

李明轩, 黎雷. 机器学习在水环境典型水质参数遥感反演中的应用[J]. 净水技术, 2024, 43(8): 45-53.

LI M X, LI L. Application of machine learning in remote sensing retrieval of typical water quality parameters in aquatic environments[J]. Water Purification Technology, 2024, 43(8): 45-53.

机器学习在水环境典型水质参数遥感反演中的应用

李明轩, 黎雷*

(同济大学环境科学与工程学院, 上海 200092)

摘要 遥感技术是一种可用于大面积水体长时序监测的有效方法, 研究综述了机器学习方法在几种典型水质参数遥感反演中的应用。首先, 简述了水质反演中几种常用机器学习算法的原理和优缺点。随后, 介绍了机器学习模型反演叶绿素 a、悬浮物质、溶解性有机质、磷和氮 5 种参数的研究进展, 并进一步分析了面临的问题和挑战。在此基础上, 进行了总结和展望: (1) 机器学习模型的反演效果普遍优于传统经验公式和半经验模型; (2) 具有量化反演不确定性能力的机器学习模型(如混合密度网络和贝叶斯神经网络等), 提供了更为全面和可靠的预测; (3) 基于全球性大样本数据集构建的机器学习模型具有较好的泛化能力, 存在产品化潜力; (4) 未来的工作应主要集中于不确定性估计算法和迁移学习的推广、大气校正算法的评估, 以及水环境遥感大数据的发展等。

关键词 机器学习 遥感反演 水质参数 叶绿素 a 深度学习

中图分类号: X87 文献标识码: A 文章编号: 1009-0177(2024)08-0045-09

DOI: 10.15890/j.cnki.jsjs.2024.08.007

Application of Machine Learning in Remote Sensing Retrieval of Typical Water Quality Parameters in Aquatic Environments

LI Mingxuan, LI Lei*

(College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract Remote sensing technology is a highly effective method for long-term monitoring of large-scale water bodies. The application of machine learning techniques in remote sensing retrieval of typical water quality parameters is reviewed in this study. Initially, the principles, advantages, and disadvantages of several commonly used machine learning algorithms for water quality retrieval are briefly described. Subsequently, the research progress of machine learning models in estimating several key parameters, including chlorophyll-a, suspended matter, dissolved organic matter, phosphorus and nitrogen, is discussed. Additionally, the challenges and issues encountered in this field are analyzed. Based on this review, the following conclusions and prospects are proposed. (1) Machine learning models generally outperform traditional empirical and semi-empirical models in terms of retrieval accuracy. (2) Models capable of quantifying retrieval uncertainty, such as mixture density networks and Bayesian probabilistic neural networks, offer more comprehensive and reliable retrieval. (3) Machine learning models developed from extensive global datasets demonstrate good generalization capabilities and hold potential for productization. (4) Future research should focus on popularizing uncertainty estimation algorithms and transfer learning, evaluating atmospheric correction algorithms, and developing big data applications for remote sensing of aquatic environments.

Keywords machine learning remote sensing retrieval water quality parameters chlorophyll-a deep learning

[收稿日期] 2024-05-11

[基金项目] 国家“万人计划”青年拔尖人才项目

[作者简介] 李明轩(2000—), 硕士, 研究方向为水质反演, E-mail: lmx2021@tongji.edu.cn.

[通信作者] 黎雷, 博士, 教授, 研究方向为给水处理理论与智慧水质监测, E-mail: lilei@tongji.edu.cn.

水环境是人类生存和发展的基础, 它不仅直接影响着饮用水安全, 还与农业灌溉、工业生产和生态系统的平衡息息相关^[1]。定期和系统性的水质监测有助于评估水污染状况, 并制定有效的水污染控制策略。及时的水质监测还能进行水污染预警, 从而采取适应性有效措施以防止水污染扩散。然而,

传统的“采样-测试”的水质监测方法流程繁琐,且仅能获得单一采样点的水质信息,无法快速准确地定位污染源。相反,遥感方法可以获得大范围的水体影像,是对水环境进行大面积和长时序监测的重要手段。目前,遥感传感器主要由卫星、飞机和无人机 3 类平台搭载,能适应不同的需求场景^[2-3]。

传统的遥感反演方法分为经验公式法、分析方法和半经验方法 3 类^[4]。经验公式法较为简单,通过建立遥感反射率与水质参数间的线性或非线性方程来反演水质参数。分析方法通过近似求解辐射传输方程来反演水质指标,该方法效果较好,但由于需要大量先验数据因而不常用。半经验方法介于两种方法之间,是结合了经验统计和光学原理的定量反演方法。上述 3 种方法在反演如叶绿素 a (chlorophyll-a, Chla) 等光学活性物质 (optically active constituents, OACs) 时各有优劣势,但在反演非光学活性物质 (non-optically active constituents, NACs),如氮和磷等,只能根据与 OACs 的相关性建立间接反演的模型,因此表现较差。

机器学习算法克服了经验公式法无法将遥感参数与水质参数间复杂的非线性关系准确联系和基于辐射传输理论的方法依赖先验知识的缺点,具备捕获数据间的线性与非线性关系的能力,近年来已逐渐应用于遥感水质反演领域^[5]。

