

基于水体光学类型的全球悬浮物浓度动态遥感反演研究

邓风光

内蒙古师范大学地理科学学院, 内蒙古 呼和浩特

收稿日期: 2026年2月27日; 录用日期: 2026年4月7日; 发布日期: 2026年4月17日

摘要

内陆湖泊及近岸水体的光学性质极端复杂, 悬浮颗粒物(SPM)浓度跨度可达数个数量级, 导致传统的单一通用反演算法难以兼顾全动态范围内的监测精度。针对这一难题, 本研究基于涵盖全球多源的实测数据集($N = 3339$), 构建了包含22类典型水体的光学分类(OWT)体系, 并系统评估了11种主流算法(涵盖经验、半分析及机器学习模型)在原始、全局率定(CAL)及分类独立率定(CLUS)模式下的性能差异。研究量化修正了“分类率定绝对优于全局率定”的传统认知, 揭示了CLUS策略在样本稀缺的极端水体中存在严重的过拟合风险(高方差)。基于“偏差-方差权衡”理论, 本研究提出了一种混合优选策略, 阐明了最佳反演机制随水体浑浊度增加呈现出由“半分析/经验法”向“机器学习算法”演变的规律。在此基础上, 构建了集成分类识别与无缝反演的动态切换反演系统。独立验证结果表明, 该系统有效融合了各子模型的局部优势, 相比表现最好的单一全局算法, 其均方根误差(RMSE)降低约25%, 平均偏差(Bias)近乎为0, 有效解决了低浓度区的估算偏差与高浓度区的信号饱和问题, 为全球内陆及近岸水体的高精度、无缝SPM监测提供了一套稳定的解决方案。

关键词

悬浮颗粒物, 光学水体分类, 动态切换算法, 偏差-方差权衡, 全球水体

Research on Global Suspended Matter Concentration Dynamics Remote Sensing Inversion Based on Water Optical Types

Fengguang Deng

College of Geographical Science, Inner Mongolia Normal University, Hohhot Inner Mongolia

Received: February 27, 2026; accepted: April 7, 2026; published: April 17, 2026

Abstract

The extreme optical complexity and wide dynamic range of Suspended Particulate Matter (SPM) in inland and coastal waters pose significant challenges for traditional “one-size-fits-all” retrieval algorithms. To address this, this study establishes an Optical Water Type (OWT) framework comprising 22 distinct classes based on a comprehensive global in-situ dataset (N = 3339). We systematically evaluated the performance of 11 mainstream algorithms (including empirical, semi-analytical, and machine learning models) under three calibration modes: original, global (CAL), and class-specific (CLUS). The results quantitatively revise the conventional wisdom that “class-specific calibration is inherently superior”, revealing that the CLUS strategy suffers from high variance (overfitting) in data-scarce extreme waters. Drawing on the “Bias-Variance Tradeoff” theory, we propose a hybrid optimization strategy and identify a clear paradigm shift in the optimal retrieval mechanism—transitioning from semi-analytical/empirical methods to machine learning algorithms as turbidity increases. Consequently, a dynamic switching retrieval system integrating classification and smooth blending was constructed. Independent validation demonstrates that this system effectively synthesizes the local advantages of different models. Compared to the best single global algorithm, the dynamic system reduces the Root Mean Square Error (RMSE) by approximately 25% and achieves a near-zero bias. It successfully mitigates estimation bias in low-concentration waters and signal saturation in high-concentration waters, providing a robust solution for high-precision, seamless SPM monitoring across global scales.

Keywords

Suspended Particulate Matter (SPM), Optical Water Types (OWT), Dynamic Switching Algorithm, Bias-Variance Tradeoff, Global Waters

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

内陆及近岸水体的悬浮颗粒物(SPM)是表征水下光场、初级生产力与环境健康的核心指标[1][2]。随着卫星遥感技术的快速发展,利用水色数据反演大范围、长时序的 SPM 时空分布已成为监测全球水资源变化的重要手段[3]-[5]。与大洋一类水体不同,此类水体受浮游植物、CDOM 及非色素颗粒物独立变化的影响,呈现极强的时空异质性, SPM 浓度跨越数个数量级[6]-[8]。这令传统“单一通用算法”面临严峻挑战:蓝绿波段比值法在浑浊水体易受 CDOM 干扰及信号饱和掣肘;红光/近红外(NIR)算法(如 Nechad 和 Doxaran 模型[9][10])虽能抗饱和,却在清澈水体因纯水强吸收导致信噪比(SNR)骤降;半分析算法则受制于固有光学属性(SIOPs)在全球尺度的剧烈波动[11]。因此,单一算法机制无法兼顾全动态范围的精准反演。

“分而治之”的光学水体分类(OWT)策略随之兴起[12]。Spyrakos 等[13]与 Neil 等[11]的研究证实该框架可有效降低反演不确定性。然而,当前 SPM 分类反演领域普遍存在“分类独立率定(CCLUS)必定优于全局率定(CAL)”的认知误区。依据“偏差-方差权衡”法则,CLUS 虽能通过缩小样本空间降低系统偏差,但面对全球极不均衡的实测数据,极端水体(如极高浑浊或特殊藻类)样本往往稀缺。在此条件下强行独立回归极易陷入“过拟合”,导致泛化能力反逊于海量数据驱动的全局模型。如何在统一框架下,依

