

藻类光谱实验及其光谱定量信息提取研究*

刘堂友 匡定波 尹 球

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海, 150001)

摘要 通过对实验室培养的韦氏微囊藻、斜生栅藻及其混合物的光谱实验, 获得了韦氏微囊藻、斜生栅藻及其混合物的光谱特征, 为利用遥感技术对藻进行分类提供了基础信息, 利用光谱分离法提取了这两种藻的定量光谱信息, 并建立了光谱信息与藻浓度的数学模型。

关键词 藻, 光谱, 分离法, 遥感

THE SPECTRUM EXPERIMENTS OF ALGAE AND STUDIES ON RETRIEVAL QUANTITATIVE INFORMATION FROM ITS SPECTRA *

LIU Tang-You KUANG Ding-Bo YIN Qiu

(Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences,
Shanghai 200083, China)

Abstract Through the spectrum experiments with *Microcystis wesenbergii*, *Scenedesmus obliquus* and its mixture cultivated in laboratory, the qualitative characteristics of the algal spectrum were obtained, that provided basic information for classifying algae by the technology of remote sensing. Quantitative spectrum information of the two algae was retrieved with spectrum decomposition method, and set up algorithmic model between spectrum information and alga concentration.

Key words alga, spectrum, decomposition method, remote sensing.

引言

为了用遥感技术对水华进行监测, 已有许多同步光谱测量采样分析的报道^[1,2], 然而由于湖泊爆发的水华是多种藻的混合物, 不同时间地点水华中藻的成分、比例也不相同, 其研究结果只能是藻的总体效果. 为了用遥感技术对藻进行分类, 及定量计算出各种藻的浓度, 本文就 2 个单种藻及其混合物进行了光谱实验研究. 由于水华中藻比较小, 一般仅为几微米到几十微米, 从混合藻中提取单种藻很困难, 所以本次实验采用实验室人工培养藻.

1 藻类光谱试验

1.1 藻种选择

我国水华最严重的湖泊是滇池、太湖和巢湖, 这 3 个湖泊近几年几乎每年都爆发水华, 水华中藻的

种类非常多, 大多属于蓝藻门、绿藻门, 蓝藻中又以微囊藻最为优势^[3]. 虽然藻类在一定的自然环境下生长得很快, 以致形成水华, 但在实验室有些藻却不能培养或生长得很慢. 根据水华的优势藻种以及实际情况, 我们选择蓝藻门的韦氏微囊藻和绿藻门的斜生栅藻进行实验.

1.2 实验使用的仪器

测量藻浓度用岛津 UV-300 紫外可见分光光度计; 测量光谱用 GER1500 地物光谱仪, 它是美国 Geophysical & Environmental Research Corporation 1996 年的产品, 视场角为 3×0.1 度, 波长范围为 350-1050nm, 波段数为 512 个, 带宽为 1.5nm, 光谱分辨率为 3nm, 数字量化为 16bit.

盛藻液的容器: 2000 年使用的桶是塑料水桶, 该水桶上大下小, 为消除桶壁反射光的影响, 把桶口封起来, 切除桶底, 上下颠倒, 并在桶的内壁漆上无

* 全国优秀博士论文作者专项基金资助项目
稿件收到日期 2001-11-15, 修改稿收到日期 2002-03-07

* The project supported by a National Fund of Author of Most Excellent Doctoral Dissertation
Received 2001-11-15, revised 2002-03-07

光油漆(黑板漆),容积为 0.26m^3 . 2001年使用的是圆柱形不锈钢水箱,容积 0.95m^3 ,同样在桶的内壁漆上无光油漆.

1.3 实验过程和实验数据

我们委托中国科学院水生生物研究所培养本次实验用藻,并进行浓度的采样分析.

2000年、2001年总共做了3次实验,第1次测的是斜生栅藻,第2次测的是韦氏微囊藻,最后1次测的是韦氏微囊藻和斜生栅藻的混合藻.单种藻的浓度从低测到高,测量时先在水桶中加满清水,然后逐渐加入藻,搅拌,每加一次藻,采一次样,测多条光谱;混合藻的测量方法与单种藻的测量方法一样,只是两种藻是交叉加入的.韦氏微囊藻的叶绿素-a浓度范围是 $160\sim 750\mu\text{g/L}$,斜生栅藻的叶绿素-a浓度是 $9\sim 359.4\mu\text{g/L}$;混合藻中韦氏微囊藻和斜生栅藻的叶绿素-a浓度分别是 $2.3\sim 284.7\mu\text{g/L}$ 和 $9.9\sim 425.7\mu\text{g/L}$,测得的光谱分别如图1、2和3所示.