目前,机器学习算法在水质反演领域的应用日益增多,但是缺乏全面和系统的梳理。本文首先对近年来基于机器学习水质反演领域的发展趋势和研究热点进行了概述,并介绍水质反演中常用的机器学习方法,随后梳理机器学习在 5 种典型水质参数的反演研究中取得的进展和面临的挑战,最后总结机器学习在水质反演方面取得的突破,并对未来的研究提出展望。

1 文献计量分析及概述

截至 2023 年底,Web of Science Core Collection 上以“Remote Sensing”“Machine Learning”“Water Quality Parameters”“TSM (总悬浮物质)”“TSS”“SPM”“Chla”“CDOM (有色溶解性有机质)”“Phosphorus”和“Nitrogen”为关键字,共筛选出文献 253 篇。总体而言,机器学习在遥感水质反演方向上发文量逐年增加,尤其在 2016 年后发文量显著增加,2023 年发文量达到 82 篇,说明机器学习方法受

到遥感水质反演领域的研究者的广泛关注。近年的研究热点主要侧重于 Chla 的研究,其他水质参数如 TSM、溶解性有机质 (dissolved organic matter, DOM)、总氮 (total nitrogen, TN) 和总磷 (total phosphorus, TP) 受到的关注度较接近,但数量均不及 Chla (图 1)。算法方面,人工神经网络特别是深度学习、支持向量回归 (support vector regression, SVR) 和随机森林 (random forest, RF) 等在水质反演领域也受到了广泛应用。卫星数据方面, Landsat、Sentinel-2、MODIS 和 MERIS 是主要的数据来源。关于大气校正和水质参数变异性的讨论是以往反演研究中常常涉及到的问题,在机器学习的应用中也受到持续关注。将水体进行分类可能是水质反演研究的一个重要策略。

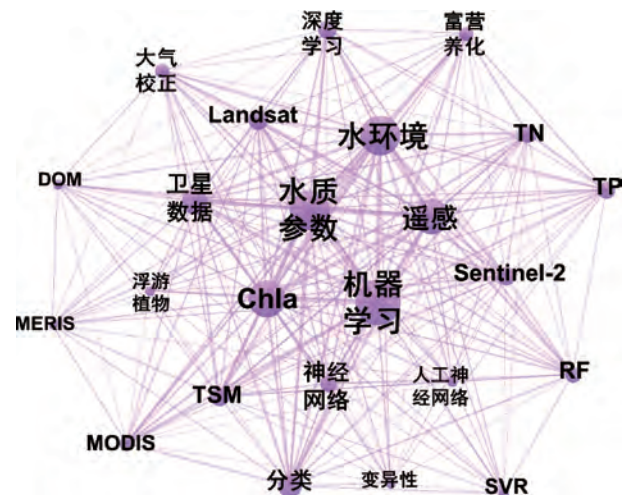


图 1 水质反演文献关键词共现网络

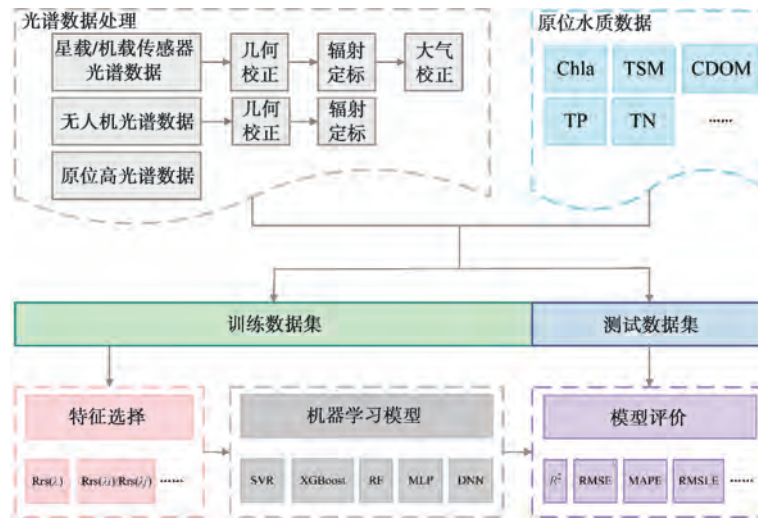
Fig. 1 Keywords Co-Occurrence Network of Water Quality Retrieving

2 水质反演的常用机器学习方法介绍

数据驱动的机器学习算法在捕捉复杂的非线性关系方面具有传统反演算法所不具备的显著优势。本章将重点介绍在水质反演过程中涉及的 3 类机器学习算法,即常用机器学习回归算法、不确定性估计的机器学习算法和迁移学习算法。通过探讨每种算法的基本原理和具体实现,对各算法的优劣势和限制因素进行分析。

2.1 常用机器学习回归算法类型

建立遥感反演模型就是建立水质参数与遥感光学信号之间的回归关系 (图 2)。目前,应用于遥感反演的机器学习回归算法有很多,常见的有 SVR、极端梯度提升 (extreme gradient boosting, XGBoost)、



注: $Rrs(\lambda)$ 表示 λ 波段的遥感反射率; $Rrs(\lambda_i)/Rrs(\lambda_j)$ 表示 λ_i 与 λ_j 波段的遥感反射率之比; MLP 表示多层感知机, 一种基础神经网络算法; R^2 表示模型的决定系数; RMSE 表示均方根误差; MAPE 表示平均绝对百分比误差; RMSLE 表示均方根对数误差。

