

基于主成分方法的浑浊水体组分的光谱探测分析

丛茂勤, 罗 宏, 韦玉春

(南京师范大学地理科学学院, 江苏 南京 210023)

[摘要] 浑浊水体是水色遥感的重要研究对象,其光谱特征由浮游植物(叶绿素 a 含量)、无机悬浮物和可溶性有机物 3 个组分控制,利用光谱识别浑浊水体的组分信息对于光谱解混和组分的定量反演具有重要意义. 基于 2010—2016 多年太湖水体野外测量的数据,以水体光谱数据的协方差矩阵和相关矩阵为输入进行主成分分析,对比特征值分解(EVD)、奇异值分解(SVD)、非线性迭代偏最小二乘法(NIPALS)3 种求解方法以及白化后处理对水体组分的识别作用. 结果表明,基于相关矩阵的 SVD 方法对浑浊水体组分的识别效果优于其他算法,获得的前 3 个主成分载荷累计贡献率为 98.8%,依次代表了水、叶绿素 a 组分和悬浮泥沙组分信息;白化后处理没有明显的优化作用.

[关键词] 主成分分析, 浑浊水体, 组分识别, 奇异值分解, 非线性迭代偏最小二乘法

[中图分类号] X131.2 **[文献标志码]** A **[文章编号]** 1672-1292(2019)02-0068-07

Spectral Detecting of Water Components in the Turbid Water Body by Principle Component Analysis

Cong Maoqin, Luo Hong, Wei Yuchun

(School of Geography, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

Abstract: The turbid water is an important research object in water color remote sensing, whose spectral characteristics are determined by the phytoplankton (chlorophyll-a concentration), inorganic suspended matter and dissolved organic matter. Using spectrum data collected from field measurement in Taihu Lake, the paper compares the performance of identifying the components from turbid water spectrum among three methods, eigenvalue decomposition (EVD), singular value decomposition (SVD), nonlinear iterative partial least squares (NIPALS), and whitening post-processing, taking the covariance matrix and the correlation matrix as input. The results shows that SVD with input of correlation matrix presents the better performance, that the first three principal component loadings of SVD have 98.8% cumulative contribution rate, and represents component information about the water, chlorophyll-a dominant and suspends sediment dominant, respectively, while the whitening does not show an obvious effect.

Key words: principle component analysis, turbid water, component identification, singular value decomposition, nonlinear iterative partial least squares

水体光谱是水体中光学活性物质(主要包括浮游藻类色素、无机悬浮物和可溶性有机物)的光学特性的综合反映,本质上是一种混合光谱. 野外浑浊水体光学特性复杂多变,各种信息的重叠干扰导致测量的光谱曲线不同,影响了水体组分识别^[1]. 从浑浊水体光谱提取水体组分,有助于理解混合光谱问题,也可以提高定量遥感精度,对水色遥感具有重要意义^[2-3].

主成分分析方法^[4]是一种基于统计特征的多维正交线性变换,将高维数据投影到较低维空间,以揭示事物的本质特征,在化学计量、实验室分析如重量分析、容量分析、色谱分析、光谱分析等方面有着广泛应用^[5]. 在不丢失主要光谱信息的前提下,主成分分析可以选择较少的新变量代替原来较多的变量,便于处理谱带重叠的问题^[6],获得的载荷系数中包含了样品不同组分的信息,有助于组分的识别和提取^[5]. 在

收稿日期:2019-06-19.

基金项目:国家自然科学基金(41471283).

