

水色光谱分析与多成分反演算法

唐军武

田国良

(国家海洋局海洋技术研究所 天津 300111) (中国科学院遥感应用研究所 北京 100101)

摘要 影响水体可见光近红外遥感信息提取精度的因素除大气修正外,主要是对水体(海洋)光谱与水体所含物质成分之间的作用机理了解得不够。由于水体光谱的机理与陆地地物波谱的机理有很大的差别,其光谱数据的测量和分析方法也不一样。该文首先较为完整地描述了以叶绿素、悬浮泥沙、黄色物质为主要水体成分的水色机理,以及遥感反射率与各成分散射与吸收的关系,确定了进行水体光谱分析所必须的关键参数,然后提出一种基于局域水体的多成分同时反演的算法。这种算法不同于以往一种算法反演一种物质成分的模式。

关键词 光谱分析, 水色算法

1 引言

海洋对研究全球性环境问题具有重要意义。水色遥感(Ocean Color Remote Sensing)是研究诸如碳循环问题的非常重要的手段。1978年,搭载于NIMBUS-7上的CZCS(海岸带水色扫描仪)的发射,极大地推动了水色遥感和海洋光谱研究。水色遥感发展到今天,已进入以SeaWiFS、OCTS为代表的第二代。在2000年前后将会有十几个具有水色通道的遥感器上天。这些高性能的新一代传感器为水色要素的反演提供了新的手段,同时也对反演算法提出新的要求。从CZCS的经验来看,影响水色要素反演精度的主要原因,除了大气修正的因素之外,更重要的是对水体的光谱特征不够了解。Morel等人1977年给出了奠基性海洋光谱机理分析的结果^[1],随着现场测量仪器的进步和有关水色计划的推动,以及对内陆与近岸水体水质航空遥感监测的实验研究,获得了越来越多的不同水体的光谱特征数据,进一步加深了对水体光谱与物质成分相互作用机理的认识。因此,基于水色机理分析基础上的算法将逐步取代原有的统计模型,如最近提出的针对二类水体的SeaWiFS高黄色物质浓度条件下的叶绿素反演算法^[2]。

该文将首先较全面地描述以叶绿素(Chlorophyll-a)、悬浮泥沙(Nonchlorophyllous particles, Inorganic suspended sediments or tripton)、黄色物质(CDOM, Gelbstoff or Yellow substance)为

主要成分的3要素水色光谱分析模型——遥感反射率(Remote Sensing Reflectance)模型。从正演和反演两个过程,给出多光谱水色数据与物质成分之间的关系。最后提出一种多要素反演算法,该算法不同于以往基于波段比值的单要素分别反演的算法,而是在一个模型中同时反演出3种成分的浓度。

2 水色机理分析

2.1 水色与水体成分的吸收和散射的关系

水体的向上辐照度 $E_u(\lambda, 0^-)$ 带有水体信息,各成分引起的水体光谱变化可以由水表面下的辐照度比 $R(\lambda)$ 来表征:

$$R(\lambda) = E_u(\lambda, 0^-) / E_d(\lambda, 0^+) \quad (1)$$

其中 $E_d(\lambda, 0^+)$ 为水表面的向下辐照度(Downwelling irradiance)。为简便起见,以下省略波长下标 λ 。又

$$\begin{aligned} E_u(0^-) &= QL_u(0^-) \\ L_u(0^+) &= L_u(0^-)t/n^2 \end{aligned} \quad (2)$$

其中, Q 为光场分布参数(≈ 5), $t/n^2 = 0.54$, n 为水体的折射率, t 为水气界面的透过率^[3]。 L_u 为直接由 L_w 导出或遥感器测得的离水辐射率(Water-leaving radiance),显然 L_w 携带着水体信息。 $E_d(0^+)$ 可由辅助数据或模型反演而得^[4, 5]。