图 2 机器学习水质反演模型建立流程

Fig. 2 Establishment Process of Machine Learning Water Quality Inversion Model

RF 和神经网络等^[6]。

SVR 使用核函数将数据非线性地映射到高维空间,并寻找到决策边界。SVR 可以有效地处理高维数据,但由于其涉及到优化问题,在处理大规模的复杂光谱数据时非常费时,因此,更适合应用于小样本数据集^[7]。

XGBoost 通过逐步构建决策树来优化预测模型。具体来说,它在每一步迭代式地添加一个新树,尝试纠正前一轮所有树的总和所做的预测的残差。XGBoost 的树是顺序构建的,在构建树的过程中实现并行计算,加速了模型的训练速度,能有效处理大规模数据集^[8]。

RF 是一种构建多棵决策树的集成学习方法,通过平均或者投票的方式决定输出。虽然这种决定输出的方式降低了过拟合风险,但同时也降低了模型对极端数值的预测能力。Yang 等^[9]使用不同季节的数据反演全年的 Chla,结果表明不同季节 Chla 的浓度范围差异降低了模型的精度。

神经网络是一类受到生物神经系统启发建立的模型,由输入层、隐藏层和输出层组成。深度神经网络(deep neural networks, DNN)是神经网络的变体,它具有比一般神经网络更多的隐藏层,可以学习数据的高层特征,具备处理更加复杂问题的能力。Sagan 等^[10]的研究显示,在对多种 OACs 和 NACs 进

行反演时,DNN 模型均表现出优于其他传统机器学习模型、经验公式模型和半经验模型的性能。牛超^[2]基于 DNN 算法开发了两种针对 NACs 的深度学习回归模型,与 SVR 等模型相比,基于深度学习的回归模型可以获得更高的精度,这表明 DNN 在高维数据的特征提取方面具备出色的能力,对于 NACs 的估计具有更大的优势。然而,也有研究^[11]表明,深度学习算法应用于 MODIS 陆地表面反射率产品进行水质反演时弱于 RF 和 XGBoost,这可能是由于其波段较少且波宽较大,特征维度不足以支撑复杂的深度学习。

目前,机器学习回归方法已在遥感水质反演领域得到了较多的应用,相比于传统的经验公式方法和半经验方法,机器学习回归模型在许多对比研究中表现出更高的性能,特别是深度学习模型的性能优于其他普通机器学习模型。

2.2 不确定性估计的机器学习算法

长久以来,水质反演的相关研究致力于给出水质参数的确定值。然而,预测的不确定性问题也逐渐受到研究者的关注。例如,水域的富营养化程度降低会增加 Chla 反演的不确定性^[12]。一些神经网络方法如混合密度网络(mixture density networks, MDN)和贝叶斯神经网络(Bayesian probabilistic neural networks, BNN)将不确定性估计引入到回归

模型的结果中,可以实现对不确定性的量化。与传统模型只能给出确定的预测值不同,不确定性估计的机器学习方法输出的结果是预测值的分布,从而可以据此理解预测结果的可信度。

MDN 是一种结合高斯混合模型和神经网络模型的方法。与普通神经网络不同,MDN 在输出时给出的是高斯混合分布,以计算给定输入对应输出的概率密度(图 3)。BNN 是一种将贝叶斯方法与神经网络结合的模型,它通过引入隐藏层权重参数的不确定性,给出预测结果的不确定性。这一类引入不确定性估计的神经网络模型包含复杂的结构和大量参数,需要大量的数据来减少模型的不确定性,增强模型的泛化能力。

Werther 等^[13]使用来自全球范围的 1 755 个原

位观测数据集开发用于反演 Chla 的 BNN 模型,并比较 OLCI 和 MSI 两种卫星传感器反演 Chla 的不确定性,结果表明,OLCI 上的额外波段有效地降低了不确定性。此外,已有许多研究^[13]证实大气校正是 OACs 反演研究中产生数据不确定性的的重要因素。Pahlevan 等^[14]建立了用于反演 Chla、TSS 和 CDOM 的 MDN 模型,并明确了该模型对两种不同大气校正方法引入的不确定性敏感度较低,具有较好的鲁棒性。

目前,不确定性估计的方法应用较少,且主要应用在 Chla 的反演上,限制其应用的主要原因是该方法需要大量与光谱数据匹配的真实水质数据。未来的研究重点应放在遥感大数据的构建,并在此基础上推广 MDN 和 BNN 等不确定性估计的算法。

