

1998年—2020年渤海、黄海和东海月平均典型浮游植物色素浓度遥感数据集

孙德勇^{1,2}, 李正浩¹, 王胜强^{1,2}, 环宇¹, 张海龙^{1,2}, 齐琳³,
刘建强^{2,4}, 何宜军^{1,2}

1. 南京信息工程大学 海洋科学学院, 南京 210044;
2. 自然资源部空间海洋遥感与应用重点实验室, 北京 100081;
3. 美国南佛罗里达大学 海洋科学学院, 圣彼德斯堡 FL33701;
4. 国家卫星海洋应用中心, 北京 100081

摘要: 海洋浮游植物群落结构信息对了解和研究碳循环和气候变化至关重要。浮游植物中含有的多种色素能够用于描述浮游植物群落结构特征和生理状态, 因此浮游植物色素浓度的检测具有重要意义。本研究基于2016年—2018年渤海、黄海和东海7次航次调查实验中采集的实测数据(包括浮游植物吸收系数、16种典型色素浓度和遥感反射率), 利用高斯分解法开发了一种基于浮游植物吸收的色素浓度遥感模型, 并使用原位观测数据集进行评估, 得到的结果的误差可接受(例如, 大部分色素模型的平均绝对百分比误差 MAPE<60%)。卫星匹配验证也表明反演结果与实测数据的一致性(大部分色素模型的 MAPE 范围 40%—60%)。将本文开发的模型应用于 SeaWiFS 和 MODIS-Aqua 遥感反射率月平均产品(1998年—2020年), 获得了渤海、黄海和东海区域 16 种色素浓度 23 年的时空变化数据记录。浮游植物色素浓度遥感数据集可以从 <https://doi.org/10.17632/bhcznf2m7v.1> 下载获得。本研究从遥感反射率卫星数据中得到复杂浑浊沿海水域中的浮游植物色素浓度, 可为渤海、黄海和东海精细化的海洋浮游植物群落结构研究提供数据支撑。

关键词: 浮游植物色素, 吸收系数, 沿海水域, SeaWiFS, MODIS, 遥感数据集

中图分类号: P733.3/P2

引用格式: 孙德勇, 李正浩, 王胜强, 环宇, 张海龙, 齐琳, 刘建强, 何宜军. 2024. 1998年—2020年渤海、黄海和东海月平均典型浮游植物色素浓度遥感数据集. 遥感学报, 28(4): 1101–1111

Sun D Y, Li Z H, Wang S Q, Huan Y, Zhang H L, Qi L, Liu J Q and He Y J. 2024. Monthly average remote-sensing datasets of phytoplankton pigment concentrations in the Bohai Sea, Yellow Sea, and Eastern China Sea (1998–2020). National Remote Sensing Bulletin, 28(4): 1101–1111 [DOI: 10.11834/jrs.20222244]

1 引言

海洋浮游植物对了解全球初级生产力、分析碳循环过程、研究海洋生态和全球气候变化具有重要意义(Falkowski等, 1998; Le Quéré等, 2005; Siegel等, 2014)。叶绿素a (Chlorophyll a, Chla) 作为几乎所有浮游植物都含有的重要色素, 常被用于描述浮游植物初级生产力和总生物量(Falkowski等, 1998; Harding等, 2016), 但无法精细描述浮

游植物群落组成。除Chla外, 浮游植物含有多种色素, 服务于浮游植物的光合作用和光保护过程, 这些浮游植物色素, 可以描述浮游植物群落的组成和生理状况(Kramer和Siegel, 2019; Jeffrey等, 2011)。高效液相色谱法HPLC (High-performance liquid chromatography) 的发展为测量海水中浮游植物色素浓度提供了有效的方法。通过航次调查可以获得浮游植物色素浓度的准确信息。然而, 航次调查仍然局限于有限的空间和时间尺度。无法

收稿日期: 2022-05-23; 预印本: 2022-08-23

基金项目: 国家自然科学基金(编号: 42176179, 42176181, 42106176, 4207060172)

第一作者简介: 孙德勇, 研究方向为海洋水色遥感。E-mail: sundeyong@nuist.edu.cn

通信作者简介: 王胜强, 研究方向为海洋生态遥感。E-mail: shengqiang.wang@nuist.edu.cn

相关数据集链接: 浮游植物色素浓度遥感数据集: <http://doi.org/10.17632/bhcznf2m7v.1>.

满足长期和大规模色素浓度监测需求，这些限制需要通过遥感技术来解决。

近年来，浮游植物色素浓度的遥感估算方法已经开展了多项研究。学者们通过构建遥感反射率与色素浓度的经验关系，实现典型色素浓度的卫星产品制作。例如：Pan等（2010）分析遥感反射率 R_{rs} （Remote sensing reflectance）波段比率和浮游植物色素浓度之间的相关性，构建经验算法估计美国东北区域沿海水域的Chla、总叶绿素b（Chlorophyll b, Chlb）、总叶绿素c（Chlorophyll c, Chlc）和9类胡萝卜素的浓度。进一步建立基于中等分辨率成像光谱仪 R_{rs} 波段比值和海表温度的经验模型，估计中国南海北部地区的墨角藻黄素和玉米黄素浓度（Pan等，2013）。李正浩等（2021）采用 R_{rs} 波段比值建立Chla、Chlb、Chlc、光合有效类胡萝卜素PSC（Photosynthetic carotenoid pigments）和光保护类胡萝卜素PPC（Photoprotective carotenoid pigments）模型，并应用于2014年—2018年GOCI数据上，实现渤海、黄海和东海5类色素集浓度的遥感反演。Bracher等（2015）使用经验正交函数分析实测 R_{rs} 数据，建立多元线性回归模型来估计色素浓度（包括Chla、PSC和PPC），绘制了2008年11月热带大西洋东部的色素空间分布图。

学者们还进一步探索基于浮游植物光吸收特征的半分析模型。Hoepffner和Sathyendranath（1993）提出将浮游植物吸收系数 a_{ph} （ λ ）（Phytoplankton absorption coefficient）分解为多条代表不同色素吸收的高斯曲线，从而将浮游植物色素与吸收系数相联系。Chase等（2017）利用全球实测数据集，建立了一个多色素反演模型MuPI（Multi-Pigment Inversion model）。利用高斯分解法构建模型估计Chla、Chlb、Chlc和PPC的浓度。在MuPI模型的基础上，Wang等（2018）利用全球实测数据集对模型参数进行优化，并将模型应用于全球年平均卫星 R_{rs} 数据上，得到了Chla、Chlb、Chlc、PPC和PSC浓度的空间分布。王桂芬等（2021）采用导数光谱分析法研究浮游植物吸收与南海典型色素浓度之间的相关性，建立用于色素浓度估算的偏最小二乘回归模型。

然而，上述的研究在遥感估算海洋浮游植物色素浓度方面仍然存在一定的限制：（1）现有的研究主要集中在少数色素或色素集上，如Chla、Chlb、Chlc、PPC和PSC；（2）已有的色素反演算

法多是基于大洋水体数据，针对中国近海光学二类水体的研究不够充分；（3）缺乏多种浮游植物色素浓度的长时间序列的卫星遥感数据集，为浮游植物相关领域研究提供数据支撑。

本研究以渤海、黄海和东海作为研究区域，通过建立典型浮游植物色素浓度遥感模型，并应用于1998年—2020年长时序月平均卫星遥感反射率数据上，构建中国近海浮游植物色素浓度的长时序遥感数据集，为海洋浮游植物群落结构研究提供数据支撑。

