

北太平洋表层海水 pH 值的重建

王洁^{1,2}, 毛景景¹, 吕阳阳¹, 王杰¹, 栾奎峰^{1,2*}

(1. 上海海洋大学 海洋科学学院, 上海 201306; 2. 上海河口海洋测绘工程技术研究中心, 上海 201306)

摘 要: 以 1993—2018 年北太平洋海表面温度(SST)、海表面盐度(SSS)、叶绿素 *a* 浓度(Chl-*a*)、二氧化碳分压($p\text{CO}_2$)等数据为基础, 利用传统线性回归分析和 BP 神经网络算法, 建立表层海水 pH 值的预测模型。结果表明: 两种方法对于重建北太平洋表层海水 pH 值都能达到较高的精度, 其中线性回归模型基于 SSS、Chl-*a*、 $p\text{CO}_2$ 参数模拟最佳, BP 神经网络模型基于 SST、SSS、Chl-*a*、 $p\text{CO}_2$ 参数模拟最佳。对比两种最佳模型的均方根误差和拟合系数发现, BP 神经网络模型优于线性回归模型。除此之外, 最佳 BP 神经网络模型在 4 个季节的拟合效果均很好, 不同季节的适用性远高于最佳线性回归模型。表层海水 pH 值受到多种因素的综合影响, 与 $p\text{CO}_2$ 、SST 呈负相关关系, 与 SSS、Chl-*a* 呈正相关关系。应用最佳 BP 神经网络模型重建北太平洋表层海水 pH 值发现, 本研究模型的预测结果与已有研究、哥白尼欧洲地球观测计划数据、站点实测数据都存在很好的一致性, 表层海水 pH 值冬季高于夏季, 整体呈现西北高东南低的趋势。

关键词: 线性回归; BP 神经网络; 表层海水 pH 值; 模型; 重建

中图分类号: P734.2+5 **文献标识码:** A **文章编号:** 1003-0239(2023)01-0046-11

1 引言

太平洋作为世界上最大的大洋, 对全球气候变化起着关键作用, 丰富的渔业资源也为太平洋岛屿国家的经济发展提供了机遇^[1-3]。由于近年来人为排放 CO_2 增加, 被海洋吸收后导致北太平洋酸化现象愈发严重, 其正在改变并影响着海洋生物赖以生存的化学环境^[4-5], 也破坏着海洋生物多样性和生态系统的平衡^[6-8]。表层海水 pH 值作为衡量海水酸化程度的关键指标, 是海洋酸化研究的主要参数, 北太平洋海水 pH 值实测数据的缺失使得重建表层海水 pH 值非常有必要。表层海水 pH 值的重建有助于加强对北太平洋海域酸化的认识, 提高海洋酸化预测的准确性, 更好地理解海洋环境因子与海洋酸化之间的作用机理, 对填补该海区酸化研究的缺失、探究大洋酸化和全球碳循环问题具有重要意义, 同时也为缓解海洋酸化提供基础资料, 为海洋生态系

统的稳定维护提供理论依据。

目前, 海水 pH 值的重建方法主要有线性回归、动态物理模型及海水碳酸盐系统模型, 各模型的优点及局限性见表 1。线性回归方法已较为成熟, 国内外学者李福荣^[9]、石强等^[10]、杨顶田等^[11]、NAKANO 等^[12]、ALIN 等^[13]、LI 等^[14]、SRIDEVI 等^[15]已经开展了一系列利用传统线性回归方法重建表层海水 pH 的研究, 但这些结果具有一定的区域、季节适用性; WOOTTON 等^[16]基于多种海洋物理特性建立的表层海水 pH 模型较为复杂; GREGOR 等^[17]利用测量的总碱度(Total Alkalinity, TA)和推导出的二氧化碳分压($p\text{CO}_2$)重建的表层海水 pH 值具有误差传递性, 模型精度存在一定的局限性。相比之下, BP(Back Propagation)神经网络作为一种根据误差逆传播算法训练的多层前馈网络, 可以储存及学习大量的输入和输出数据, 具有很强的模拟能力^[18]。目前, 人工神经网络已经被广泛地应用于 $p\text{CO}_2$ 、

收稿日期: 2022-03-20; 修回日期: 2022-06-15。

作者简介: 王洁(1982-), 女, 副教授, 博士, 主要从事海洋遥感研究。E-mail: wangjie@shou.edu.cn

*通信作者: 栾奎峰(1981-), 男, 副教授, 博士, 主要从事海洋测绘与遥感研究。E-mail: kfluan@shou.edu.cn

表1 海水pH重建方法

Tab.1 Reconstruction method of seawater pH

方法	优点	局限性	参考文献
线性回归	方法简单	建模参数不全面 存在区域、季节限制性	李福荣 ^[9] 、石强等 ^[10] 、杨顶田等 ^[11] 、NAKANO等 ^[12] 、 ALIN等 ^[13] 、LI等 ^[14] 、SRIDEVI等 ^[15]
动态物理模型	模拟精度高	考虑物理因素多,模型复杂	WOOTTON等 ^[16]
海水碳酸盐系统模型	适用范围广	误差传递性明显	GREGOR等 ^[17]