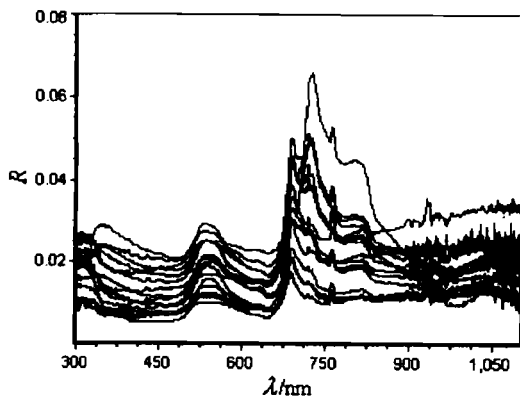


图1 斜生栅藻光谱

Fig. 1 *Scenedesmus obliquus* spectra

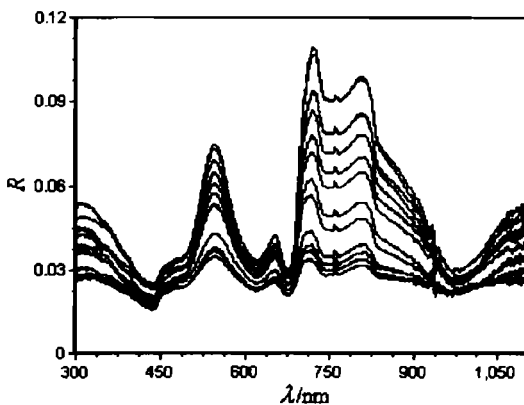


图2 韦氏微囊藻光谱

Fig. 2 *Microcystis wesenbergii* spectra

2 藻类光谱特征及定性分析

斜生栅藻的光谱在 540 nm 、 700 nm 处各有一个较强的波峰,并且当浓度增加到一定程度后,会在 720 nm 出现另一个波峰,我们可以初步认为位于 700 nm 的波峰其实是由两个波峰组成的,并且随着浓度的增大, 720 nm 这个波峰峰高会增长的更快,以致达到一定浓度时 720 nm 的波峰峰高会大于 700 nm 的波峰,波长大于 820 nm 的光谱曲线除了噪声,总体上近似直线,没有明显的波峰.

韦氏微囊藻光谱在 550 nm 、 710 nm 的波峰非常明显,在 440 nm 和 670 nm 处有非常明显的吸收峰.与斜生栅藻显著不同的是韦氏微囊藻在 630 nm 有一个吸收峰,它是区别栅藻和微囊藻的特征之一,因为该吸收峰是微囊藻所含的藻蓝素产生的,而绿藻都没有藻蓝素.

对于斜生栅藻和韦氏微囊藻的混合藻光谱,从图3可以看出,混合藻光谱同时具有韦氏微囊藻和斜生栅藻的光谱特征,但在叶绿素-a浓度相近的情况下,韦氏微囊藻的反射率总体上要高一些,故在韦氏微囊藻浓度较高时,即使斜生栅藻的浓度相对更高,也表现出较明显的韦氏微囊藻光谱特征.

通过上述分析可知,要区分某种藻是韦氏微囊藻还是斜生栅藻相对较为容易,即看光谱在 630 nm 处是否有藻蓝素的吸收峰,有则为韦氏微囊藻无则为斜生栅藻;或看 687 nm 处是否存在散射峰,有则为斜生栅藻无则为韦氏微囊藻;另外还可根据 440 nm 和 675 nm 这两处吸收峰是否明显来判断,如果吸收峰很明显则为韦氏微囊藻,否则为斜生栅藻.但是要判断藻液中是否同时含有两种藻比较困难,特别是在两种藻的浓度都很低或两种藻浓度差别很