2 实测与卫星数据源介绍

2.1 原位实测数据集

现场实测数据主要来源于2016年—2018年7个共享航次，采集了遥感反射率（ R_{rs} （ λ ））、叶绿素a浓度（Chla）、浮游植物色素浓度（ C_{pig} ）、浮游植物吸收系数（ a_{ph} （ λ ））数据集。调查站点覆盖了富营养的近岸水域和寡营养的深水区域，航次调查时间涵盖了多个季节。本文所使用主要数据类型的航次信息及质量控制后的数量如表1所示。

表1 航次信息及采集实测参数统计
Table 1 Summary of cruise information and measurement parameters

航次	日期	海域	C_{pig}	a_{ph}	R_{rs}
201605ECS	2016-05-30— 2016-05-21	东海	15	13	11
201607YSBS	2016-06-29— 2016-07-15	黄渤海	85	80	45
201609ECS	2016-09-23— 2016-10-26	东海	34	33	11
201612YSBS	2016-12-29— 2017-01-13	黄渤海	68	68	34
201705ECS	2017-05-18— 2017-05-22	东海	41	41	17
201804YSBS	2018-03-28— 2018-04-14	黄渤海	36	34	12
201807YSBS	2018-07-22— 2018-08-08	黄渤海	71	71	46

遥感反射率数据是通过水面之上法测量获得，所使用的仪器是美国ASD公司生产的FieldSpec 4 Hi-Res NG地物光谱仪，选择在低云量、风力不超过5级的情况下测量。海水样品使用CTD系统上的Niskin瓶采集（深度<10 m），分别过滤到25 mm和

47 mm, 孔径为 0.7 μm 的 Whatman GF/F 玻璃纤维过滤膜上。使用分光光度计采用反射—透射法测量浮游植物吸收系数 (Cleveland 和 Weidemann, 1993), 并根据 Hirata 等 (2011) 的方法剔除异常数据。浮游植物色素浓度在实验室中使用 HPLC 分析方法测得 (van Heukelem 和 Thomas, 2001)。使用 Aiken 等 (2009) 的方法对色素浓度数据进行质

量控制, 即: (1) 叶绿素 a 和总诊断色素浓度之差低于总色素浓度的 30%; (2) 总叶绿素 a 和总诊断色素浓度之间线性回归斜率为 0.6—1.4, 决定系数高于 0.7; (3) 剔除浮游植物色素浓度 $<0.001 \text{ mg/m}^3$ 的数据。基于 HPLC 检测的色素类型, 选择 16 种主要的浮游植物色素类型。本数据集涵盖的浮游植物色素类型及实测色素浓度的平均值如表 2 所示。

表 2 浮游植物色素名称、对应实测色素的浓度平均值

Table 2 Information on phytoplankton pigment names and mean values of pigment concentrations

色素	英文名称	中文名称	平均值/(mg/m^3)	色素	英文名称	中文名称	平均值/(mg/m^3)
Chlb	Chlorophyll b	叶绿素 b	0.20	α -caro	α -carotene	α -胡萝卜素	0.01
Chlc2	Chlorophyll c2	叶绿素 c2	0.09	β -caro	β -carotene	β -胡萝卜素	0.06
Chlc3	Chlorophyll c3	叶绿素 c3	0.05	Diad	Diadinoxanthin	硅甲藻黄素	0.06
Fuco	Fucoxanthin	墨角藻黄素	0.19	Diato	Diatoxanthin	硅藻黄素	0.01
Perid	Peridinin	多甲藻黄素	0.07	Allo	Alloxanthin	别藻黄素	0.05
19'-but	19'-butanoyloxy-fucoxanthin	19'-丁酰基氧化墨角藻黄素	0.01	Zea	Zeaxanthin	玉米黄素	0.07
19'-hex	19'-hexanoyloxy-fucoxanthin	19'-乙酰基氧化墨角藻黄素	0.09	Neo	Neoxanthin	新黄素	0.01
Prasin	Prasinoxanthin	青绿藻素	0.02	Viol	Violaxanthin	紫黄素	0.01

2.2 卫星遥感数据集

浮游植物色素浓度数据集覆盖范围为渤海、黄海和东海 (27°N — 41°N , 117°E — 127°E), 基于 1998 年 1 月—2002 年 12 月的海上宽视场扫描仪 SeaWiFS (Sea-viewing Wide Field-of-view Sensor) 和 2003 年 1 月—2020 年 12 月 AQUA 卫星所搭载的中分辨率成像光谱仪 MODIS-Aqua (Moderate-resolution Imaging Spectroradiometer) 的遥感反射率产品计算得到。SeaWiFS 和 MODIS-Aqua 的 3 级 R_{rs} 月平均数据 (空间分辨率为 9 km) 下载自美国航空航天局戈达德太空飞行中心网站 (<https://oceancolor.gsfc.nasa.gov/> [2022-05-23])。

3 数据生产流程与验证

浮游植物色素浓度数据集制作流程如图 1 所示。可见首先由卫星遥感反射率数据计算得到研究区 Chla 浓度, 然后基于 Sun 等 (2019) 的浮游植物粒径等级双组分模型计算浮游植物吸收系数, 最后使用高斯分解算法对浮游植物吸收系数进行分解, 通过分解参数与实测浮游植物色素浓度之间的关系实现色素浓度的卫星估计, 从而制作渤海、黄海和东海典型浮游植物色素浓度的遥感产品。

3.1 典型浮游植物色素浓度模型构建

浮游植物的光吸收具有可加性, $a_{ph}(\lambda)$ 光谱可以表示为多个高斯函数曲线的线性和, 从而描述各种浮游植物色素的复杂吸收峰特征, 具体计算公式如下:

$$a_{ph}(\lambda) = \sum_{i=1}^n a_{\text{gaus}}(\lambda'_i) \times e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\lambda - \lambda'_i}{\sigma_i} \right)^2} \quad (1)$$

式中, $a_{\text{gaus}}(\lambda'_i)$ 是第 i 个高斯波段 λ'_i 处的高斯参数, σ_i 是指每个高斯峰的半波宽度。在 Chase 等 (2013) 的基础上选择了 12 个高斯波段作为初始值, 通过实测的 $a_{ph}(\lambda)$ 数据进一步优化这些高斯波段: (1) 提取实测 $a_{ph}(\lambda)$ 光谱的极值点和拐点位置, 在此基础上调整 Chase 等 (2013) 的高斯波段位置; (2) 在拟合式 (1) 的过程中让半波宽度在 20 nm 范围内动态调整。本研究中使用的高斯波段分别为 407 nm、437 nm、459 nm、476 nm、491 nm、523 nm、555 nm、571 nm、591 nm、602 nm、647 nm 和 674 nm, 相应的 σ_i 值分别为 16 nm、12 nm、12 nm、16 nm、14 nm、14 nm、16 nm、13 nm、11 nm、11 nm 和 10 nm。通过使用最小二乘法获得 12 个 $a_{\text{gaus}}(\lambda'_i)$ 参数的最佳拟合。