TA、无机碳等化学要素的重建过程中^[19-23],研究表明BP神经网络算法在重建表层海水pH值方面具有巨大的潜力。基于此,本文以北太平洋为研究区域,通过筛选与表层海水pH值具有较强相关性的参数及参数组合进行模型演算,进而比较传统线性回归分析和BP神经网络算法在重建北太平洋表层海水pH值方面的能力。

2 数据与方法

2.1 数据源

本研究中,表层海水pH值、海表面温度(Sea Surface Temperature, SST)、海表面盐度(Sea Surface Salinity, SSS)、海表面叶绿素 a 浓度(Chl- a)和 $p\text{CO}_2$ 等数据来源于哥白尼欧洲地球观测计划(Copernicus Marine Environment Monitoring Service, CMEMS),数据分辨率均为 $0.25^\circ \times 0.25^\circ$,各参数精度评价见表2^[24-25],评价指标包括相关系数(r),偏差(Bias)和均方根误差(Root Mean Square Error, RMSE),这些指标能够量化大尺度和季节性时间尺度的偏差。目前,这些数据被广泛应用于海洋酸化的研究中^[26]。由于这些数据产品重建表层海水pH值时需要考虑平均海平面、硝酸盐、磷酸盐、溶解氧、浮游植物等多种海洋物理化学特性,所用模型较为复杂,故本文采用相对简单的线性回归和BP神经网络算法对表层海水pH值进行重建。本文以 $10^\circ \sim 60^\circ \text{N}$, $119^\circ \text{E} \sim 110^\circ \text{W}$ 为研究范围,随机选取1993—2018年北太平洋表层海水pH值、SST、SSS、Chl- a 和 $p\text{CO}_2$ 的月平均数据,共76 000组,其中36 000组数据用于表层海水pH值模型的建立,20 000组数据用于模型验证,20 000组数据用于分析模型在不同季节的适用性(春、夏、秋、冬数据各5 000组)。此外,为了进一步验证模型在北太平

洋的重建能力,本文还收集了来自美国国家海洋和大气管理局(National Oceanic and Atmospheric Administration, NOAA)国家环境信息中心(National Centers for Environmental Information, NCEI)3个时间序列站点的实测数据,包括KEO站点数据(2001—2002年、2005—2015年)、CCE1站点数据(2001—2011年、2013—2014年)和Kaneohe站点数据(2001—2006年、2012—2016年),站点位置见图1。

表2 数据源各参数的精度评价

Tab.2 Accuracy evaluation of each parameter of the data source

参数	r	Bias	RMSE
SST	—	—	0.76
SSS	—	—	0.22
Chl- a	0.811	0.26	0.59
pH	0.952	0.02	0.04

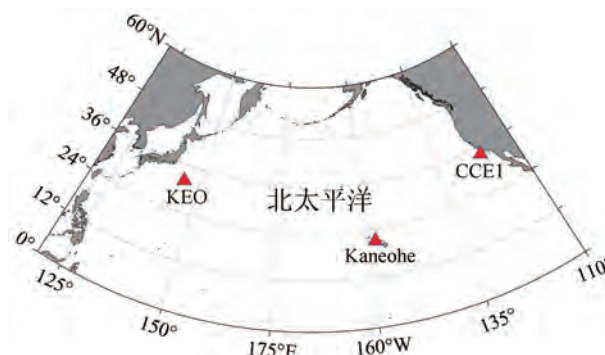


图1 研究区域

Fig.1 Domain of study area

2.2 模型重建方法

本文主要运用传统线性回归分析和BP神经网络算法对表层海水pH值进行模型重建。传统线性回归分析是指用于分析一个连续型因变量与一个

或多个自变量之间线性关系的统计学分析方法^[27],该方法可以对因变量进行有效的预测分析。一般用 R 表明变量之间的相关程度,决定系数(R^2)判定模型的拟合效果。BP神经网络是一种基于误差反向传播的多层前馈神经网络,它可以通过对训练样本的反复学习,不断地调整各层间的连接权值和阈值^[28],从而使输入信息接近所期望的输出信息。本文使用的BP神经网络结构如图2所示,包括输入层(SST、SSS、Chl- a 、 pCO_2)、输出层(pH)和隐含层。

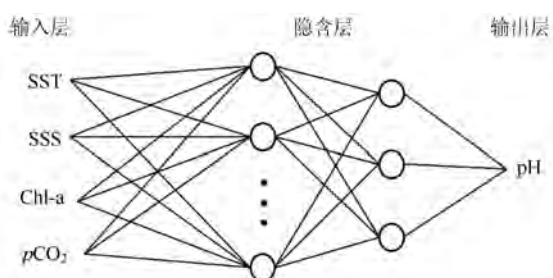


图2 BP神经网络结构图

Fig.2 Structure of BP neural network

3 结果

3.1 线性回归模型的建立与验证

本文使用最小二乘法对 SST、SSS、Chl- a 、 pCO_2 及各参数组合与表层海水 pH 值进行线性回归分析,得到建模 $R^2 > 0.95$ 的 6 个线性方程(见表3)。结