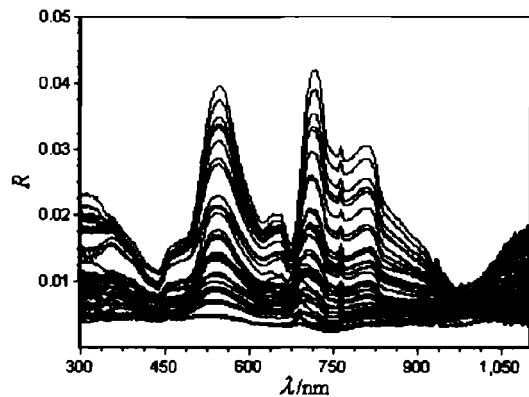


图3 斜生栅藻和韦氏微囊藻混合藻的光谱

Fig. 3 the spectra of mixed algae-*Scenedesmus obliquus* and *Microcystis wesenbergii*

大,就不能从光谱上进行定性判别了。

3 藻类光谱的定量分析

为了用定量分析计算的方法区分藻的种类,甚至计算出每种藻的浓度,本文尝试使用在分析气体微粒散射、吸收光谱常用的光谱分离分析法。

3.1 光谱分离法原理^[4]

通常光谱分离处理的方法首先假定各峰成份可用特定的解析函数来表示,并且假定光谱曲线是由这些函数线性叠加而成的,反过来,可用曲线拟合的方法从光谱曲线中分离出这些解析函数,用这些解析函数的系数(即峰高)与物质粒子的浓度建立关系式,然后利用这个关系式求出物质粒子的浓度。

光谱分离处理需要确定光谱波形参数,如峰的个数、各峰的形状和中心波长、半宽度、峰高以及基线形状等。在实际处理时,可先假定已知各峰形状的解析函数,然后通过计算确定其他的波形参数。

对每隔一定波长间隔采样 m 个点的光谱,其测量输出波形 $(y(j) | j = 1, 2, \dots, m)$ 取决于各个波峰的形状、基线和峰的个数。现以一含有多个波峰、基线的综合典型波形 $C(j)$ 与之进行拟合,且假定该波形由 N 个高斯分布的波峰和一次项基线组成,则其解析式为:

$$y(j) = C(j) + \delta(\lambda_j) = \sum_{i=0}^N h_i e^{-(\lambda_i - \lambda_{i0})^2 / \omega_i^2} + \alpha_1 \lambda_j + \alpha_2 + \delta(\lambda_j) \quad (1)$$

式中 h_i 为峰高, λ_{i0} 为峰的中心波长, ω_i 为常数, $\delta(\lambda_j)$ 为实际波形与拟合波形间的偏差。解出线性方程组(1)式,即得各个高斯函数的波峰高度 h_i 。波峰高度 h_i 与物质的浓度有一定函数关系,因此通过波峰高度 h_i 可求得物质浓度。

3.2 藻类光谱试验的光谱数据处理

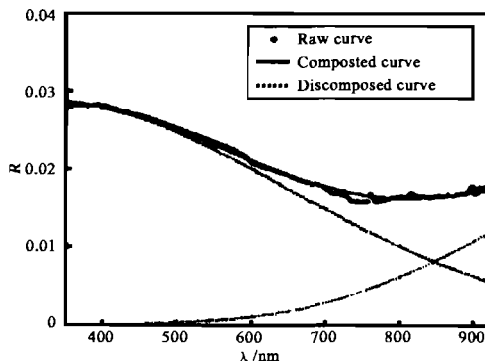


图4 清水光谱分离图

Fig.4 decomposition of Pure water spectrum

水体的散射、吸收和气体的散射、吸收有一定的差别(水体中的物质粒子密度要高的多),作为近似分析,作者借用气体散射、吸收的高斯分布,从图2也可以看出,韦氏微囊藻的中心波长为 550nm 散射峰非常类似于高斯分布。

3.2.1 确定本底函数的参数

由于环境影响和水体散射的特殊性,基线函数采用二次或一次函数都会产生较大的误差。通过多次试验,决定使用在同一环境下测得的清水光谱作为基线函数,但基线函数很难用一个简单的函数加以表达,我们将它近似为两个高斯函数的合成,即:

$$R(\lambda) = h_1 e^{-(\lambda - \lambda_1)^2 / \omega_1^2} + h_2 e^{-(\lambda - \lambda_2)^2 / \omega_2^2} \quad (2)$$