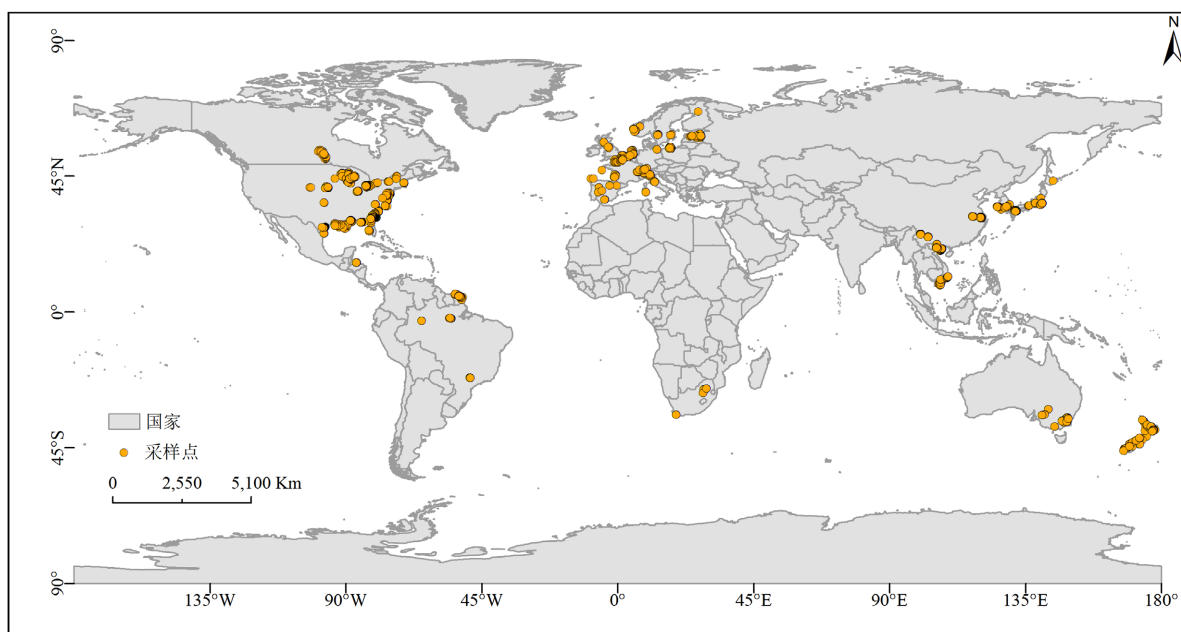
据样本丰度灵活权衡“局部精度”与“全局稳定性”，是当前亟待突破的关键瓶颈。

鉴于此，本研究基于全球多源实测数据集，构建了包含 22 类典型水体的光学分类体系。研究旨在：(1) 系统评估 11 种代表性 SPM 算法在原始参数、CAL 及 CLUS 模式下的性能差异；(2) 揭示 CLUS 在样本稀缺类别中的过拟合风险，基于性能热力图制定“分类与全局参数混合优选”决策机制；(3) 构建基于光谱相似度匹配的动态切换反演系统，实现全球尺度兼顾低值灵敏度与高值抗饱和能力的高精度、无缝反演。

2. 数据与方法

2.1. 数据集构建

本研究采用的数据主要来源于 Lehmann 等[14]发布的 GLORIA 数据集。该数据集汇集了来自全球 59 个科研机构的实测数据，覆盖了从贫营养的清澈湖泊到极端浑浊的河口近岸水体等多种光学环境，具有极强的全球代表性(见图 1)。



注：该图基于自然资源部标准地图服务网站下载的审图号为 GS(20215443)号的标准地图制作，底图无修改。

Figure 1. distribution map of measured data sites

图 1. 实测数据站点分布图

为了确保算法评估的准确性，本研究对原始数据进行了严格的质量控制与时空匹配：(1) SPM 浓度记录缺失或为负值的样本；(2) 遥感反射率光谱在可见光波段存在负值或明显光谱形状异常的样本；(3) 不满足生物光学基本规律的离群点。经过筛选，获得了共计(3339 个)高质量匹配样本对的验证数据集。数据集的 SPM 浓度跨越了近 4 个数量级($0.1 \sim >500 \text{ g m}^{-3}$)，且在对数坐标下近似呈正态分布(见图 2)，能够有效支撑全动态范围内的算法性能评估。

2.2. 水体光学分类

为了克服单一算法在全球复杂水体中的“水土不服”，本研究引入了光学水体分类(OWT)框架，其核心旨在根据光谱形状特征将水体划分为具有相似光学属性的子集，杨现坤等[15]曾利用该策略在珠江口浑浊水体中有效提升了悬浮泥沙的反演精度。本文首先采用均方根归一化方法对所有光谱进行处理，

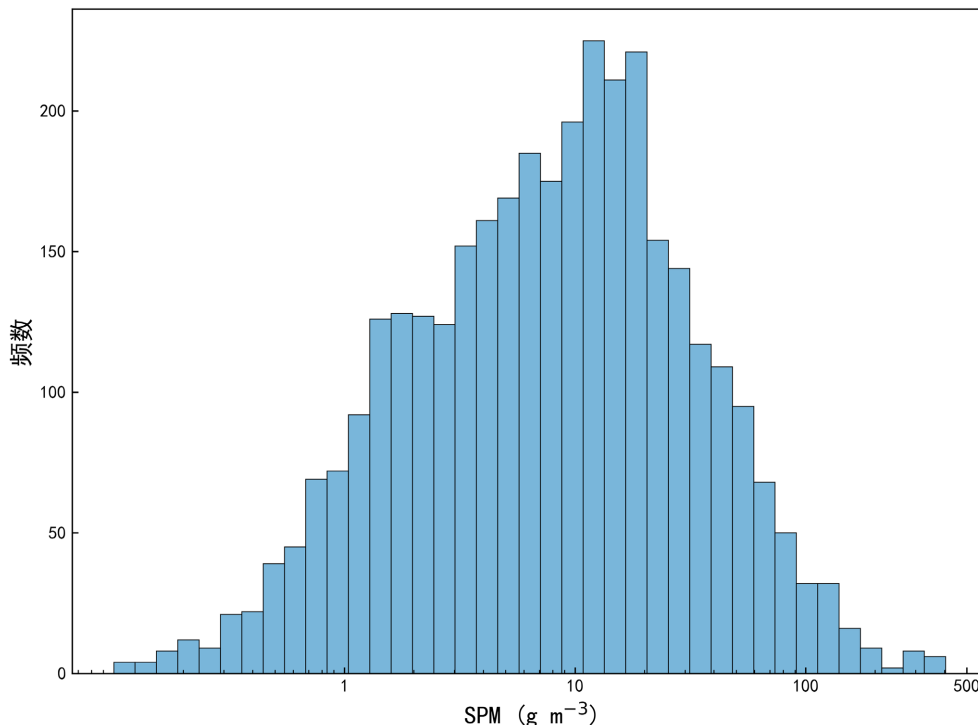


Figure 2. Histogram of suspended matter concentration frequency distribution
图 2. 悬浮物浓度频率分布直方图

将光谱向量模长统一为 1，从而突出波峰、波谷等形状特征[13]。在此基础上，利用 K-means 非监督聚类算法对归一化光谱进行迭代计算，并依据 Wei 等[16]的统计评估结果，将最佳聚类数设定为 22 类(OWT 2-23)。在后续的算法应用阶段，采用光谱角制图(SAM)算法计算待测光谱与 22 个 OWT 聚类中心的余弦相似度，将待测像元归类于相似度最高的 OWT 类别，从而实现对未知水体类型的自动判别。

2.3. 典型反演算法

为了全面评估不同反演机制的适用性，本研究从文献中筛选了 11 种具有代表性的 SPM 反演算法，涵盖了当前水色遥感领域的三大主流构建策略：经验/半经验算法、半分析算法以及机器学习算法。经验类算法侧重于建立单波段或波段比值与 SPM 的统计关系，例如 Nechad 等[9]利用半经验公式修正了高浓度下的信号饱和问题，而 Doxaran 等[10]则利用近红外波段比值来消除大气校正残差；半分析算法基于辐射传输方程，通过准分析算法(QAA)等手段首先从 R_{rs} 中分离出颗粒物后向散射系数，再利用质量比后向散射系数推算 SPM，这类算法物理意义明确，但依赖于对固有光学属性(IOPs)的准确假设[17]；机器学习算法则利用神经网络或梯度提升决策树(GBDT)等非线性模型，挖掘多波段光谱与 SPM 之间的高维映射关系，具有强大的非线性拟合能力[18]。

