

Б.Л. Сухоруков, И.В. Новиков

Сравнительный анализ двух способов интерпретации дистанционных спектрометрических данных о состоянии водных экосистем

Институт водных проблем РАН, Южный отдел, г. Ростов-на-Дону

Поступила в редакцию 17.09.2001 г.

Проанализированы особенности двух способов интерпретации дистанционных спектрометрических данных о состоянии водных экосистем: первого – представления оптически активных компонентов (ОАК), второго – представления оптического состояния водной экосистемы (ОСВЭ). Оценена точность определения концентрации ОАК при традиционном способе интерпретации. Приведены условия применимости каждого из способов. Показано, что дистанционные спектрометрические данные являются объективным индикатором состояния экосистемы.

Преимущества и недостатки обследования водных экосистем с использованием спектрометров, установленных на летательных аппаратах, общеизвестны. Основные преимущества – оперативность получения информации, проведение съемки в реальном времени на больших территориях и неконтактные («неразрушающие») методы получения информации. Основными недостатками считают малое компонентное разрешение и низкую точность определения тех компонент, которые могут быть определены с помощью методов дистанционного контроля.

Не обсуждая очевидных преимуществ этих методов, остановимся на недостатках более подробно. Во-первых, рассмотрим предмет нашего изучения. Если объектом являются экосистемы, то предметом являются излучательные свойства объекта в видимом диапазоне электромагнитных волн – спектры восходящего излучения. Задача же состоит в установлении прямой связи между регистрируемым дистанционным датчиком излучением и изучаемым объектом. Классическая обратная задача.

В пассивных дистанционных методах наблюдения источником излучения является Солнце, и восходящее от воды излучение является трансформированным солнечным излучением, рассеянным или поглощенным водной экосистемой. Составляющие водную

экосистему компоненты, которые вносят вклад в процессы переизлучения и изменяют комплексный показатель преломления $m = n + in'$, называются оптически активными компонентами. Спектральные свойства ОАК достаточно подробно изучены и описаны во многих монографиях [1–3]. Здесь же отметим следующее. Спектры поглощения и рассеяния практически всех ОАК неселективны. Исключение составляют спектры поглощения пигментов фитопланктона. Поэтому и спектры восходящего от воды излучения в подавляющем большинстве случаев не имеют особенностей, характерных для эмиссионных спектров. С точки зрения классической спектроскопии такое поведение спектров совершенно ясно. Узкие оптические уровни сливаются в неразрешимую (в спектральном смысле) полосу, а переходов на внутренние атомные уровни нет. Исключение – флуоресценция хлорофиллов и фикобилинов.

Теория расчета спектров яркости и спектров коэффициентов яркости (КЯ) достаточно хорошо разработана [4, 5]. Получено удовлетворительное совпадение модельных спектров КЯ с экспериментальными [6] (рис. 1). В приближении «анизотропного рассеяния при заметном поглощении» [4, 5] с учетом флуоресценции хлорофиллов и фикобилинов выражение для расчета спектров коэффициентов яркости имеет вид

$$\rho(\lambda) = \frac{\sum_i \sigma_i^y(\lambda) C_i + \alpha_{\text{воды}}(\lambda) + 0,5\sigma_{\text{воды}}(\lambda) + \omega_{\text{хл}}(\lambda) C_{\text{хл}} + \omega_{\text{фб}}(\lambda) C_{\text{фб}}}{\sum_i [\alpha_i(\lambda) + (1 - \Phi_i(\lambda)) \sigma_i(\lambda)] C_i},$$

где $\alpha(\lambda)$, $\sigma(\lambda)$, $\sigma^{\gamma}(\lambda)$ – удельные показатели поглощения, рассеяния и рассеяния под углом γ i -го ОАК с концентрацией C_i или воды; w – удельный выход флуоресценции хлорофилла или фикобилина; Φ – интеграл от индикатрисы рассеяния, который воспроизводит долю света, рассеянного в заднюю полусферу частицами сорта i ; λ – длина волны, для которой выполняется расчет. Здесь и далее использованы следующие сокращения ОАК: МВВ – минеральные взвешенные вещества, фп – фитопланктон, РОВ – растворенные органические вещества, хл – хлорофилл «а», к – каротиноиды, фб – фикобилины.