果表明,这 6 个线性方程在模型验证中的 RMSE、标准差(Standard, STD)均小于 0.11,方差(Variance, VAR)均小于 0.008 6,各组合差别不大,用于重建北太平洋表层海水 pH 值都是可行的。基于 SSS、Chl- a 、 pCO_2 这 3 个参数和基于 SST、SSS、Chl- a 、 pCO_2 这 4 个参数建立的表层海水 pH 值模型的 R^2 相对较高,分别为 0.959 0 与 0.959 4,但在模型的验证中,前一个参数组合的 RMSE、STD 以及 VAR 在这 6 个模型中最小。

从图3可以看出,基于传统线性回归方法建立的 6 个表层海水 pH 模型的预测值与真实值极为接近,其中,基于 SSS、Chl- a 、 pCO_2 参数的模型相关系数最大,达到 0.976 6,模型的拟合效果最优。通过综合评定可以发现, $8.309\ 6+0.003\ 1SSS+0.012\ 6Chl-a-0.000\ 988pCO_2$ 是最佳的线性回归模型。

3.2 BP神经网络模型的建立与验证

使用与线性回归方法建模相同的 36 000 组数据作为训练数据,用以生成训练模式文件,20 000 组数据作为测试数据,用以生成测试模式文件。通过将筛选出的不同建模参数及组合作为输入层的神经元进行模型的训练和演算,得到 $R^2 > 0.95$ 的 6 个 BP 神经网络模型(见表4),各参数组合的 RMSE 均小于 0.015, r 均大于 0.97,其中以 SST、SSS、Chl- a 、 pCO_2 这 4 个参数建立的 BP 神经网络模型的训练结果和测试数据的 R^2 和 r 最大, RMSE 最小。

表3 基于线性回归方法的表层海水 pH 重建模型的输出结果

Tab.3 Output results of pH reconstruction model based on linear regression

参数组合	建模数据 ($n=36\ 000$)		验证数据 ($n=20\ 000$)		
	R^2	线性方程	RMSE	STD	VAR
SST+ pCO_2	0.950 3	$8.421\ 2+0.000\ 1SST-0.001pCO_2$	0.009 8	0.009 7	0.000 095
SSS+ pCO_2	0.952 2	$8.365\ 9+0.001\ 7SSS-0.001pCO_2$	0.008 8	0.008 7	0.000 075
Chl- a + pCO_2	0.952 6	$8.416\ 9+0.007\ 1Chl-a-0.000\ 99pCO_2$	0.010 3	0.010 3	0.000 106
SST+SSS+ pCO_2	0.952 2	$8.363\ 2-0.000\ 023\ 8SST+0.001\ 8SSS-0.000\ 999\ 7pCO_2$	0.008 9	0.008 6	0.008 600
SSS+Chl- a + pCO_2	0.959 0	$8.309\ 6+0.00\ 31SSS+0.012\ 6Chl-a-0.000\ 988pCO_2$	0.008 4	0.008 4	0.000 071
SST+SSS+Chl- a + pCO_2	0.959 4	$8.319\ 7+0.000\ 128SST+0.002\ 8SSS+0.013\ 6Chl-a-0.000\ 992pCO_2$	0.008 7	0.008 6	0.000 074

