

基于来源示踪的内陆水体颗粒有机碳遥感反演方法研究

陈法融^{1,2}, 杨广睿^{1,2}, 赵志龙⁵, 施坤⁵, 赵楚^{1,2}, 孟丽泽^{1,2}, 叶治山^{1,2}, 张昕怡^{1,2}, 黄昌春^{1,2,3,4}

1. 南京师范大学 地理科学学院, 南京 210023;
2. 江苏省物质循环与污染控制重点实验室, 南京 210023;
3. 江苏省地理信息资源开发与利用协同创新中心, 南京 210023;
4. 南京师范大学 虚拟地理环境教育部重点实验室, 南京 210023;
5. 中国科学院南京地理与湖泊研究所 中国科学院流域地理学重点实验室, 南京 210008

摘要: 颗粒有机碳 (Particulate Organic Carbon, POC) 是内陆水体碳库中的重要组成部分, 影响水体有机碳的迁移转化和温室气体排放等, 在全球碳循环和气候变化中具有重要的意义。由于 POC 来源组成的复杂性, 使得已有的 POC 遥感反演算法的精度和普适性相对较低。本研究以长江干流中下游区域和太湖作为研究区, 利用了生物地球化学来源示踪方法, 解析了 POC 的端元贡献, 构建了内源 POC 比例的遥感反射率三波段比值估算模型, 并通过 POC 内外源比例将水体分为两类, 即以内源和陆源 POC 为主导的水体; 针对两种类型水体, 分别构建了基于浮游植物吸收系数 (a_{ph} (674)) 和非色素颗粒物吸收系数 (a_{nsp} (443)) 的 POC 浓度半分析反演模型。结果表明利用 a_{ph} (674) 和 a_{nsp} (443) 可以估算内源和陆源 POC 浓度, 算法精度与普适性较好, RMSE 为 1.322 mg/L, MB 为 -0.177 mg/L, MAPE 为 29.380%。本研究阐述了遥感与生物地球化学技术协同反演 POC 的可能性和优势, 为后续遥感监测内陆水体提供了新思路。

关键词: 内陆水体, 颗粒有机碳, 同位素示踪, 正构烷烃, 半分析模型

中图分类号: P2

引用格式: 陈法融, 杨广睿, 赵志龙, 施坤, 赵楚, 孟丽泽, 叶治山, 张昕怡, 黄昌春. XXXX. 基于来源示踪的内陆水体颗粒有机碳遥感反演方法研究. 遥感学报, XX(XX): 1-14

CHEN Farong, YANG Guangrui, ZHAO Zhilong, SHI Kun, ZHAO Chu, MENG Lize, YE Zhishan, ZHANG Xinyi, HUANG Changchun. XXXX. Remote sensing inversion of particulate organic carbon in inland waters based on biochemical - optical mechanisms. National Remote Sensing Bulletin, DOI:10.11834/jrs.20265131]

1 引言

内陆水体在全球碳循环中扮演着关键角色, 从陆地生态系统中接收大量碳, 通过输移、矿化和埋藏, 调节着全球碳循环 (Regnier 等, 2022; Tranvik 等, 2009)。每年约有 2.95 Pg 的有机碳从陆地生态系统输入到内陆水体 (Regnier 等, 2022), 其中约有 1.85 Pg 的碳被矿化为 CO_2 和 CH_4 排放出水体 (Holgerson 和 Raymond, 2016; Raymond 等, 2013), 32% (0.95 Pg) 输入到海洋

中 (Li 等, 2017, 2019; Regnier 等, 2022), 剩下的 0.15 Pg 被埋藏在内陆水体中 (Mendonça 等, 2017)。内陆水体中的有机碳主要以颗粒态 (Particulate Organic Carbon, POC) 和溶解态 (Dissolved Organic Carbon, DOC) 形式存在, 通过光合作用、分解、沉积和水文过程进行复杂的动态交换 (Anderson 等, 2014; Brett 等, 2017; Paerl 等, 2011; Tranvik 等, 2009)。其中, POC 作为有机碳库的重要组成部分, 主要来源于水生植物光合作用 (内源性) (Gu 等,

收稿日期: 2025-04-16; 预印本: XXXX-XX-XX

基金项目: 国家自然科学基金面上项目 (编号: 41971286)

第一作者简介: 陈法融, 研究方向为内陆水体定量遥感。E-mail: chenfarong@nnu.edu.cn

通信作者简介: 黄昌春, 研究方向为湖泊生态环境遥感与碳循环。E-mail: huangchangchun@njnu.edu.cn

2006; Schindler 等, 2008) 和随着地表径流冲刷进入到水体中的有机碳(陆源性)(Galy 等, 2015), 不仅影响着水体中氮磷等营养盐的动态变化(张乃星等, 2013; 张运林等, 2002; Tranyik 等, 2009), 还与温室气体排放和内陆水体碳库动态平衡息息相关(Friedlingstein 等, 2023; Mendonça 等, 2017)。因此, 充分了解内陆水体中颗粒有机碳的含量、来源和时空分布格局, 对研究内陆水体碳库迁移转化、有机碳矿化、温室气体排放、以及对全球碳循环的影响具有重要的意义。

目前, 已有大量研究利用遥感技术估算水体中颗粒有机碳含量及其时空分布(Liu 等, 2019; Duan 等, 2014; Son 等, 2009; Stramski 等, 1999)。海洋 POC 主要来源于浮游植物, 以内源 POC 为主(Loisel 和 Morel, 1998; Stramski 和 Morel, 1990)。因此, 在反演海洋水体 POC 时候, 除了直接利用遥感反射率与 POC 建立经验模型外(Allison 等, 2010; Hu 等, 2015; Stramski 等, 2022), 还有先反演叶绿素 a 浓度(Stramski 和 Stramski, 2005)或根据固有光学特性(颗粒物后向散射系数 $b_{p\lambda}$ 、颗粒物衰减系数 c_p 或浮游植物吸收系数 a_{ph} 等)估算 POC(Duforêt-Gaurier 等, 2010; Son 等, 2009; Stramski 等, 1999)。在将算法移植到内陆水体中时, 基于红-近红外波段的经验模型(Duan 等, 2014)和半分析算法已成功实现长江中下游湖泊的 POC 空间分布监测, 特别是在富营养化湖泊, 藻类与浮游生物主导内源 POC 的贡献时, 其在 620 nm 处的吸收特征与 POC 的响应关系稳定(Huang 等, 2017a; Jiang 等, 2015)。相较于与海洋环境单一生物源主导的特征, 内陆水体 POC 的来源更复杂, 除藻类生长外, 还易受到悬浮泥沙的影响(Chen 等, 2018; Hou 等, 2013; Xu 等, 2020)。针对浑浊水体, 水体中总悬浮颗粒物成为关键光学参量, 基于此构建的 POC 半分析算法被成功应用于太湖的高浊度水域(Lyu 等, 2017)。然而, 上述基于单一因子(藻类或悬浮颗粒物)构建的反演算法存在着环境依赖性, 当应用于其他类型水体时, 势必会造成反演误差和限制(Le 等, 2018; Lin 等, 2018)。此外, 两者在内陆水体中都表现出了很强的时空

差异性(Huang 等, 2018), 这使得适用于海洋的 POC 算法在应用到内陆水体时会有局限性(Jiang 等, 2015)。为了提高内陆水体 POC 遥感算法的精度和普适性, 通过先确定内陆水体中有机碳类型后, 再根据不同类型分别构建 POC 生物光学反演模型(Li 等, 2024; Liu 等, 2019; Zhao 等, 2022)。这类方法可以通过将分子标识物和碳($\delta^{13}C$)氮($\delta^{15}N$)同位素等示踪方法和水体组分光学特性相结合(Xu 等, 2021), 更有效地解决了内陆水体 POC 的来源复杂性对遥感算法应用的制约。近些年, 随着示踪技术的不断发展, 越来越多的模型和示踪剂被应用到内陆水体中, 更好区分了 POC 的来源组成(Huang 等, 2017d; Meng 等, 2021; Xu 等, 2019), 有利于进一步提高 POC 遥感反演的精度(Zhao 等, 2022)。

水体颗粒有机碳遥感反演算法中, 由于有机碳来源和研究区域的差异性, 使得经验或半分析模型的应用受到一定的限制, 而以内陆水体组分光学特性和有机碳地球化学性质为基础, 通过示踪方法研究内陆水体有机碳来源组成, 并与水体组分光学特性相结合, 是一种可以有效提高颗粒有机碳遥感反演算法精度和普适性的方法(Huang 等, 2022)。本文选取长江中下游河流和典型湖泊太湖作为研究区, 针对内陆水体物质来源和光学特征的复杂性, 耦合生物地球化学示踪技术与水体光学特性解析, 系统验证颗粒有机碳遥感算法在不同来源组分条件下的适用性。

2 材料与方法

2.1 野外实验概述

本研究使用的数据来自于2004年至2022年间长江干流和太湖的49次采样, 共计372条记录(详见表1), 其中长江干流中下游的112个样点, 太湖260个样点(样点分布如图1所示)。在野外采样过程中, 同步测量获取水体遥感反射率数据, 采集表层水样(0.5米水深)保存在聚乙烯瓶中(用盐酸提前清洗), 并立即用0.7微米Whatman GF/F玻璃纤维滤膜过滤(在450℃下灼烧6小时)。所有水样和滤膜都迅速转移到实验室, 测量颗粒有机碳浓度、 $\delta^{13}C$ 和 $\delta^{15}N$ 等指标。