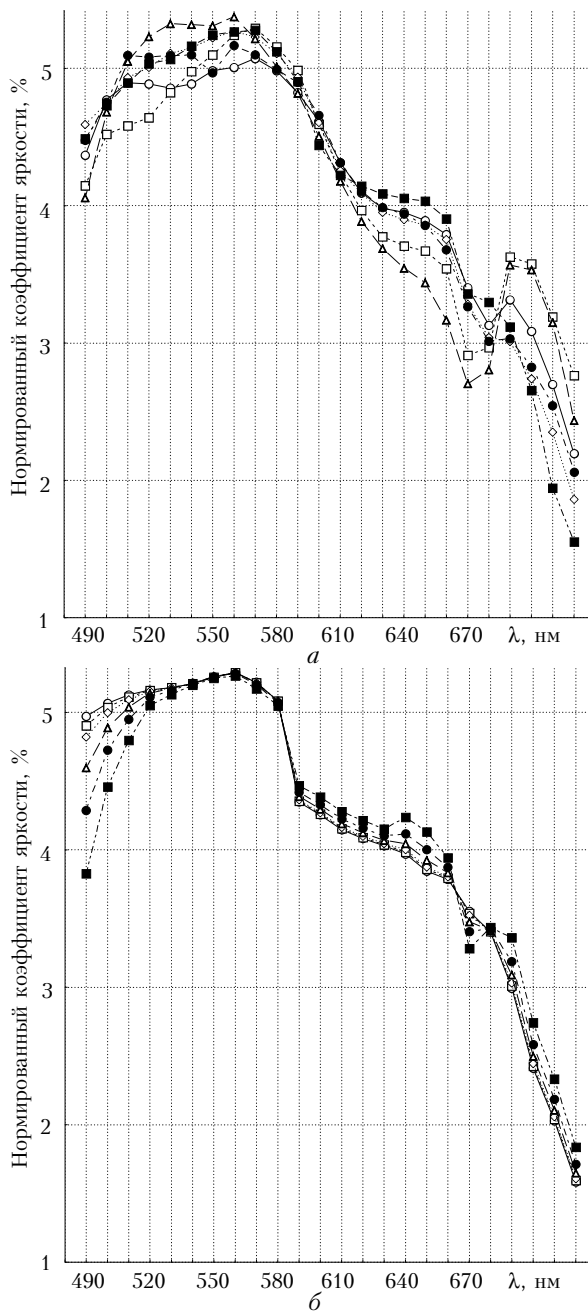


Рис. 1. Нормированные спектры коэффициентов яркости восходящего от воды излучения: экспериментальные (а) и модельные (б). Спектры с различными концентрациями ОАК помечены различными значками

Видно, что в общем случае получить простое аналитическое выражение для отдельного ОАК невозможно. Однако учитывая, что поглощающие и рассеивающие свойства в видимой области спектра можно частично разделить, предложены алгоритмы восстановления концентраций ОАК с использованием радиационных параметров, представляющих отношение $\rho(\lambda)$ в области λ с максимальным влиянием отдельного ОАК к области длин волн, где влияние всех ОАК, за исключением определяемого, максимально. Так, предложены алгоритмы определения концентрации фитопланктона (по концентрации хлорофилла «а»), минеральных взвешенных веществ и растворенных органических веществ (см. [1, 9] и ссылки в них, [7, 8]). Причем для чистых морских и океанских вод и поверхностных вод суши (ПСВ) эти алгоритмы различны, что связано с различным соотношением ОАК в водной среде. В ряде работ отмечается, что эти алгоритмы могут быть успешно применены [1, 8, 9], но только как «региональные» [9] или полученные в приближении «постоянной матрицы» [6]. Назовем такой подход, в котором по спектрометрической информации определяют концентрации ОАК, представлением ОАК.