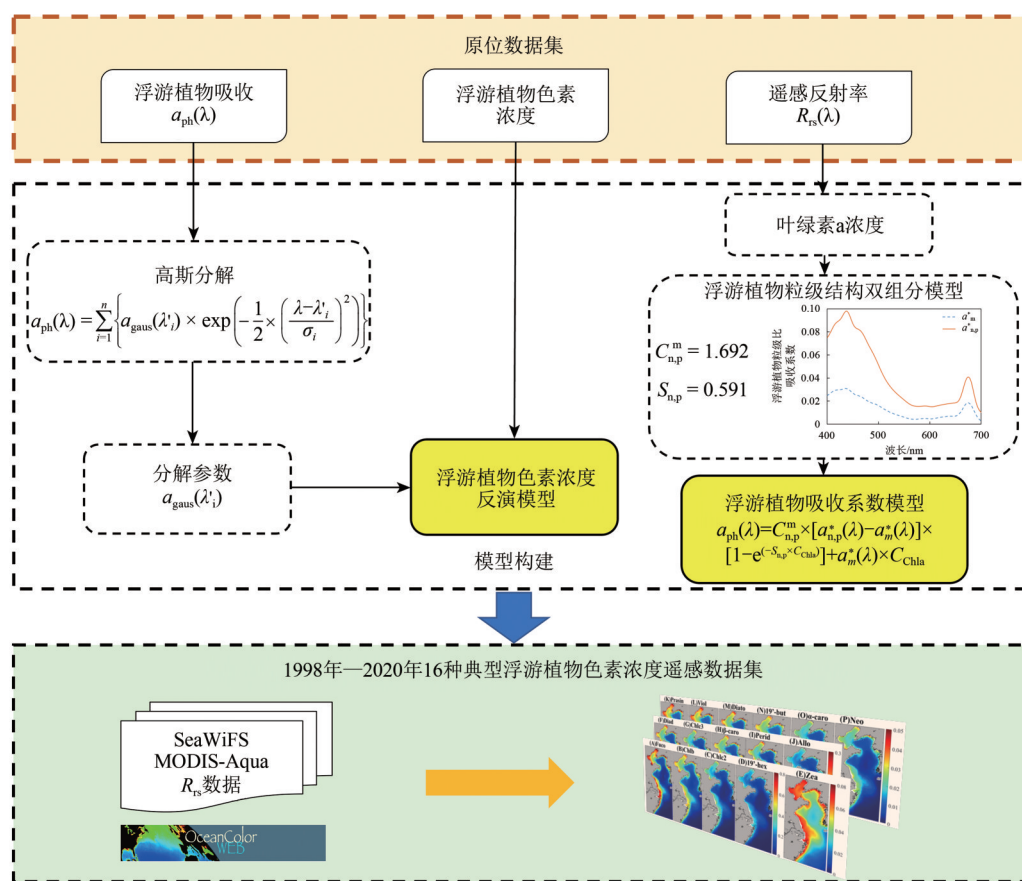


图1 渤海、黄海和东海典型浮游植物色素浓度长时序卫星数据集制作流程

Fig. 1 Process of producing a long-time series satellite dataset of typical phytoplankton pigment concentrations in the Bohai Sea, Yellow Sea and East China Sea

分析高斯参数 $a_{\text{gaus}}(\lambda'_i)$ 与16种色素浓度之间的关系, 选择最佳高斯波段, 建立色素浓度模型。浮游植物色素浓度 $C_{\text{pig}} \text{ (mg/m}^3\text{)}$ 模型如下:

$$C_{\text{pig}} = \alpha \times e^{(\beta \times \ln(a_{\text{gaus}}(\lambda'_i)))} \quad (2)$$

式中, α 和 β 为模型参数。表3列出了16种色素浓度的高斯波段以及 α 和 β 参数。大多数模型的 R^2 约为0.8 ($P < 0.001$), 除了19'-but ($R^2 = 0.42$, $P < 0.001$) 和 Zea ($R^2 = 0.1$, $P < 0.001$)。

3.2 浮游植物吸收系数模型构建

为了获得高光谱 $a_{\text{ph}}(\lambda)$ 数据, 采用浮游植物粒级结构双组分模型对 $a_{\text{ph}}(\lambda)$ 进行重构 (Sun 等, 2019; Brewin 等, 2015)。按照浮游植物细胞直径大小, 通常将其分为小型 (Micro, 20—200 μm)、微型 (Nano, 2—20 μm) 和微微型 (Pico, 0.2—2 μm) 3种粒径等级 (Sieburth 等, 1978)。双组分模型假设大粒径浮游植物主导 Chla 浓度高的水体,

而 Chla 浓度低的水体则由中、小粒径浮游植物控制。总 Chla 浓度可由大细胞 (小型浮游植物, C_m) 和中、小细胞 (微型和微微浮游植物, $C_{n,p}$) 的浓度之和来计算。浮游植物吸收系数 $a_{\text{ph}}(\lambda)$ 可以表示为 C_m 和 $C_{n,p}$ 的共同贡献 (Devred 等, 2006):

$$a_{\text{ph}}(\lambda) = a_m^*(\lambda) \times C_m + a_{n,p}^*(\lambda) \times C_{n,p} \quad (3)$$

式中, $a_m^*(\lambda)$ 和 $a_{n,p}^*(\lambda)$ 分别为小型浮游植物和微型、微微型浮游植物的比吸收系数; C_m 和 $C_{n,p}$ 为小型浮游植物和微型、微微型浮游植物的浓度。 $C_{n,p}$ 可以通过 Chla 浓度计算得到, 具体计算公式如下:

$$C_{n,p} = C_m \times (1 - e^{(-S_{n,p} \times C_{\text{Chla}})}) \quad (4)$$

式中, $C_{n,p}$ 表示当微型和微微型浮游植物之和 $C_{n,p}$ 随着 Chla 浓度增加达到的浓度最大值, $S_{n,p}$ 表示在这一过程中 $C_{n,p}$ 的斜率。假设当 Chla 浓度趋于0时, C_m 与 $S_{n,p}$ 的关系为 $C_m = S_{n,p}^{-1}$ 。在 Sun 等 (2019) 的研究中发现在渤海、黄海和东海 $S_{n,p} = 0.591$ 。

表3 色素模型采用的高斯波段和模型系数
Table 3 Gaussian bands and model coefficients were used for modeling the pigment concentrations

色素	λ'_i/nm	α	β	R^2
Fuco	459	45.91	1.77	0.92
Chlb	459	7.0	1.09	0.79
Chlc2	437	6.48	1.45	0.92
19'-hex	476	15.24	1.32	0.76
Diad	476	24.43	1.58	0.91
Chlc3	459	5.89	1.52	0.81
β -caro	491	3.94	1.22	0.88
Perid	476	36.09	1.75	0.76
Allo	459	1.88	1.19	0.73
Viol	437	0.42	1.22	0.84
Prasin	459	0.82	1.28	0.82
Diato	459	1.27	1.53	0.89
19'-but	476	0.68	1.01	0.42
Zea	437	0.16	0.43	0.1
α -caro	476	0.79	1.15	0.74
Neo	437	0.28	1.2	0.8

注: 相应的置信 $P<0.001$ 。

在 Sun 等 (2019) 建立渤海、黄海和东海 Chla 浓度模型基础上, 使用实测数据针对 SeaWiFS 和 MODIS-Aqua 进行优化, 两种卫星的 Chla 浓度反演模型如下:

$$C_{\text{SeaWiFS_chla}} = 0.972 \times e^{(-8.12 \times \log_{10}(R_n(490)/R_n(555)))} \quad (5)$$

$$C_{\text{MODIS_chla}} = 0.965 \times e^{(-5.931 \times \log_{10}(R_n(488)/R_n(555)))} \quad (6)$$