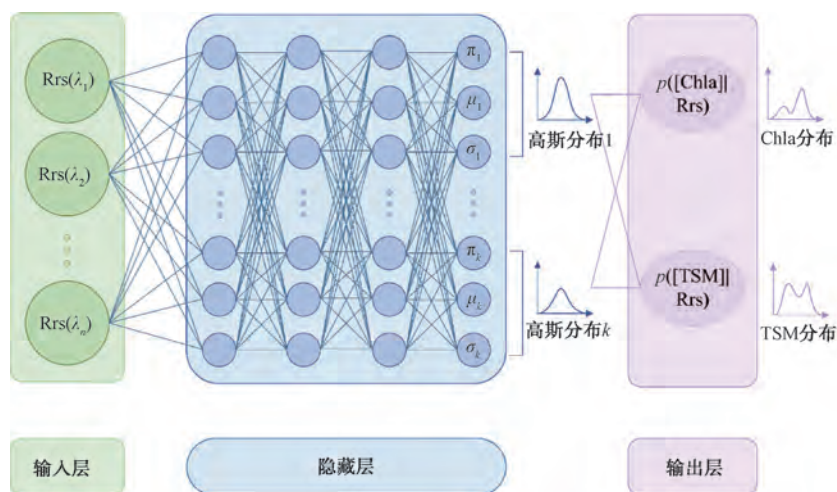


图 3 MDN 反演水质参数结构

Fig. 3 Structure of MDN for Water Quality Parameters Retrieving

2.3 迁移学习方法

传统的机器学习方法假设训练和测试的数据来自同一分布,但不同水域的光谱特性和不同传感器的设备均存在一定程度的差异。这些方法建立的模型更适合应用在固定的传感器和水域,改变其应用场景会降低准确率。与传统的机器学习方法不同,迁移学习突出源域(source domain)和目标域(target domain)数据间的相似性,可解决源域和目标域数据间的差异问题并增强模型性能。Shi 等^[15]将光谱迁移学习策略与半监督回归模型相结合建立 Chla 反演模型,提升了 45% 的模型精度。

现有的大多数水质反演模型都是基于局部水域的少量实测数据建立的,模型的精度和泛化能力都

有限。迁移学习方法可以在更易获取的源域数据集上对模型进行预训练,再使用获取难度较大的目标域小数据集对模型进行微调,使小规模数据集得到更有效的利用。针对神经网络原位样本不足和模型过拟合等问题,Syariz 等^[16]提出了一种由模型预训练、主训练和微调阶段组成的新型迁移学习方法反演 Chla,减少了 54% 的均方根误差。

尽管迁移学习方法的潜力巨大,但当前水质反演领域的迁移学习研究还较少,主要的限制是数据获取的不易。未来,需要进一步研究如何有效地利用大数据和迁移学习方法,以实现更准确、高效的遥感反演。

机器学习方法给水质反演领域带来了新的机遇与挑战。总体而言,机器学习反演模型具有比传统

反演模型更高的精度,特别是深度学习模型在各类参数的反演中较之其他模型具有更大优势。不确定性估计的机器学习算法和迁移学习算法相比于传统机器学习算法,分别具有能估计回归值分布和更高效利用现有数据的特点,为水质反演提供了新的视角。但由于数据量限制,上述机器学习算法难以得到高质量的优化并建立成熟可靠的遥感产品。未来

的研究重点之一是构建全球性的遥感大数据,并在此基础上优化水质反演模型。

3 典型水质参数的反演

3.1 Chla 浓度反演

Chla 浓度是浮游植物生物量的代表,在 440 nm 和 670 nm 附近有吸收峰,可通过结合机器学习的遥感手段监测水体 Chla(表 1)。

表 1 基于机器学习的水体 Chla 反演模型对比
Tab. 1 Comparison of Machine Learning-Based Chla Inversion Models for Water Bodies

光谱数据源	机器学习方法	研究区域	总样本数量	质量浓度/ ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	R^2	MAPE	RMSE/ ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	参考文献
Sentinel-2	XGBoost	深圳某水库	96	1.5~4.46	0.73	7.59%	0.26	[17]
Sentinel-2	XGBoost	洱海	624	4~27	0.87	15.76%	1.69	[18]
Sentinel-2	XGBoost	鄱阳湖	43	1~24.38	0.74	27.40%	-	[19]
Sentinel-2	RF	太湖等 6 个典型内陆大湖	776	0.4~366	0.585	34.71%	-	[9]
Sentinel-2	轻量级梯度提升机	韩国 78 个湖泊和沿海河口	5 891	2.04~101.25	0.75	-	15.15	[20]
Sentinel-2	Cubist	捷克共和国南部的几个水库	131	2.14~672.58	0.85	-	48.57	[21]
Sentinel-2 和 Landsat-8	DNN	美国五大湖区	96	0.66~79.5	0.75	15.46%	2.82	[10]
VIIRS	DNN	中国东西部 79 湖泊	340	0.1~254.1	0.84	32.30%	-	[22]
VIIRS	DNN	中国东部 61 个湖泊	747	1.9~230	0.83	33.70%	14.1	[23]
Landsat-8	XGBoost	长江中下游的 8 个湖泊	225	7.1~258.7	0.79	24.20%	7.1	[24]
MODIS 陆地表面反射率产品	RF	东北的 40 个湖泊	914	0.45~781.42	0.83	-	-	[25]
MODIS、Landsat TM 和 ETM+	遗传算法	西班牙瓦伦西亚阿布菲拉湖	54	30~240	0.94	6%	8	[26]
GF-6	RF	兴凯湖	122	0.14~23.95	0.89	-	2.12	[27]
无人机高光谱和 ASD	混合反馈深度分解机	茅洲河	70	5.05~11.17	0.93	9.14%	0.57	[28]

影响 Chla 反演精度的因素很多,Chla 浓度较低时,CDOM 和非藻颗粒对水体光学特性的影响相对增强,这增加了准确反演 Chla 的难度^[12,29]。BNN 和 MDN 等算法在反演低浓度 Chla 的水体时具有较高的精度,特别是使用全球性的大数据集开发使得其具有良好的泛化能力,存在产品化潜力^[13,30]。Saranathan 等^[31]收集了世界范围内超过 5 000 组水质数据,构建了反演 Chla 的 MDN 模型,并基于主成分分组训练的方法,验证了 MDN 模型的泛化能力,这证明了使用全球性大规模数据集开发的模型具有巨大应用潜力。