(1) 算法 A

算法 A 指的是 Jiang 等人(2023)针对 Sentinel-2 MSI 传感器改进的半分析反演模型。算法公式如下：

$$TSS = \frac{b_{bp}(\lambda_0)}{b_{bp}^*(\lambda_0)} \tag{2-1}$$

(2) 算法 B

算法 B 指的是 Xue 等人(2019)提出的单波段经验算法进行悬浮物浓度(TSS)反演。算法公式如下：

$$TSS = A \times [R_{rs}(709)]^B \quad (2-2)$$

(3) 算法 C

算法 C 指的是 Yu 等人(2019)提出的全局适用性悬浮物反演算法(GAASPM)。算法公式如下:

$$GI_{SPM} = c_0 \times \frac{R_{rs}(551)}{R_{rs}(486)} + \sum_{i=1}^3 c_i \times W_i \times \frac{R_{rs}(\lambda_i)}{R_{rs}(551)} \quad (2-3)$$

(4) 算法 D

算法 D 指的是 Zhang 等人(2023)提出的经验反演模型。算法公式如下:

$$TSS = 1.20 \times \exp(14.44 \times X_L) \quad (2-4)$$

其中, 复合光谱指数 X_L 的计算公式为:

$$X_L = \frac{R_{rs}(Green) + R_{rs}(Red)}{\frac{R_{rs}(Blue)}{R_{rs}(Red)}} \quad (2-5)$$

(5) 算法 E

算法 E 指的是 Chen 等人(2015)构建的多层反向传播神经网络(MBPNN)模型。算法公式如下:

$$SPM = f_{MBPNN} \left[\frac{R_{rs}(555)}{R_{rs}(531)}, \frac{R_{rs}(645)}{R_{rs}(531)}, \frac{R_{rs}(667)}{R_{rs}(555)} \right] \quad (2-6)$$

(6) 算法 F

算法 F 指的是 Mao 等人(2012)提出的复指数代理模型(CPTSM)。算法公式如下:

$$\log_{10}(TSM) = f_5 + f_6 \cdot CP \quad (2-7)$$

其中, 复指数代理 CP 的定义为:

$$CP = \frac{f_1 X_1 + f_2 X_2 + f_3 X_3 + f_4 X_4}{\sum_{i=1}^4 f_i} \quad (2-8)$$

(7) 算法 G

算法 G 指的是 Han 等人(2016)开发的通用半分析算法。算法公式如下:

$$SPM_i = \frac{A_i^\rho \cdot \rho_w(\lambda)}{1 - \frac{\rho_w(\lambda)}{C_i^\rho}} \quad (i \in \{L, H\}) \quad (2-9)$$

(8) 算法 H

算法 H 指的是 Novoa 等人(2017)提出的多条件切换算法。算法公式如下:

$$SPM = \alpha \cdot SPM_i + (1 - \alpha) \cdot SPM_j \quad (2-10)$$

(9) 算法 I

算法 I 指的是 Wen 等人(2024)提出的梯度提升决策树(GBDT)机器学习模型。算法公式如下:

$$SPM = f_{GBDT}(X) \quad (2-11)$$

(10) 算法 J

算法 J 指的是 Shen 等人(2010)提出的半经验辐射传输模型。算法公式如下:

$$R_{rs} = \frac{\alpha\beta SSC}{1 + \beta SSC + \sqrt{1 + 2\beta SSC}} \quad (2-12)$$

(11) 算法 K

算法 K 指的是 Petus 等人(2010)开发的二阶多项式回归算法。算法公式如下:

$$TSM = A_p \cdot [R_{rs}(\lambda_{red})]^2 + B_p \cdot R_{rs}(\lambda_{red}) + C_p \quad (2-13)$$

2.4. 精度评价与打分方法

为了系统量化光学分类策略的有效性,本研究设计了三种参数模式:原始参数模式(ORG),即直接沿用原始文献中发布的模型系数;全局率定模式(CAL),即利用本研究构建的全球全量数据集(N = 3339)对算法系数进行重新拟合;分类独立率定模式(CLUS),即基于 OWT 框架将数据集划分为 22 个子集,针对每一个 OWT 子集独立率定的算法系数。在精度评价方面,选取均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)、平均偏差(Bias)和皮尔逊相关系数(r)作为统计指标。此外,为避免单一指标的片面性,本研究引入了一套客观评分系统[11][19]。该系统基于各项误差指标的中位数进行打分:若某算法在特定 OWT 下的误差指标显著优于所有算法的中位数得 2 分,无显著差异得 1 分,显著劣于中位数得 0 分。通过累加各指标得分生成性能热力图,直观展示不同算法在不同水体类型下的适应性差异,为后续的动态优选策略提供量化依据。

2.5. 动态切换机制与平滑过渡方案

为了解决单一算法在全球尺度下的适应性难题,本研究构建了基于光谱相似度的动态切换反演系统。该系统并未采用人为设定的固定阈值,而是引入了基于 22 类精细化光学水体类型的光谱形态匹配机制。具体而言,对于任意输入的待测遥感反射率光谱 x , 系统首先利用光谱角制图(SAM)算法计算其与 23 个 OWT 聚类中心光谱 c_i 的余弦相似度 S_i , 以此量化该像元与第 i 类水体的匹配程度, 计算公式为:

$$S_i = \cos \theta_i = \frac{\sum_{j=1}^N x_j \cdot c_{ij}}{\sqrt{\sum_{j=1}^N x_j^2} \cdot \sqrt{\sum_{j=1}^N c_{ij}^2}}$$

其中 N 为波段数量。

基于计算得出的相似度向量,系统采用“最大相似度原则”判定待测像元所属的光学水体类型 k (即 $k = \arg \max_{i \in \{1, \dots, 23\}} (S_i)$), 并自动检索最佳算法查找表(LUT), 调用该类别对应的最优反演模型 $f_k(\cdot)$ 输出最终的 SPM 浓度。值得注意的是,本研究采用的 22 类 OWT 体系涵盖了从极清澈到极浑浊水体的完整光谱梯度。

3. 结果

3.1. 水体光学分类

基于全球归一化 R_{rs} 数据集的 K-means 聚类分析,本研究识别出 22 类典型的光学水体类型(OWT 2~23)。分类结果有效地将全球内陆及近岸水体极大的光学变异性解构为具有梯度演变特征的光谱簇(见图 3)。

从光谱形态上看,OWT 2 至 OWT 9 代表了低悬浮物浓度的清澈水体或 CDOM 主导水体。此类光谱在短波段(400~500 nm)呈现较高的反射率,且随波长增加呈指数衰减趋势,指示了较弱的颗粒物散射与较强的 CDOM 吸收特征。随着水体营养状态和浑浊度的增加 OWT 10~15, 光谱反射峰逐渐红移至绿光波