通讯联系人:韦玉春,博士,教授,博士生导师,研究方向:环境遥感. E-mail: weiyuchun@njnu.edu.cn

水色遥感中,国内外诸多学者利用主成分分析处理水体反射率光谱^[7-8]或遥感图像^[9-11],将获得的主成分作为解释变量进行回归分析,以进行不同水体组分的反演估计。Sváb等^[12]利用主成分分析将浑浊水体描述为若干个光谱独特的水体组分,识别浑浊水体中相对较纯的水体组分;Tyler等^[13]使用主成分分析来确定水体组分的个数,但都没有对不同主成分输入和不同主成分提取方法的识别作用进行深入研究。

本文基于太湖水体的水上测量光谱数据,以协方差矩阵和相关矩阵作为输入,对比特征值分解(EVD)、奇异值分解(SVD)、非线性迭代偏最小二乘法(NIPLAS)、白化后处理等对浑浊水体组分的识别效果,以期对光谱解混提供依据,从而服务于水体组分的遥感反演。

1 数据来源和预处理

1.1 数据获取

太湖是中国三大淡水湖之一。湖泊平均水深约2 m左右,是比较典型的浅水型湖泊。太湖水体富营养化程度严重,属于典型的浑浊水体^[14]。

2010—2016年进行了太湖野外采样,获得150个样点光谱,测量时间主要为春夏秋季。利用美国ASD公司生产的ASD FieldSpace Pro便携式光谱辐射计距离水面0.5~1 m测量光谱,波段范围为350~1 050 nm,视场角为10°。以反射率30%的灰板为标准板,每个样点重复测量10次,剔除异常光谱后取遥感反射率最低的光谱作为样点光谱。采集每个样点的表层15 cm的水样,低温储藏,用于室内水质参数的测量。

1.2 水质参数测量

室内用GF/F膜过滤混合水样,采用国家行业标准^[15]的分光光度计三色法测定叶绿素a(Chla)浓度,单位为 $\mu\text{g/L}$ 。采用常规的干燥、烘烧、称重法测定无机悬浮物浓度(ISS),单位为 mg/L 。

1.3 数据预处理

测量的光谱重采样为1 nm的间隔,按照文献^[16]方法将其转换为遥感反射率值。使用核回归平滑方法^[17]进行平滑处理。光谱数据用矩阵表示为:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & \cdots & x_{mn} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

式中, \mathbf{X} 为光谱矩阵; x 为水体的遥感反射率值; m 为波段个数; n 为样本数。矩阵的每一行为一个波段,每一列为一个样点。

2 方法

主成分分析(PCA)可使用两种输入:第一种是原始数据的协方差矩阵;第二种是相关矩阵,即先对原始数据进行Z-score标准化,再计算标准化后数据的协方差矩阵。分别以光谱数据的相关矩阵和协方差矩阵作为输入,对比EVD^[18]、SVD^[19]、NIPLAS^[20]3种主成分提取方法和白化后处理^[21]。使用matlabR2015b软件进行数据处理。

2.1 主成分计算

EVD、SVD和NIPLAS在原理上都是特征值计算的问题。EVD、SVD是非顺序的方法,同时提取主成分因子,NIPALS则按顺序依次计算各个主成分;若需计算所有主成分,SVD比NIPALS更有效,如仅需保留前几个主成分,NIPALS更有效^[22]。EVD常用于解释PCA的原理,在化学计量应用中不及SVD和NIPALS,可能是由于其效率在两者之间^[22]。

2.1.1 特征值分解(EVD)

若一个向量 \mathbf{V} 是方阵 \mathbf{A} 的特征向量,则可表示为 $\mathbf{AV}=\lambda\mathbf{V}$,其中 λ 为特征向量 \mathbf{V} 对应的特征值。使用如下矩阵分解形式计算特征值:

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}^{-1}, \quad (2)$$

式中, \mathbf{Q} 为矩阵 \mathbf{A} 的特征向量组成的矩阵; $\mathbf{\Lambda}$ 是一个对角矩阵,每一个对角线元素就是一个特征值。特征值由大到小排列,所对应的特征向量描述了这个矩阵的变化方向(从主要的变化到次要的变化排列)。由此,矩阵 \mathbf{A} 的信息可由其特征值和特征向量表示。

2.1.2 奇异值分解(SVD)

SVD 可将任意实阶矩阵分解为 3 个矩阵的乘积,即任一矩阵 $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$,可写成 $A = UDV^T$,其中, $U \in \mathbf{R}^{m \times n}$, $D \in \mathbf{R}^{n \times n}$, $V \in \mathbf{R}^{n \times n}$. 其中, D 为对角矩阵,各元素为奇异值; U 的列是 AA^T 的特征向量; V 的列是 $A^T A$ 的特征向量.