结合式 (3) 到 (6), 最终可以由卫星遥感反射率产品计算 400—700 nm 浮游植物吸收产品:

$$a_{\text{ph}}(\lambda) = C_{\text{n,p}}^{\text{m}} \times (a_{\text{n,p}}^*(\lambda) - a_{\text{m}}^*(\lambda)) \times (1 - e^{(-S_{\text{sp}} \times C_{\text{chl}})}) + a_{\text{m}}^*(\lambda) \times C_{\text{Chla}} \quad (7)$$

式中, 浮游植物粒级结构的比吸收系数参考 Sun 等 (2019) 和 Huan 等 (2021) 的研究。

3.3 卫星数据集存储

通过本文的模型获得渤海、黄海和东海区域 (27°—41°N, 117°—127°E) 的叶绿素 b、叶绿素 c2、叶绿素 c3、墨角藻黄素、多甲藻黄素、19'-丁酰基氧化墨角藻黄素、19'-乙酰基氧化墨角藻黄素、青绿藻素、 α -胡萝卜素、 β -胡萝卜素、硅甲藻黄素、硅藻黄素、别藻黄素、玉米黄素、新黄素和紫黄素 16 种浮游植物色素浓度月平均数据集。数据集时间覆盖范围为 1998 年 1 月—2020 年 12 月,

每种色素共有 276 个文件, 数据以 NetCDF (Network Common Data Form) 格式储存, 数据文件包括色素浓度 (mg/m^3) 和经纬度信息, 空间分辨率为 9 km, 非水体像元和无效像元用 NaN 表示。

数据文件的命名格式为“数据源标识_原数据标识_年月_色素简称_空间分辨率_数据生产时间.后缀名”。示例如下:

SW_S20020012002031_200201_Fuco_9km_20220422.nc

MO_A20200012020031_202001_Fuco_9km_20220422.nc

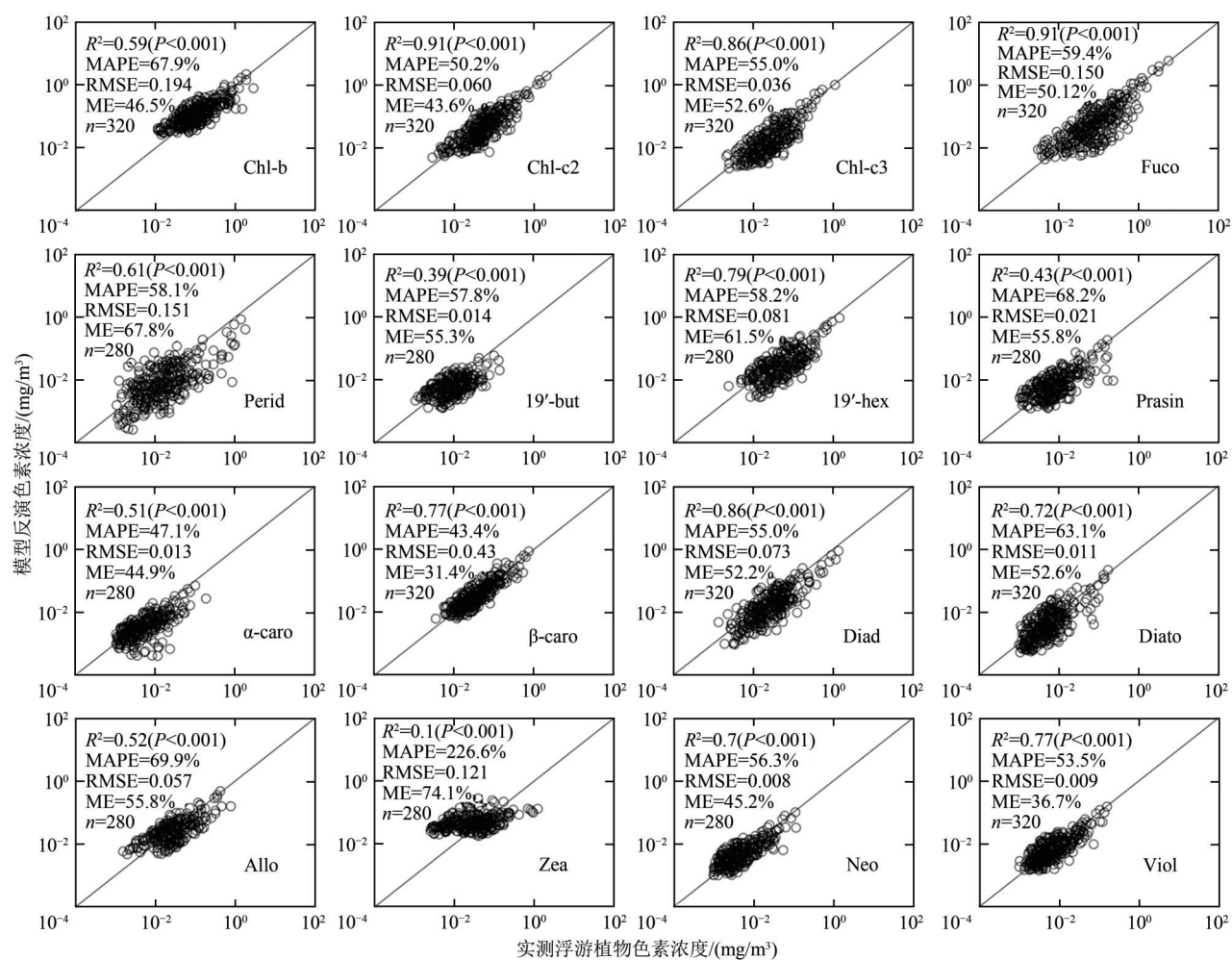
其中, SW 表示 SeaWiFS 卫星; MO 为 MODIS 卫星; 原数据标识为原始数据日期标号; 200201 表示 2002 年 1 月月平均色素浓度数据; 色素简称见表 3, 其中使用 hex 和 but 来表示 19'-hex 和 19'-but; 9 km 表示空间分辨率为 9 km; 数据生产时间表示为“年年年年月月日日”; nc 为 NetCDF 数据文件的后缀名。

目前, 渤海、黄海和东海 16 种典型浮游植物色素浓度遥感数据集可以从 <https://doi.org/10.17632/bhcznf2m7v.1> 下载获得。