由于在遥感中 L_w 比 E_u 容易得到,因此定义遥感反射率(Remote sensing reflectance) R_{rs} :

$$R_{rs}(\lambda) = L_w(\lambda) / E_d(\lambda, 0^+) \quad (3)$$

将 R_{rs} 与水体的总吸收系数 $a(\lambda)$ 和总的后向散射系数

b_b 联系起来：^[2, 6]

$$R_{rs} = \frac{ft}{Qn^2} \frac{b_b}{a + b_b} \quad (4)$$

其中, f 为一经验参数约为 0.32—0.33, 是太阳天顶角的函数。Morel and Gentili 表明, f/Q 不依赖于太阳天顶角的变化^[7], Gordon 采用^[8] $f/Q = 0.0945$, 又 $t/n^2 = 0.54$, 则

$$R_{rs} = \text{const} \frac{b_b}{a + b_b}, \text{const} = 0.051 \quad (5)$$

而 b_b 和 a 是海水和各种成分贡献的线性和:

$$b_b = (b_b)_w + \sum_{i=1}^N (b_b)_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, N \text{ 为成分数}$$

$$a = a_w + \sum_i a_i \quad (6')$$

如果只考虑叶绿素- a 及其降解物褐色素(以 C 表示)、悬浮泥沙(以 X 表示)、黄色物质(以 Y 表示), 则(6') 可记为(忽略黄色物质的后向散射):

$$b_b = b_{b_w} + b_{b_c} + b_{b_x}$$

$$a = a_w + a_c + a_x + a_y \quad (6)$$

2.2 各成分对 a 、 b_b 的贡献

显然各成分的吸收、散射与其浓度有关, Morel 与 Prieur 等人将吸收表示为成分浓度与单位吸收系数(Specific absorption coefficient)的乘积^[1, 9, 10], 将后向散射表示为体散射(Volumn scattering)与后向散射比例系数(Backscattering ratio)的乘积:

$$b_b = \tilde{b}_{b_w} b_w + \tilde{b}_{b_c} b_c + \tilde{b}_{b_x} b_x$$

$$a = a_w + Ca_c^* + Xa_x^* + Ya_y^* \quad (7)$$

其中:

b_w 为纯(海)水的体散射, \tilde{b}_{b_w} 为水的后向散射的比例; b_c 为浮游生物(叶绿素)的体散射, \tilde{b}_{b_c} 为叶绿素的后向散射的比例; b_x 为悬浮泥沙的体散射, \tilde{b}_{b_x} 为悬浮泥沙的后向散射的比例。

a_w 为纯(海)水的吸收系数(注: 文献[1]中所给出的水的吸收系数是淡水的, 不是海水的), 可参见文献[11]; C 为叶绿素浓度(mg / m^3), a_c^* 为其单位吸收系数; X 为无机悬浮物的浓度(m^{-1}), 其单位按 550nm 波段处的散射量来决定, a_x^* 为其单位吸收系数; Y 为黄色物质的浓度(m^{-1}), 其单位按 440nm 处光束的衰减量来决定, a_y^* 为其单位吸收系数。

下面依次给出各参数的计算过程。

2.2.1 水体各成分的后向散射

海水的散射^[11]:

$$b_w(500) = 0.00288 \text{m}^{-1},$$

$$\tilde{b}_{b_w} = 0.5,$$

$$\frac{b_w(\lambda_1)}{b_w(\lambda_2)} = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{-4.3} \quad (8)$$

叶绿素的散射^[10]:

$$b_c(550) = 0.12C^{0.63},$$

$$b_c(\lambda) = b_c(550) * \frac{a_c(550)}{a_c(\lambda)}, \quad (9)$$

$$\tilde{b}_{b_c} = 0.005$$

[$a_c(\lambda)$ 的计算见下面 2.2.2 “★叶绿素的吸收”]