表1 样点数据简介
Table 1 Introduction to the samples

区域	采样时间	数据	样点数量
长江	2020年12月、2021年9月、2022年8月	遥感反射率 $R_{rs}(\lambda)$ 、颗粒物后向散射系数 $b_{bp}(\lambda)$ 、吸收系数($a_{nap}(\lambda)$ 、 $a_{ph}(\lambda)$ 和 $a_{nw}(\lambda)$)、POC、同位素数据	112
太湖	2004年10月、2006年8月、2007年11月、2008年10月、2009年4月、2010年5月、2011年5月和8月、2012年10月、2013年5月和8月、2014年10月、2015年7月、2016年8月、2017年3月	遥感反射率 $R_{rs}(\lambda)$ 、颗粒物后向散射系数 $b_{bp}(\lambda)$ 、吸收系数($a_{nap}(\lambda)$ 、 $a_{ph}(\lambda)$ 和 $a_{nw}(\lambda)$)、POC(2013年8月之前无POC数据)	201
	2019年8月	遥感反射率 $R_{rs}(\lambda)$ 、颗粒物后向散射系数 $b_{bp}(\lambda)$ 、吸收系数($a_{nap}(\lambda)$ 、 $a_{ph}(\lambda)$ 和 $a_{nw}(\lambda)$)、POC、同位素数据	59

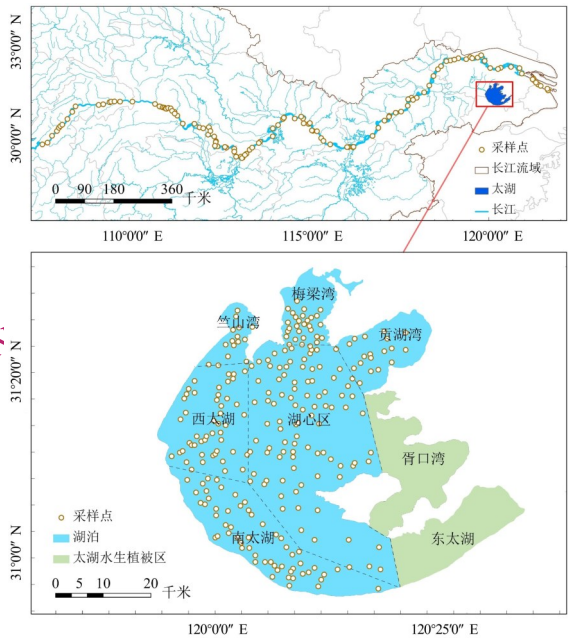


图1 研究区与采样点分布图
Fig.1 Locations of the study areas and sampling sites.

2.2 测定指标

使用美国ASD Field Spec Pro光谱仪，依据水上测量法(唐军武等，2004)获得样点水体的遥感反射率 $R_{rs}(\lambda)$ ，测量的波段范围为350~1050 nm，通过测量标准灰板、天空光和水体等的光谱辐亮度后，依据公式提取 $R_{rs}(\lambda)$ ：
$$R_{rs}(\lambda) = (L_{tw}(\lambda) - r \times L_s(\lambda)) / (L_p(\lambda) \times \pi / \rho_p(\lambda)) \#(1)$$
其中， $L_{tw}(\lambda)$ 是总的水体信息， $L_s(\lambda)$ 是天空漫反射光， r 是气-水界面的反射比， $L_p(\lambda)$ 是标准灰板的测量值， $\rho_p(\lambda)$ 是标准灰板的反射系数，具体数

据处理方法参考(Huang等，2014)。
颗粒物后向散射系数是利用仪器HS-6P测量得到，仪器在测量后向约140°的散射后经过转换得到总颗粒物后向散射系数 $b_{bp}(\lambda)$ (Maffione和Dana，1997)。内陆水体中的颗粒物吸收系数采用定量滤膜技术测量(Cleveland和Weidemann，1993)。利用岛津紫外分光光度计UV-3600 Plus测量过滤后的水样的吸光度值，并用空白膜做参考进行仪器校正，得到总颗粒物吸收系数 $a_p(\lambda)$ ；利用1%的次氯酸钠溶液漂白分离色素，测量得到非色素颗粒物吸收系数 $a_{nap}(\lambda)$ ；最后通过 $a_p(\lambda)$ 减去 $a_{nap}(\lambda)$ ，得到色素颗粒物吸收系数 $a_{ph}(\lambda)$ ；黄色物质CDOM吸收系数 $a_{CDOM}(\lambda)$ 是用孔径0.22微米的Millipore滤膜对水样进行二次过滤后，并用UV-3600 Plus测量700 nm处的吸光度值进行校正得到；非水吸收 $a_{nw}(\lambda)$ 是 $a_{nap}(\lambda)$ 、 $a_{ph}(\lambda)$ 和 $a_{CDOM}(\lambda)$ 之和。

颗粒有机碳(POC)的浓度通过总有机碳分析仪(TOC-L-SM-5000A，Shimadzu Corporation)测定得到。将带有悬浮颗粒的滤膜在55°C下干燥8h，然后用0.01 mol/L HCl处理以去除无机碳，经酸化处理后，再次干燥滤膜并称重，最后将滤膜剪碎置入总有机碳分析仪中燃烧来测定POC浓度(mg/L)(Huang等，2017a)。
POC稳定碳、氮同位素($\delta^{13}C_{POC}$ 、 $\delta^{15}N_{POC}$)通过同位素比质谱仪(MAT253 Plus，Thermo Fisher)测定(Li等，2018；Wang等，2013)。碳和氮同位素值分别以维也纳Pee Dee Belemnite (VPDB)

的 $\delta^{13}\text{C}$ 和大气氮的 $\delta^{15}\text{N}$ 作为标准计算得到, 重复测量的 $\delta^{13}\text{C}$ 和 $\delta^{15}\text{N}$ 的标准偏差均约为 0.05‰。

用二氯甲烷-甲醇溶液 (93: 7, v: v) 通过微波萃取 (100℃, 10 分钟) 从滤膜中获得提取物, 用正己烷作为溶剂在 40℃ 下旋转蒸发 3 次浓缩后固相萃取分离纯化浓液, 再旋转蒸发到 1mL, 最后通过气质联用仪 (GC/MS - QP2010 Ultra, Shimadzu Corp. Japan) 提取正构烷烃 (Jiang 等, 2020)。

2.3 遥感数据预处理

研究中使用了哨兵 3 号 Sentinel - 3A 的海洋和陆地颜色仪 (Ocean and Land Color Instrument, OLCI) 遥感数据, OLCI 在可见光到近红外光谱范围内设有 21 个波段, 空间分辨率为 300 米, 具有强大的监测光学复杂水域的能力。研究中所有覆盖研究区样点的 OLCI 影像从欧空局网站上 (<http://scihub.copernicus.eu>) 下载, 并利用 SeaDAS 软件对影像数据进行图像预处理, 包括几何校正和大气校正等。其中大气校正策略采用的是 MUMM 模型 (The Management Unit Mathematical Models) 是一种针对二类水体的大气校正算法 (Ruddick 等, 2000), 可以很好应用到内陆河流和湖泊中 (Miao 等, 2019)。

2.4 精度评价指标

研究使用以下统计指标来评估算法的表现, 包括均方根误差 (RMSE)、中位数偏差 (MB) 和平均绝对百分误差 (MAPE)。

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \quad \#(2)$$

$$\text{MB} = \text{median}(y_i - \hat{y}_i) \quad \#(3)$$

$$\text{MAPE} = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad \#(4)$$

式中, y_i 为样点 i 的实测值, $\hat{y}_i$ 为样点 i 的模型预测值, n 为样本数量。

3 颗粒有机碳来源解析模型

3.1 表层水体 POC 碳氮同位素与正构烷烃特征

由于颗粒有机碳 (POC) 在基本组成、分子结构和同位素分馏上存在差异, 不同来源的碳 ($\delta^{13}\text{C}$) 和氮 ($\delta^{15}\text{N}$) 同位素值显著不同, 所以可以

作为追踪 POC 来源的指标 (Alewell 等, 2016; Machiwa, 2010), 内源选取的端元值 -20.87‰ 与研究区微囊藻的 $\delta^{13}\text{C}$ 值相符 (de Kluijver 等, 2012), -28.27‰ 被认为是陆地端元的平均值, 接近 C3 植物的稳定碳同位素值 (Xu 等, 2020)。同样的, 氮稳定同位素则是 1.70‰ 和 11.26‰ 分别被认为是陆源和内源内含物的 $\delta^{15}\text{N}$ 端元值 (Meng 等, 2021) (图 2)。研究区内长江表层水的 $\delta^{13}\text{C}_{\text{POC}}$ 值介于 -28.42‰~-24.49‰, $\delta^{15}\text{N}_{\text{POC}}$ 值介于 -0.82‰~14.82‰, 表现出显著的陆源主导; 太湖 $\delta^{13}\text{C}_{\text{POC}}$ 值介于 -27.21‰~-19.25‰, $\delta^{15}\text{N}_{\text{POC}}$ 值介于 1.61‰~11.42‰, 表明有机物混合陆源和藻类来源, 其中大部分区域分别在 $\delta^{13}\text{C}$ 值和 $\delta^{15}\text{N}$ 值上较高, 这是因为受到了藻华影响 (Herczeg 等, 2001; Xu 等, 2019), 少部分区域由于陆源有机质随着河流的输入 (Xu 等, 2019), $\delta^{13}\text{C}$ 和 $\delta^{15}\text{N}$ 较低。