Рассмотрим это представление более подробно, используя для анализа модельные спектры, полученные в указанном приближении [6, 10]. На рис. 2 нанесены точки, по которым строится зависимость $C_{фп} = A(RP)C_j^B$, $j = 1..p$ (C_j – концентрации ОАК, изменяющие комплексный показатель преломления водной

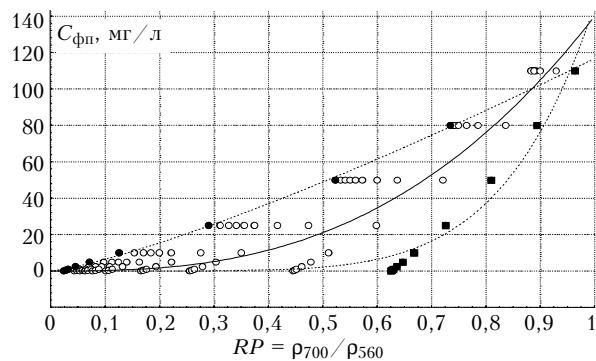


Рис. 2. Регрессионные зависимости $C_{фп} = A(RP)C_j^B$, построенные по модельным спектрам. Темные кружки соответствуют значениям RP , вычисленным при $C_{МВВ} = 0$ (строка 9 табл. 1), темные квадраты – $C_{МВВ} = 50$ мг/л (строка 11 табл. 1), незаполненные кружки – промежуточным значениям $C_{МВВ}$

среды для различных значений j , A и B – коэффициенты регрессии, RP – радиационный параметр – отношение яркости (или КЯ) на двух длинах волн) для различных значений концентрации минеральной взвеси. $C_{фп}$ задавали изменяющимися от 0 до 110 мг/л, при этом для каждого значения $C_{фп}$ $C_{МВВ}$ изменялось от 0 до 50 мг/л. Причем все остальные ОАК в этой серии спектров остаются неизменными – приближение «постоянной матрицы».

Если $C_{МВВ}$ остается неизменной, поведение точек описывается регрессионной зависимостью вида $A(RP)^B$ с высокой точностью. Но как только $C_{МВВ}$ начинает изменяться, изменяются и коэффициенты A и B этой зависимости. Изменение заметно (см. строки 9–11 в табл. 1, а также см. рис. 2). Поэтому определять

Таблица 1

Параметры регрессионных моделей (строки 1–8 по экспериментальным спектрам, 9–14 – по модельным спектрам)

№	Водный объект, год	A	B	$r[C_{\text{фп}}, RP]$	$C_{\text{фп}}$ средн., мг/л
1	оз. Балатон, Венгрия, 1985	125,21	2,32	0,95	48,8
2	оз. Балатон, Венгрия, 1986	94,63	2,19	0,95	63,3
3	оз. Балатон, Венгрия, 1988	68,03	2,59	0,86	10,2
4	оз. Мюгельзее, Германия, 1985	217,2	1,84	0,95	101,4
5	р. Дон, Россия, 1983	67,36	2,84	0,97	18,5
6	р. Дон, Россия, 1984	71,52	2,91	0,84	12,9
7	р. Сев. Донец, Россия, 1983	72,54	2,82	0,92	7,9
8	р. Сев. Донец, Россия, 1984	58,56	2,25	0,98	24,6
Наши расчеты					
9	$C_{\text{МВВ}} = 0, C_{\text{РОВ}} = 2, C_{\text{хл}} = 0,2, C_{\text{к}} = 0,2, C_{\text{фб}} = 0,01$	125,70	1,36	0,99	
10	$C_{\text{МВВ}} = 13,9, C_{\text{РОВ}} = 2, C_{\text{хл}} = 0,2, C_{\text{к}} = 0,2, C_{\text{фб}} = 0,01$	139,95	2,73	0,92	11
11	$C_{\text{МВВ}} = 50,0, C_{\text{РОВ}} = 2, C_{\text{хл}} = 0,2, C_{\text{к}} = 0,2, C_{\text{фб}} = 0,01$	145,69	6,14	0,98	
12	$C_{\text{МВВ}} = 0, C_{\text{РОВ}} = 50, C_{\text{хл}} = 0,9, C_{\text{к}} = 0,8, C_{\text{фб}} = 0,05$	27,42	1,61	0,99	
13	$C_{\text{МВВ}} = 13,9, C_{\text{РОВ}} = 50, C_{\text{хл}} = 0,9, C_{\text{к}} = 0,8, C_{\text{фб}} = 0,05$	41,23	1,44	0,92	49,5
14	$C_{\text{МВВ}} = 50, C_{\text{РОВ}} = 50, C_{\text{хл}} = 0,9, C_{\text{к}} = 0,8, C_{\text{фб}} = 0,05$	35,82	4,44	0,99	

коэффициенты A и B из спектров КЯ при значительном изменении всех ОАК за исключением исследуемого в общем случае оказывается хотя и возможно, но не всегда корректно.