2.1.3 非线性迭代偏最小二乘法(NIPALS)

NIPALS^[20] 是 Wold 于 1966 年提出的方法,在化学计量分析中经常使用^[23]. 其按照重要性的降序(如特征值或奇异值)分解数据以获得主成分,一般用于计算主成分或偏最小二乘法中的前几个主成分. 其特点是:收敛速度快;对参数初值的依赖程度低,甚至不依赖初值的选取;计算量小;适应面广.

NIPALS 算法步骤如下:(1)将矩阵 X 的某一列赋给 u ; (2)计算载荷系数 $p = X^T \cdot u / (u^T \cdot u)$; (3) $p = p / \|p\|$; (4)计算得分矩阵 $t = X \cdot p / (p^T \cdot p)$; (5)计算 $q = (t - u)^T \cdot (t - u)$; (6)检验 q 的收敛性; (7)计算剩余矩阵 $E = X - t \cdot p^T$; (8)用 E 取代 X ,重复(1)~(7),计算下一个主成分.

2.2 白化后处理

白化后处理,即特征向量除以对应特征值的平方根,目的是去除输入数据的冗余信息,降低特征之间的相关性,且保持所有特征具有相同的方差.

2.3 方法对比

以光谱数据的相关矩阵和协方差矩阵作为输入. 首先对比 EVD 与 SVD 方法. 方法 1 使用 eig 函数提取载荷系数;方法 2 使用 eig 函数提取载荷系数后进行白化后处理;方法 3 使用 svd 函数提取载荷系数;方法 4 使用 svd 函数提取载荷系数后进行白化后处理. 方法 1 和方法 3 用于对比 EVD 与 SVD 对水体组分的识别效果,方法 1 和方法 2、方法 3 和方法 4 用于对比白化后处理的影响. 最后对比 EVD、SVD 的结果与 NIPALS 方法的结果.

2.4 评价依据

使用载荷系数曲线作为对比依据,使用余弦距离判别主成分载荷对水体组分的识别效果. 计算载荷系数与水体光谱的余弦距离,余弦距离越小,与光谱相似度越高. 余弦距离表达式为:

$$d_{x,y} = 1 - \frac{X \cdot Y}{\|X\| \cdot \|Y\|}, \tag{3}$$

式中, X 、 Y 分别为光谱向量或载荷系数. 通过最小余弦距离的水体光谱的 Chla 浓度和 ISS 浓度,推断载荷系数包含的水体组分信息,以此判断识别效果.

3 结果与讨论

3.1 光谱特征分析及水质参数统计

预处理后的光谱曲线如图 1 所示.

在测量的光谱中,Chla 主导的水体光谱在 556 nm 有低峰,700 nm 附近有反射峰且随着 Chla 浓度的增加向长波方向移动;ISS 主导的水体光谱在 600~700 nm 和 760~820 nm 有反射峰,随着浓度的增加,第二反射峰高于第一反射峰;纯水(或一般的水体、清洁水体)光谱随着波长增加反射率逐渐下降.

野外水样的 Chla 浓度在 3.0~557.9 $\mu\text{g/L}$ 之间,均值为 59.3 $\mu\text{g/L}$;ISS 浓度在 0.8~121.3 mg/L 之间,均值为 36.4 mg/L ;其中,Chla 浓度小于 100 $\mu\text{g/L}$ 且 ISS 浓度小于 60 mg/L 的样点占 74%. 水质参数浓度的统计特征如表 1 所示.