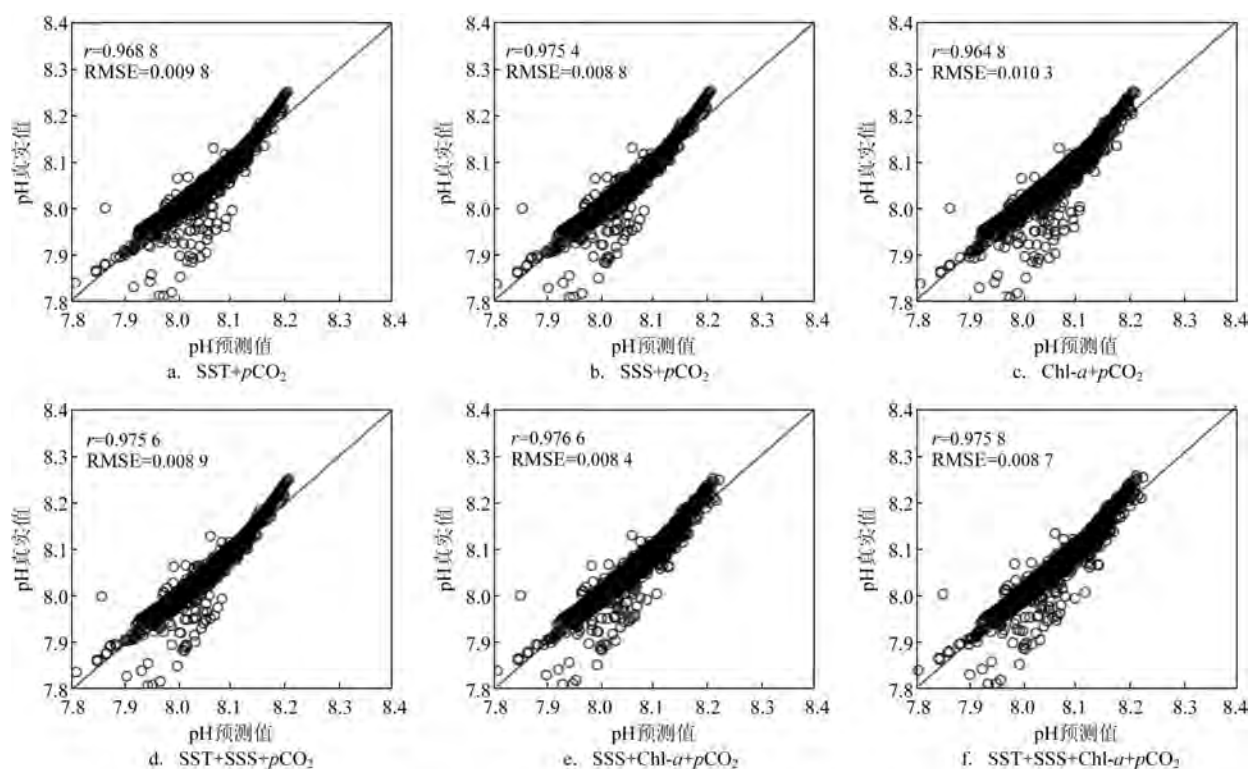


图3 线性回归模型验证

Fig.3 Validation of linear regression model

表4 基于BP神经网络方法的表层海水pH重建模型的输出结果

Tab.4 Output results of the surface seawater pH based on the BP neural network model

参数组合	R^2	RMSE	r
SST+pCO ₂	0.963 3	0.008 1	0.981 5
SSS+pCO ₂	0.955 1	0.014 0	0.977 3
Chl-a+pCO ₂	0.953 8	0.009 0	0.976 6
SST+SSS+pCO ₂	0.968 2	0.007 7	0.983 9
SSS+Chl-a+pCO ₂	0.969 1	0.007 7	0.984 4
SST+SSS+Chl-a+pCO ₂	0.970 2	0.007 4	0.985 0

从模型验证结果来看(见图4),BP神经网络算法预测的表层海水pH值与真实pH值差异很小,基于SST、SSS、Chl-a、pCO₂这4个参数的重建模型的 r 达到0.985 0,即该模型的预测结果与实际值的相关性较高,模型拟合效果最好,是重建北太平洋表层海水pH值的最佳BP神经网络模型。

3.3 线性回归模型和BP神经网络模型对

通过对比上述两个最佳模型可以发现,最佳线

性回归模型的 R^2 为0.959 0,模型预测值与真实值的RMSE为0.008 4、 r 为0.976 6;而最佳BP神经网络模型的 R^2 为0.970 2,模型预测值与真实值的RMSE为0.007 4、 r 为0.985 0。各项评定指标都表明最佳BP神经网络模型优于最佳线性回归模型。

为了进一步比较两个最佳模型,本文选取未参与建模和验证的20 000组数据,对北太平洋表层海水的pH值进行季节适用性评定。从两个最佳模型对不同季节表层海水pH值的预测值与真实值的拟合度来看(见图5),最佳线性回归模型在夏、秋两季的拟合效果较好,春季和冬季的拟合效果相对较差;最佳BP神经网络模型在四季的拟合效果均较好。

此外,从表5可以看出,北太平洋海域最佳线性回归模型在夏季的RMSE、STD、VAR都较小,分别为0.006 7、0.006 3、0.000 039,而在冬季分别为0.009 7、0.009 3和0.000 086,这表明最佳线性回归模型在北太平洋海域夏季的适用性最好,冬季适用性最差。最佳BP神经网络模型在4个季节的RMSE、STD、VAR相差不大,且都远低于最佳线性