Если проведем регрессионную зависимость как среднюю через все точки, полученные из серии спектров, где $C_{\text{МВВ}}$ изменяется от 0 до 50 мг/л, то получим зависимость, близкую к зависимости, определенной из экспериментальных данных (строка 10 табл. 1). Коэффициент корреляции $r[C_{\text{фп}}, RP]$ близок, и даже выше, чем определяют из экспериментальных данных, но из рис. 2 видно, что наблюдается значительный разброс точек вокруг «средней» зависимости. Этот разброс при расчете $r[C_{\text{фп}}, RP]$ компенсируется увеличением числа точек, поэтому коэффициент корреляции меняется незначительно. При вариации концентраций остальных ОАК, входящих в модель расчета КЯ, можно получить практически любые коэффициенты моделей A и B [11] (ср. строки 9 и 13, 11 и 14 и средние зависимости, строки 10 и 13). Таким образом представление ОАК может быть успешно использовано при условии фиксированных остальных ОАК. Отсюда и выражение «постоянная матрица».

На водных объектах, имеющих приблизительно одинаковый состав ОАК и относительно мало изменяющийся по акватории водного объекта гидрологический режим, это условие часто выполняется. (Из практики экспедиционных работ на водных объектах известно, что при построении регрессионных моделей высокий коэффициент корреляции $r[C_{\text{фп}}, RP]$ наблюдается в том случае, когда съемку проводят в хорошую погоду в течение одного светового дня. Если же происходит изменение погодных условий или же они переходят из одного района водного объекта в другой с изменяющимися гидрологическими условиями, то наблюдается специфическая группировка точек, по которым строят регрессионную зависимость. Формально единая регрессионная зависимость может быть построена, но можно отчетливо наблюдать, что эта зависимость уже состоит из нескольких.)

Другим способом интерпретации дистанционных спектрометрических данных является их представление в виде оптического состояния водной экосистемы в пространстве оптических состояний (ПОС) [10–14].

В этом представлении каждый спектр отображается в ПОС в виде точки с координатами f_1, f_2, f_3 .