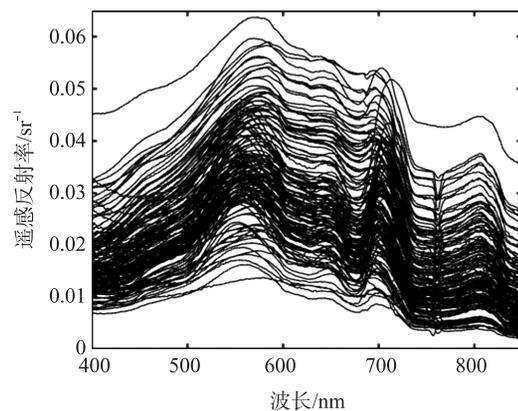


图 1 平滑后的水上光谱曲线

Fig. 1 Spectra above the water surface after smoothing

表 1 水质参数统计特征
Table 1 Statistical characteristics of water quality parameters

水质参数	Chla/($\mu\text{g/L}$)			ISS/(mg/L)		
	Min	Max	Mean	Min	Max	Mean
浓度	3.0	557.9	59.3	0.8	121.3	36.4

3.2 主成分结果的比较

利用光谱的协方差矩阵和相关矩阵提取特征向量,即载荷系数,其绝对值越大,对应波长对主成分的影响越大,符号仅表示正相关或负相关.前3个主成分的累计贡献率均达98%以上,表明前3个主成分就可以表示水上光谱的主要信息,因此,以下仅分析前3个主成分的载荷系数.

3.2.1 EVD 与 SVD 的主成分结果

EVD 与 SVD 方法计算的野外水体光谱数据的主成分载荷系数曲线如图 2 所示.方法 1 与方法 3、方法 2 与方法 4 的载荷系数呈现对称或重叠,方法 1 与方法 2、方法 3 与方法 4 曲线形态相似.