段(约 550~570 nm), 并在红光波段出现明显的叶绿素 a 吸收谷, 表现为典型的富营养化藻类水体特征。而在极端浑浊的 OWT 16~23 中, 光谱幅值在红光及近红外(NIR)波段显著抬升, 峰值完全迁移至 700~810 nm 范围(见图 4), 这是高浓度无机悬浮颗粒强后向散射的典型表现。这种跨越可见光至近红外波段的巨大光谱差异, 直观地证实了单一波段或固定参数算法难以在全球尺度上适配所有水体的推断。

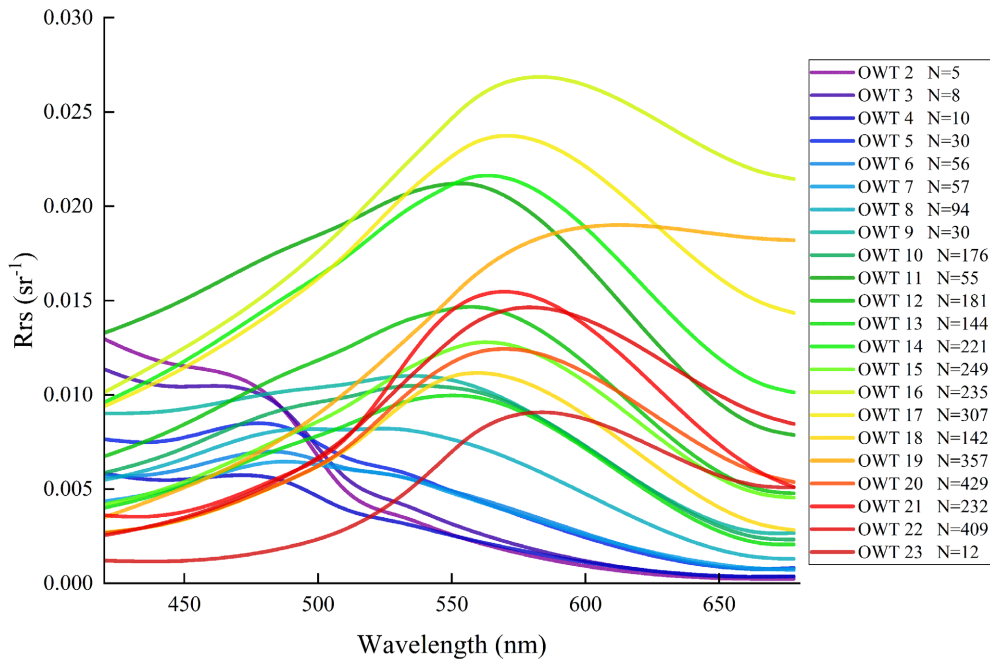


Figure 3. Average R_{rs} spectra of each optical water type

图 3. 每种光学水体类型的平均 R_{rs} 光谱

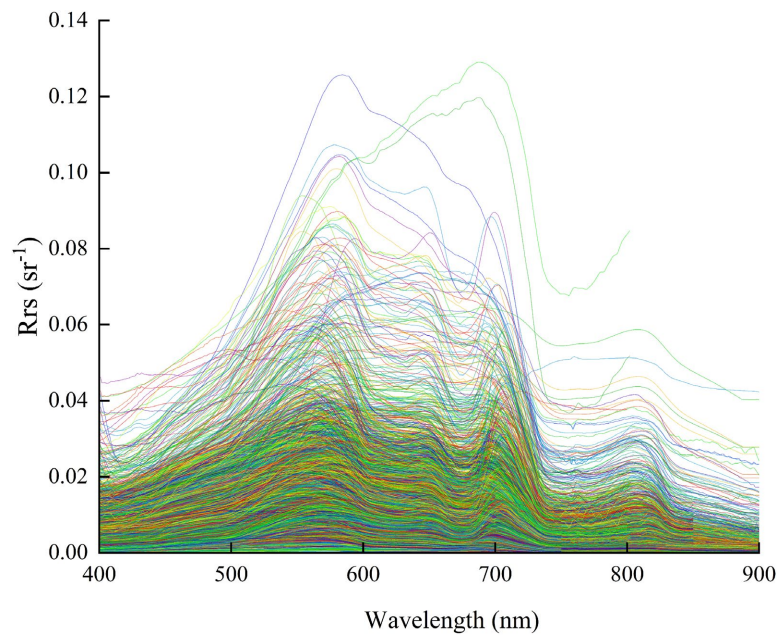


Figure 4. R_{rs} spectra used in the validation dataset colored by classified optical water types

图 4. 由分类光学水体类型着色的验证数据集中使用的 R_{rs} 光谱

3.2. 算法性能评估

对比 11 种反演算法在三种模式(ORG、CAL、CLUS)下的性能,揭示了算法结构与参数化策略的复杂关系(见图 5)。全局视角下, CAL 显著提升了多数算法的稳定性。其中,基于红光/近红外波段的算法(如 A、B、K)收敛性良好($r > 0.80$)且无明显高值饱和,验证了其在宽动态范围内的稳定性。反之,算法 D 因经验指数结构的物理适用性受限,出现严重系统性低估($Bias < -0.6 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$),表明单一参数调整无法弥补模型结构的先天缺陷。

此外,综合评分对比(见图 6)修正了“分类率定必然占优”的固有认知,揭示了数据不均衡条件下 CLUS 策略的双重效应:在样本充足类别(如 OWT 4)中,CLUS 有效消除了局部偏差,使算法 F 的相关系数升至 0.999,凸显了“分而治之”的优势;但在样本稀缺的极端水体(如 OWT 23)中,算法 H 在 CLUS 模式下却发生严重的过拟合失效($r = -0.432$),误差反超全局模式。该量化结果证实,盲目依赖 CLUS 会引入极高的方差风险,必须在样本量与模型自由度间寻求平衡,由此确立了构建“混合优选策略”的必要性。