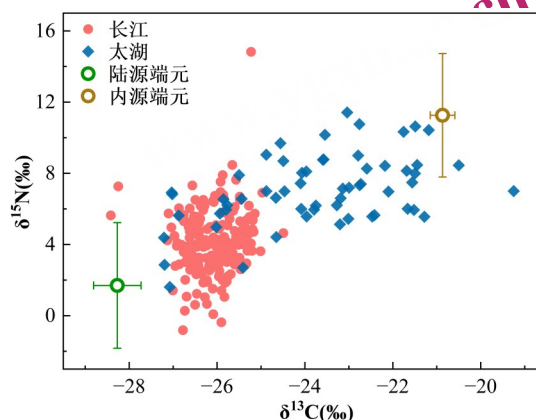


图2 研究区颗粒有机碳(POC)的碳氮同位素特征及其潜在来源

Fig.2 Carbon and nitrogen isotope characteristics of particulate organic carbon (POC) and its potential sources in the study area

POC 来源复杂且受到多种因素的控制, 尤其是富营养化湖泊, 因此除了使用稳定同位素之外, 加入生物分子标记物分析可以更准确地区分有机碳的来源, 正构烷烃的碳链分布已被用于藻类和真菌、水生植物和陆生高等植物的来源指示剂 (Ficken 等, 2000; Sojinu 等, 2012)。以研究区中的太湖为例, 短链 (n - C12 - n - C20) 正构烷烃的富集象征着藻类和光合细菌的有机物贡献较大, 其中具有明显内源性特征点位的主峰碳为 C15、C17、C19, 而太湖西南和梅梁湾由于受到了河流流入的影响, 有大量的陆地有机物的输入,

长链 (n - C26 - n - C35) 正构烷烃的占比更高, 具有明显陆源性特征点位的碳峰为 C25、C27、C29。因此基于研究区具有内源性和陆源性特征的采样点的不同链长正构烷烃的相对百分比可以计算陆生植物与藻类的比例 (Terrestrial plant to algae ratio, TAR), 增加研究区 POC 的来源区分的准确性, 其计算公式:

$$TAR = \frac{C15 + C17 + C19}{C25 + C27 + C29} \quad \#(5)$$

$$TAR^* = \frac{TAR}{TAR + 1} \quad \#(6)$$

陆生植物与藻类比例 (TAR) 的端元值选取 3.21 为内源平均值, 0.1 为陆源平均值 (Meng 等, 2021)。

3.2 POC 来源计算

相对于传统使用的采用线性方法对有机物来源进行分配的多元混合模型, 贝叶斯混合模型采用马尔可夫链蒙特卡罗 (MCMC) 采样算法, 更有效地考虑了所有参数, 可以产生更准确的比例源贡献的后验分布 (Cooper 和 Krueger, 2017), 在涉及复杂有机物源的区域更为适用。本研究贝叶斯模型的构建是使用了 MixSIAR (R package, 2.1.11), MixSIAR 与以前的混合模型相比的一个关键优势是能够将固定效应和随机效应作为协变量, 解释混合比例的可变性, 并通过信息标准计算对多个模型的相对支持 (Stock 等, 2018)。该模型计算中引入了终端成员的不确定性, 并考虑了同位素分馏因子 (Meng 等, 2021)。本研究根据碳氮稳定同位素 ($\delta^{13}C$ 和 $\delta^{15}N$) 的端元值使用贝叶斯混合模型计算了研究区内长江的陆源 (R_{terPOC}) 和内源 POC (R_{endPOC}) 的比例:

$$X_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^K p_k q_{ij} (S_{jk} + c_{jk})}{\sum_{k=1}^K p_k q_{ij}} + \varepsilon_{ij} \quad \#(7)$$

$$q_{jk} \sim N(\mu_{jk}, \omega_{jk}^2) \quad \#(8)$$

$$c_{jk} \sim N(\lambda_{jk}, \tau_{jk}^2) \quad \#(9)$$

$$\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma_j^2) \quad \#(10)$$

其中 X_{ij} 表示混合物 i 来源指标 j 的观测值; p_k 表示来源 k 的比例; q_{ij} 来源 k 中同位素 j 的浓度; S_{jk} 表示来源 k 的第 j 种同位素的来源指标的端元值, 服从均值为 μ_{jk} 方差为 ω_{jk}^2 的正态分布; c_{jk} 表示第 k 个来源的 j 同位素的分馏系数, 服从均值为 λ_{jk} 方差为 τ_{jk}^2 的正态分布; ε_{ij} 是残余误差, 描述模型未描述的

额外观测间方差, 其均值在通常为 0, 标准差 σ_j^2 由模型估算。但由于湖泊 POC 的来源通常更为复杂, 在碳氮稳定同位素作为端元之外还增加了陆生植物与藻类的比值 TAR, 通过三种端元区分研究区内太湖 POC 的 R_{terPOC} 和 R_{endPOC} 。

通过贝叶斯模型解析的来源结果表明, 在太湖, 内源 POC 的平均贡献率为 $60.18 \pm 20.26\%$, 高于陆源 POC (平均值为 $39.82 \pm 20.26\%$); 长江的陆源 POC 平均贡献率为 $95.95 \pm 4.18\%$, 远高于长江内源 POC 平均贡献值 $4.05 \pm 4.18\%$ 。

4 颗粒有机碳遥感反演

POC 的来源组成影响着水体的光学性质, 也为基于生物地球化学 - 光学机制遥感估算 POC 提供了可能。本研究基于上述的来源示踪结果, 与水体光学性质相结合, 构建半分析算法反演内陆水体中 POC 浓度。

4.1 POC 来源占比反演

由于内陆水体 POC 的来源包括生物和非生物成分, 其组成的变化会显著影响 POC 与水色要素之间的关系。内源 POC 主要来自于浮游植物的贡献 (Xu 等, 2019, 2021), 当内源产生 POC 占比 (R_{endPOC}) 较高时, POC 与叶绿素 a (Chl - a) 的相关性好, 同时与色素颗粒物吸收系数 ($a_{ph}(\lambda)$) 的关系强; 而随着地表径流输入的陆源 POC 占比 (R_{terPOC}) 较高时, POC 则与悬浮颗粒物 (TSM) 有关, 陆源有机物在输运过程中容易被微生物分解, 使得陆源颗粒物非色素吸收系数 ($a_{nap}(\lambda)$) 也具有较好的相关性 (图 3)。

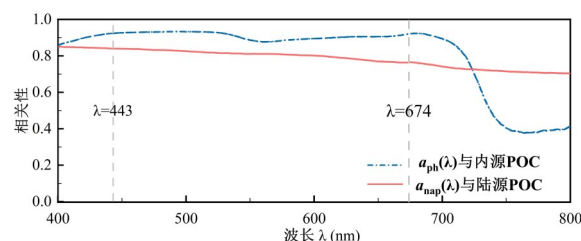


图3 不同端元 POC 浓度与吸收系数的相关性
Fig.3 Correlation between endogenous and terrestrial POC concentrations and absorption coefficients

考虑到不同端元的 POC 浓度与光学活性物质之间的关系不同, 不区分 POC 的来源组成将会造成后续浓度的反演误差。研究首先基于遥感反射

率比和实测 R_{endPOC} 之间的关系 (图4), 利用内源 POC 占比模型 (Endogenous POC Ratio, EPR)

$$R_{\text{endPOC}} = \frac{0.9159}{1 + 0.1841 \times \exp(-11.7899 \times ((\frac{1}{R_{rs}(681)} - \frac{1}{R_{rs}(754)}) \times R_{rs}(709)))} \quad \#(11)$$

$$R_{\text{terPOC}} = 1 - R_{\text{endPOC}} \quad \#(12)$$

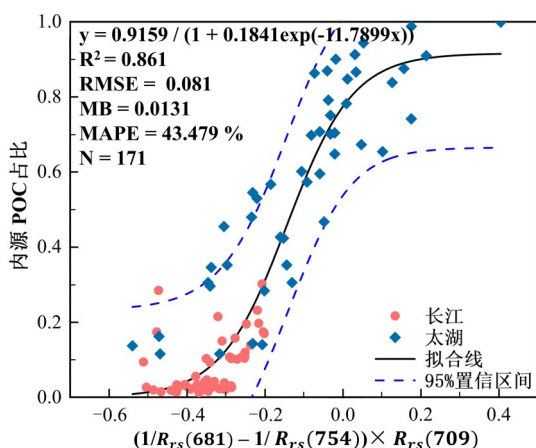


图4 遥感反射率与内源 POC 占比关系

Fig.4 Relationship between remote sensing reflectance and endogenous POC ratio

4.2 POC 浓度半分析反演算法

浮游植物和非藻类颗粒物是水体中内源和陆源 POC 的主要成分, 依据水体的固有光学性质 $a_{ph}(\lambda)$ 和 $a_{nap}(\lambda)$ 可以一定程度上反映水中浮游植物和陆源颗粒物的数量 (Babin 等, 2003; Shi 等, 2013; Sun 等, 2010)。进一步研究表明, 内源和陆源 POC 浓度分别与 a_{ph} (674) 和 a_{nap} (443) 有很强的相关性 (Zhao 等, 2022)。在推导计算 a_{ph} (674) 和 a_{nap} (443) 时, 研究利用了野外实测的遥感反射率 $R_{rs}(\lambda)$ 和吸收系数数据, 通过 QAA 模型 (Lee 等, 2002) 计算得到总的非水吸收系数 ($a_{nw}(\lambda)$) 和总的颗粒物后向散射系数 ($b_{bp}(\lambda)$) 后, 根据不同来源的 POC 与吸收系数之间的关系反演得到 POC 浓度 (具体步骤见表2)。对于光学复杂的二类水体, 浮游植物在 674 nm 处的吸收系数可以通过剥离非色素颗粒吸收 $a_{nap}(\lambda)$ 和黄色物质吸收 $a_{CDOM}(\lambda)$, 从非水吸收 $a_{nw}(\lambda)$ 中分解得到 (Liu 等, 2020); 非藻类颗粒物包含在悬浮颗粒物中, 对 $b_{bp}(\lambda)$ 有很大影响, 研究利用 b_{bp} (560) 得到非藻类颗粒物在 443nm 处的吸收系数 a_{nap} (443) (图5)。