内陆与沿海水体的光学复杂性和陆地的邻接效应增加了大气校正的难度,引入了误差和不确定性,进一步传导入 Chla 的反演中^[4]。虽然现有的大气校正方法在应用于复杂光学水体水质反演时的不确

定性均较高,但有研究^[32-33]评估了不同大气校正方法对 Chla 反演的影响,发现根据水体的浑浊度和富营养化程度选择合适的大气校正方法可以有效降低 Chla 反演的不确定性。此外,在模型构建的初期对数据分类可以实现更高精度的反演^[34]。常见的预分类方法有根据水体的反射率光谱类型和悬浮颗粒物浓度(suspended particulate matter, SPM)进行分类,在 Chla 反演中均取得了较好的效果^[12,25]。

光谱分辨率对 Chla 反演精度的影响也不容忽视,基于同样框架开发的 Chla 反演模型的效果,OLCI>MSI>OLI,这表明使用更高光谱分辨率数据开发的模型常常具有更高精度^[13-14]。此外,HICO 和 PRISMA 等高光谱传感器也被应用于 Chla 反演,且被证明具有更高的反演精度^[30]。

3.2 TSM 浓度反演

悬浮物敏感波段被证明是红色和近红外波

段^[7]。Wang 等^[35]基于此提出了一种使用局部回归和基于权重 RF 的混合模型,成功对中国不同河口的 TSM 浓度进行反演,证明了预分类策略的实用性。

内陆与沿海水体中复杂的 OACs 共同贡献了传感器捕获的光谱信息,引起了光谱信息的协变性。针对这一特点,Cao 等^[23]开发了一种同时反演 Chla、SPM 和 CDOM 的 DNN 模型,相较于输出单一 SPM 浓度的 DNN 模型,平均绝对误差下降了 15.1%。

内陆与沿海水体相较于开阔海洋具有更小的尺度,常用的海洋水色产品空间分辨率通常较低,无法较好满足内陆与沿海水体的监测需求。Cao 等^[11]针对该问题探究了使用空间分辨率更高的 MODIS 陆地遥感产品应用于水体 SPM 反演的可行性。无人机具有高度的机动性,其上搭载的传感器通常具有较高的空间分辨率,近年来也逐渐用于水质反演研究中。Zhang 等^[3]使用无人机高光谱技术开发了一种图卷积网络的深度学习模型,反演 TSS、Chla 和 浑浊度等水质参数。

3.3 DOM 反演

CDOM 是 DOM 中的光学相关成分,在蓝色波段中表现出最高的吸收,基于此可使用遥感手段监测 CDOM^[36]。Kim 等^[37]基于机载高光谱数据和 RF 算法建立了 CDOM 在多波段吸收系数的反演模型,355 nm 处 CDOM 吸收反演效果最佳,决定系数 R^2 为 0.87。O'Shea 等^[30]开发了一种用于反演 CDOM 的 MDN 模型,对大气校正的不确定性不敏感。

溶解性有机碳(dissolved organic carbon, DOC)作为 DOM 的一种表征指标在一些研究中也作为反演对象。Liu 等^[38]通过建立多层反向传播神经网络模型实现了对太湖 DOC 浓度、储量和河流交换通量的监测,解释了 DOC 动态变化的主要因素。CDOM 的光学特性是实现 DOC 遥感监测的基础,在多数场景下两者具有很高的相关性,然而在部分水体和季节这种相关性被打破^[39]。针对这一问题,Harkort 等^[40]将多个环境因子引入 4 种机器学习 DOC 反演模型的输入变量中,所有模型的决定系数都得到提升,最高增加了 0.27。

3.4 氮浓度反演

氮不具备光学活性,只能通过挖掘其与 OACs 之间的潜在联系进行反演。Fu 等^[19]开发了一种集成学习模型对鄱阳湖 Chla、TSM 以及包括氨氮在内

的多种 NACs 进行反演,并探究了水文气象因素和各水质参数间的响应关系。郭宏伟^[41]开发并验证了一种用于反演 Chla、TP 和 TN 的多模态深度学习模型,发现低浓度 TN 与 Chla 浓度的相关性很小。与传统的水生植被干扰水质反演的观点不同,Wang 等^[6]基于无人机高光谱数据开发了一种集成学习模型用于反演挺水植被水域的 TN,结果表明,挺水植物的水质净化作用增强了 TN 反演效果。

3.5 磷浓度反演

与氮类似,磷也不具备明确的光谱特性,因此,只能通过与其他 OACs 的相关性进行反演。Xiong 等^[42]确定了 1 199 种光谱指数中漂浮藻指数是反演太湖 TP 最关键的参数,基于此建立了用于 TP 反演的 XGBoost 模型,决定系数 R^2 为 0.6。杜成功^[43]将水体分为浮游植物主导和非藻颗粒主导的两种类型,构建基于不同水体类型的 TP 反演机器学习模型,平均相对误差相比于分类前降低了 15.05%。Wang 等^[44]以长江-淮河流域湖泊群为研究对象,建立了反演 TP 的 XGBoost 模型,并根据湖泊尺度大小分析了不同湖泊 TP 浓度的季节变化趋势。