3.3. 最佳算法优选结果

基于“MAE 初筛—RMSE 决胜”的双级策略与性能热力图(见图 7),本研究构建了 22 类 OWT 的最佳

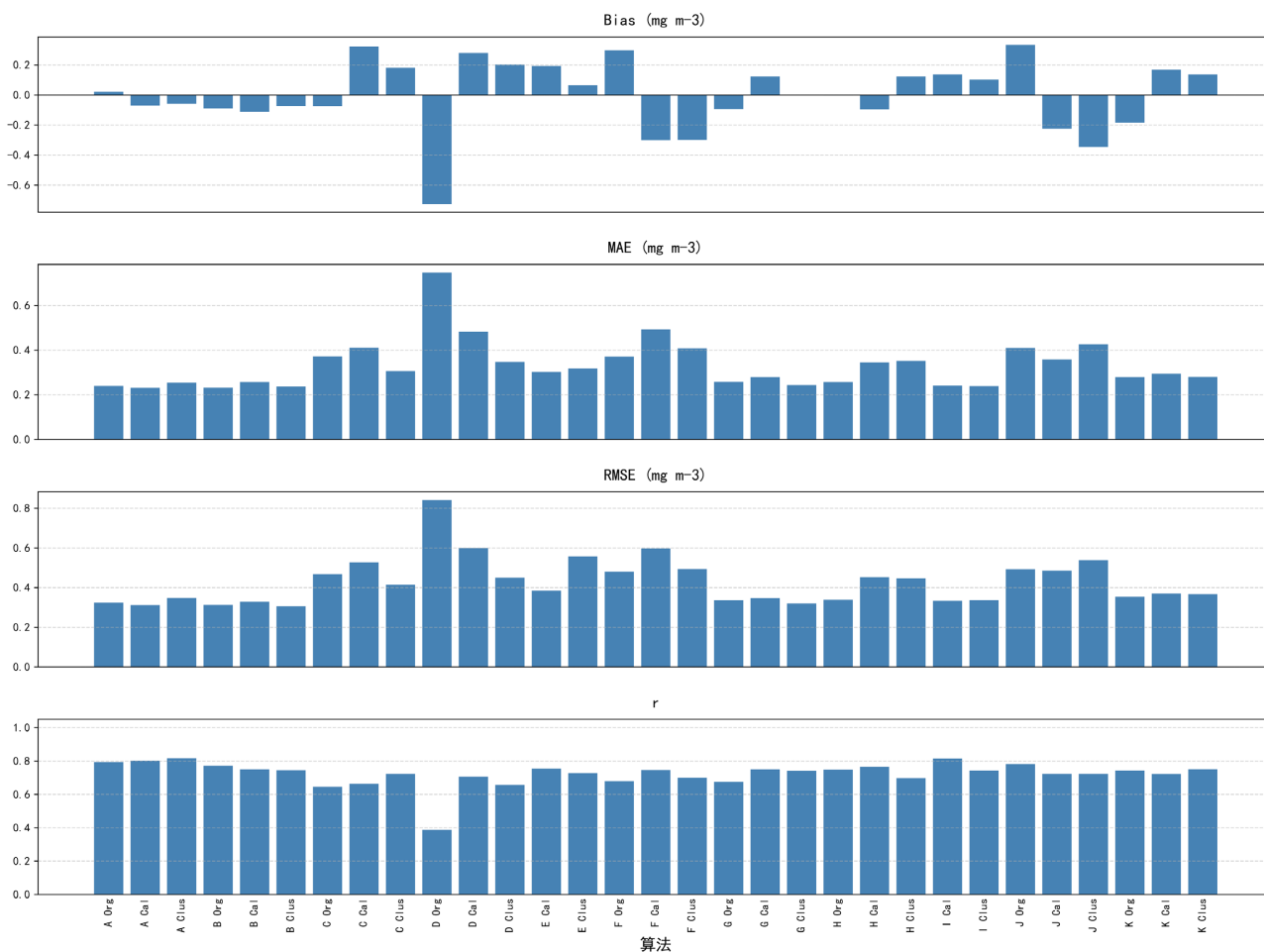


Figure 5. compares the error metrics calculated when the algorithm-inverted SPM concentration is compared with the field-measured SPM concentration

图 5. 比较算法反演的 SPM 浓度与现场测量 SPM 浓度时计算的误差指标

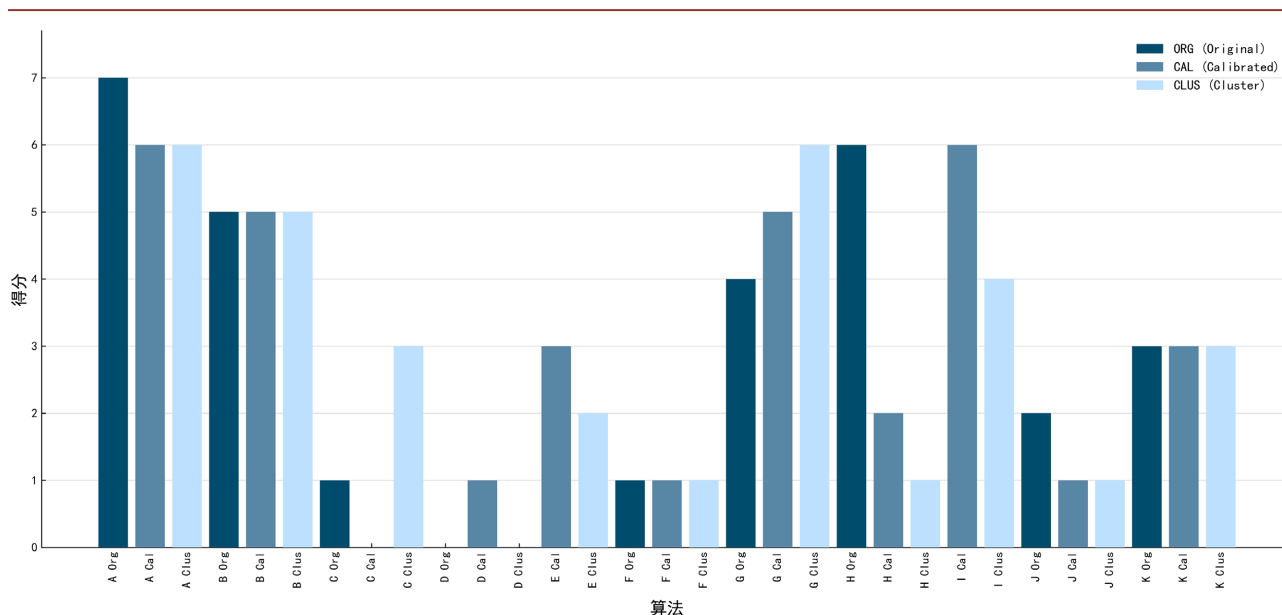


Figure 6. shows the performance scores of a single SPM model compared using the full validation dataset. Dark blue represents the original form (ORG), medium blue represents the full dataset calibrated form (CAL), and light blue represents the OWT calibrated form (CLUS)

图 6. 使用完整验证数据集对 SPM 单一模型进行比较得出的性能的分数的。深蓝色为原始形式(ORG), 中蓝色为完整数据集校准形式(CAL), 浅蓝色为 OWT 校准形式(CLUS)

算法查找表, 揭示了反演机制随浑浊度增加的“范式演变”规律。在低浓度及 CDOM 主导水体(OWT 2~9)中, 半分析(算法 G)与经验法(算法 F)对微弱光场敏感, 能有效从噪声中提取散射信息; 过渡至中等浊度区间(OWT 6, 10~15)时, 基于红光比值的经验算法(算法 B)利用近红外波段抵消散射干扰, 实现最佳信噪比平衡。

当进入高/极浑浊水体(OWT 16~23)后, 传统波段信号趋于饱和致使线性模型失效。此时, 基于梯度提升树(GBDT)的机器学习算法(算法 I)凭借强大的非线性拟合优势占据主导, 特别是在浓度最高的 OWT16 (中位数 $31 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$)中仍保持了 $r = 0.791$ 的高精度。此演变规律证实, 数据驱动模型是攻克极端水体反演难题的关键路径, 各机制算法在其专属“生态位”中均不可替代。