在以内源 POC 主导的区域中 ($R_{\text{endPOC}} \geq 0.5$),

(Zhao 等, 2021) 解析水体中 POC 不同端元的贡献, 计算公式如下:

先通过 a_{ph} (674) 建立半分析反演算法, 得到内源 POC 浓度 (C_{endPOC}); 在以陆源 POC 主导的区域时 ($R_{\text{endPOC}} < 0.5$), 则是通过 a_{nap} (443) 得到陆源 POC 浓度 (C_{terPOC}) (图6)。最后, 通过之前计算的 R_{endPOC} , 得到水体中整体 POC 浓度 (C_{POC})。

4.3 算法精度评价分析

研究基于式 (2~4), 评估颗粒有机碳浓度算法的反演精度。首先验证了吸收系数 a_{ph} (674) 与 a_{nap} (443) 的反演精度, 模型反演值与实测值散点图, 详见图7。验证结果显示, a_{ph} (674) 反演模型 RMSE 为 0.531 m^{-1} , MB 为 -0.063 m^{-1} , MAPE 为 37.179%; a_{nap} (443) 反演模型 RMSE 为 0.631 m^{-1} , MB 为 0.059 m^{-1} , MAPE 为 18.913%。估算的吸收系数大部分都分布在 1:1 线周围, 模型反演值贴近实测值, 没有明显的离散值, 算法精度较好, 适用于研究区内不同光学性质的水体。

进一步地验证了内源和陆源 POC 浓度的反演精度 (图8), 算法在反演 C_{endPOC} 和 C_{terPOC} 时精度较好, 估算值与实测值均匀分布在 1:1 线周围。其中, 反演 C_{terPOC} 时实测值与反演值的 RMSE 为 0.346 mg/L , MB 为 -0.013 mg/L , MAPE 为 22.200%; 而在反演 C_{endPOC} 时地面实测与反演值得 RMSE 为 1.000 mg/L , MB 为 -0.157 mg/L , MAPE 为 24.455%。结果表明, 反演 C_{terPOC} 时的误差相对较小, 而随着算法中间步骤需要的参数增加, 误差逐级增大, 这使得反演 C_{endPOC} 精度减小, 但整体上, 模型可以准确反演 POC 不同端元的浓度。

同时, 为了验证算法能否满足实际遥感应用的需求, 研究通过获取采样点的星地同步影像, 对算法进行评估。共计获取了 55 个星地同步点, 其中太湖 46 个, 长江 9 个, 图9展示了算法在影像上反演的与地面实测的 POC 浓度散点分布。研究区中长江上反演值与实测值之间的 RMSE 为 0.932 mg/L , MB 为 0.181 mg/L , MAPE 为 40.610%; 太湖上 RMSE 为 2.026 mg/L , MB 为 -0.165 mg/L , MAPE 为 26.384%, 表明算法精度满足实际反演水体中 POC 浓度的需求。

表2 反演POC浓度算法步骤
Table 2 Steps of POC concentration retrieval algorithm

步骤	变量	公式	方法
0	r_{rs}	$= \frac{R_{rs}(\lambda)}{0.52 + 1.7 \times R_{rs}(\lambda)}$	半分析方法
1	$u(\lambda)$	$= \frac{-g_0 + \sqrt{(g_0)^2 + 4g_1r_{rs}(\lambda)}}{2g_1}$	半分析方法, $g_0 = 0.084, g_1 = 0.17$
2	Y	$= 2.0 - 2.4 \times \exp(-0.9 \frac{r_{rs}(443)}{r_{rs}(560)})$	优化迭代
3	$b_{bp}(\lambda_0)$	$= \frac{u(\lambda_0)a_w(\lambda_0)}{1 - u(\lambda_0)} - b_{bw}(\lambda_0)$	分析方法 $\lambda_0 = 754 \text{ nm}$
4	$b_b(\lambda)$	$= b_{bp}(\lambda_0)(\frac{\lambda_0}{\lambda})^Y + b_{bw}(\lambda)$	半分析方法
5	$a_{nw}(\lambda)$	$= \frac{(1 - u(\lambda))b_b(\lambda)}{u(\lambda)} - a_w(\lambda)$	分析方法
6	$a_{ph}(674)$	$= a_{nw}(674) - \eta \cdot a_{nw}(560) - (1 - \eta) \cdot a_{nw}(709)$	半分析方法 $\eta = 0.17$
7	$a_{nap}(443)$	$= 2.049 \times b_{bp}(560)^{0.5916}$	半分析方法
8	C_{endPOC}	$= -0.1117 + 2.8611 \times a_{ph}(674)^{1.4117}$	经验方法
9	C_{terPOC}	$= 0.0223 + 0.9317 \times a_{nap}(443)^{0.3297}$	经验方法
10	C_{POC}	$= \begin{cases} C_{\text{endPOC}}/R_{\text{endPOC}}, & R_{\text{endPOC}} \geq 0.5 \\ C_{\text{terPOC}}/R_{\text{terPOC}}, & R_{\text{endPOC}} < 0.5 \end{cases}$	—

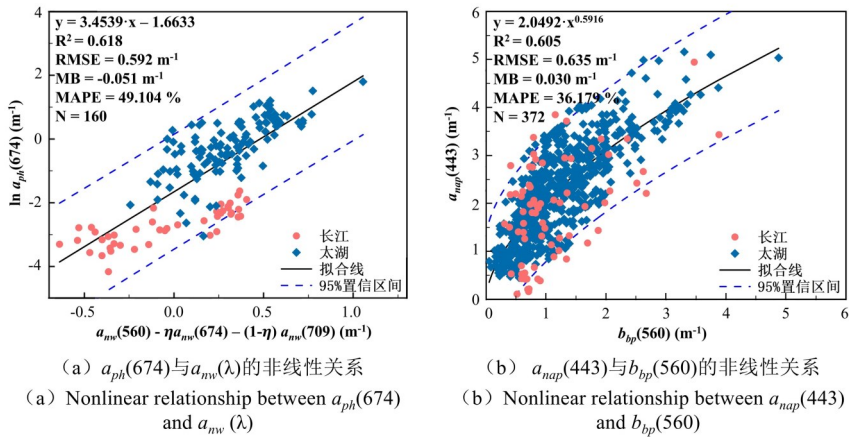


图5 $a_{ph}(674)$ 与 $a_{nw}(\lambda)$ 和 $a_{nap}(443)$ 与 $b_{bp}(560)$ 构建的非线性关系
Fig.5 The nonlinear relationship between $a_{ph}(674)$ and $a_{nw}(\lambda)$ and between $a_{nap}(443)$ and $b_{bp}(560)$

4.4 基于来源示踪手段的POC浓度反演算法优势

与先前反演算法不同，本文的基于来源示踪手段的POC浓度反演算法可以准确解析出水体中POC的端元，并根据不同端元POC的光学特性建模反演，这不仅提高了POC浓度反演的精度，也解决了之前算法在移植到其他区域时的局限性。

本研究选择几个常用于反演内陆水体POC浓度的算法（Jiang等，2019；Lin等，2018；Xu等，2021）与本文的进行对比评价（图10）。结果表明本文的POC浓度反演算法精度最佳，反演值与实测值均匀分布在1:1线附近，同时RMSE为1.322 mg/L，MB为-0.177 mg/L，MAPE为

29.380%。

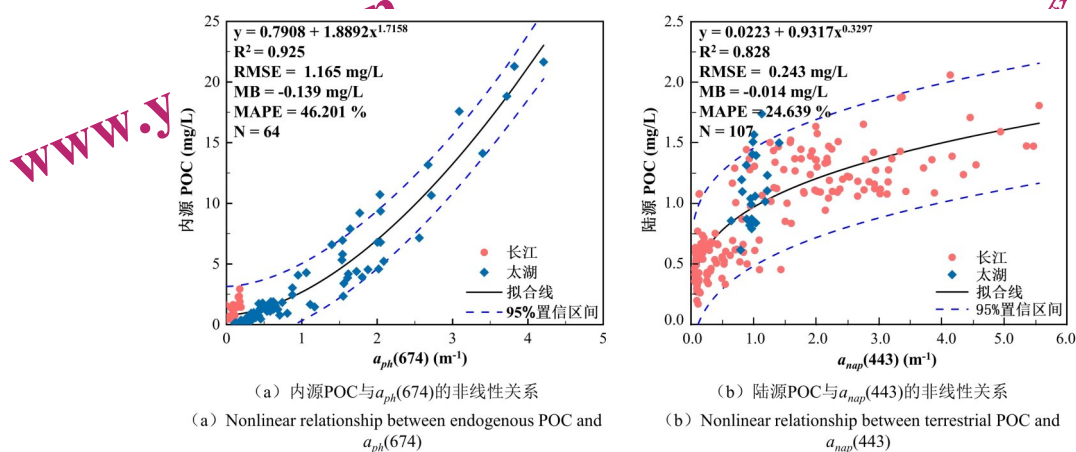


图6 内源和陆源主导的水体中颗粒有机碳浓度与吸收系数的非线性关系

Fig.6 The nonlinear relationship between POC concentration and absorption coefficients dominated by endogenous and terrestrial sources