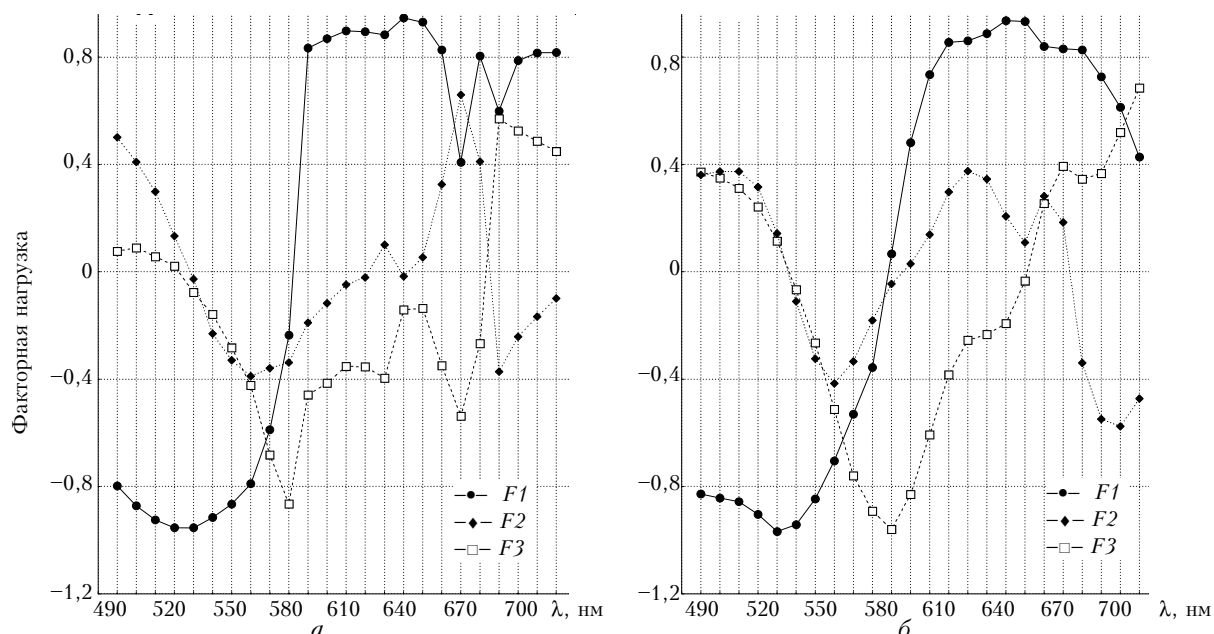


Рис. 3. Факторные нагрузки для массивов экспериментальных (а) и модельных (б) спектров

Спектральное распределение факторных нагрузок – оси ПОС $F1$, $F2$, $F3$, полученное по сериям модельных и экспериментальных спектров, приведено на рис. 3.

Их сравнение позволяет убедиться, что с формально математической точки зрения такие массивы имеют идентичную структуру. Это косвенно еще раз подтверждает правильность выбора модели для расчета спектров КЯ. Первые три собственных числа, полученные только по экспериментальным спектрам, составляют 14,33; 5,63; 2,47, полученные по модельным спектрам – 16,08; 3,87; 2,09.

Показано, что наиболее информативно представлять спектрометрическую информацию о состоянии ПВС в плоскостях факторов 1–3 и 2–3 [11]. На рис. 4 приведены те же спектры, что были использо-

ваны при построении регрессионных зависимостей на рис. 2 (см. стр. 9–11 табл. 1) в проекциях ПОС на плоскости факторов 1–3 и 2–3 соответственно. Контур ПОС, полученного по 7200 модельным спектрам, выделен пунктирной линией. Показано, что практически все экспериментальные спектры попадают внутрь ПОС, построенного по модельным спектрам [10].

Кроме того, эта область является открытой и контуром обведена только та ее часть, которую заполнили спектры, рассчитанные в данной работе. Ключом к интерпретации полученных в этом представлении результатов служит табл. 2, где приведены коэффициенты корреляции между ОАК, факторами и значениями RP , использованными при построении регрессионных зависимостей.