3.4 模型精度评价

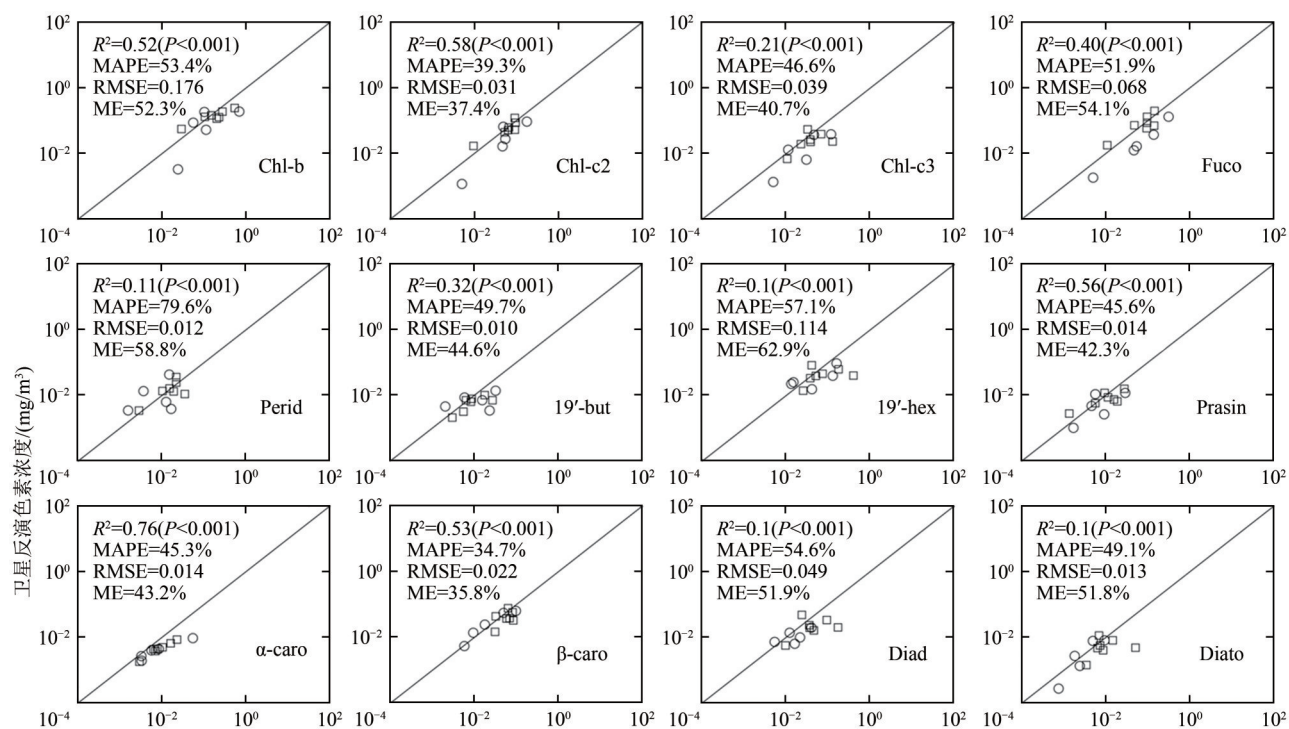
使用留一交叉验证法对色素浓度模型检验。利用决定系数 R^2 (Determination Coefficient, R^2)、均方根误差 RMSE (mg/m^3) (Root Mean Square Error)、平均绝对百分误差 MAPE (%) (Mean Absolute Percentage Error) 以及中值绝对百分误差 ME (%) (Median Absolute Percentage Error) 来评价模型精度。

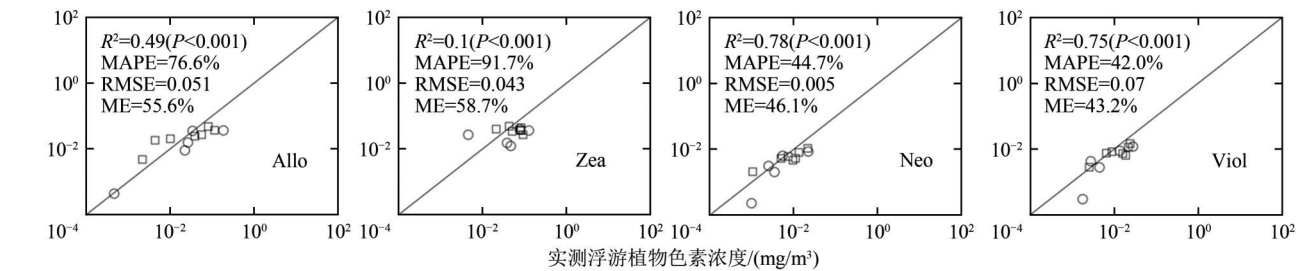
使用实测浮游植物吸收系数对模型进行检验, 如图 2 (a) 所示。可见实测与反演色素浓度值集中在 1:1 线。除 Zea 外, 模型计算得到的色素浓度 MAPE 和 ME 在 40%—70% 和 30%—70%, $R^2>0.5$ 。Zea 的 $\text{ME}<74.15\%$, 反演结果可信。进一步收集 MODIS-Terra 和 MODIS-Aqua 的 L3 遥感反射率日产品 (空间分辨率为 4 km), 由 3×3 网格的空间窗口以及 ± 1 h 的时间窗口, 提取对应实测数据站点的 R_{rs} 有效值, 共获得 12 个同步站点数据。图 2 (b) 对比了实测与卫星估计的色素浓度值。这些数据点沿 1:1 线集中分布, 大多数色素的 MAPE 和 ME 分布 40%—60%, 卫星得到的色素浓度与实测色素浓度较为一致。



(a) 实测色素浓度与模型计算浓度对比

(a) Measured pigment concentrations versus estimated pigment concentrations





(b) 实测色素浓度与卫星反演浓度对比

(b) Measured pigment concentrations versus satellite-derived concentrations

实线黑线是1:1线。矩形点为MODIS-Terra同步站点，圆圈点为MODIS-Aqua匹配点。

The solid black lines are 1:1 lines. The triangular point is the MODIS-Terra synchronous station, and the circular point is the MODIS-Aqua match-up station.

图2 评估16种浮游植物色素浓度模型的准确性

Fig. 2 Accuracy evaluation of 16 phytoplankton pigments derived by the developed models

4 数据集展示与应用价值

4.1 色素浓度数据集展示

图3展示了渤海、黄海和东海1998年—2020年16种浮游植物色素浓度的月平均分布。可见色素浓度的空间分布相似，即高值分布在近岸地区，低值分布在离岸水域。在近岸地区，Fuco和Chlb的浓度较高 ($> 0.3 \text{ mg/m}^3$)， α -caro和Neo的浓度较低 ($< 0.02 \text{ mg/m}^3$)，其他色素的浓度分布在0.03— 0.3 mg/m^3 之间。16种浮游植物色素浓度呈现显著的季节性变化。渤海区域全年色素浓度整体呈现冬春季高，夏季低。北黄海区域春季出现浓度高值区域。江苏浅滩和浙闽沿岸区域，色素浓度全年保持较高水平，夏季色素浓度达到峰值。在东海开阔深水区，色素浓度较低，季节变化相对较小。

4个子区域的7种典型色素浓度的长期变化如图4所示。这7种典型色素在浮游植物群落结构研究中常被作为标记色素指示浮游植物类群 (Brewin等, 2015)，从长期趋势来看，1998年—2020年色素浓度没有明显的增加或减少趋势，但存在1年为周期的短期波动，符合浮游植物群落的周期性生长规律。

4.2 数据集应用价值

监测海洋浮游植物群落特征是海洋水色遥感的核心任务之一 (IOCCG, 2014)。然而目前海洋浮游植物群落组成的长时序和大规模监测较为缺乏。用可以代表不同浮游植物类群的浮游植物色素，是评估浮游植物群落组成的常用方法，如Fuco (全球：硅藻和甲藻；区域：硅藻)、19'-hex (定鞭金藻)和Zea (蓝藻) (Kramer和Siegel, 2019)。