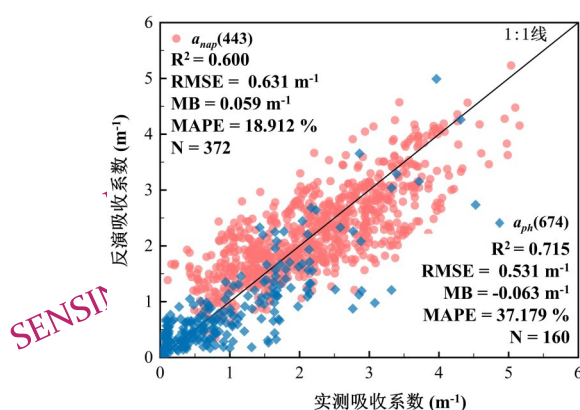
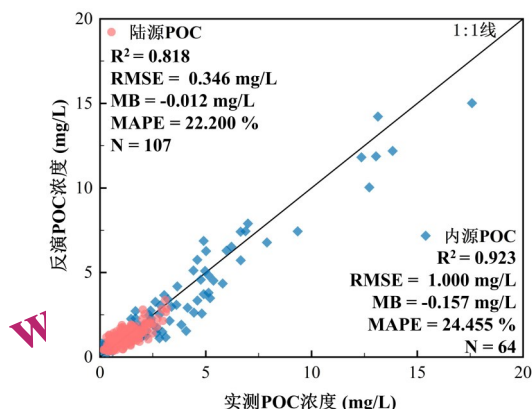
图7 吸收系数 $a_{ph}(674)$ 与 $a_{nap}(443)$ 的反演精度Fig.7 The performance of estimating absorption coefficients $a_{ph}(674)$ and $a_{nap}(443)$ 

图8 内源与陆源POC浓度的反演精度

Fig.8 The performance of estimating endogenous and terrestrial dominated POC

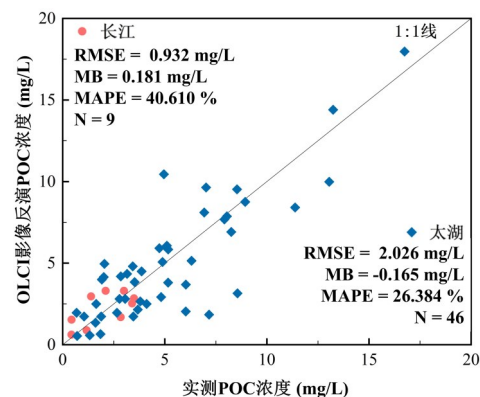


图9 星地同步点的POC浓度反演精度

Fig.9 The performance of the POC concentration inversion model at star-ground synchronization points

虽然先前算法也通过光学方法先分类水体类型后再反演POC浓度,但这种通过经验优化的算

4.5 基于OLCI影像的长江中下游水体POC空间分布特征

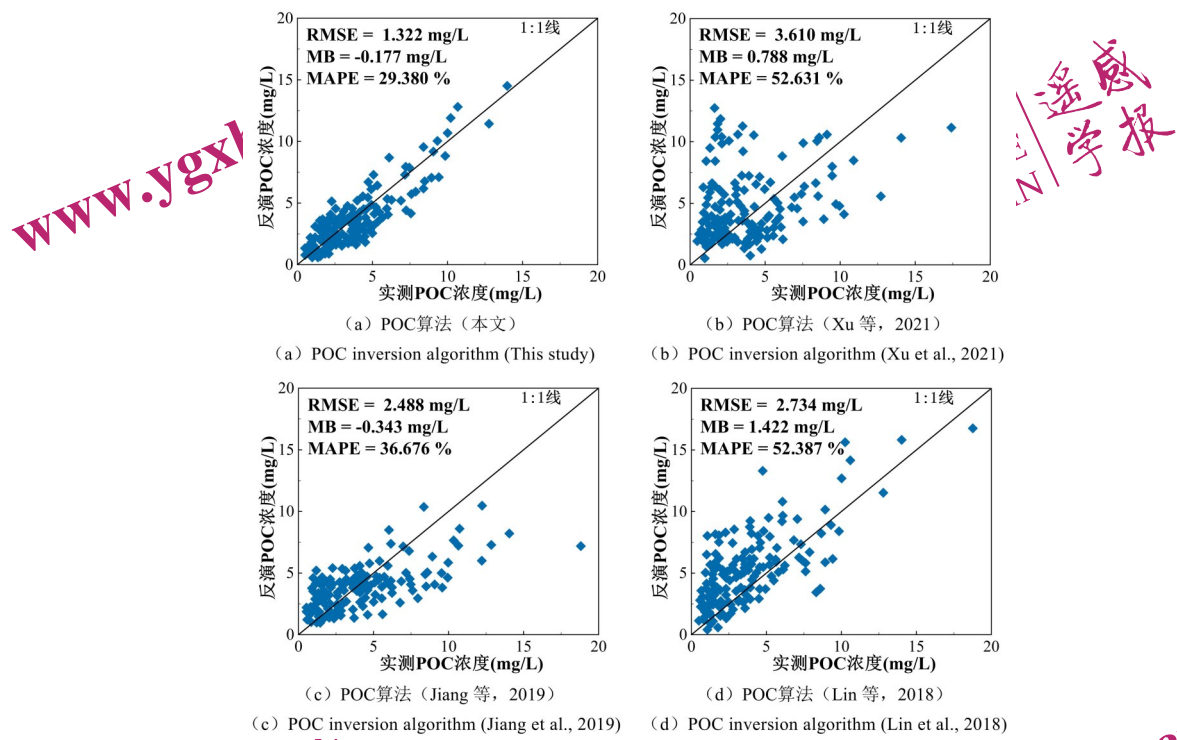


图10 不同POC算法验证和比较

Fig.10 The validation and comparison of different POC inversion algorithms

进一步验证 POC 算法模型在遥感影像上反演的效果, 研究获取了 2021 年 3 月 25 日的 OLCI 影像, 在对影像进行预处理、提取水体和水华掩膜之后, 先通过 POC 来源占比反演模型确定研究区

内水体中 POC 的组份来源, 然后依据不同来源选择对应的 POC 浓度反演模型, 获得了长江干流中下游和太湖的 POC 浓度空间分布图, 如图 11 所示。

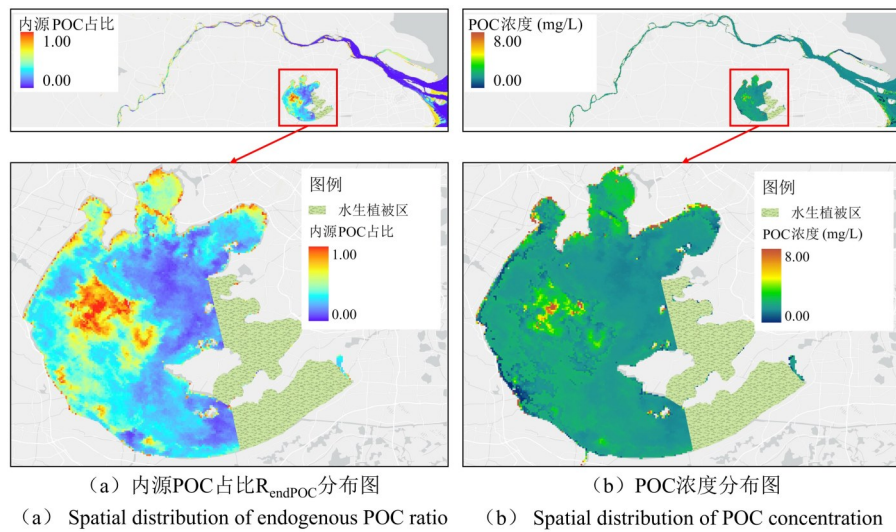


图11 长江中下游河流湖泊POC内源占比和浓度空间分布

Fig.11 Spatial distribution of endogenous POC ratio and POC concentration in rivers and lakes of the Yangtze River

根据 POC 内源占比和浓度的空间分布图表明, 水体中 POC 浓度受到自生内源和陆源输入的影响, 表现出了明显的空间差异。在整个研究区中, 长江 POC 以陆源输入为主, 平均占比约为 89.58%,

而太湖整体上内源 POC 相对较高, 约占 59.93%。此外, POC 浓度和内源性 POC 占比的空间分布相似, 高值区域集中在研究区的湖泊中, 进一步表明了浮游植物的优势影响着研究区内水体中 POC

浓度的高低,这也使得太湖的POC浓度(平均2.21 mg/L)高于长江河流中的浓度(平均1.03 mg/L)。在太湖中,内源性颗粒有机碳在梅梁湾和西太湖区域的比例较高,这与太湖经常爆发藻类水华的区域相吻合(Huang等, 2015, 2019);在南太湖和贡湖湾区域,陆源颗粒有机碳随着输入性河流汇入湖泊,内源和陆源的贡献均衡;而在湖心区,随着强风扰动,湖泊中沉积物再悬浮(Huang和Yao, 2017b; Huang等, 2017c),使得陆源性颗粒有机碳的比例相对较高(Xu等, 2020)。