3.4. 动态算法精度验证

基于上述优选规律, 本研究构建了集成分类识别、逻辑分流与无缝反演于一体的动态切换反演系统(见图 8)。利用独立验证集对该系统进行的精度评估结果(见图 9)表明, 该系统在各项关键指标上均显著优于表现最好的单一全局算法(算法 I_CAL)。具体而言, 动态系统的决定系数(R^2)达到 0.70, 均方根误差(RMSE)从单一最优算法的 $0.41 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$ 降低至 $0.31 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$, 实现了约 25%的精度提升。

尤为重要的是, 该动态系统在消除系统性偏差方面取得了突破性进展, 其平均偏差(Bias)降低至 $0.0038 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$, 近乎完全消除了单一算法普遍存在的低值区高估或高值区低估的现象。散点图分析进一步显示, 动态算法的数据点紧密收敛于 1:1 线附近, 未出现明显的离群值或分层现象。这表明, 通过在低浓度区调用半分析/经验算法, 在高浓度区无缝切换至机器学习算法, 该系统有效解决了低浓度区的估算偏差与高浓度区的信号饱和问题, 在跨越 10^{-2} 至 $10^4 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$ 的全动态范围内实现了高精度、高一致性的 SPM 反演。

4. 讨论

4.1. 数据驱动反演中的偏差 - 方差权衡机制

本研究量化发现, 基于 OWT 的分类独立率定(CLUS)并非全面优于全局率定(CAL), 修正了水色遥感

领域“分类越细、精度越高”的固有认知。从统计学习视角来看，该现象揭示了数据驱动反演中经典的“偏差-方差权衡”困境。CAL 模式基于海量全集数据训练，有效抑制了随机噪声，具备低方差与强稳定性，但在特定光学类别中易因模型自由度不足产生系统性偏差(欠拟合)。

反之，CLUS 通过缩小小样本空间以期降低偏差，但其效能高度依赖样本丰度。在样本充足的类别(如 OWT 4)中，CLUS 成功实现了低偏差与低方差的统一；但在样本稀缺的极端类别(如 OWT 23)中，强制独立回归极易捕捉随机噪声而非物理规律，导致方差骤升、泛化能力大幅下降(过拟合)。因此，本研究提出的“混合优选策略”本质上是在偏差与方差之间寻求最佳平衡的自适应机制：在数据富集区追求高精度(降低偏差)，在数据贫乏区保障稳定性(控制方差)，从而有效破解了全球数据分布不均衡带来的反演难题。

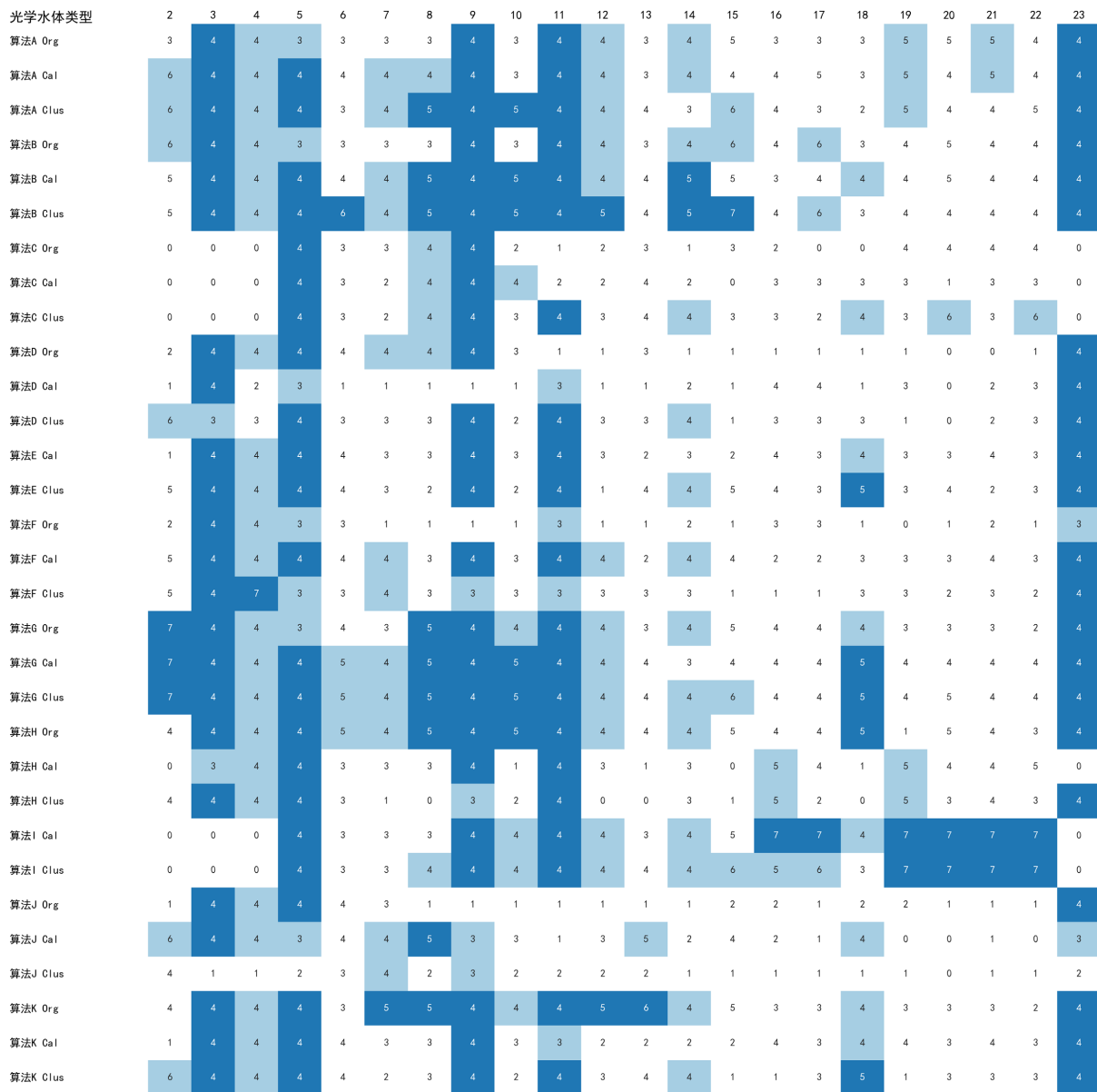


Figure 7. shows the performance scores of each OWT test algorithm determined based on objective ratings. The higher the score, the better the performance relative to all test algorithms in the OWT. The top-ranked scores (i.e., jointly ranked first or second) are shown in blue. 图 7. 根据客观评分确定的每个 OWT 测试算法的性能得分。得分越高，表明相对于 OWT 中所有测试算法的性能越好。最高排名得分(即联合排名第一或第二)用蓝色表示