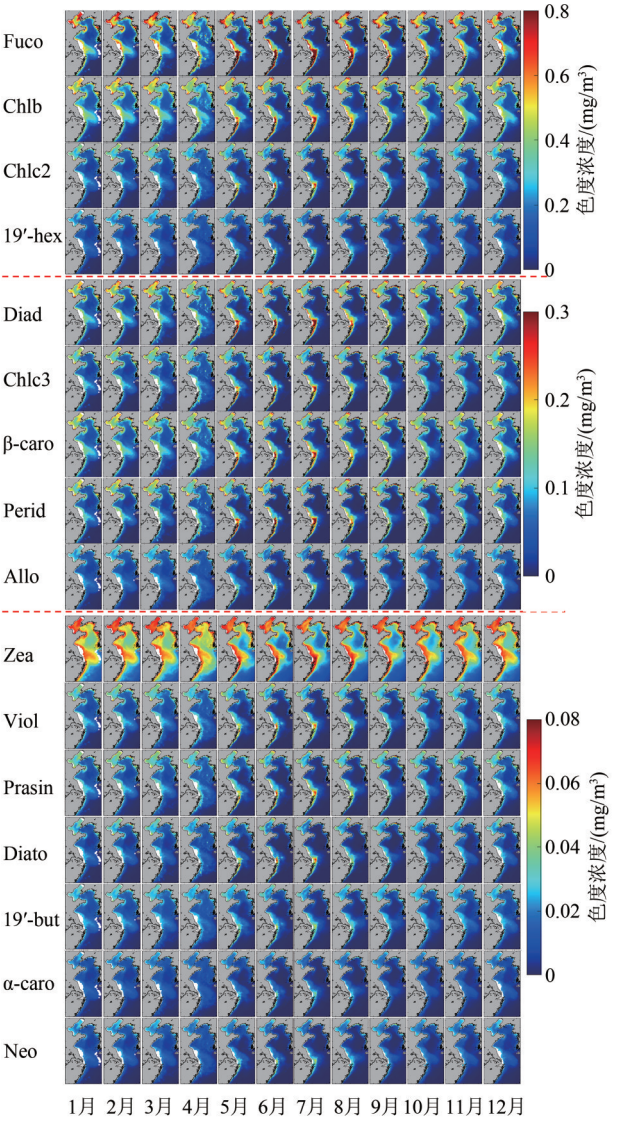


图3 1998年1月—2020年12月渤海、黄海和东海16种浮游植物色素月平均分布图

Fig. 3 Monthly mean distribution of 16 phytoplankton pigments in the Bohai Sea, Yellow Sea and East China Sea from January 1998 to December 2020

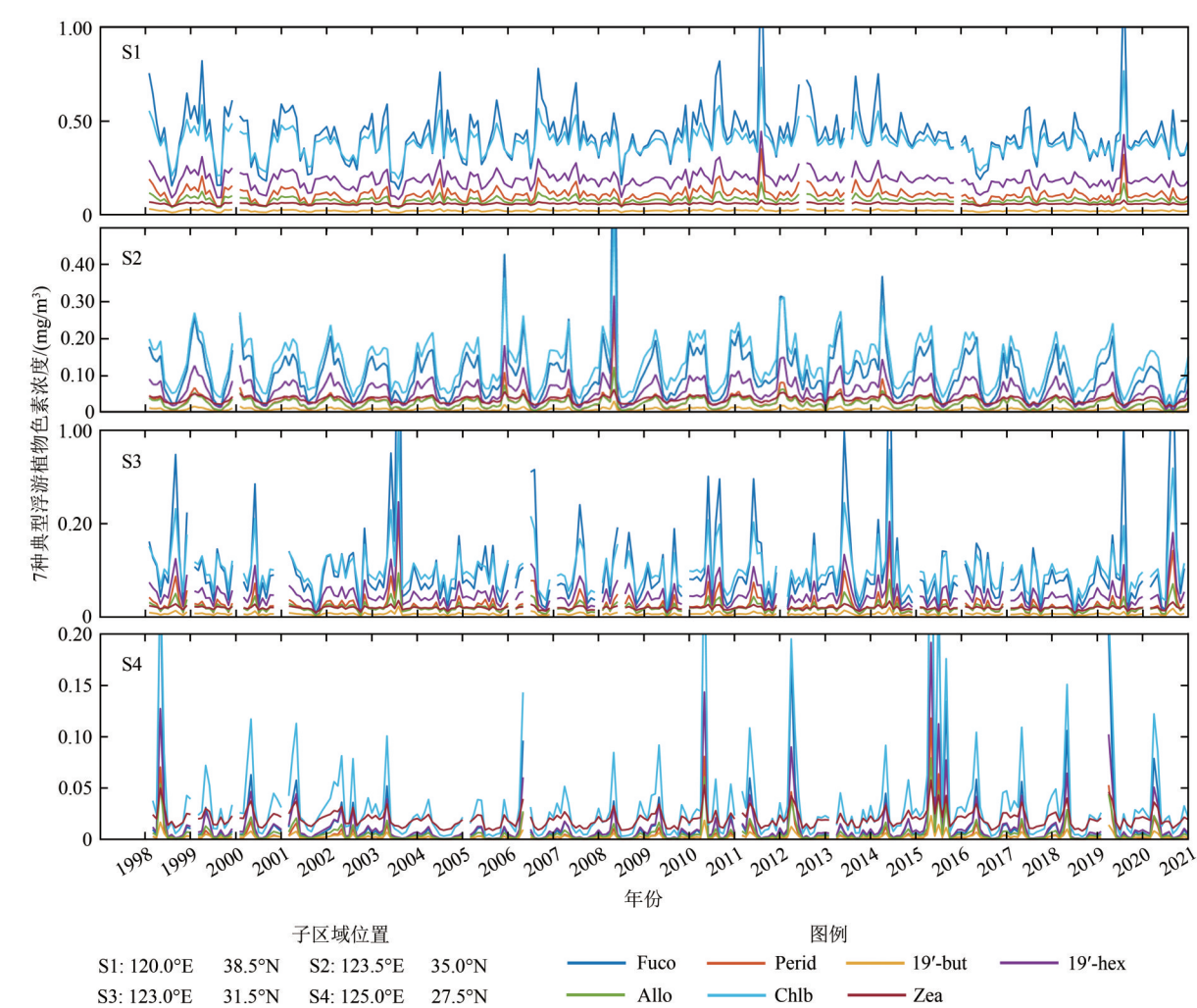


图4 1998-01—2020-12渤海、黄海和东海4个典型子区域(S1—S4)的7种典型浮游植物色素浓度的月平均变化
Fig. 4 Monthly mean changes of seven typical phytoplankton pigment concentrations in four typical sub-regions of the Bohai Sea , Yellow Sea, and East China Sea (S1—S4) from January 1998 to December 2020

在先前的研究中，使用诊断色素分析法 DPA (Diagnostic Pigment Analysis) (Brewin 等，2015; Vidussi 等，2001) 和 CHEMical TAXonomy (CHEMTAX) (Mackey 等，1996; Swan 等，2016) 模型根据浮游植物色素数据获得典型浮游植物类群的 Chla 浓度。此外，已有研究基于区域或全球实测浮游植物色素浓度数据，利用经验正交分解法和层次聚类法 (Catlett 和 Siegel, 2018; Sun 等，2021)，对色素进行分类分析，从而研究浮游植物种群结构。这些分析方法都依赖于研究区色素浓度数据，在过去的研究中，学者们通常使用的是原位实测数据来开展浮游植物群落结构或生理状态的研究。由于实测数据空间上的离散性和时间上的不连贯性，无法实现浮游植物群落的宏观长时序研究。

本研究首次提供了 1998 年—2020 年渤海、黄海和东海 16 种典型浮游植物色素浓度月平均遥感

数据集，通过卫星遥感估计多种浮游植物色素，从而进一步为利用卫星遥感方法提取浮游植物群落组成信息提供了数据支撑。首先，相比于以往获得的离散实测色素浓度数据，通过本数据集，可以得到 16 种典型色素浓度在近 23 年中宏观长时序的时空变化特征，进一步可以结合多种海洋环境因子分析色素浓度与海洋生态环境因子之间的关系。其次，本遥感数据集使用的色素浓度模型得到了实测和卫星同步数据集的检验，经过质量控制与统计处理。同时，由于色素浓度数据集是基于 Ocean Color 网站提供的 SeaWiFS 和 MODIS-Aqua 遥感反射率数据计算得到，色素浓度数据集保留了部分原数据集的制作标准规范（如投影和坐标系），因此可以更好地匹配其他海洋生态环境、气象等数据，开展进一步分析，降低了非遥感专业学者使用数据的门槛。最后，通过使用色素分析