4 结论与展望

数据驱动的机器学习方法促进了水质反演研究的发展,同时也带来了新的机遇和挑战。文章综述了近年来机器学习方法在水质反演领域取得的诸多进展,总结如下。

(1) 基于机器学习算法开发的水质反演模型展现了比传统反演模型更优越的性能,特别是深度学习模型在不少研究中都表现出比传统机器学习更高的反演精度。

(2) 引入了不确定性估计的机器学习模型,提供了更为全面和可靠的预测,尤其是在 Chla 的反演研究中表现突出。

(3) 迁移学习方法在充分利用数据并提高模型精度和泛化能力方面具有优势,但缺少公开获取的数据集使其应用受限。

(4) 基于全球性大样本数据集构建的机器学习模型具有较好的泛化能力,未来可能进一步开发为广泛适用的成熟遥感反演产品。

(5) 针对水体的不同光谱特征进行预分类可有效提高水质反演精度。

但目前的工作还存在一些局限,未来应该从以

下方面推动水质反演的发展。

(1) 目前的水质反演研究主要以 Chla 为反演对象, 其他物质受到的关注相比于 Chla 较小。主要体现在不确定性估计的机器学习模型在其他物质的反演研究中鲜少应用, 以及大气校正方式对其他物质机器学习反演模型的影响尚缺乏认识。

(2) 遥感大数据的建立不仅可以支持构建更复杂且适用度更广的反演模型, 还有助于推广迁移学习的应用, 有效降低研究成本。

(3) 尽管机器学习方法对于提高内陆与沿海水质反演模型的精度存在一定帮助, 但遥感数据的粗糙性限制了其上限, 未来应增加兼具高光谱分辨率和高空间分辨率的卫星任务, 以应对内陆与沿海水体水质反演的需求。

参考文献

- [1] ALIMI O S, BUDARZ J F, HERNANDEZ L M, et al. Microplastics and nanoplastics in aquatic environments: Aggregation, deposition, and enhanced contaminant transport [J]. *Environmental Science & Technology*, 2018, 52(4): 1704–1724.
- [2] 牛超. 基于航空高光谱遥感的灌河水质参数估算[D]. 徐州: 中国矿业大学, 2020.
- NIU C. Water quality parameters estimation of Guanhe River using airborne hyperspectral imagery [D]. Xuzhou: China University of Mining and Technology, 2020.
- [3] ZHANG Y S, KONG X, DENG L C, et al. Monitor water quality through retrieving water quality parameters from hyperspectral images using graph convolution network with superposition of multi-point effect: A case study in Maozhou River[J]. *Journal of Environmental Management*, 2023, 342: 118283. DOI: 10.1016/j.jenvman.2023.118283.
- [4] LLODRÀ-LLABRÉS J, MARTÍNEZ-LÓPEZ J, POSTMA T, et al. Retrieving water chlorophyll-a concentration in inland waters from Sentinel-2 imagery: Review of operability, performance and ways forward [J]. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 2023, 125: 103605. DOI: 10.1016/j.jag.2023.103605.
- [5] GU K, ZHANG Y H, QIAO J F. Random forest ensemble for river turbidity measurement from space remote sensing data[J]. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 2020, 69(11): 9028–9036.
- [6] WANG J Z, SHI T Z, YU D L, et al. Ensemble machine-learning-based framework for estimating total nitrogen concentration in water using drone-borne hyperspectral imagery of emergent plants: A case study in an arid oasis, NW China[J]. *Environmental Pollution*, 2020, 266: 115412. DOI: 10.1016/j.envpol.2020.115412.
- [7] KIM Y H, IM J, HA H K, et al. Machine learning approaches to coastal water quality monitoring using GOCI satellite data[J]. *Gisience & Remote Sensing*, 2014, 51(2): 158–174.
- [8] 李勇. 基于 Sentinel-3 OLCI 数据的中国湖泊浊度反演[D]. 鞍山: 辽宁科技大学, 2023.
- LI Y. Estimation of lake turbidity in China based on Sentinel-3 OLCI images [D]. Anshan: University of Science and Technology Liaoning, 2023.
- [9] YANG Y F, HOU X K, GAO W, et al. Retrieving lake chla concentration from remote sensing: Sampling time matters[J]. *Ecological Indicators*, 2024, 158: 111290. DOI: 10.1016/j.ecolind.2023.111290.
- [10] SAGAN V, PETERSON K T, MAIMAITIJIANG M, et al. Monitoring inland water quality using remote sensing: Potential and limitations of spectral indices, bio-optical simulations, machine learning, and cloud computing [J]. *Earth-Science Reviews*, 2020, 205: 103187. DOI: 10.1016/j.earscirev.2020.103187.
- [11] CAO Z G, SHEN M, KUTSER T, et al. What water color parameters could be mapped using MODIS land reflectance products: A global evaluation over coastal and inland waters[J]. *Earth-Science Reviews*, 2022, 232: 104154. DOI: 10.1016/j.earscirev.2022.104154.
- [12] NEIL C, SPYRAKOS E, HUNTER P D, et al. A global approach for chlorophyll-a retrieval across optically complex inland waters based on optical water types[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2019, 229: 159–178. DOI: 10.1016/j.rse.2019.04.027.
- [13] WERTHER M, ODERMATT D, SIMIS S G H, et al. A Bayesian approach for remote sensing of chlorophyll-a and associated retrieval uncertainty in oligotrophic and mesotrophic lakes [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2022, 283: 113295. DOI: 10.1016/j.rse.2022.113295.
- [14] PAHLEVAN N, SMITH B, ALIKAS K, et al. Simultaneous retrieval of selected optical water quality indicators from Landsat-8, Sentinel-2, and Sentinel-3 [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2022, 270: 112860. DOI: 10.1016/j.rse.2021.112860.
- [15] SHI X, GU L, LI X, et al. Automated spectral transfer learning strategy for semi-supervised regression on Chlorophyll-a retrievals with Sentinel-2 imagery [J]. *International Journal of Digital Earth*, 2024, 17(1): 2313856. DOI: 10.1080/17538947.2024.2313856.
- [16] SYARIZ M A, LIN C H, HERIZA D, et al. A transfer learning technique for inland chlorophyll-a concentration estimation using Sentinel-3 imagery[J]. *Applied Sciences*, 2022, 12(1): 203. DOI: 10.3390/app12010203.