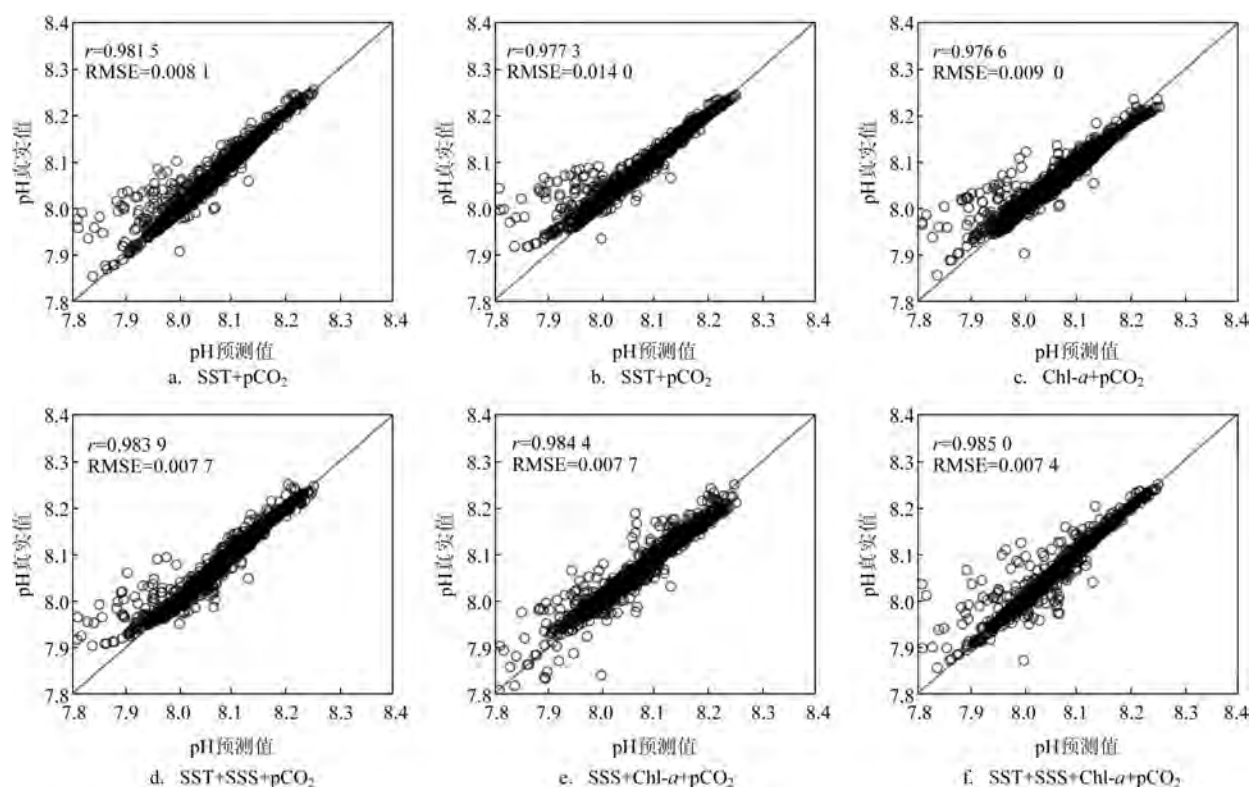


图4 BP神经网络模型验证

Fig.4 Validation of BP neural network model

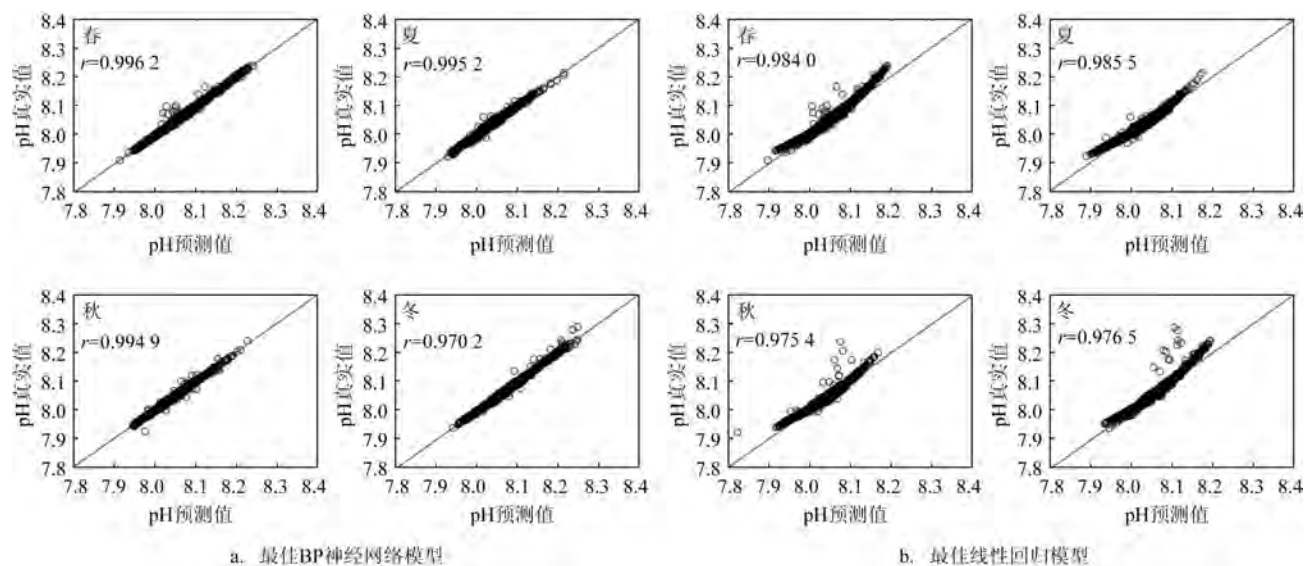


图5 最佳线性回归与最佳BP神经网络pH重建模型的季节适用性

Fig.5 Seasonal verification of pH reconstruction model based on optimal linear regression and BP neural network