5 结论与展望

颗粒有机碳(POC)的来源影响着内陆水体中碳的转化,在碳循环中起着重要作用,一直是研究重点关注的问题,但其来源的复杂性也阻碍着光学遥感准确反演内陆水体中POC浓度。本研究利用碳氮同位素和正构烷烃作为贝叶斯混合模型的参数,解析了水体中POC的内源与陆源贡献。在此基础上,利用遥感反射率和水体生物光学特性等数据,通过遥感三波段比例模型,得到了水体中内源POC的占比(R^2 为0.861, RMSE为0.081, MB为0.0131, MAPE为43.479%),并依据占比将水体分为内源和陆源主导。针对不同水体类型,分别利用了浮游植物吸收和非色素颗粒物吸收系数估算了内源和陆源POC浓度,最后依据内源与陆源POC的占比,推导得到整体POC浓度。该算法反演的RMSE为1.322 mg/L, MB为-0.177 mg/L, MAPE为29.380%,与已有算法相比,具有更好的精度和稳定性。这种遥感与生物地球化学技术的协同反演结合了遥感数据大时空尺度的优势和生物地球化学技术揭示碳循环输移的特征机理的能力,为监测内陆水体中碳库来源组成与时空动态分布提供了新方向。本研究利用了来源示踪手段反演水体中POC的浓度拓展了遥感技术的应用思路,在解决先前遥感反演内陆水体中POC浓度时水体光谱响应复杂性和POC来源组成的不确定性等问题中进行了有效探索,然而算法在其他水域的表现尚未验证,在之后的研究中,将通过收集更多的数据,进一步检验完善算法的性能。

参考文献(References)

- Tang J W, Tian G L, Wang X Y, Wang J M and Song Q J. 2004. The methods of water spectral measurement and analysis I: above-water method. *Journal of Remote Sensing*, 8(1): 37-44 (唐军武, 田国良, 汪小勇, 王晓梅, 宋庆君. 2004. 水体光谱测量与分析 I: 水面上测量法. *遥感学报*, 8(1): 37-44 [DOI: 10.11834/jrs.20040106])
- Zhang N X, Song J M and He Z P. 2006. Biogeochemical mechanism of particulate organic carbon (POC) variations in seawaters. *Acta Ecologica Sinica*, 26(7): 2328-2339 (张乃星, 宋金明, 贺志鹏. 2006. 海水颗粒有机碳(POC)变化的生物地球化学机制. *生态学报*, 26(7): 2328-2339 [DOI: 10.3321/j. issn: 1000-0933.2006.07.037])
- Zhang Y L, Qin B Q and Huang Q F. Evolution and Zone Analysis on Lake Eutrophication in East Plain Region. *Shanghai Environmental Science*, 2002, 21(9): 549-553 (张运林, 秦伯强, & 黄群芳. 2002. 东部平原地区湖泊富营养化的演变及区域分析. *上海环境科学*, 21(9), 549 - 553)
- Alewel C, Birkholz A, Meusburger K, Wildhaber Y S and Mabit L. 2016. Quantitative sediment source attribution with compound-specific isotope analysis in a C3 plant-dominated catchment (central Switzerland). *Biogeosciences*, 13(5): 1587 - 1596 [DOI: 10.5194/bg-13-1587-2016]
- Allison D B, Stramski D and Mitchell B G. 2010. Empirical ocean color algorithms for estimating particulate organic carbon in the Southern Ocean. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 115 (10) [DOI: 10.1029/2009jc006040]
- Anderson N J, Bennion H and Lotter A F. 2014. Lake eutrophication and its implications for organic carbon sequestration in Europe. *Global Change Biology*, 20(9): 2741 - 2751 [DOI: 10.1111/gcb.12584]
- Babin M, Stramski D, Ferrari G M, Claustre H, Bricaud A, Obolensky G and Hoepffner N. 2003. Variations in the light absorption coefficients of phytoplankton, nonalgal particles, and dissolved organic matter in coastal waters around Europe. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 108(C7): 3211 [DOI: 10.1029/2001jc000882]
- Brett M T, Bunn S E, Chandra S, Galloway A W F, Guo F, Kainz M J, Kankaala P, Lau D C P, Moulton T P, Power M E, Rasmussen J B, Taipale S J, Thorp J H and Wehr J D. 2017. How important are terrestrial organic carbon inputs for secondary production in freshwater ecosystems? *Freshwater Biology*, 62(5): 833 - 853 [DOI: 10.1111/fwb.12909]
- Chen J, Yang H, Yang Y, Guo J, Song Y and Ding W. 2018. Combined use of radiocarbon and stable carbon isotope to constrain the sources and cycling of particulate organic carbon in a large freshwater lake, China. *Science of the Total Environment*, 625: 27 - 38 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2017.12.275]
- Cleveland J S and Weidemann A D. 1993. Quantifying absorption by aquatic particles: A multiple scattering correction for glass-fiber filters. *Limnology and Oceanography*, 38(6): 1321 - 1327 [DOI:

- 10.4319/lo.1993.38.6.1321]
- Cooper R J and Krueger T. 2017. An extended Bayesian sediment fingerprinting mixing model for the full Bayes treatment of geochemical uncertainties. *Hydrological Processes*, 31(10): 1900 – 1912 [DOI: 10.1002/hyp.11154]
- de Kluijver A, Yu J, Houtekamer M, Middelburg J J and Liu Z. 2012. Cyanobacteria as a carbon source for zooplankton in eutrophic Lake Taihu, China, measured by ^{13}C labeling and fatty acid biomarkers. *Limnology and Oceanography*, 57(4): 1245 – 1254 [DOI: 10.4319/lo.2012.57.4.1245]
- Duan H T, Feng L, Ma R H, Zhang Y C and Loiselle S A. 2014. Variability of particulate organic carbon in inland waters observed from MODIS Aqua imagery. *Environmental Research Letters*, 9(8), 084011 [DOI: 10.1088/1748-9326/9/8/084011]
- Duforêt-Gaurier L, Loisel H, Dessailly D, Nordkvist K and Alvain S. 2010. Estimates of particulate organic carbon over the euphotic depth from in situ measurements. Application to satellite data over the global ocean. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 57(3): 351 – 367 [DOI: 10.1016/j.dsr.2009.12.007]
- Ficken K J, Li B, Swain D L and Eglinton G. 2000. An n-alkane proxy for the sedimentary input of submerged/floating freshwater aquatic macrophytes. *Organic Geochemistry*, 31(7 – 8): 745 – 749 [DOI: 10.1016/S0146-6380(00)00081-4]
- Friedlingstein P, O'Sullivan M, Jones M W, Andrew R M, Bakker D C E, Hauck J, Landschützer P, Le Quéré C, Luijckx I T, Peters G P, Peters W, Pongratz J, Schwingshackl C, Sitch S, Canadell J G,iais P, Jackson R B, Alin S R, Anthoni P and Zheng B. 2023. Global Carbon Budget 2023. *Earth System Science Data*, 15(12): 5301 – 5369 [DOI: 10.5194/essd-15-5301-2023]
- Galy V, Peucker-Ehrenbrink B and Eglinton T. 2015. Global carbon export from the terrestrial biosphere controlled by erosion. *Nature*, 521(7551): 204 – 207 [DOI: 10.1038/nature14400]
- Gu B, Chapman A D and Schelske C L. 2006. Factors controlling seasonal variations in stable isotope composition of particulate organic matter in a soft water eutrophic lake. *Limnology and Oceanography*, 51(6): 2837 – 2848 [DOI: 10.4319/lo.2006.51.6.2837]
- Herczeg A L, Smith A K and Dighton J C. 2001. A 120 year record of changes in nitrogen and carbon cycling in Lake Alexandrina, South Australia: C:N, $\delta^{15}\text{N}$ and $\delta^{13}\text{C}$ in sediments. *Applied Geochemistry*, 16(1): 73 – 84 [DOI: 10.1016/S0883-2927(00)00016-0]
- Holgerson M A and Raymond P A. 2016. Large contribution to inland water CO_2 and CH_4 emissions from very small ponds. *Nature Geoscience*, 9(3): 222 – 226 [DOI: 10.1038/ngeo2654]
- Hou W, Gu B H, Lin Q Q, Gu J G and Han B P. 2013. Stable isotope composition of suspended particulate organic matter in twenty reservoirs from Guangdong, southern China: Implications for pelagic carbon and nitrogen cycling. *Water Research*, 47(11): 3610 – 3623 [DOI: 10.1016/j.waters.2013.04.014]
- Hu S B, Cao W X, Wang G F, Xu Z T, Zhao W J, Lin J F, Zhou W and Yao L J. 2015. Empirical ocean color algorithm for estimating particulate organic carbon in the South China Sea. *Chinese Journal of Oceanology and Limnology*, 33(3): 764 – 778 [DOI: 10.1007/s00343-015-4203-x]
- Huang C C, Shi K, Yang H, Li Y M, Zhu A X, Sun B Y, Xu L, Zou J and Chen X. 2015. Satellite observation of hourly dynamic characteristics of algae with Geostationary Ocean Color Imager (GO-CI) data in Lake Taihu. *Remote Sensing of Environment*, 159: 278 – 287 [DOI: 10.1016/j.rse.2014.12.016]
- Huang C C, Yang H, Zhu A X, Zhang M L, Lü H, Huang T, Zou J and Li Y M. 2015. Evaluation of the Geostationary Ocean Color Imager (GOCI) to monitor the dynamic characteristics of suspension sediment in Taihu Lake. *International Journal of Remote Sensing*, 36(15): 3859 – 3874 [DOI: 10.1080/01431161.2015.1070323]
- Huang C C, Jiang Q L, Yao L, Li Y M, Yang H, Huang T and Zhang M L. 2017a. Spatiotemporal Variation in Particulate Organic Carbon Based on Long-Term MODIS Observations in Taihu Lake, China. *Remote Sensing* 9(6): 624 [DOI: 10.3390/rs9060624]
- Huang C C and Yao L. 2017b. Semi-Analytical Retrieval of the Diffuse Attenuation Coefficient in Large and Shallow Lakes from GOCI, a High Temporal-Resolution Satellite. *Remote Sensing*, 9, 825 [DOI: 10.3390/rs9080825]
- Huang C C, Yao L, Huang T, Zhang M L, Zhu A X and Yang H. 2017c. Wind and rainfall regulation of the diffuse attenuation coefficient in large, shallow lakes from long-term MODIS observations using a semianalytical model. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 122(13): 6748–6763 [DOI: 10.1002/2017JD026955]
- Huang C C, Yao L, Zhang Y L, Huang T, Zhang M L, Zhu A X and Yang H. 2017d. Spatial and temporal variation in autochthonous and allochthonous contributors to increased organic carbon and nitrogen burial in a plateau lake. *Science of The Total Environment*, 603 – 604: 390 – 400 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2017.06.118]
- Huang C C, Jiang Q L, Yao L, Yang H, Lin C, Huang T, Zhu A X and Zhang Y M. 2018. Variation pattern of particulate organic carbon and nitrogen in oceans and inland waters, *Biogeosciences*, 15: 1827 – 1841 [DOI: 10.5194/bg-15-1827-2018]
- Huang C C, Yao L, Li J S, Zhou C H, Guo Y L and Li Y M. 2022. Remote sensing technology in the study of lake carbon cycle: Opportunities and challenges. *National Remote Sensing Bulletin*, 26(1): 49-67 (黄昌春, 姚凌, 李俊生, 周成虎, 郭宇龙, 李云梅. 2022. 湖泊碳循环研究中遥感技术的机遇与挑战. *遥感学报*, 26(1): 49-67 [DOI: 10.11834/jrs.20221220])
- Huang C C, Zou J, Li Y M, Yang H, Shi K, Li J S, Wang Y H, Chen A X and Zheng F. 2014. Assessment of NIR-red algorithms for observation of chlorophyll-a in highly turbid inland waters in China. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 93: 29 – 39 [DOI: 10.1016/j.isprsjprs.2014.03.012]
- Huang C C, Zhang Y L, Huang T, Yang H, Li Y M, Zhang Z G, He M Y, Hu Z J, Song T and Zhu A X. 2019. Long-term variation of phytoplankton biomass and physiology in Taihu Lake as observed via MODIS satellite. *Water Research*, 153: 187-199 [DOI: 10.1016/j.watres.2019.01.017]
- Jiang G J, Loiselle S A, Yang D T, Gao C J, Ma R H, Su W and Duan H T. 2019. An absorption-specific approach to examining dynam-