悬浮泥沙的散射. 为简化计算, 定义 $X(\text{m}^{-1}) = b_x(550)$, 实测时, 可用 $b_x(550) = b(550) - b_c(550)$, 以免除麻烦的水体过滤(可参见(9)式 $b_c(550)$ 与叶绿素浓度 C 的关系, C 较容易测得)。如果要确定 $X(\text{m}^{-1})$ 与 mg / m^3 为单位的换算关系, 可进行一系列不同浓度的水体配比测量, 然后回归确定二者的关系。一般认为, 泥沙的光谱散射满足下列关系:

$$\frac{b_x(\lambda_1)}{b_x(\lambda_2)} = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{-n} \quad (10)$$

随水体的不同, \tilde{b}_{b_x} 与 n 有以下规律^[10]:

- 1) 对于二类水体(如近岸), $n=0$, \tilde{b}_{b_x} 在 0.01—0.033 之间;
- 2) 对于高叶绿素浓度的一类水体, $n=1$ 或 2, $\tilde{b}_{b_x} \leq 0.005$;
- 3) 对于贫瘠一类水体, $n=2$, \tilde{b}_{b_x} 在 0.01—0.025 之间。

对于中国近岸水体, 可对实测 $R(\lambda)$ 曲线和按此模型计算出的理论值进行比较, 调整模型中 n 与 \tilde{b}_{b_x} 的值, 直至二者的误差达到最小。这时 n 与 \tilde{b}_{b_x} 的值就为所求的值。

2.2.2 水体成分吸收特征

纯(海)水(W)、及典型的叶绿素(C)、悬浮泥沙(X)、黄色物质(Y)的光谱吸收特征^[9], 参见图 1。其中 $a_w(\text{m}^{-1})$ 为纯海水的吸收系数; a_c^* 、 a_x^* 、 a_y^* 为归一化单位吸收系数, 以 400nm 处的值进行了归一化, $a_i^*(\lambda) = a_i^*(\lambda) / a_i^*(440)$, $i = c, x, y$, 无量纲。

叶绿素的吸收 叶绿素的吸收随着 Chl-a、Chl-b、Chl-c 相对比例的不同、不同浮游生物组分和光照条件的不同有一定的差别。但总的规律满足:

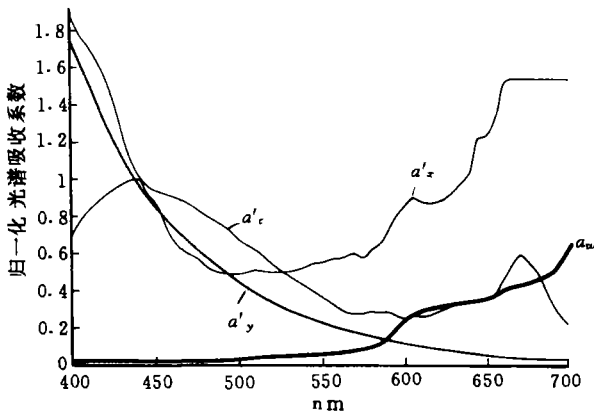


图 1 水体成分光谱吸收系数曲线
Fig. 1 Curves of spectral absorption of water constituents

$$a_c(\lambda) = a_c^*(\lambda) \cdot C \quad (11)$$

关键问题是 a_c^* 的测算。

由于叶绿素的后向散射很小(参见 2.2.1 中的 (9) 式), 因此可寻找散射系数 b 几乎一样, 而叶绿素浓度差别的现场水样, 将一个水样的光谱吸收系数 $a_1(\lambda)$ 减去另一个水样的光谱吸收系数 $a_2(\lambda)$, 即可获得叶绿素的单位吸收系数 [$m^{-1} / (mg \cdot m^{-3})$], 一般应用可采用^[1] $a_c^*(440) = 0.025m^{-1} / (mg \cdot m^{-3})$, 再采用文献 [9] 中的 a_c 数值即可得到 $a_c^*(\lambda)$ 。