回归模型,这表明最佳BP神经网络模型在4个季节的适用性都较好。综合对比发现,最佳BP神经网络模型在北太平洋海域四季的适用性整体高于最佳线性回归模型。

络模型在北太平洋海域四季的适用性整体高于最佳线性回归模型。

表5 最佳线性回归和最佳BP神经网络模型季节适用性分析

Tab.5 Seasonal verification of optimal linear regression and BP neural network model

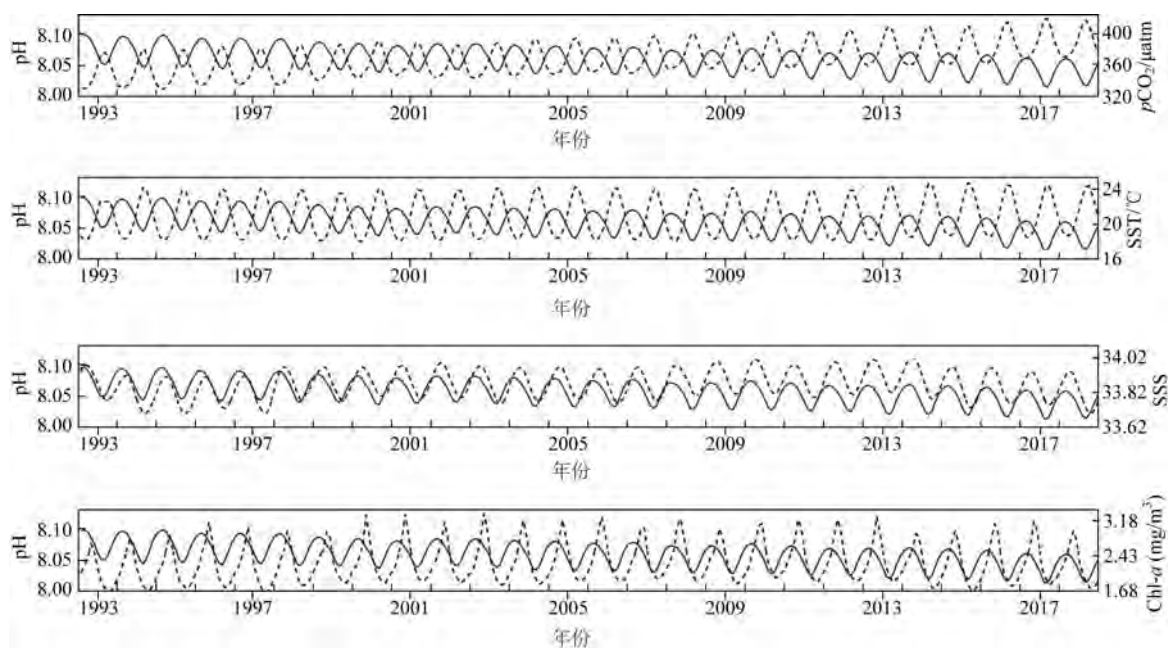
季节	RMSE		STD		VAR	
	线性回归	BP神经网络	线性回归	BP神经网络	线性回归	BP神经网络
春	0.008 2	0.004 9	0.007 7	0.003 7	0.000 059 6	0.000 013 8
夏	0.006 7	0.004 2	0.006 3	0.003 3	0.000 039 3	0.000 010 9
秋	0.007 4	0.004 2	0.007 3	0.003 2	0.000 052 9	0.000 010 4
冬	0.009 7	0.004 7	0.009 3	0.003 4	0.000 086 2	0.000 011 6

4 讨论

4.1 表层海水pH值影响机制分析

表层海水pH值除了受 CO_2 影响外,海水温度和盐度等环境因子、海洋生产力、营养物质浓度、上升流、厄尔尼诺-南方涛动(El Niño-Southern Oscillation, ENSO)及近岸水体的输入等都可能是海洋酸化的因素^[29],这也是本文选取SST、SSS、Chl-*a*、 $p\text{CO}_2$ 等参数作为模型输入的原因。由这些指标的逐月变化曲线可知(见图6),表层海水pH值与 $p\text{CO}_2$ 、SST呈现负相关,与SSS、Chl-*a*呈现正相关,这与其

他相关研究具有很好的一致性。MIDORIKAWA等^[30]在研究北太平洋西部25 a时间序列海水pH值的变化趋势时发现, $p\text{CO}_2$ 浓度越高,海水pH值越低。BATES等^[31]、RAVEN等^[32]指出海水温度的变化会影响海水吸收 CO_2 的能力,因而改变海水pH值,即当水温升高时,海水中的 CO_2 含量减少,pH值升高,而当水温降低时pH值随之下降。BATES等^[31]也表明盐度对海水pH同样具有重要影响,北大西洋海水的pH变化与盐度存在正相关特征。ZEEBE^[33]、肖钰霖^[34]也指出盐度作为碳酸盐化学平衡的一个重要因子,会对海水pH值产生一定的影响。DENG等^[35]研究发现海水pH值与Chl-*a*呈现显著正相关关系。