- ics of particulate organic carbon from VIIRS observations in inland and coastal waters. *Remote Sensing of Environment*, 224: 29 – 43 [DOI: 10.1016/j.rse.2019.01.030]
- Jiang G J, Ma R H, Loisel H, Qian H T, Su W, Cai W X, Huang C C, Yang J and Yu W. 2015. Remote sensing of particulate organic carbon dynamics in a eutrophic lake (Taihu Lake, China). *Science of The Total Environment*, 532: 245 – 254 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2015.05.120]
- Jiang Q L, Li S D, Chen Z L, Huang C C, Wu W X, Wan H B, Hu Z J, Han C, Zhang Z G, Yang H and Huang T. 2020. Disturbance mechanisms of lacustrine organic carbon burial: Case study of Cuopu Lake, Southwest China. *Science of The Total Environment*, 746, 140615 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.140615]
- Le C F, Zhou X Y, Hu C M, Lee Z P, Li L and Stramski D. 2018. A Color-Index-Based Empirical Algorithm for Determining Particulate Organic Carbon Concentration in the Ocean From Satellite Observations. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 123(10): 7407 – 7419 [DOI: 10.1029/2018jc014014]
- Lee Z P, Carder K L and Arnone R A. 2002. Deriving inherent optical properties from water color: a multiband quasi-analytical algorithm for optically deep waters. *Applied Optics*, 41(27): 5755–5772 [DOI: 10.1364/ao.41.005755]
- Li M X, Peng C H, Wang M, Xue W, Zhang K, Wang K F, Shi G H and Zhu Q A. 2017. The carbon flux of global rivers: A re-evaluation of amount and spatial patterns. *Ecological Indicators*, 80: 40 – 51 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2017.04.049]
- Li M X, Peng C H, Zhou X L, Yang Y Z, Guo Y R, Shi G H and Zhu Q A. 2019. Modeling Global Riverine DOC Flux Dynamics From 1951 to 2015. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 11 (2): 514 – 530 [DOI: 10.1029/2018ms001363]
- Li M Y, Shen F, Organelli E, Luo W, Li R H, Sun X R and Wei X D. 2024. Disentangling Particle Composition to Improve Space-Based Quantification of POC in Optically Complex Estuarine and Coastal Waters. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 62: 1 – 15 [DOI: 10.1109/tgrs.2023.3341462]
- Li Z C, Xu X G, Ji M, Wang G X, Han R M, Ma J, Yan X C and Liu J. 2018. Estimating sedimentary organic matter sources by multi-combined proxies for spatial heterogeneity in a large and shallow eutrophic lake. *Journal of Environmental Management*, 224: 147 – 155 [DOI: 10.1016/j.jenvman.2018.07.017]
- Lin J, Lyu H, Miao S, Pan Y, Yu Z M, Li Y M and Wang Q. 2018. A two-step approach to mapping particulate organic carbon (POC) in inland water using OLCI images. *Ecological Indicators*, 90: 502 – 512 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2018.03.044]
- Liu D, Bai Y, He X Q, Pan D L, Chen C T A, Li T, Xu Y, Gong C H and Zhang L. 2019. Satellite-derived particulate organic carbon flux in the Changjiang River through different stages of the Three Gorges Dam. *Remote Sensing of Environment*, 223: 154 – 165 [DOI: 10.1016/J.RSE.2019.01.012]
- Liu G, Li L, Song K S, Li Y M, Lyu H, Wen Z D, Fang C, Bi S, Sun X P, Wang Z M, Cao Z G, Shang Y X, Yu G L, Zheng Z B, Huang C C, Xu Y F and Shi K. 2020. An OLCI-based algorithm for semi-empirically partitioning absorption coefficient and estimating chlorophyll a concentration in various turbid case-2 waters. *Remote Sensing of Environment*, 239, 111648 [DOI: 10.1016/j.rse.2020.111648]
- Loisel H and Morel A. 1998. Light scattering and chlorophyll concentration in case 1 waters: A reexamination. *Limnology and Oceanography*, 43(5): 847 – 858 [DOI: 10.4319/lo.1998.43.5.0847]
- Lyu H, Wang Y N, Jia Q, Shi L, Li Y M and Wang Q. 2017. Developing a semi-analytical algorithm to estimate particulate organic carbon (POC) levels in inland eutrophic turbid water based on MERIS images: A case study of Lake Taihu. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 62: 69 – 77 [DOI: 10.1016/j.jag.2017.06.001]
- Machiwa J F. 2010. Stable carbon and nitrogen isotopic signatures of organic matter sources in near-shore areas of Lake Victoria, East Africa. *Journal of Great Lakes Research*, 36(1): 1 – 8 [DOI: 10.1016/j.jglr.2009.11.005]
- Maffione R A and Dana D R. 1997. Instruments and methods for measuring the backward-scattering coefficient of ocean waters. *Applied Optics*, 36(24): 6057–6067 [DOI: 10.1364/ao.36.006057]
- Mendonça R, Müller R A, Clow D, Verpoorter C, Raymond P, Tranvik L J and Sobek S. 2017. Organic carbon burial in global lakes and reservoirs. *Nature Communications*, 8(1): 1 – 7. [DOI: 10.1038/s41467-017-01789-6]
- Meng L Z, Zhao Z L, Lu L F, Zhou J, Luo D, Fan R, Li S D, Jiang Q L, Huang T, Yang H and Huang C C. 2021. Source identification of particulate organic carbon using stable isotopes and n-alkanes: modeling and application. *Water Research*, 197, 117083 [DOI: 10.1016/j.waters.2021.117083]
- Miao S, Lyu H, Wang Q, Li Y M, Wu Z M, Du C G, Xu J, Bi S, Mu M and Lei S H. 2019. Estimation of terrestrial humic-like substances in inland lakes based on the optical and fluorescence characteristics of chromophoric dissolved organic matter (CDOM) using OLCI images. *Ecological Indicators*, 101: 399 – 409 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2019.01.039]
- Paerl H W, Xu H, McCarthy M J, Zhu G W, Qin B Q, Li Y P and Gardner W S. 2011. Controlling harmful cyanobacterial blooms in a hyper-eutrophic lake (Lake Taihu, China): The need for a dual nutrient (N & P) management strategy. *Water Research*, 45(5): 1973 – 1983 [DOI: 10.1016/j.waters.2010.09.018]
- Raymond P A, Hartmann J, Sauerwald R, Sobek S, McDonald C, Hoover M, Butman D, Striegl R, Mayorga E, Humborg C, Kortelainen P, Dürr H, Meybeck M, Ciais P and Guth P. 2013. Global carbon dioxide emissions from inland waters. *Nature*, 503(7476): 355 – 359 [DOI: 10.1038/nature12760]
- Regnier P, Resplandy L, Najjar R G and Ciais P. 2022. The land-to-ocean loops of the global carbon cycle. *Nature*, 603(7901): 401 – 410 [DOI: 10.1038/s41586-021-04339-9]
- Ruddick K G, Ovidio F and Rijkeboer M. 2000. Atmospheric correction of SeaWiFS imagery for turbid coastal and inland waters. *Applied Optics*, 39(6): 897 – 912 [DOI: 10.1364/ao.39.000897]
- Schindler D W, Hecky R E, Findlay D L, Stainton M P, Parker B R, Pa-