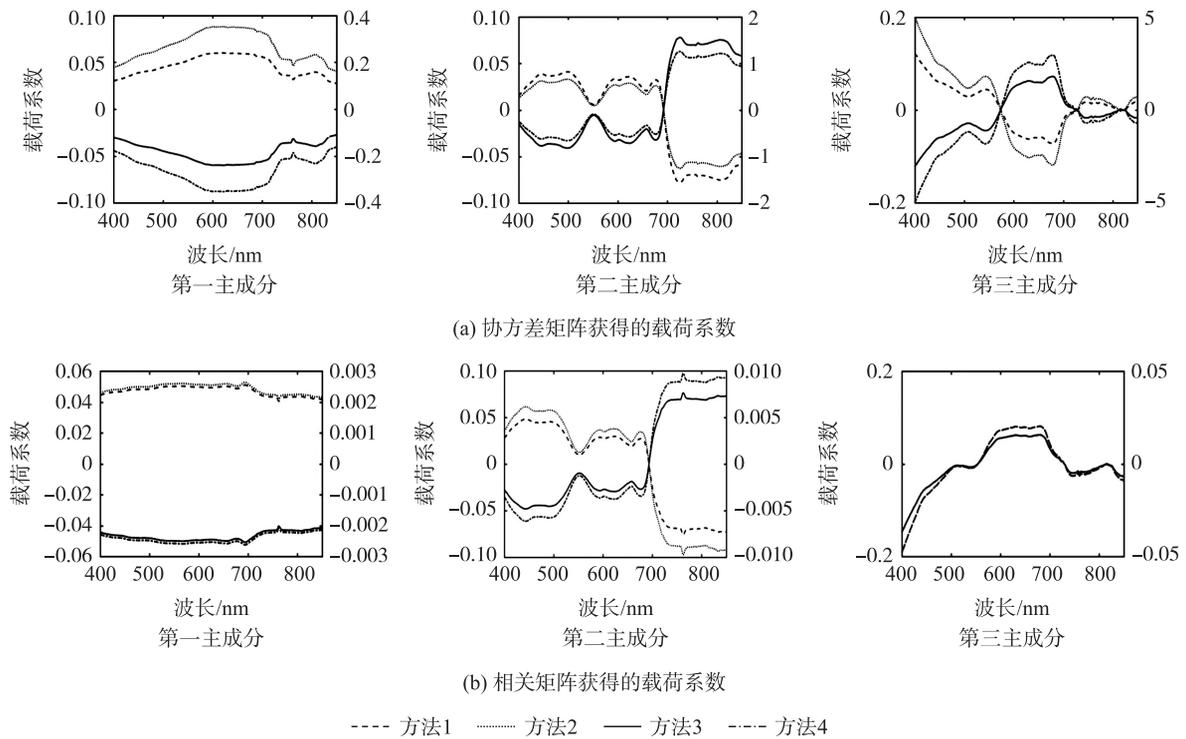


图 2 载荷系数曲线图

Fig. 2 Loading changes

协方差矩阵作为输入时,方法 1、方法 2 的第一主成分载荷系数在 685、808 nm 处有峰值,符合 ISS 主导的水体光谱特征;第二主成分、第三主成分载荷系数整体呈下降趋势,符合水的光谱特征.方法 3、方法 4 的第一主成分载荷系数呈现下降的趋势,符合水的光谱特征;第二主成分载荷系数在 553、726 nm 处有峰值,符合 Chla 主导的水体光谱特征;第三主成分载荷系数在 676、814 nm 有峰值,符合 ISS 主导的水体光谱特征.从载荷系数曲线来看,方法 3 对于水体组分识别效果优于方法 1,分别对应不同水体组分光谱特征.经过白化后处理(方法 2、方法 4)的载荷系数曲线与处理前的载荷系数曲线形态一致.

相关矩阵作为输入时,方法 1、方法 2 的第一主成分载荷系数在 694、810 nm 处有峰值,符合 ISS 主导水体光谱特征;第二主成分载荷系数整体呈下降趋势,符合水的光谱特征;第三主成分载荷系数在 682、816 nm 有峰值,符合 ISS 主导的水体光谱特征.方法 3、方法 4 的第一主成分载荷系数整体呈下降趋势,符合水的光谱特征;第二主成分载荷系数在 556、729 nm 有峰值,符合 Chla 主导的水体光谱特征;第三主成分载荷系数在 682、816 nm 有峰值,符合 ISS 主导的水体光谱特征.从载荷系数曲线来看,方法 3 获得的 3 个主成分载荷分别对应不同水体组分光谱特征,水体组分识别效果优于方法 1.白化后处理前后的载荷系数曲线形态一致.

方法 3 提取的主成分载荷系数更符合不同组分主导的水体光谱曲线特征,白化后处理后载荷系数曲线形态与处理前变化较小,对水体组分识别的优化作用甚微.在方法 3 中,对于两种输入,基于相关矩阵提取的载荷系数曲线更加平滑,噪声更小,对浑浊水体组分识别效果更好.

余弦距离最小时光谱对应的 Chla 浓度和 ISS 浓度如表 2 所示.

表 2 太湖水体中不同主成分方法载荷系数对应的 Chla 浓度和 ISS 浓度

Table 2 Chla and ISS concentration related to principal component loadings in Taihu Lake

方法	协方差矩阵				相关矩阵			
	方法 1	方法 2	方法 3	方法 4	方法 1	方法 2	方法 3	方法 4
第一主成分载荷	Chla = 15.5 $\mu\text{g/L}$ ISS = 75.4 mg/L		Chla = 5.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 10.2 mg/L		Chla = 12.7 $\mu\text{g/L}$ ISS = 93.0 mg/L		Chla = 5.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 10.2 mg/L	
第二主成分载荷	Chla = 5.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 10.2 mg/L		Chla = 557.9 $\mu\text{g/L}$ ISS = 25.1 mg/L		Chla = 5.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 10.2 mg/L		Chla = 557.9 $\mu\text{g/L}$ ISS = 25.1 mg/L	
第三主成分载荷	Chla = 15.7 $\mu\text{g/L}$ ISS = 27.7 mg/L		Chla = 30.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 51.6 mg/L		Chla = 30.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 51.6 mg/L		Chla = 30.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 51.6 mg/L	

白化后处理前后载荷系数对应样点均相同,对浑浊水体组分识别效果的影响较小.无论是协方差矩阵或相关矩阵,方法 3 获得的第一主成分载荷系数对应水的组分信息,第二主成分载荷系数对应 Chla 组分信息,第三主成分载荷系数对应于 ISS 组分信息,表明 SVD 方法对于浑浊水体组分识别效果较好.