- [17] TIAN S, GUO H, XU W, et al. Remote sensing retrieval of inland water quality parameters using Sentinel-2 and multiple machine learning algorithms [J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2023, 30(7): 18617–18630.
- [18] WANG J, CHEN X. A new approach to quantify chlorophyll-a over inland water targets based on multi-source remote sensing data[J]. *Science of the Total Environment*, 2024, 906:167631. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.167631.
- [19] FU B, LAO Z, LIANG Y, et al. Evaluating optically and non-optically active water quality and its response relationship to hydro-meteorology using multi-source data in Poyang Lake, China [J]. *Ecological Indicators*, 2022, 145: 109675. DOI: 10.1016/j.ecolind.2022.109675.
- [20] KIM Y W, KIM T, SHIN J, et al. Validity evaluation of a machine-learning model for chlorophyll a retrieval using Sentinel-2 from inland and coastal waters [J]. *Ecological Indicators*, 2022, 137: 108737. DOI: 10.1016/j.ecolind.2022.108737.
- [21] SABERIOON M, BROM J, NEDBAL V, et al. Chlorophyll-a and total suspended solids retrieval and mapping using Sentinel-2A and machine learning for inland waters [J]. *Ecological Indicators*, 2020, 113: 106236. DOI: 10.1016/j.ecolind.2020.106236.
- [22] CAO Z, WANG M, MA R, et al. A decade-long chlorophyll-a data record in lakes across China from VIIRS observations[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2024, 301:113953. DOI: 10.1016/j.rse.2023.113953.
- [23] CAO Z, MA R, PAHLEVAN N, et al. Evaluating and optimizing VIIRS retrievals of chlorophyll-a and suspended particulate matter in turbid lakes using a machine learning approach[J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2022, 60: 3220529. DOI: 10.1109/tgrs.2022.3220529.
- [24] CAO Z, MA R, DUAN H, et al. A machine learning approach to estimate chlorophyll-a from Landsat-8 measurements in inland lakes[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2020, 248:111974. DOI: 10.1016/j.rse.2020.111974.
- [25] FANG C, SONG C, WEN Z, et al. A novel chlorophyll-a retrieval model based on suspended particulate matter classification and different machine learning[J]. *Environmental Research*, 2024, 240:117430. DOI: 10.1016/j.envres.2023.117430.
- [26] DOÑA C, CHANG N B, CASELLES V, et al. Integrated satellite data fusion and mining for monitoring lake water quality status of the Albufera de Valencia in Spain [J]. *Journal of Environmental Management*, 2015, 151: 416–426. DOI: 10.1016/j.jenvman.2014.12.003.
- [27] XU S, LI S, TAO Z, et al. Remote sensing of chlorophyll-a in Xinkai Lake using machine learning and GF-6 WFV images[J]. *Remote Sensing*, 2022, 14 (20): 5136. DOI: 10.3390/rs14205136.
- [28] ZHANG Y, WU L, DENG L, et al. Retrieval of water quality parameters from hyperspectral images using a hybrid feedback deep factorization machine model [J]. *Water Research*, 2021, 204:117618. DOI: 10.1016/j.watres.2021.117618.
- [29] MOUW C B, CHEN H, MCKINLEY G A, et al. Evaluation and optimization of bio-optical inversion algorithms for remote sensing of Lake Superior's optical properties[J]. *Journal of Geophysical Research-Oceans*, 2013, 118(4): 1696–1714.
- [30] O'SHEA R E, PAHLEVAN N, SMITH B, et al. A hyperspectral inversion framework for estimating absorbing inherent optical properties and biogeochemical parameters in inland and coastal waters[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2023, 295:113706. DOI: 10.1016/j.rse.2023.113706.
- [31] SARANATHAN A M, SMITH B, PAHLEVAN N. Per-pixel uncertainty quantification and reporting for satellite-derived chlorophyll-a estimates via mixture density networks [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2023, 61: 4200718. DOI: 10.1109/tgrs.2023.3234465.
- [32] WARREN M A, SIMIS S G H, MARTINEZ-VICENTE V, et al. Assessment of atmospheric correction algorithms for the Sentinel-2A multispectral imager over coastal and inland waters [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2019, 225: 267–289. DOI: 10.1016/j.rse.2019.03.018.
- [33] PAHLEVAN N, MANGIN A, BALASUBRAMANIAN S V, et al. ACIX-Aqua: A global assessment of atmospheric correction methods for Landsat-8 and Sentinel-2 over lakes, rivers, and coastal waters[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2021, 258: 112366. DOI: 10.1016/j.rse.2021.112366.
- [34] WERTHER M, ODERMATT D, SIMIS S G H, et al. Characterising retrieval uncertainty of chlorophyll-a algorithms in oligotrophic and mesotrophic lakes and reservoirs [J]. *Isprs Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 2022, 190: 279–300. DOI: 10.1016/j.isprsjprs.2022.06.015.
- [35] WANG X, WEN Z D, LIU G, et al. Remote estimates of total suspended matter in China's main estuaries using Landsat images and a weight random forest model [J]. *Isprs Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 2022, 183: 94–110. DOI: 10.1016/j.isprsjprs.2021.11.001.
- [36] ZHANG Y L, ZHOU L, ZHOU Y Q, et al. Chromophoric dissolved organic matter in inland waters: Present knowledge and future challenges[J]. *Science of the Total Environment*, 2021, 759:143550. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.143550.
- [37] KIM J, JANG W, KIM J H, et al. Application of airborne hyperspectral imagery to retrieve spatiotemporal CDOM distribution using machine learning in a reservoir [J]. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 2022, 114: 103053. DOI: 10.1016/j.jag.2022.103053.