黄色物质的吸收 定义黄色物质的浓度为 $Y(m^{-1}) = a_y(440)$, 研究表明(参见图 1), 黄色物质的吸收满足下述指数规律:

$$a_y(\lambda) = a_y(\lambda_0) \exp[-S(\lambda - \lambda_0)] \quad (12)$$

其中 $\lambda_0 = 440nm$, S 随水体的不同在 0.011—0.018 之间变化, 通常取^[6] $S = 0.014$. 因此其单位吸收系数 $a_y^*(\lambda) = \exp[-0.014(\lambda - 440)]$, 且 $a_y^*(\lambda) = a_y$ (归一化单位吸收系数)。由此表达式计算出的值与文献 [9] 中的 $a_y(\lambda)$ 完全一样。

悬浮泥沙的吸收 显然, 在不同的近岸河口地区, 悬浮泥沙矿物质组成不一样, 其光谱吸收也有很大的差别, 因此, 需要测算典型海区的悬浮泥沙光谱吸收系数。图 1 中大于 550nm 部分数据不可靠。

采集典型水体的悬浮泥沙进行水体配比(使 $a = a_w + a_x, a_c = a_y = 0$)测定, 可得到较精确的结果。

3 水体光谱的正演

由上一节的分析, 一旦确定了水域的 5 个光谱特征参数 ($n, \bar{b}_x, a_c^*, a_x^*, a_y^*$), 便可由常规的成分浓度测量, 按 (5) 式, 估算出水体的理论光谱曲

线 $R_{rs}(\lambda)$ 或 $L_w(\lambda)$ 。Sathyendranath 等人的结果表明, 他们的实测结果与理论计算的平均误差约为 4%, 最大误差为 10%^[10]。

4 基于遥感反射率模型的多水体成分反演算法

Gordon *et al.* 把水色解译算法归为 3 类^[8]:

(1) 经验模型 (Empirical), 主要基于离水辐射率与某一成分之间的统计关系; (2) 半分析模型 (Semianalytic), 光谱与成分之间的物理和经验参数并用; (3) 辐射传递模型 (Radiative transfer), 采用辐射传递模型提取水体的固有光学特性 (inherent optical properties), 再由固有光学特性导出相应的成分浓度。该文提出的算法属于第二类。

4.1 计算方法

由多波段的 R_{rs} 值, 导出水体的固有光学参数 a 和 b_b , 再由上述固有光学参数与成分浓度 C, X, Y 的关系, 建立线性方程组, 然后解出 C, X, Y 的值。

通过遥感手段或现场直接测量, 可获得 L_w 和 $E_d(0^+)$ 。由水色遥感器经大气修正得到 L_w 和 $E_d(0^+)$ 的方法可参见文献 [2, 3, 6, 12] 由公式 (5)、(7)、(9) 得:

$$R_{rs}(\lambda) = \text{const} \frac{b_b(\lambda)}{a(\lambda) + b_b(\lambda)} = 0.051 \frac{b_b(\lambda)}{a(\lambda) + b_b(\lambda)} \\ = 0.051 \frac{(\bar{b}_x b_w + \bar{b}_x b_c + \bar{b}_x b_x)}{(a_w + Ca_c^* + Xa_x^* + Ya_y^*) + (\bar{b}_x b_w + \bar{b}_x b_c + \bar{b}_x b_x)} \quad (13)$$

由于

$$b_b(\lambda) = \left[0.5b_w(\lambda) + 0.005 \cdot 0.12C^{0.63}a_c^*(550) \right] \\ a_c^*(\lambda) + \bar{b}_x X \left(\frac{\lambda}{550} \right)^{-n}$$

若 n, \bar{b}_x 已知, 由第 2 节的讨论, 则第 (13) 式中只有 $C, C_e = C^{0.63}, X, Y$ 4 个未知数。由多光谱遥感获得 4 个波段的 $R_{rs}(\lambda_i)$ 值 ($i = 1, 2, 3, 4$), 便可化简 (13), 建立关于此 4 个参数的线性方程组:

$$a_{11}C + a_{12}C_e + a_{13}X + a_{14}Y = k_1 \\ \dots \dots \dots \\ a_{41}C + a_{42}C_e + a_{43}X + a_{44}Y = k_4 \quad (14)$$