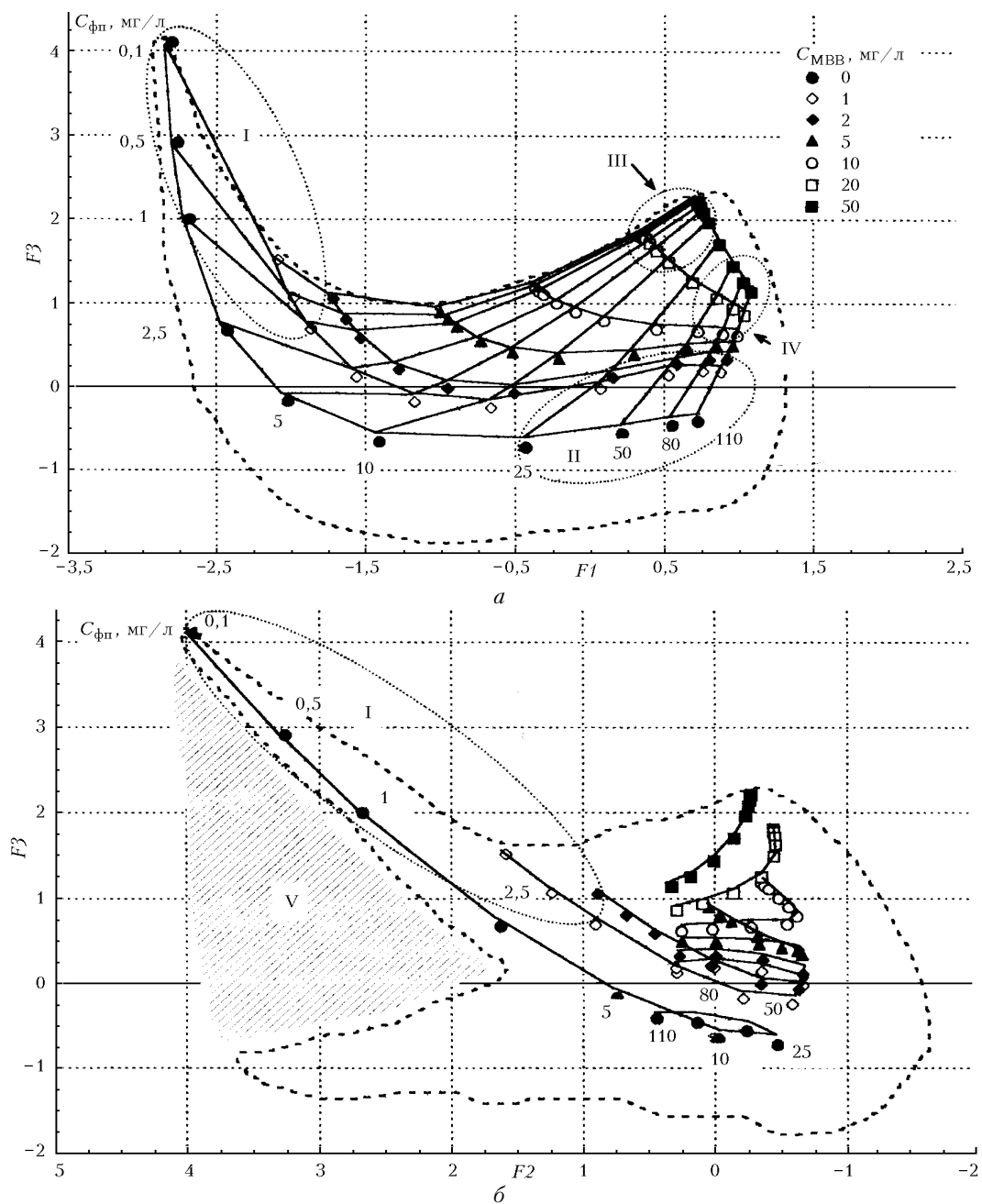


Рис. 4. Модельные спектры в проекциях ПОС на плоскости факторов 1–3 и 2–3

Таблица 2

Парные коэффициенты корреляции между концентрациями ОАК, факторами и регрессионными отношениями

	$C_{\text{фб}}$	$C_{\text{к}}$	$C_{\text{хл}}$	$C_{\text{РОВ}}$	$C_{\text{МВВ}}$	$C_{\text{фп}}$	$F1$	$F2$	$F3$
$F1$	-0,011	0,022	0,060	0,253	0,437	0,612	1,000	0,000	0,000
$F2$	0,125	-0,056	0,096	-0,289	-0,073	0,597	0,000	1,000	0,000
$F3$	0,112	-0,077	-0,325	-0,041	0,617	-0,292	0,000	0,000	1,000
$RP(700/560)$	0,060	0,000	0,157	0,072	0,213	0,881	0,780	0,581	-0,169
$RP(590/630)$	0,004	0,000	0,069	-0,242	-0,622	-0,253	-0,838	0,285	-0,354
$RP(690/590)$	0,071	0,000	0,203	0,029	-0,099	0,734	0,532	0,629	-0,360
$RP(690/580)$	0,064	0,000	0,195	0,035	-0,058	0,765	0,571	0,635	-0,333
$RP(690/570)$	0,057	0,000	0,194	0,043	-0,041	0,771	0,587	0,631	-0,322
$RP(620/560)$	-0,072	0,000	0,041	0,229	0,610	0,528	0,967	-0,001	0,189
$RP(620/570)$	-0,061	0,000	0,063	0,191	0,563	0,592	0,977	0,064	0,123
$RP(620/550)$	-0,097	0,000	0,064	0,260	0,607	0,506	0,962	-0,025	0,180

Фактор 1 имеет значимые, причем сравнимые по величине, коэффициенты корреляции со многими ОАК, что вполне объяснимо, если рассмотреть его поведение на рис. 3. Он практически неселективен, и обращается в нуль в области $\lambda \approx 580$ нм. Поэтому смысл этого фактора, или изменения положения точки вдоль оси $F1$, можно интерпретировать как «общее загрязнение» воды.

Фактор 2 имеет максимальный коэффициент корреляции с $C_{\text{фп}}$ и имеет значимые коэффициенты корреляции и с $C_{\text{РОВ}}$ и с $C_{\text{фб}}$. Знак коэффициента корреляции положительный, т.е. $F2$ увеличивается с увеличением $C_{\text{фп}}$. Этот фактор можно интерпретировать как показатель состояния биоты экосистемы, видового разнообразия фитопланктона.