其中 λ_1, λ_2 分别为 324nm, 1224nm, ω_1, ω_2 分别为 466.3nm, 311nm。如图4所示,

3.2.2 确定藻光谱各个波峰的函数的参数

通过大量计算,我们获得了韦氏微囊藻、斜生栅藻各波峰的中心波长和常数,如表1所示。从表中可以看出,分离出的韦氏微囊藻高斯函数参数和斜生栅藻高斯函数参数大多数相同。用表1数据对韦氏

表1 计算得到的参数

Table 1 The computed parameters

韦氏微囊藻		斜生栅藻	
中心波长 λ_0 (nm)	常数 ω	中心波长 λ_0 (nm)	常数 ω
		520.0	15.8
547.0	38.3	547.0	38.3
612.0	33.3	612.0	33.3
652	18.6	652	18.6
		687	13.4
703	15.4	703	15.4
722.5	11.2	722.5	11.2
740	34.6	740	34.6
790	25.5	790	25.5
815	17.8	815	17.8
840	92.9	840	92.9

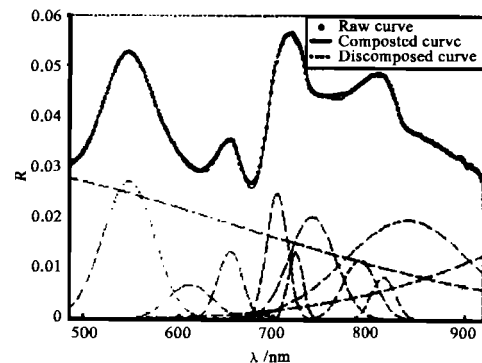


图5 韦氏微囊藻光谱分离分解图

Fig.5 Decomposition of microcystis wesenbergii spectrum

微囊藻光谱进行光谱分离的效果如图 5 所示.

3.3 藻类光谱处理结果

要获得藻的浓度公式,需要对藻浓度不同的多条光谱曲线进行光谱分离,然后把分离出的高斯峰高与藻的浓度进行拟合回归,即可获得藻的浓度公式.对于藻类而言,总体上一个细胞所含有的叶绿素-a 是一定的,不同的藻,一个细胞含有的叶绿素-a 是不同的.对特定的藻,藻的细胞数和叶绿素-a 总体上有一个对应关系,即知道了叶绿素-a 浓度,也就知道了单位体积的水中含有藻的细胞数.

3.3.1 斜生栅藻的叶绿素-a 浓度公式

按 Table 1 的高斯函数参数对斜生栅藻光谱进行光谱分离,然后用个高斯函数的峰高与叶绿素-a 浓度进行拟合,发现中心波长为 687nm、703nm 的高斯函数峰高相关性较好,相关系数分别达 0.921、0.944,对应公式为:

$$Chl. = (2.84218 \times h_{687}^2 + 0.0340751 \times h_{687} - 0.000039446) \times 10^6, \quad (3)$$

$$Chl. = (9.97380 \times h_{703} - 0.004019 \times 10^4). \quad (4)$$

式中,Chl. 为叶绿素-a 浓度,单位 $\mu\text{g/L}$, h 为高斯峰高.其中中心波长为 687nm 的高斯峰高与叶绿素-a 浓度对应图如图 6 所示.

3.3.2 韦氏微囊藻的叶绿素-a 浓度公式

按 Table 1 的高斯函数参数对韦氏微囊藻光谱进行光谱分离,然后用个高斯函数的峰高与叶绿素-a 浓度进行拟合,发现中心波长为 547nm、703nm 和 722.5nm 高斯函数峰高相关性较好,相关系数分别为 0.918、0.91、0.903,对应公式分别为:

$$Chl. = (1.7201 \times h_{547} - 0.01404) \times 10^4 \quad (5)$$

$$Chl. = (1.70987 \times h_{703} - 0.0100255) \times 10^4 \quad (6)$$

$$Chl. = (2.49217 \times h_{722} - 0.0024448) \times 10^4 \quad (7)$$

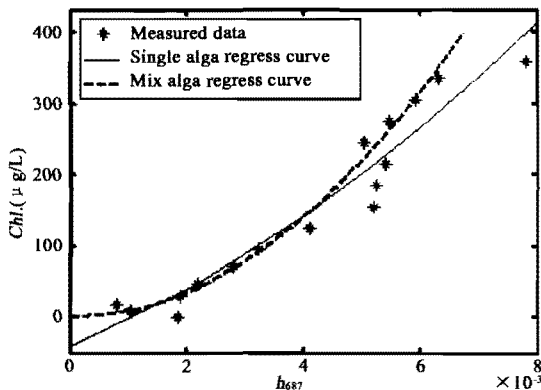


图 6 峰高(687nm)与叶绿素-a 浓度对应图
Fig. 6 Corresponding figure of peak heights (687nm) and chlorophyll concentrations

其中中心波长为 703nm 的高斯函数峰高与叶绿素-a 浓度对应图如图 7 所示.