方法, 基于本研究提供的数据集, 可以开展渤海、黄海和东海浮游植物种群生物量研究, 获取近23年典型浮游植物类群的分布, 研究其时空分布变化特征。

5 结 论

本研究基于1998年1月—2002年12月的SeaWiFS和2003年1月—2020年12月的MODIS-Aqua月平均遥感反射率数据, 得到近23年渤海、黄海和东海16种典型浮游植物色素浓度长时序遥感数据集, 记录其时空分布变化特征。本文研究的浮游植物色素浓度均显示出相似的时空分布规律。在23年期间色素浓度变化趋势不明显, 但观察到色素浓度周期1年的短期波动。相关领域的学者可以根据本文给出的数据集信息, 开展渤海、黄海和东海宏观持续性的浮游植物群落结构监测和浮游植物生理特征等研究。16种典型浮游植物色素浓度遥感数据集可以从<https://doi.org/10.17632/bhcznf2m7v.1> [2022-05-23] 下载获得。本数据集可以丰富海洋浮游植物色素特征的认识, 并为基于卫星遥感的浮游植物群落组成监测提供数据支撑, 希望能给相关学者以启发。

志 谢 感谢国家自然科学基金委组织的共享航次为本研究提供的支持。感谢厦门大学黄邦钦教授团队在数据测量实验过程中给予的重要支持。

参考文献(References)

- Aiken J, Pradhan Y, Barlow R, Lavender S, Poulton A, Holligan P and Hardman-Mountford N. 2009. Phytoplankton pigments and functional types in the Atlantic Ocean: a decadal assessment, 1995—2005. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 56(15): 899-917 [DOI: 10.1016/j.dsr2.2008.09.017]
- Bracher A, Taylor M H, Taylor B, Dinter T, Röttgers R and Steinmetz F. 2015. Using empirical orthogonal functions derived from remote-sensing reflectance for the prediction of phytoplankton pigment concentrations. *Ocean Science*, 11(1): 139-158 [DOI: 10.5194/os-11-139-2015]
- Brewin R J W, Sathyendranath S, Jackson T, Barlow R, Brotas V, Ains R and Lamont T. 2015. Influence of light in the mixed-layer on the parameters of a three-component model of phytoplankton size class. *Remote Sensing of Environment*, 168: 437-450 [DOI: 10.1016/j.rse.2015.07.004]
- Catlett D and Siegel D A. 2018. Phytoplankton pigment communities can be modeled using unique relationships with spectral absorption signatures in a dynamic coastal environment. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 123(1): 246-264 [DOI: 10.1002/2017jc013195]
- Chase A, Boss E, Zaneveld R, Bricaud A, Claustre H, Ras J, Dall'Omo G and Westberry T K. 2013. Decomposition of in situ particulate absorption spectra. *Methods in Oceanography*, 7: 110-124 [DOI: 10.1016/j.mio.2014.02.002]
- Chase A P, Boss E, Cetinić I and Slade W. 2017. Estimation of phytoplankton accessory pigments from hyperspectral reflectance spectra: toward a global algorithm. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 122(12): 9725-9743 [DOI: 10.1002/2017jc012859]
- 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]
- Devred E, Sathyendranath S, Stuart V, Maass H, Ulloa O and Platt T. 2006. A two-component model of phytoplankton absorption in the open ocean: theory and applications. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 111(C3): C03011 [DOI: 10.1029/2005jc002880]
- Falkowski P G, Barber R T and Smetacek V. 1998. Biogeochemical controls and feedbacks on ocean primary production. *Science*, 281(5374): 200-206 [DOI: 10.1126/science.281.5374.200]
- Harding L W, Mallonee M E, Perry E S, Miller W D, Adolf J E, Gallegos C L and Paerl H W. 2016. Variable climatic conditions dominate recent phytoplankton dynamics in Chesapeake Bay. *Scientific Reports*, 6: 23773 [DOI: 10.1038/srep23773]
- Hirata T, Hardman-Mountford N J, Brewin R J W, Aiken J, Barlow R, Suzuki K, Isada T, Howell E, Hashioka T, Noguchi-Aita M and Yamanaka Y. 2011. Synoptic relationships between surface Chlorophyll-a and diagnostic pigments specific to phytoplankton functional types. *Biogeosciences*, 8(2): 311-327 [DOI: 10.5194/bg-8-311-2011]
- Hoepffner N and Sathyendranath S. 1993. Determination of the major groups of phytoplankton pigments from the absorption spectra of total particulate matter. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 98(C12): 22789-22803 [DOI: 10.1029/93jc01273]
- Huan Y, Sun D Y, Wang S Q, Zhang H L, Qiu Z F, Bilal M and He Y J. 2021. Remote sensing estimation of phytoplankton absorption associated with size classes in coastal waters. *Ecological Indicators*, 121: 107198 [DOI: 10.1016/j.ecolind.2020.107198]
- IOCCG. 2014. Phytoplankton functional types from space. Reports of the international ocean color coordinating group (No. 15). Dartmouth: IOCCG
- Jeffrey S W, Wright S W and Zapata M. 2011. Microalgal classes and their signature pigments//Roy S, Llewellyn C A, Egeland E S and Johnsen G, eds. *Phytoplankton Pigments: Characterization, Chemotaxonomy and Applications in Oceanography*. Cambridge: Cambridge University Press: 3-77 [DOI: 10.1017/CBO9780511732263.004]
- Kramer S J and Siegel D A. 2019. How can phytoplankton pigments be best used to characterize surface ocean phytoplankton groups for ocean color remote sensing algorithms?. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 124(11): 7557-7574 [DOI: 10.1029/2019JC015604]
- Le Quéré C, Harrison S P, Prentice I C, Buitenhuis E T, Aumont O,