Фактор 3 имеет максимальный коэффициент корреляции с $C_{\text{МВВ}}$, значимые, но меньшие коэффициенты корреляции с $C_{\text{хл}}$, $C_{\text{РОВ}}$, $C_{\text{фп}}$. Его можно с определенной степенью осторожности интерпретировать как загрязнение воды веществами биотического происхождения.

Рассмотрим поведение спектров в ПОС. Выделим серию спектров, в которых изменяются только $C_{\text{фп}}$ и $C_{\text{МВВ}}$. Остальные ОАК выберем постоянными и, в данном конкретном случае, минимальными из всех значений, которые использованы при построении ПОС. Постоянство этих ОАК равносильно выбору сечения ПОС поверхностью, на которой изменяются $C_{\text{фп}}$ и $C_{\text{МВВ}}$, но остаются постоянными остальные ОАК, т.е. происходит переход к приближению «постоянной матрицы». Соединим спектры, в которых остаются постоянными либо $C_{\text{фп}}$ либо $C_{\text{МВВ}}$. Такое семейство кривых называется двойными изоплетами. Ограниченное крайними изоплетами пространство представляет собой ограниченную область этой поверхности. На рис. 4 такая область поверхности выделена в ПОС и представлена в проекциях координат $F1-F3$, $F2-F3$ соответственно. В проекции $F1-F2$ эта область поверхности оказывается повернутой ребром и, за исключением малых концентраций $C_{\text{МВВ}}$, оказывается вырожденной [11].

Наибольшая дисперсия по $C_{\text{фп}}$ и $C_{\text{МВВ}}$ наблюдается в проекции на оси $F1-F3$ (рис. 4,а). По поведению спектров в этой плоскости можно достаточно подробно следить за изменением оптического состояния водной экосистемы. Отмечены области ПОС, которые можно однозначно интерпретировать. Область

чистой воды – I. В этой области дисперсия по ОСВЭ максимальна. Область прозрачной, но «цветущей» воды – II. Область очень грязной воды – IV, и область грязной воды, но без фитопланктона – III. Выражение «грязные» воды использовано чисто условно, и имеет смысл только с физической точки зрения: чистая вода – вода без примесей, любая примесь – загрязнение. Безусловно, с точки зрения экологов это утверждение некорректно.

Проекция ПОС на оси $F2-F3$ (рис. 4,б) примечательна тем, что здесь можно выделить запрещенную область V, в которую спектры не попадают при любых вариациях ОАК.

Трехмерное пространство – ПОС – получается путем сдвига рассматриваемой поверхности за счет изменения остальных ОАК. Однако при этом параллельно со сдвигом происходит и определенное искажение формы этой поверхности, что становится особенно заметным при значительном изменении концентрации всех ОАК.

Сравнить рассмотренные представления возможно путем вычисления коэффициентов корреляции типа $r_{i,j} = r[RP_i, F_j]$, где RP_i – радиационный параметр, F_j – значение фактора (factor scores), $j = 1, 2, 3$. Эти коэффициенты корреляции представлены совместно с рядом других параметров в табл. 2, анализ которой позволяет (с большим числом оговорок) провести аналогию между представлениями. Если вместо факторов $F1, F2, F3$ использовать радиационные параметры, хорошо с ними коррелирующие, то формально можно построить ПОС в представлении RP . Однако радиационные параметры будут иметь смысл уже не индикаторов ОАК, а индикаторов состояния экосистемы [10–14].

Это основное различие рассматриваемых способов интерпретации спектрометрической информации. Первым способом в общем случае можно определять концентрации ОАК. Точность определения зависит от постоянства концентраций и качественного состава всех ОАК за исключением определяемого. При этом используют только две длины волны регистрируемого спектра. Вторым – определяют интегральные показатели экосистемы, не останавливаясь на определении концентраций ОАК, используя весь видимый спектр. В частных случаях, или при необходимости, можно перейти к определению концентраций ОАК.