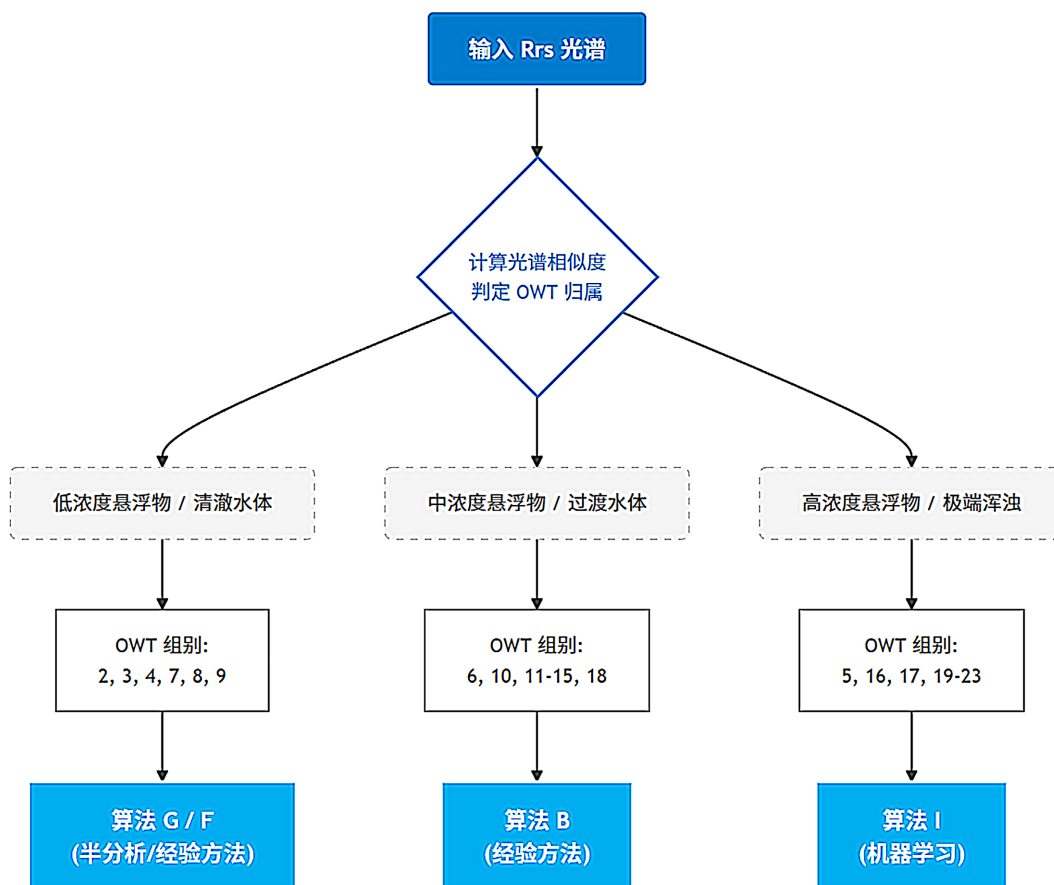


Figure 8. Flowchart of the SPM dynamic switching algorithm based on water optical classification
图 8. 基于水体光学分类的 SPM 动态切换算法运行逻辑流程图

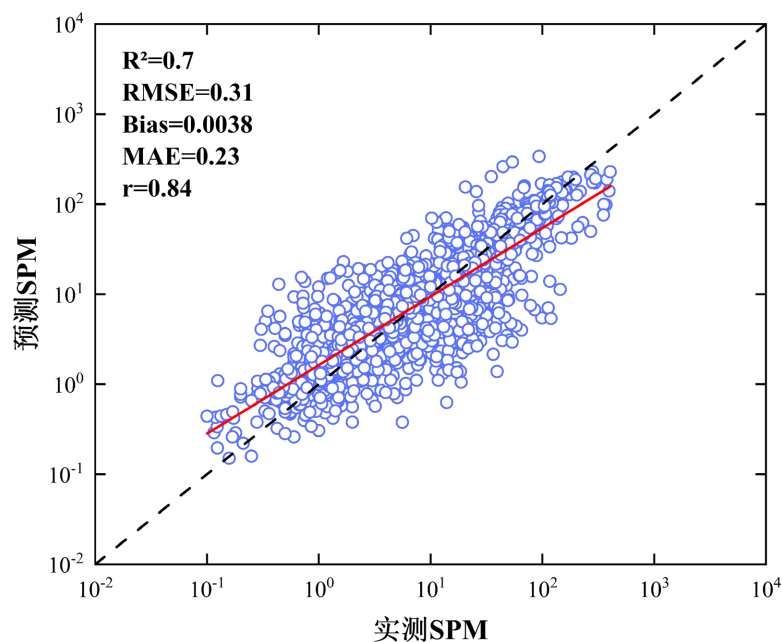


Figure 9. Scatter plot comparing the inversion results of the dynamic switching algorithm with measured values
图 9. 动态切换算法反演结果与实测值对比散点图

4.2. 悬浮物反演算法范式的演变机理

本研究构建的动态查找表揭示了最佳反演机制随浑浊度增加的“范式演变”，该过程与水体辐射传输的物理规律高度耦合。在低浓度清澈水体中，离水辐射微弱且受纯水与 CDOM 强干扰，信噪比极低。此时，半分析算法凭借物理机制优势，通过解析吸收与散射分量，从复杂背景噪声中有效提取了颗粒物散射信号；随浓度升至中等水平，后向散射显著增强，基于红光与近红外波段比值的经验算法脱颖而出，其通过比值运算有效抵消了无关吸收与大气残差，兼顾了反演的灵敏度与稳定性。

然而，在极端浑浊水体中，可见至近红外波段反射率遭遇“信号饱和”瓶颈，传统经验模型的敏感度趋近于零。此时，基于梯度提升树(GBDT)的机器学习算法展现出处理高维非线性问题的绝对优势。GBDT 深度挖掘多波段光谱间的非线性依赖关系，有效利用红边及短波红外波段的残余敏感度，突破了线性模型的性能天花板。这一从“物理模型”到“经验统计”再至“数据驱动”的演变规律证明：单一机制无法覆盖 SPM 的全动态范围，唯有顺应光学主导因子的变化动态切换算法范式，方能实现全域高精度反演。

4.3. 动态切换系统的优势与局限性

该动态切换系统展现出超越单一最优模型的综合性能。其不仅显著降低了 RMSE，更在物理层面化解了不同浓度区间反演机制的内在冲突。通过精准匹配低值区的高灵敏度模型与高值区的抗饱和模型，系统成功消除了由 CDOM 干扰(低值高估)和信号饱和(高值低估)引发的系统性偏差，使残差分布趋近理想正态分布。此外，基于光谱相似度的形态匹配机制有效避免了算法切换边界的数值跳变，保障了反演结果的空间连续性，为生成无缝的全球卫星产品奠定了基础。