- Bopp L, Claustre H, Da Cunha L C, Geider R, Giraud X, Klaas C, Kohfeld K E, Legendre L, Manizza M, Platt T, Rivkin R B, Sathyendranath S, Uitz J, Watson A J and Wolf-Gladrow D. 2005. Ecosystem dynamics based on plankton functional types for global ocean biogeochemistry models. *Global Change Biology*, 11(11): 2016-2040 [DOI: 10.1111/j.1365-2486.2005.1004.x]
- Li Z H, Chen Z Z, Wang L Y, Sun D Y, Zhao B R and Wang S Q. 2021. Remote sensing inversion of concentration of phytoplankton chlorophyll and carotenoid from GOCI measurements in coastal waters. *Acta Optica Sinica*, 41(2): 0201001 (李正浩, 陈志钊, 王力彦, 孙德勇, 赵彬如, 王胜强. 2021. 结合 GOCI 数据反演近海浮游植物叶绿素和类胡萝卜素浓度. *光学学报*, 41(2): 0201001) [DOI: 10.3788/aos202141.0201001]
- Mackey M D, Mackey D J, Higgins H W and Wright S W. 1996. CHEMTAX - A program for estimating class abundances from chemical markers: application to HPLC measurements of phytoplankton. *Marine Ecology Progress Series*, 144: 265-283 [DOI: 10.3354/meps144265]
- Pan X J, Mannino A, Russ M E, Hooker S B and Harding L W. 2010. Remote sensing of phytoplankton pigment distribution in the United States northeast coast. *Remote Sensing of Environment*, 114(11): 2403-2416 [DOI: 10.1016/j.rse.2010.05.015]
- Pan X J, Wong G T F, Ho T Y, Shiah F K and Liu H B. 2013. Remote sensing of picophytoplankton distribution in the northern South China Sea. *Remote Sensing of Environment*, 128: 162-175 [DOI: 10.1016/j.rse.2012.10.014]
- Sieburth J M, Smetacek V and Lenz J. 1978. Pelagic ecosystem structure: heterotrophic compartments of the plankton and their relationship to plankton size fractions. *Limnology and Oceanography*, 23(6): 1256-1263 [DOI: 10.4319/lo.1978.23.6.1256]
- Siegel D A, Buesseler K O, Doney S C, Sailley S F, Behrenfeld M J and Boyd P W. 2014. Global assessment of ocean carbon export by combining satellite observations and food-web models. *Global Biogeochemical Cycles*, 28(3): 181-196 [DOI: 10.1002/2013gb004743]
- Sun D Y, Huan Y, Wang S Q, Qiu Z F, Ling Z B, Mao Z H and He Y J. 2019. Remote sensing of spatial and temporal patterns of phytoplankton assemblages in the Bohai Sea, Yellow Sea, and East China Sea. *Water Research*, 157: 119-133 [DOI: 10.1016/j.watres.2019.03.081]
- Sun D Y, Pan T F, Wang S Q and Hu C M. 2021. Linking phytoplankton absorption to community composition in Chinese marginal seas. *Progress in Oceanography*, 192: 102517 [DOI: 10.1016/j.pocan.2021.102517]
- Swan C M, Vogt M, Gruber N and Laufkoetter C. 2016. A global seasonal surface ocean climatology of phytoplankton types based on CHEMTAX analysis of HPLC pigments. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 109: 137-156 [DOI: 10.1016/j.dsr.2015.12.002]
- Van Heukelem L and Thomas C S. 2001. Computer-assisted high-performance liquid chromatography method development with applications to the isolation and analysis of phytoplankton pigments. *Journal of Chromatography A*, 910(1): 31-49 [DOI: 10.1016/S0378-4347(00)00603-4]
- Vidussi F, Claustre H, Manca B B, Luchetta A and Marty J C. 2001. Phytoplankton pigment distribution in relation to upper thermocline circulation in the eastern Mediterranean Sea during winter. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 106(C9): 19939-19956 [DOI: 10.1029/1999jc000308]
- Wang G F, Zhang Y X, Xu W L, Zhou W, Wu H L, Xu Z T and Cao W X. 2021. Estimation of phytoplankton pigment concentration in the South China Sea from hyperspectral absorption data. *Acta Optica Sinica*, 41(6): 0601002 (王桂芬, 张银雪, 徐文龙, 周雯, 吴华莲, 许占堂, 曹文熙. 2021. 基于高光谱吸收的南海浮游植物色素浓度估算. *光学学报*, 41(6): 0601002) [DOI: 10.3788/AOS202141.0601002]
- Wang G Q, Lee Z and Mouw C B. 2018. Concentrations of multiple phytoplankton pigments in the global oceans obtained from satellite ocean color measurements with MERIS. *Applied Sciences*, 8(12): 2678 [DOI: 10.3390/app8122678]

Monthly average remote-sensing datasets of phytoplankton pigment concentrations in the Bohai Sea, Yellow Sea, and Eastern China Sea (1998—2020)

SUN Deyong^{1,2}, LI Zhenghao¹, WANG Shengqiang^{1,2}, HUAN Yu¹, ZHANG Hailong^{1,2}, QI Lin³,
LIU Jianqiang^{2,4}, HE Yijun^{1,2}

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

2. Key Laboratory of Space Ocean Remote Sensing and Application, Ministry of Natural Resources, Beijing 100081, China;

3. College of Marine Science, University of South Florida, St. Petersburg FL33701, USA;

4. National Satellite Ocean Application Service, Beijing 100081, China

Abstract: Studying marine phytoplankton communities is essential for understanding the carbon cycle and climate change. Phytoplankton

pigments can describe the composition and physiological state of phytoplankton communities. Detecting phytoplankton pigment concentrations is also important, and remote sensing technology permits macroscopic long-term series monitoring of phytoplankton pigment concentrations. However, existing studies still have limitations. First, remote sensing methods for retrieving additional types of pigments are lacking. Existing studies have focused primarily on a few pigments or pigment groups. Second, the existing pigment inversion algorithms are mostly based on oceanic water data, and studies of optical class II waters off China are insufficient. Finally, satellite remote sensing datasets for long time series of multiple phytoplankton pigment concentrations in phytoplankton-related fields are lacking, indicating low data support. In this study, phytoplankton absorption data, 16 pigment concentration data points, and remote sensing reflectance data were collected. A total of 7 cruise experiments were performed in the Bohai Sea, Yellow Sea, and East China Sea from 2016 to 2018. Then, a remote-sensing model and a long-term series dataset of the spatiotemporal distribution of phytoplankton pigment concentrations were developed.

The remote removal of fine particulate matter was achieved by determining the relationship between phytoplankton absorption and the 16 pigments. The measured absorption coefficients were decomposed into Gaussian functions, and the relationship between the Gaussian parameters and the measured pigment concentration was analyzed to construct inversion models. A two-component model of phytoplankton size classes was also used to determine hyperspectral phytoplankton absorption. The performance of the models was evaluated for consistency. Then, the models were assessed using in situ datasets and leave-one-out cross-validation methods. The results showed competitive and acceptable error results, with Mean Absolute Percentage Errors (MAPEs) of less than ~60% for most pigments. Satellite-measured validation also produced promising prediction errors, yielding MAPEs in the range of 40%—60% for most pigments. Finally, the developed models were applied to the SeaWiFS and MODIS-Aqua remote sensing reflectance monthly mean products (1998—2020) to obtain 23 years of spatiotemporal patterns of 16 pigment concentrations in the Bohai Sea, Yellow Sea, and East China Sea.

The satellite remote sensing dataset revealed 16 similar pigment distribution patterns, revealing a decreasing trend from nearshore to offshore waters. In the Bohai Sea, the pigment concentration is high in winter and spring and low in summer. In summer, the pigment concentration peaks in the coastal areas of Jiangsu Province and gradually decreases toward Zhejiang and Fujian Provinces. A triangular high concentration is apparent in the Yangtze River Estuary, with the area extending from west to east in autumn and winter. The phytoplankton pigment concentration was relatively low in the outer deepwater area, and the variation in concentration with season was only slight.

The remote sensing datasets of 16 phytoplankton pigment concentrations can be downloaded from <https://doi.org/10.17632/bhcnf2m7v.1>. In related fields, scholars can study the macroscopic and continuous phytoplankton community structure monitoring and physiological characteristics of phytoplankton in the Bohai Sea, Yellow Sea, and East China Sea based on information from pigment concentration remote sensing datasets. This dataset can enrich the understanding of marine phytoplankton pigment distributions and provide data support for satellite-based detection of phytoplankton community composition.

Key words: phytoplankton pigments, absorption coefficient, coastal water, SeaWiFS, MODIS, remote sensing dataset

Supported by National Natural Science Foundation of China (No. 42176179, 42176181, 42106176, 4207060172)