解之则得 C 、 X 、 Y 。

若 n 、 \tilde{b}_v 未知, 则可依据 2.2.1 节公式(10)的说明, 取不同的值代入计算, 结果与现场实测值进行比较, 取结果最接近的 n 、 \tilde{b}_v 值。

4.2 模型的误差分析

为进行误差分析, 首先进行了光谱合成, 即给定叶绿素、悬浮泥沙、黄色物质的浓度 C 、 X 、 Y , 由上述公式得到 $R_{rs}(\lambda_i)$, $i = 1, 2, 3, 4$ 。然后将 $R_{rs}(\lambda_i)$ 引入 5% 的误差, 反演出浓度值。若模型是病态的, 则遥感反射率的微小扰动将导致很大的反演误差。

采用 SeaWiFS 的 4 个波段 412, 443, 490, 550 (nm)。

[情形 1]: 混浊二类水体, $C = 5\text{mg} / \text{m}^3$, $X = 1.3\text{m}^{-1}$, $Y = 0.2\text{m}^{-1}$

合成得^[13]:

$$R_{rs}(412) = 0.004382,$$

$$R_{rs}(443) = 0.005588,$$

$$R_{rs}(490) = 0.007806,$$

$$R_{rs}(550) = 0.008605.$$

令 $R_{rs}(\lambda_i) = R_{rs}(\lambda_i) + R_{rs}(\lambda_i) * 5\%$, 计算 4 阶线性方程组, 可得:

$$C' = 4.60937, \text{ 相对反演误差 } \Delta\text{Err} = 7.8\%$$

$$X' = 1.26972, \quad \Delta\text{Err} = 2.3\%$$

$$Y' = 0.188106, \quad \Delta\text{Err} = 5.9\%$$

[情形 2]: $C = 2.5$, $X = 0.6$, $Y = 0.05$

同样合成出 $R_{rs}(\lambda_i)$, 再将其 $\pm 5\%$, 结果如下:

$$R_{rs} = R_{rs} + 5\% * R_{rs};$$

$$C' = 2.20, \quad \text{相对反演误差 } \Delta\text{Err} = 11.9\%$$

$$X' = 0.560 \quad \Delta\text{Err} = 6.6\%$$

$$Y' = 0.0464, \quad \Delta\text{Err} = 7.2\%$$

$$R_{rs} = R_{rs} - 5\% * R_{rs};$$

$$C' = 2.87, \quad \text{相对反演误差 } \Delta\text{Err} = 14.8\%$$

$$X' = 0.648 \quad \Delta\text{Err} = 7.9\%$$

$$Y' = 0.0544, \quad \Delta\text{Err} = 8.8\%$$

由此可以看出, 该模型对 R_{rs} 的误差不是很敏感。

5 总 结

该文所讨论的内容, 包括水色光谱模型和反演算法两部分。有关水色机理的讨论, 基本是水色光谱特征分析中的单一成分波谱分析问题。所给出的多成分反演算法, 是在总结前人工作的基础上

提出的, 是 Morel(1980)提出的针对一类水体(大洋水)的算法的改进^[14,15]。这种算法的优点是可以同时反演出多种水体成分的浓度, 缺点是必须对相应水域作大量的先期测量与分析工作。由于受测量手段和测量数据缺乏的限制, 这种方法在 CZCS 水色遥感时期及 90 年代初, 未能得到很好的应用, 这期间基本上以统计模型为主。从近几年成象光谱仪航空水色遥感^[16]和 SeaWiFS 最新算法来看^[2], 情况已经改变。中国的水色遥感发展很快, 但基础的水体光谱特征参数测量^[17]及分析研究尚需进一步深入。