图6 1993—2018年海水表层pH值(实线)与 $p\text{CO}_2$ 、SST、SSS、Chl-*a*逐月变化曲线Fig.6 Monthly variation curves of surface seawater pH(solid line), $p\text{CO}_2$, SST, SSS and Chl-*a* from 1993 to 2018

4.2 模型评价

4.2.1 与已有研究对比

为了验证模型在北太平洋表层海水 pH 重建方面的能力,本文选取与前人研究相一致的时间进行分析。2016 年北太平洋表层海水 pH 值在 7.8~8.3 之间(见图 7),全年平均值为 8.04。由于受到西北太平洋复杂环流、季风、陆源输送、大气沉降和海底沉积物的影响,丰富的营养盐和大量的浮游生物引起的高生产力使得北太平洋表层海水 pH 整体呈西北高东南低的分布趋势^[36],最高值出现在 36°~48°N 和 130°~175°W 范围内,尤其是在中国近海和日本海海域附近。这一结果与 JIANG 等^[37]基于第六版表面海洋二氧化碳图集(SOCATv6)和第二

版全球海洋数据分析项目(GLODAPv2)估算的原位温度下北太平洋表层海水 pH 值的分布一致。

本文将最佳 BP 神经网络模型应用于 2005 年 2 月和 8 月北太平洋表层海水 pH 的重建(见图 8)。结果表明,北太平洋表层海水 pH 存在显著的季节性变化特征,冬季海水 pH 整体高于夏季,尤其在 24°~36°N 范围内,pH 变化较为明显。2 月,北太平洋表层海水 pH 值在 20°~48°N 范围内较高,西侧海域 pH 值较东侧高,8 月则呈现北侧和南侧海域表层海水 pH 值较中部海域高,北侧最高。这一结果与 TAKAHASHI 等^[38]基于 GLODAP (Global Ocean Data Analysis Project)、CARINA (Carbon Dioxide In the Atlantic Ocean)和 LDEO (Lamont-Doherty Earth Observatory)数据库中 $p\text{CO}_2$ 、TA 和营养盐浓度数据估算的 2005 年 2 月和 8 月北太平洋开阔外海海域 pH 值的分布高度相似(见图 9),进一步说明了基于 SST、SSS、Chl- a 、 $p\text{CO}_2$ 4 个参数建立的 BP 神经网络模型用于重建北太平洋表层海水 pH 值是可行的。

4.2.2 与 CMEMS 数据对比

图 10 显示了本研究最佳 BP 神经网络模型重建的北太平洋表层海水 pH 值与 CMEMS 产品 pH 之间的差值。从图中可以发现两者误差在 0~0.02 之间,其中差异较小的区域位于开阔海域,差异较大的区域位于近海海域,这说明本文建立的最佳 BP 神经网络模型具有一定的空间适用性,即更适用于开阔海域,而在近海海域的适用性相对较差。这种差异可能源自近岸海域复杂的物理、化学和生物过程,表层海水 pH 值除了受建模考虑到的 SST、SSS、

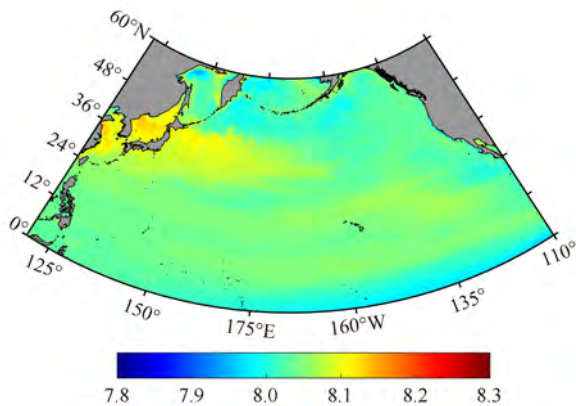


图 7 基于本文 BP 模型的 2016 年北太平洋表层海水 pH 分布
Fig.7 Distribution of surface seawater pH in the North Pacific in 2016 based on BP model