3.2.2 NIPALS 的主成分结果

以相关矩阵作为输入,利用 NIPALS 提取载荷系数,对比相同输入下 SVD 的组分识别效果.

图 3 中,第一、第二主成分载荷系数整体呈下降趋势,符合水的光谱特征;第三主成分载荷系数在 550、710 nm 有峰值,符合 Chla 主导的水体光谱特征.与 SVD 的结果相比,NIPALS 的载荷系数曲线较为平滑.

余弦距离最小时光谱对应的 Chla 浓度和 ISS 浓度如表 3 所示.

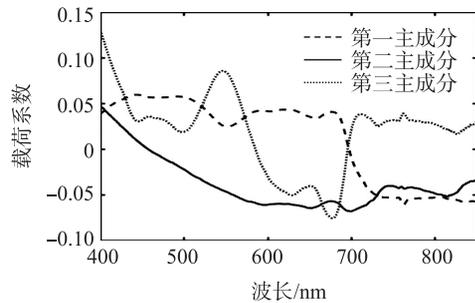


图 3 NIPALS 算法提取的载荷系数曲线图

Fig. 3 Loading changes in NIPALS

表 3 NIPALS 载荷系数对应的 Chla 浓度和 ISS 浓度

Table 3 Chla and ISS concentration related to principal component loadings in NIPALS

主成分载荷	第一主成分载荷	第二主成分载荷	第三主成分载荷
水质参数浓度	Chla = 5.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 10.2 mg/L	Chla = 15.7 $\mu\text{g/L}$ ISS = 27.7 mg/L	Chla = 121.4 $\mu\text{g/L}$ ISS = 24.3 mg/L

表中各个主成分对应的浓度表明 NIPALS 获得的载荷系数均无法完全识别出典型的水体组分,提取出第三主成分载荷可代表 Chla 组分信息,而第一、第二主成分载荷代表了 ISS 和水的信息. NIPALS 的识别效果不如 SVD. 使用协方差矩阵作为输入计算得到的主成分载荷的可识别性更弱.

3.3 讨论

在实验室的化学光谱分析中,一般认为,当仅提取部分主成分因子时,NIPALS 比 SVD 更有效^[22],但就野外水体光谱的组分识别而言,没有获得这样的效果.无论是水体光谱的协方差矩阵还是相关矩阵作为输入,SVD 方法都能识别出不同水体组分,前 3 个主成分载荷依次代表水组分信息、Chla 组分信息和 ISS 组分信息.

SVD 的输入有两种:协方差矩阵和相关矩阵.一般认为协方差矩阵适用于量纲一致的情况,而相关矩阵先进行了 Z-score 标准化,适用于量纲差异较大的情况.工作中,学者往往直接以光谱数据的协方差矩阵^[12]或相关矩阵^[9]为出发点进行研究,对于两种输入的选择并没有客观的判断准则.本文的对比分析表明,基于相关矩阵提取的载荷系数更为平滑,噪声更低.

为了更好地识别浑浊水体组分,本文分别以水体光谱数据的协方差矩阵和相关矩阵作为输入,对比了 EVD、SVD、NIPALS 3 种方法和白化后处理的提取效果.在数据源方面,本文使用了太湖多年的野外测量

数据,比一般的多光谱影像^[9-11,13]对具体目标信息的表达和探测更为清晰、明确。本文的目的在于寻找一种能够较好地探测水体组分信息的主成分分析方法,一些研究则直接使用主成分回归方法反演水体组分浓度^[7-11]。数据处理上不同的是,本文结合了白化后处理进行主成分分析,并对比了白化后处理前后水体组分识别的结果。本文的结论,在主成分分析对浑浊水体组分的识别作用方面与 Sváb 等^[12]和 Tyler 等^[13]相同,即主成分分析可以有效识别不同的水体组分,包括水、Chla 组分和 ISS 组分。不同的是,本文对比了协方差矩阵和相关矩阵两种输入,SVD、EVD 和 NIPALS 3 种主成分提取方法及白化后处理对水体组分识别的影响,表明基于相关矩阵的主成分分析方法更有利于水体组分的识别,且 SVD 识别水体组分的效果要优于 EVD 和 NIPALS,白化后处理对水体组分识别效果的影响较小,而 Sváb 等^[12]和 Tyler 等^[13]并没有对不同的主成分分析方法和组分探测效果作进一步研究。