参 考 文 献

- [1] Morel, A., Prieur, L. Analysis of variation in ocean color. *Limnology and Oceanography*, 1977, **22**: 709—722.
- [2] Carder, K. L. et al. SeaWiFS Algorithm for Chlorophyll-a and CDOM in a subtropical environment. (personal communication), 1995.
- [3] Gordon, H. R., D. K. Clark, Clear water radiance for atmospheric correction of Coastal Zone Color Scanner imagery. *Applied Optics*, 1981, **20**: 4175—5180.
- [4] Gregg, W. W. et al. A simple 1nm resolution solar irradiance model for cloudless maritime atmospheres. *Limnology and Oceanography*, 1990, **35**: 1657—1675.
- [5] Fouin, R. et al. A simple analytical formula to compute clear sky total and photosynthetically available solar irradiance at the ocean surface. *Journal of Geophysics Research*, 1989, **94**: 9731—9742.
- [6] Gordon, H. R., Morel, A. Y. Remote assessment of ocean color for interpretation of satellite visible imagery: A review. Springer, 1983.
- [7] Morel, A., B. Gentili. Diffuse reflectance of oceanic waters. II. Bidirectional aspects. *Applied Optics*. 1993, **32**(33): 6864—6879.
- [8] Gordon, H. R. et al. A Semianalytic Radiance Model of Ocean Color. *Journal of Geophysics Research*, 1988, **93**: 90909—90924.
- [9] Prieur, L., Sathyendranath, S. An optical classification of coastal and oceanic waters based on the specific spectral absorption curves of phytoplankton pigments, dissolved organic matter, and other materials. *Limnology and Oceanography*, 1981, **26**: 671—689.
- [10] Sathyendranath, S., Prieur, L., Morel, A. A three-component model of ocean color and its application to remote sensing of phytoplankton pigments in coastal waters. *International Journal of Remote Sensing*, 1989, **10**(8): 1373—1394.
- [11] Smith, R. C., Baker, K. S. Optical properties of the clearest waters(200—800nm). *Applied Optics*, 1981, **20**: 177—184.
- [12] Gordon, H. R., M. Wang. Retrieval of water-leaving radiance and aerosol optical thickness over the oceans with SeaWiFS: a preliminary algorithm. *Applied Optics*, 1994, **33**(3): 443—452.
- [13] Kirk, J. T. O. Light and photosynthesis in aquatic ecosystem. Cambridge University Press, 1994.

- [14] Morel, A. In-water and remote measurement of ocean color. *Boundary Layer Meteorology*, 1980, **18**: 177—201. 104566, 1995, **25**.
- [15] Morel, A., Gordon, H. R. Report of the working group on water color. *Boundary Layer Meteorology*, 1980, **18**: 177—201.
- [16] Jupp, D. L. B., *et al.* The potential use of airborne scanning for monitoring algal dynamics in Australian inland waters. CSIRO OSA publication No.30, 1993.
- [17] Mueller, J. L., *et al.* Ocean optics protocol for SeaWiFS validation, revision 1. NASA Technical Memorandum

作者简介

唐军武, 男, 1965年5月生, 1987年毕业于天津大学计算机系, 1992年获工学硕士学位。目前正在攻读遥感博士学位。主要从事海洋光谱分析、水色遥感器定标校验等研究工作。

Ocean Color Analysis and an Algorithm for the Retrieval of Multiconstituents Based on Remote Sensing Reflectance

Tang Junwu

(*Institute of Ocean Technology, SOA, Tianjin 300111*)

Tian Guoliang

(*Institute of Remote Sensing Applications, CAS, Beijing 100101*)

Abstract Beside atmospheric correction, another major factor that influences the precision of water color sensing is the unknown spectral characteristics of the water. Because of inherent different characters, there is great difference between the spectral measurement and analysis of lands and that of waters.

In this paper, we first describe the relationship between remote sensing reflectance and the constituents of the water then propose an algorithm that can retrieve the concentrations of the main constituents of the water, which is different from the models of one algorithm for one constituent.

Key words Ocean color sensing, Bio-optical algorithm