- terson M J, Beaty K G, Lyng M and Kasian S E M. 2008. Eutrophication of lakes cannot be controlled by reducing nitrogen input: Results of a 37-year whole-ecosystem experiment. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 105(32): 11254 – 11258 [DOI: 10.1073/pnas.0805108105]
- Shi K, Li Y M, Lin L and Lu H. 2013. Absorption characteristics of optically complex inland waters: Implications for water optical classification. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 118 (2): 860 – 874 [DOI: 10.1002/jgrg.20071]
- Sojinu S O, Sonibare O O, Ekundayo O and Zeng E Y. 2012. Assessing anthropogenic contamination in surface sediments of Niger Delta, Nigeria with fecal sterols and n-alkanes as indicators. *Science of The Total Environment*, 441: 89 – 96 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2012.09.015]
- Son Y B, Gardner W D, Mishonov A V and Richardson M J. 2009. Multispectral remote-sensing algorithms for particulate organic carbon (POC): The Gulf of Mexico. *Remote Sensing of Environment*, 113(1): 50 – 61 [DOI: 10.1016/j.rse.2008.08.011]
- Stock B C, Jackson A L, Ward E J, Parnell A C, Phillips D L and Semmens B X. 2018. Analyzing mixing systems using a new generation of Bayesian tracer mixing models. *PeerJ*, 6(6): e5096 [DOI: 10.7717/peerj.5096]
- Stramska M and Stramski D. 2005. Variability of particulate organic carbon concentration in the north polar Atlantic based on ocean color observations with Sea-viewing Wide Field-of-view Sensor (SeaWiFS). *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 110(C10): 1 – 16 [DOI: 10.1029/2004jc002762]
- Stramski D, Joshi I and Reynolds R A. 2022. Ocean color algorithms to estimate the concentration of particulate organic carbon in surface waters of the global ocean in support of a long-term data record from multiple satellite missions. *Remote Sensing of Environment*, 269, 112776 [DOI: 10.1016/j.rse.2021.112776]
- Stramski D and Morel A. 1990. Optical properties of photosynthetic picoplankton in different physiological states as affected by growth irradiance. *Deep Sea Research Part A. Oceanographic Research Papers*, 37(2): 245 – 266 [DOI: 10.1016/0198-0149(90)90126-g]
- Stramski D, Reynolds R A, Kahru M and Mitchell B G. 1999. Estimation of particulate organic carbon in the ocean from satellite remote sensing. *Science*, 285(5425): 239 – 242 [DOI: 10.1126/science.285.5425.239]
- Sun D Y, Li Y M, Wang Q, Lv H, Le C F, Huang C C and Gong S Q. 2010. Partitioning particulate scattering and absorption into contributions of phytoplankton and non-algal particles in winter in Lake Taihu (China). *Hydrobiologia*, 644(1): 335 – 349 [DOI: 10.1007/s10750-010-0198-7]
- Tranvik L J, Downing J A, Cotner J B, Loiselle S A, Striegl R G, Ballatore T J, Dillon P, Finlay K, Fortino K, Knoll L B, Kortelainen P L, Kutser T, Larsen S, Laurion I, Leech D M, Leigh McCallister S, McKnight D M, Melack J M, Overholt E, Weyhenmeyer G A. 2009. Lakes and reservoirs as regulators of carbon cycling and climate. *Limnology and Oceanography*, 54(6 PART 2): 2298 – 2314 [DOI: 10.4319/lo.2009.54.6_part_2.2298]
- Wang Y H, Yang H, Chen X, Zhang J X, Ou J, Xie B and Huang C C. 2013. Molecular biomarkers for sources of organic matter in lacustrine sediments in a subtropical lake in China. *Environmental Pollution*, 176: 284 – 291 [DOI: 10.1016/j.envpol.2013.01.041]
- Xu J, Lei S H, Bi S, Li Y M, Lyu H, Xu J F, Xu X G, Mu M, Miao S, Zeng S and Zheng Z B. 2020. Tracking spatio-temporal dynamics of POC sources in eutrophic lakes by remote sensing. *Water Research*, 168, 115162 [DOI: 10.1016/j.waters.2019.115162]
- Xu J, Li Y M, Lyu H, Lei S H, Mu M, Bi S, Xu J F, Xu X G, Miao S, Li L L and Yan X C. 2021. Simultaneous inversion of concentrations of POC and its endmembers in lakes: A novel remote sensing strategy. *Science of The Total Environment*, 770, 145249 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.145249]
- Xu J, Lyu H, Xu X G, Li Y M, Li Z C, Lei S H, Bi S, Mu M, Du C and Zeng S. 2019. Dual stable isotope tracing the source and composition of POM during algae blooms in a large and shallow eutrophic lake: All contributions from algae? *Ecological Indicators*, 102: 599 – 607 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2019.03.014]
- Zhao Z L, Cai X L, Huang C C, Shi K, Li J H, Jin J L, Yang H and Huang T. 2022. A novel semianalytical remote sensing retrieval strategy and algorithm for particulate organic carbon in inland waters based on biogeochemical-optical mechanisms. *Remote Sensing of Environment*, 280, 113213 [DOI: 10.1016/j.rse.2022.113213]
- Zhao Z L, Huang C C, Meng L Z, Lu L F, Wu Y F, Fan R, Li S D, Sui Z W, Huang T, Huang C L, Yang H and Zhang L M. 2021. Eutrophication and lakes dynamic conditions control the endogenous and terrestrial POC observed by remote sensing: Modeling and application. *Ecological Indicators*, 129, 107907 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2021.107907]

Remote sensing inversion of particulate organic carbon in inland waters based on biochemical – optical mechanisms

CHEN Farong^{1,2}, YANG Guangrui^{1,2}, ZHAO Zhilong⁵, SHI Kun⁵, ZHAO Chu^{1,2}, MENG Lize^{1,2}, YE

Zhishan^{1,2}, ZHANG Xinyi^{1,2}, HUANG Changchun^{1,2,3,4}

1.School of Geography, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China;

2.Jiangsu Provincial Key Laboratory of Materials Cycling and Pollution Control, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China;

3.Jiangsu Centre for Collaborative Innovation in Geographical Information Resource Development and Application, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China;

4.Key Laboratory of Virtual Geographic Environment, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China;

5.State Key Laboratory of Lake and Watershed Science for Water Security, Nanjing Institute of Geography and Limnology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China

Abstract: Particulate Organic Carbon (POC) is a critical component of the inland water carbon pool and plays a pivotal role in carbon transport, biogeochemical transformation, mineralization, and greenhouse gas emissions. Quantifying both the concentration and the source composition of POC is essential for understanding inland water carbon cycling and improving regional carbon budget assessments. However, the coexistence of endogenous and terrestrial sources creates substantial variability in optical and biochemical properties, limiting the accuracy and generalizability of existing remote sensing algorithms. This study aims to apply an approach that integrates biochemical source – tracing methods with satellite remote sensing to accurately estimate POC concentration and source composition across diverse aquatic environments. A biochemical end – member mixing model was first applied to water samples collected from the Yangtze River mainstem and Lake Taihu to quantify the contribution of endogenous and terrestrial POC. Based on these source apportionments, a three – band remote sensing reflectance ratio was identified as an effective optical indicator for resolving the proportion of endogenous POC. This ratio was used to classify water bodies into two categories characterized by dominant endogenous or terrestrial POC sources. Building upon this classification, a semi – analytical algorithm using inherent optical properties (IOPs) of the water column was applied to estimate POC concentration. Specifically, the particle absorption coefficient of pigments, $a_{ph}(674)$, was used as a proxy for endogenous POC concentration, while the non – algal particle absorption coefficient, $a_{nap}(443)$, was used to infer terrestrial POC concentration. Total POC concentration was then derived by integrating the two source – specific estimates according to their fractional contributions. The three – band remote sensing reflectance ratio demonstrated strong performance in estimating the proportion of endogenous POC in the water column, yielding an RMSE of 0.081, an MB of 0.0131, and a MAPE of 43.479%. Endogenous POC concentration estimated using $a_{ph}(674)$ achieved an RMSE of 1.000 mg/L, an MB of -0.157 mg/L, and a MAPE of 24.455%. Similarly, terrestrial POC concentration predicted from $a_{nap}(443)$ showed an RMSE of 0.346 mg/L, an MB of -0.012 mg/L, and a MAPE of 22.200%. When combined, the overall POC algorithm outperformed existing empirical and semi – analytical models, exhibiting an RMSE of 1.322 mg/L, an MB of -0.177 mg/L, and a MAPE of 29.380%. These results confirm that integrating optical classification with source – specific modeling significantly improves the robustness and generalizability of POC retrievals across heterogeneous inland waters. This study demonstrates that coupling remote sensing techniques with biochemical source – tracing provides a powerful framework for quantifying both POC concentration and source composition at broad spatial and temporal scales. The approach effectively leverages the mechanistic insights offered by biochemical methods and the large – scale observational capability of satellite remote sensing. The resulting algorithm enhances the interpretability and transferability of POC retrievals, offering a promising tool for advancing carbon pool monitoring in inland waters. However, the algorithm has not yet been validated beyond the Yangtze River mainstem and Lake Taihu regions. Future work will focus on acquiring additional datasets from diverse hydrological and optical environments to further refine model performance and assess its broader applicability.

Key words: Inland waters, particulate organic carbon, isotopic tracing, n – alkanes, semi – analytical model

Supported by Supported by grants from the National Natural Science Foundation of China (Nos. 41971286)