *diatoms* account for almost 40% of the primary productivity in the ocean. Thus, estimating *diatom* concentrations plays a crucial role in understanding marine biogeochemical processes and ecosystem evolution. In this study, we obtained *in situ diatom* concentrations using the CHEMTAX program and phytoplankton pigment data from the Bohai Sea and the Yellow Sea collected in June 2016 and July 2018. Furthermore, we established a model to estimate *diatoms* using measured remote sensing reflectance (R_{rs}) based on the singular value decomposition method. The leave-one-out method accuracy test showed that the accuracy of the model was relatively high (determination coefficient, R^2 : 0.80, $P < 0.001$). The mean absolute percent error (M_{APE}) was 58.62%, and the median error (M_E) was 39.12%. Validation by satellite-ground synchronization R_{rs} encouraged applicability of the geostationary ocean color imager (R^2 : 0.78, $P < 0.001$, M_{APE} : 44.43%, and M_E : 35.55%). The spatial distribution of the inverted *diatom* concentration showed a high degree of similarity with previous reports. A comparison with the three current inversion models and this study provides technical support for continued *diatom* biomass research in coastal waters.

(本文编辑: 赵卫红)