本文以多年太湖野外观测样点数据为基础开展分析,数据和方法比较所获得的结论更具有一般的指示作用,对类似的浑浊水体具有一定的适用性,而对其他类型水体还需要做进一步的研究。

4 结论与建议

本文基于太湖野外自然水体光谱数据的相关矩阵和协方差矩阵,利用 EVD、SVD、NIPALS 以及白化后处理提取主成分,将载荷系数视为抽象光谱,并结合余弦距离评价不同主成分分析方法对浑浊水体组分的识别效果。结论如下:

(1) SVD 识别浑浊水体组分的效果优于 NIPALS 和 EVD 算法。无论是协方差矩阵或相关矩阵作为输入,SVD 都能识别出不同的水体组分,前 3 个载荷系数依次对应水信息、Chla 组分信息和 ISS 组分信息。NIPALS 和 EVD 无法有效识别不同的水体组分。

(2) 基于相关矩阵的 SVD 主成分分析识别效果优于协方差矩阵。与协方差矩阵相比,利用相关矩阵获得的载荷系数噪声更低,主成分载荷曲线更为平滑,更有利于水体组分的识别。

(3) 白化后处理对于水体组分提取优化效果不明显。白化处理前后载荷系数曲线的形态变化不大,波峰波谷位置不变,不影响水体组分的识别。

本文仅针对太湖水体进行研究,结论对于类似的湖泊水体具有参考性。不同类型的其他湖泊水体还需进一步研究。

[参考文献] (References)

- [1] GITELSON A, GARBUZOV G, SZILAGYI F, et al. Quantitative remote sensing methods for real-time monitoring of inland waters quality[J]. International journal of remote sensing, 1993, 14(7): 1269-1295.
- [2] ALLAN M G. Remote sensing of water quality in Rotorua and Waikato Lakes [D]. Hamilton, New Zealand: University of Waikato, 2008.
- [3] CHENG C, WEI Y, XU J, et al. Remote sensing estimation of Chlorophyll a and suspended sediment concentration in turbid water based on spectral separation[J]. Optik-international journal for light and electron optics, 2013, 124(24): 6815-6819.
- [4] ABDI H, WILLIAMS L J. Principal component analysis[J]. Wiley interdisciplinary reviews computational statistics, 2010, 2(4): 433-459.
- [5] SENIOR S, HAMED E, MASOUD M, et al. Characterization and dating of blue ballpoint pen inks using principal component analysis of UV-Vis absorption spectra, IR spectroscopy, and HPTLC[J]. Journal of forensic sciences, 2012, 57(4): 1087-1093.
- [6] 任玉林, 邴春亭, 逯家辉, 等. 近红外漫反射光谱的主成分分析[J]. 光谱学与光谱分析, 1996(6): 31-35.
REN Y L, BING C T, LU J H, et al. Principal component analysis of near-infrared diffuse reflectance spectra [J]. Spectroscopy and spectral analysis, 1996(6): 31-35. (in Chinese)
- [7] 王艳姣, 张培群, 董文杰, 等. 悬浮泥沙反射光谱特性和泥沙量估算试验研究[J]. 泥沙研究, 2007(5): 36-41.
WANG Y J, ZHANG P Q, DONG W J, et al. Experimental study on reflected spectrum and estimating amount of suspended sediment[J]. Journal of sediment research, 2007(5): 36-41. (in Chinese)
- [8] 郭宇龙, 李云梅, 吕恒, 等. 基于主成分降维的总悬浮物浓度遥感估算模型适用性分析[J]. 湖泊科学, 2013(6): 892-899.