Таким образом, тот недостаток, о котором говорилось в начале статьи, относится только к первому способу интерпретации. Для оценки экологического состояния водных экосистем приходится оперировать понятиями, сформированными путем обобщения большого числа различных физических, химических и биологических показателей. В этом случае показатели, определяемые дистанционными спектрометрическими методами, дают идеальную или референтную характеристику состояния экосистемы. Безусловно, вопрос связи оптических и экологических показателей остается в значительной мере открытым, но его решение должно явиться предметом дальнейших исследований в этом направлении. Кроме того, все вышесказанное относится только к фотической зоне и не может быть использовано при обследовании глубинных слоев водных объектов.

1. Радиационный режим и оптические свойства озер // В.Н. Адаменко, К.Я. Кондратьев, Д.В. Поздняков, Л.В. Чехин. Л.: Гидрометеиздат, 1991. 300 с.
2. Бриттон Г. Биохимия природных пигментов. М.: Мир, 1986. 422 с.
3. Кондратьев К.Я., Поздняков Д.В. Оптические свойства природных вод и дистанционное зондирование фитопланктона. Л.: Наука, 1988. 182 с.
4. Голубицкий Б.М., Левин И.М., Танташев М.В. Коэффициент яркости полубесконечного слоя морской воды // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. 1974. Т. 10. № 11. С. 1235–1238.
5. Зега Э.П., Иванов А.П., Кацев И.Л. Перенос изображения в рассеивающей среде. Минск: Наука и техника, 1985. 327 с.
6. Sukhorukov B.L., Garbuzov G.P and Akawiec A.A. Model calculations of brightness coefficients spectra for the inter-

pretation of the spectrometric data on fresh water quality // VII Int. Symp. «Atmos. and Ocean Optics»: Proc. SPIE. 2000. V. 4341. P. 503–510.

7. Гутельсон А.А., Гарбузов Г.П., Дубовицкий Г.А., Лопатченко Л.Л., Махотенко А.Н., Сухоруков Б.Л. Методы и приборы дистанционного мониторинга состояния поверхностных вод суши // Гидрохимические материалы. СПб.: Гидрометеиздат, 1991. Т. 100. С. 15–47.
8. Гутельсон А.А., Дубовицкий Г.А., Кейдан Г.П., Лопатченко Л.Л. Оценка качества воды водных экосистем по их излучению в видимой области спектра // Экологическое нормирование и моделирование антропогенного воздействия на водные экосистемы. Вып. 1. Л.: Гидрометеиздат, 1988. С. 101–134.
9. Васильков А.П., Кельбалиханов Б.Ф. Дистанционные оптические пассивные методы исследования океана. Сызьтывкар, 1991. 108 с.
10. Сухоруков Б.Л., Гарбузов Г.П., Никаноров А.М. Оценка экологического состояния водных объектов по спектрам коэффициента яркости // Вод. ресурсы. 2000. Т. 27. № 5. С. 579–588.
11. Sukhorukov B.L., Novikov I.V. The information content of spectra of the brightness coefficients for water ecosystems // VII Joint Int. Symp. «Atmos. and Ocean Optics»: (Irkutsk). Proc. SPIE. 2001 (в печати).
12. Garbuzov G.P., Sukhorukov B.L. Investigation of ecological state of water bodies according to the remotely sensing optical spectra // Proc. of the I Int. Airborne Remote Sensing Conference and Exhibition. Strasbourg, France, 1994. V. III. P. 37–45.
13. Сухоруков Б.Л., Гарбузов Г.П., Никаноров А.М. Оптические свойства загрязненных водных экосистем // Метеорология и гидрология. 1997. № 11. С. 5–19.
14. Сухоруков Б.Л., Гарбузов Г.П., Акавец А.А., Никаноров А.М. Интегральные показатели экологического состояния водных объектов при интерпретации дистанционных спектрометрических данных // Докл. РАН. 1998. Т. 363. № 2. С. 278–281.

B.L. Sukhorukov, I.V. Novikov. Comparative analysis of two ways to interpret the remote spectroscopic data on the state of water ecosystems.

The peculiarities of two ways of interpreting the remote spectroscopic data on the state of water ecosystems are analysed. The first one presents optically active components (OAC), the second – optical state of water ecosystem (OSWE). Accuracy of determination of optically active components in traditional interpretation is estimated. The conditions of validity for each way are given. It is shown that the remote spectroscopic data are an objective indicator of ecosystem's state.