- [38] LIU D, YU S J, XIAO Q T, et al. Satellite estimation of dissolved organic carbon in eutrophic Lake Taihu, China [J]. Remote Sensing of Environment, 2021, 264: 112572. DOI: 10.1016/j.rse.2021.112572.
- [39] BREZONIK P L, OLMANSON L G, FINLAY J C, et al. Factors affecting the measurement of CDOM by remote sensing of optically complex inland waters [J]. Remote Sensing of Environment, 2015, 157: 199–215. DOI: 10.1016/j.rse.2014.04.033.
- [40] HARKORT L, DUAN Z. Estimation of dissolved organic carbon from inland waters at a large scale using satellite data and machine learning methods [J]. Water Research, 2023, 229: 119478. DOI: 10.1016/j.watres.2022.119478.
- [41] 郭宏伟. 基于机器学习的内陆湖泊水体水质遥感反演研究 [D]. 天津: 南开大学, 2022.
- GUO H W. Monitoring inland water quality using remote sensing and machine learning [D]. Tianjin: Nankai University, 2022.
- [42] XIONG J F, LIN C, CAO Z G, et al. Development of remote sensing algorithm for total phosphorus concentration in eutrophic lakes: Conventional or machine learning? [J]. Water Research, 2022, 215: 118213. DOI: 10.1016/j.watres.2022.118213.
- [43] 杜成功. 太湖总磷浓度时空变化及其影响因素研究 [D]. 南京: 南京师范大学, 2018.
- DU C G. Temporal and spatial variation of total phosphorus concentration and its influencing factors in Taihu Lake [D]. Nanjing: Nanjing Normal University, 2018.
- [44] WANG X, JIANG Y, JIANG M, et al. Estimation of total phosphorus concentration in lakes in the Yangtze-Huaihe region based on Sentinel-3/OLCI images [J]. Remote Sensing, 2023, 15(18): 4487. DOI: 10.3390/rs15184487.

(上接第 25 页)

- (2023-05-30) [2024-05-14]. https://www.samr.gov.cn/zw/zfxxgk/fdzdgknr/rkjs/art/2023/art_b97b0b1adbf4e8aac_a43cb26f13883b.html.
- [3] 中华人民共和国国家环境保护总局, 中国国家质量监督检验检疫总局. 地表水环境质量标准: GB 3838—2002 [S]. 北京: 中国环境科学出版社, 2002.
- State Environmental Protection Administration of the People's Republic of China, General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China. Environmental quality standards for surface water: GB 3838—2002 [S]. Beijing: China Environmental Science Press, 2002.
- [4] 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局, 中华人民共和国国家标准化管理委员会. 地下水质量标准: GB/T 14848—2017 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2017.
- General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China, Standardization Administration of the People's Republic of China. Standards for groundwater quality: GB/T 14848—2017 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2017.
- [5] 中华人民共和国生态环境部. 地表水环境质量监测技术规范: HJ 91.2—2022 [S]. 北京: 中国环境出版社, 2022.
- Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China. Technical specifications for surface water environmental quality monitoring: HJ 91.2—2022 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2022.
- [6] 中华人民共和国生态环境部. 环境监测分析方法标准制订技术导则: HJ 168—2020 [S]. 北京: 中国环境出版社, 2020.
- Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China. Technical guideline for the development of environmental monitoring analytical method standards: HJ 168—2020 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2020.
- [7] 中华人民共和国建设部. 城市供水水质标准: CJ/T 206—2005 [S]. 北京: 中国环境出版社, 2005.
- Ministry of Construction of the People's Republic of China. Water quality standards for urban water supply: CJ/T 206—2005 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2005.
- [8] 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局, 中华人民共和国国家标准化管理委员会. 合格评定 化学分析方法确认和验证指南: GB/T 27417—2017 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2017.
- General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China, Standardization Administration of the People's Republic of China. Conformity assessment—Guidance on validation and verification of chemical analytical methods: GB/T 27417—2017 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2017.
- [9] 中国国家质量监督检验检疫总局, 中国国家标准化管理委员会. 化学分析方法验证确认和内部质量控制和定义: GB/T 32467—2015 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2015.
- General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China, Standardization Administration of the People's Republic of China. Verification and validation of methods and internal quality control on chemical analysis—Terms and definitions: GB/T 32467—2015 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2015.