3.3.3 韦氏微囊藻和斜生栅藻混合物的浓度公式

对于混合藻,应该把两种藻的高斯函数都放进去分离计算.由于两种藻的有些数高斯函数是完全一样的,故这些高斯峰是两种藻的贡献之和,即

$$h = h_1 + h_2 \quad (8)$$

这时不能直接把分离出的高斯峰高分别与每种藻的叶绿素-a 浓度进行拟合回归.由前面两种单种藻的光谱可知,韦氏微囊藻最明显高斯峰在 703nm 处,斜生栅藻最明显高斯峰在 687nm,因而应该根据这两个高斯函数峰高建立方程组,需要说明的是,韦氏微囊藻光谱并没有中心波长为 687nm 的高斯峰,如果进行光谱分离时把该高斯峰放进去分离,由于光谱并不是由严格的高斯函数叠加而成的,也会分离出该高斯峰,故建立方程组时也应该考虑这一项(并且由于靠近 675nm 处波谷,分离出的系数即高斯峰高是负的,见后面求得的系数 K_{w1}).因此根据前面的计算结果和光谱分离的实际情况列出如下方程组:

$$\begin{cases} h_{687} = K_{w1}Chl.{}_w + K_{r1}\sqrt{Chl.{}_r + C_r} + c_1 & (9) \\ h_{703} = K_{w2}Chl.{}_w + K_{r2}Chl.{}_r + c_2 & (10) \end{cases}$$

式中 $Chl.{}_w$ 、 $Chl.{}_r$ 分别为韦氏微囊藻和斜生栅藻的叶绿素-a 浓度.用迭代法可求得式(9)、(10)的系数和常量:

$$K_{w1} = -0.000011747, K_{r1} = 0.00033749, C_r = 0.0054543, K_{w2} = 0.000063658, K_{r2} = 0.000010445, c_1 = -0.000012556, c_2 = -0.000024702.$$

图 8、图 9 为用分离出的高斯峰高根据公式(9)、

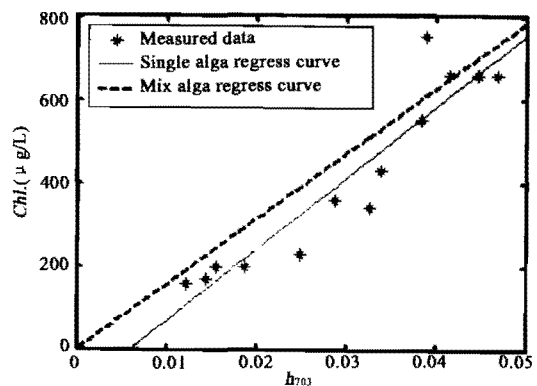


图 7 峰高(703nm)与叶绿素-a 浓度对应图
Fig. 7 corresponding figure of peak heights(703nm) and chlorophyll concentrations

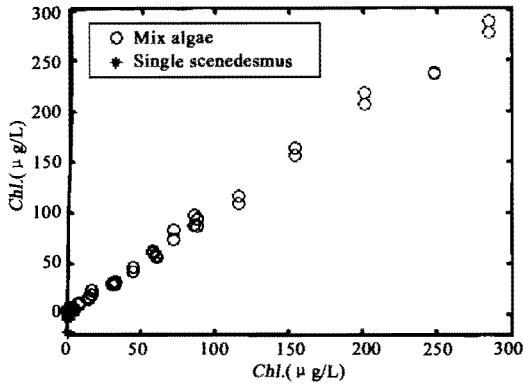


图 8 韦氏微囊藻实测叶绿素-a 浓度与计算值对应图
Fig. 8 microcystis wesenbergii corresponding figure of measured chlorophyll concentrations and calculated chlorophyll concentrations