然而，本研究仍存局限。首先，极端光学类别(如极高浑浊或特殊藻华水体)实测样本相对稀缺，制约了反演模型的进一步精细化；其次，当前分类主要依赖光谱形态，未来若结合固有光学属性(IOPs)先验知识或时空上下文信息，将进一步提升分类的物理可解释性。未来工作将致力于扩充极端生境数据集，并探索物理信息神经网络(PINN)等深度学习架构，以期在保持非线性拟合优势的同时，强化少样本条件下的物理约束与泛化能力。

5. 结论

本研究基于全球多源实测数据与 OWT 框架，系统评估了 11 种 SPM 反演算法的参数化适应性，并构建了基于光谱相似度匹配的动态切换系统。主要结论如下：

(1) 修正了“分类率定绝对优于全局率定”的传统认知，提出基于偏差 - 方差权衡的混合优选策略。证实 CLUS 虽在样本充足类别(如 OWT 4)中有效降低偏差，但在样本稀缺的极端水体中极易过拟合，泛化能力反弱于 CAL。反演策略必须打破单一束缚，依据样本丰度灵活配置。

(2) 揭示了最佳反演机制随浑浊度增加的“范式演变”规律。即：低浓度清澈水体适用物理机制明确的半分析与经验法；中等浊度过渡区依赖红光比值经验算法；而高浑浊极端水体则由 GBDT 机器学习算法占据绝对主导，证实了数据驱动模型是破解信号饱和和难题的关键。

(3) 构建的动态切换系统有效突破了单一模型的性能天花板。该系统融合了多机制算法的局部优势，较单一最优全局算法的 RMSE 显著降低约 25%且 Bias 趋近于 0，成功克服了低值估算偏差与高值信号饱和问题，为全球水体的高精度、全动态范围监测提供了稳健方案。

参考文献

- [1] Kirk, J.T.O. (1994). *Light and Photosynthesis in Aquatic Ecosystems*. 2nd Edition, Cambridge University Press.
<https://doi.org/10.1017/cbo9780511623370>

- [2] Bilotta, G.S. and Brazier, R.E. (2008) Understanding the Influence of Suspended Solids on Water Quality and Aquatic Biota. *Water Research*, **42**, 2849-2861. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2008.03.018>
- [3] Odermatt, D., Gitelson, A., Brando, V.E. and Schaepman, M. (2012) Review of Constituent Retrieval in Optically Deep and Complex Waters from Satellite Imagery. *Remote Sensing of Environment*, **118**, 116-126. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2011.11.013>
- [4] 马荣华, 唐军武, 段洪涛, 等. 湖泊水色遥感研究进展[J]. 湖泊科学, 2009, 21(2): 143-158.
- [5] 张兵, 李俊生, 申茜, 等. 长时序大范围内陆水体光学遥感研究进展[J]. 遥感学报, 2021, 25(1): 37-52.
- [6] Morel, A. and Prieur, L. (1977) Analysis of Variations in Ocean Color1. *Limnology and Oceanography*, **22**, 709-722. <https://doi.org/10.4319/lo.1977.22.4.0709>
- [7] Gordon, H.R., Brown, O.B., Evans, R.H., Brown, J.W., Smith, R.C., Baker, K.S., *et al.* (1988) A Semi-Analytic Radiance Model of Ocean Color. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **93**, 10909-10924. <https://doi.org/10.1029/jd093id09p10909>
- [8] 段洪涛, 曹志刚, 沈明, 等. 中国内陆水体水色遥感研究进展[J]. 遥感学报, 2019, 23(3): 439-460.
- [9] Nechad, B., Ruddick, K.G. and Park, Y. (2010) Calibration and Validation of a Generic Multisensor Algorithm for Mapping of Total Suspended Matter in Turbid Waters. *Remote Sensing of Environment*, **114**, 854-866. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2009.11.022>
- [10] Doxaran, D., Froidefond, J.M., Lavender, S., *et al.* (2002) Spectral Signature of Highly Turbid Waters: Application with SPOT Data to Quantify Suspended Particulate Matter Concentrations. *Remote Sensing of Environment*, **81**, 149-161. [https://doi.org/10.1016/s0034-4257\(01\)00341-8](https://doi.org/10.1016/s0034-4257(01)00341-8)
- [11] Neil, C., Spyarakos, E., Hunter, P.D. and Tyler, A.N. (2019) A Global Approach for Chlorophyll—A Retrieval across Optically Complex Inland Waters Based on Optical Water Types. *Remote Sensing of Environment*, **229**, 159-178. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2019.04.027>
- [12] Moore, T.S., Mullaugh, K.M., Holyoke, R.R., Madison, A.S., Yücel, M. and Luther, G.W. (2009) Marine Chemical Technology and Sensors for Marine Waters: Potentials and Limits. *Annual Review of Marine Science*, **1**, 91-115. <https://doi.org/10.1146/annurev.marine.010908.163817>
- [13] Spyarakos, E., O'Donnell, R., Hunter, P.D., Miller, C., Scott, M., Simis, S.G.H., *et al.* (2018) Optical Types of Inland and Coastal Waters. *Limnology and Oceanography*, **63**, 846-870. <https://doi.org/10.1002/lno.10674>
- [14] Lehmann, M.K., Gurlin, D., Pahlevan, N., Alikas, K., Conroy, T., Anstee, J., *et al.* (2023) GLORIA—A Globally Representative Hyperspectral *in Situ* Dataset for Optical Sensing of Water Quality. *Scientific Data*, **10**, Article No. 100. <https://doi.org/10.1038/s41597-023-01973-y>
- [15] 杨现坤, 崔松雪, 罗运阔, 等. 基于水体光学分类的珠江口悬浮泥沙浓度遥感反演[J]. 生态环境学报, 2021, 30(2): 364-374.
- [16] Wei, J., Lee, Z. and Shang, S. (2016) A System to Measure the Data Quality of Spectral Remote Sensing Reflectance of Aquatic Environments. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, **121**, 8189-8207. <https://doi.org/10.1002/2016jc012126>
- [17] Lee, Z.P., Carder, K.L. and Arnone, R.A. (2002) Deriving Inherent Optical Properties from Water Color: A Multiband Quasi-Analytical Algorithm for Optically Deep Waters. *Applied Optics*, **41**, 5755-5772. <https://doi.org/10.1364/ao.41.005755>
- [18] Chen, J., Quan, W., Cui, T. and Song, Q. (2015) Estimation of Total Suspended Matter Concentration from MODIS Data Using a Neural Network Model in the China Eastern Coastal Zone. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, **155**, 104-113. <https://doi.org/10.1016/j.ecss.2015.01.018>
- [19] Brewin, R.J.W., Sathyendranath, S., Müller, D., Brockmann, C., Deschamps, P., Devred, E., *et al.* (2015) The Ocean Colour Climate Change Initiative: III. A Round-Robin Comparison on In-Water Bio-Optical Algorithms. *Remote Sensing of Environment*, **162**, 271-294. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2013.09.016>