- GUO Y L, LI Y M, LÜ H, et al. Applicability analysis of the model for remotely estimating total suspended matter concentration based on principal component dimension reduction[J]. *Journal of lake sciences*, 2013(6): 892-899. (in Chinese)
- [9] FLINK P, LINDELL T, OSTLUND C. Statistical analysis of hyperspectral data from two Swedish lakes[J]. *Science of the total environment*, 2001, 268(1-3): 155-169.
- [10] 王艳红, 邓正栋, 马荣华. 基于实测光谱与 MODIS 数据的太湖悬浮物定量估测[J]. *环境科学学报*, 2007, 27(3): 509-515.
- WANG Y H, DENG Z D, MA R H. Suspended solids concentration estimation in Lake Taihu using field spectra and MODIS data[J]. *Journal of environmental sciences*, 2007, 27(3): 509-515. (in Chinese)
- [11] ALI K A, WITTER D L, ORTIZ J D. Multivariate approach to estimate colour producing agents in case 2 waters using first-derivative spectrophotometer data[J]. *Geocarto international*, 2014, 29(2): 102-127.
- [12] SVÁB E, PRESTON T, PRÉSING M, et al. Characterizing the spectral reflectance of algae in lake waters with high suspended sediment concentrations[J]. *International journal of remote sensing*, 2005, 26(5): 919-928.
- [13] TYLER A N, SVÁB E, PRESTON T, et al. Remote sensing of the water quality of shallow lakes: a mixture modelling approach to quantifying phytoplankton in water characterized by high-suspended sediment[J]. *International journal of remote sensing*, 2006, 27(8): 1521-1537.
- [14] 秦伯强, 胡维平, 陈伟民. 太湖水环境演化过程与机理[M]. 北京: 科学出版社, 2004.
- QIN B Q, HU W P, CHEN W M. Process and mechanism of environment changes of the Taihu Lake[M]. Beijing: Science Press, 2004. (in Chinese)
- [15] 中华人民共和国水利部. 叶绿素的测定(分光光度法): SL88-1994[S]. 北京: 中国标准出版社, 1994.
- MINISTRY OF WATER RESOURCES OF THE PEOPLE'S REPUBLIC OF CHINA. Determination of chlorophyll (spectrophotometric method): SL88-1994[S]. Beijing: China Standard Press, 1994. (in Chinese)
- [16] 唐军武, 田国良, 汪小勇, 等. 水体光谱测量与分析 I: 水面以上测量法[J]. *遥感学报*, 2004(1): 37-44.
- TANG J W, TIAN G L, WANG X Y, et al. The methods of water spectra measurement and analysis I: above-water method[J]. *Journal of remote sensing*, 2004(1): 37-44. (in Chinese)
- [17] 韦玉春, 王国祥, 程春梅. 水面光谱数据的核回归平滑去干扰分析[J]. *南京师大学报(自然科学版)*, 2010, 33(3): 97-102.
- WEI Y C, WANG G X, CHENG C M. Noise removal in spectrum above water surface using kernel regression smoothing[J]. *Journal of Nanjing normal university (natural science edition)*, 2010, 33(3): 97-102. (in Chinese)
- [18] MASSART D L. *Chemometrics: a textbook*[M]. Amsterdam: Elsevier, 1988.
- [19] GOLUB G, KAHAN W. Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix[J]. *Journal of the society for industrial and applied mathematics*, 1965, 2(2): 205-224.
- [20] WOLD H. Estimation of principal components and related models by iterative least squares[J]. *Journal of multivariate analysis*, 1966, 1: 391-420.
- [21] FRIEDMAN J H. Exploratory projection pursuit[J]. *Journal of the American statistical association*, 1987, 82(397): 249-266.
- [22] WU W, MASSART D L, JONG S D. The kernel PCA algorithms for wide data. Part I: theory and algorithms[J]. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, 1997, 36(2): 165-172.
- [23] 褚小立. *化学计量学方法与分子光谱分析技术*[M]. 北京: 化学工业出版社, 2011.
- CHU X L. *Molecular spectroscopy analytical technology combined with chemometrics and its application*[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2011. (in Chinese)

[责任编辑: 严海琳]