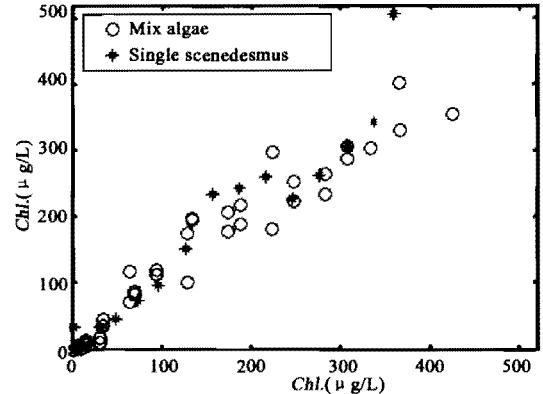


图 9 斜生栅藻实测叶绿素-a 浓度与计算值对应图
Fig. 19 scenedesmus obliquus corresponding figure of measured chlorophyll concentrations and calculated chlorophyll concentrations

(10) 计算出的叶绿素-a 的浓度与实测叶绿素-a 浓度的对应图. 由于本公式由迭代法求得的, 无法求出相关系数, 故用均方差替代, 经过计算, 混合藻中的韦氏微囊藻、斜生栅藻的实测浓度值和计算值间均方差分别为 $1.58\mu\text{g/L}$ 、 $5.8\mu\text{g/L}$, 从图中也可以看出, 计算值与实测值符合得很好.

4 结果分析与讨论

对于一个良好的两种物质的混合模型, 把其中一种物质浓度置为零, 则该模型转变为单种物质的模型. 如果该模型和从单种物质中得出的模型一致, 或在数值上相差很小, 则说明这两个模型是合理的或有效的. 为此, 把混合藻浓度公式(9)、(10)中 Ch_w 、 Ch_x 分别置零, 分别与式(3)、(4)、(6)作比较, 发现斜生栅藻的单种藻模型和韦氏微囊藻的单种藻模型在数值上都有一定的差别. 从图 6 可看出, 实测点大多数都在单种藻的拟合曲线与混合藻的拟合曲线上, 只是两条曲线差别较大, 单种藻曲线平坦一些, 而混合模型曲线的曲率大一些. 单种藻模型在藻浓度为零时还有较大的高斯峰高, 而混合模型在藻浓度为零时, 高斯峰高基本上为零. 物质浓度为零则该物质特有的波峰高应为零, 即使由于水和环境的影响会拟合出一定的高斯峰, 但该峰高是很小的, 反之, 如果高斯峰高为零时叶绿素浓度也应该很小, 据此, 可以认为单种藻的拟合回归公式不很合理. 其实从图中可以看出, 产生这种现象是由于 2 个实测数据有较大的误差, 拟合时为

为了使最小二乘法偏差最小而造成的. 根据单种藻数据基本上都在混合模型的曲线上, 可以认为混合模型是合理的. 同理, 分析图 7 可得出在 703nm 处的高斯峰高与韦氏微囊藻叶绿素-a 浓度关系的混合藻模型更合理的结论. 总体上可以说混合模型是合理的.

总之, 通过本实验, 获得了韦氏微囊藻、斜生栅藻及其混合藻的光谱特征, 利用这些的光谱特征在一定程度上可以对韦氏微囊藻、斜生栅藻进行定性分类. 尝试的光谱分离法能较好的提取粒子的波峰信息, 根据波峰信息建立的数学模型不但能从单种藻光谱中算出藻浓度, 还能从混合藻光谱计算出不同藻(光谱特征不同)的浓度, 达到了实验目的.

REFERENCES

- [1] SHU Xiao-Zhou, YIN Qiu, KUANG Ding-Bo. Relationship between Algal chlorophyll Concentration and Spectral Reflectance of Inland Water. *Journal of Remote Sensing*, 2000, 4(1): 41-45
- [2] Kalló K, Kutser T, Hannonen T, et al. Retrieval Of water quality from airborne imaging spectrometry of various lake types in different seasons. *The Science of The Total Environment*, 268(2001):59-77
- [3] WAN Shu-Ming, DOU Hong-Sheng, et al. *Chinese Lake Catalogue*. Beijing: Science press (王苏民, 窦鸿升, 等. 中国湖泊志. 北京: 科学出版社)1998.9
- [4] CENG Qing-Yong. *Faint Signal Detection*. HangZhou: Zhejiang University press, (曾庆勇. 微弱信号检测. 杭州: 浙江大学出版社)1994.1