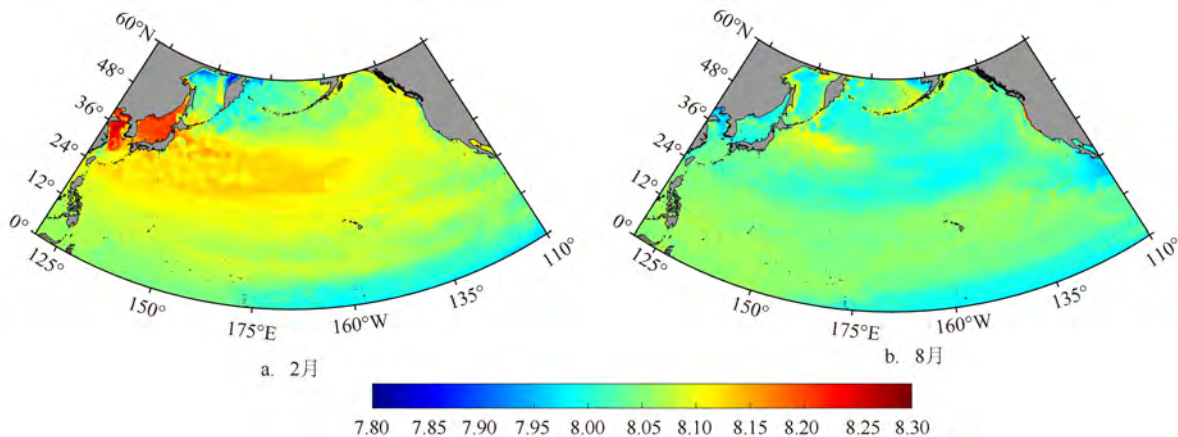


图 8 2005 年 2 月和 8 月北太平洋表层海水 pH 分布

Fig.8 Distribution of surface seawater pH in North Pacific in February and August 2005

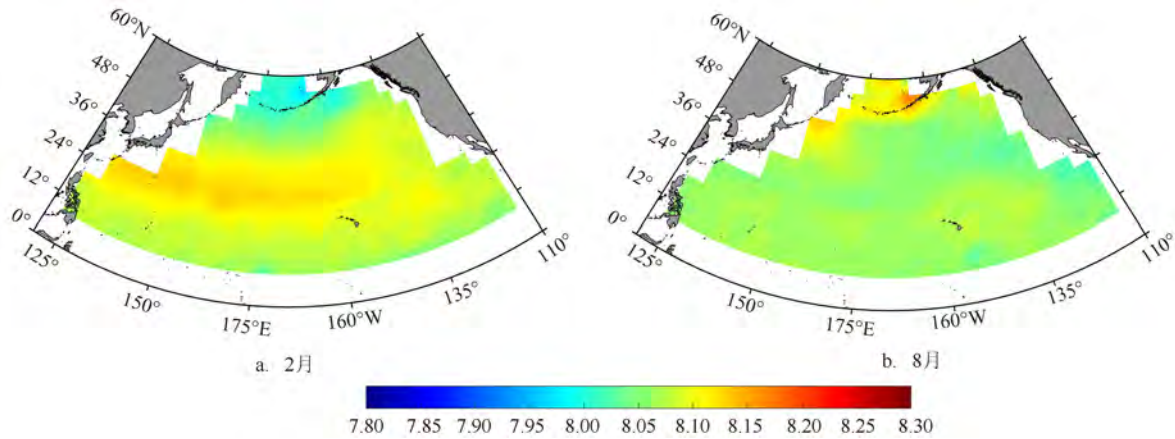


图9 2005年2月和8月北太平洋表层海水pH分布(数据来源:<https://www.ldeo.columbia.edu/res/pi/CO2/>)

Fig.9 Distribution of surface seawater pH in North Pacific in February and August 2005 (data source:<https://www.ldeo.columbia.edu/res/pi/CO2/>)

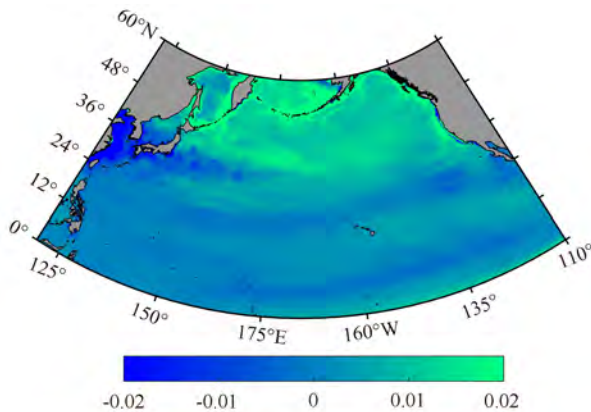


图10 基于BP模型与CMEMS产品的2016年北太平洋表层海水pH差值

Fig.10 pH difference between BP model and CMEMS products in the surface seawater of North Pacific in 2016

生产力变化的影响,还受到营养物质浓度、上升流、ENSO及近岸水体输入等因素的影响^[29]。虽然与WOOTTON等^[16]基于平均海平面、光合作用、水温、上升流、浮游植物丰度及盐度等多种海洋物理特性建立的模型相比较,本文建模考虑的参数不够全面,但是此模型所需参数较少,容易获取,方法比较简单,也能够准确地分析北太平洋表层海水pH值的季节特征及总体变化趋势。

4.2.3 pH实测值与模拟值之间的差异

为了进一步验证最佳BP神经网络模型的可信度,我们收集了研究区域3个观测站(西北太平洋的

KEO站、加利福尼亚沿岸的CCE1站和Kaneohe站,站点位置见图1)2001—2014年表层海水pH值的实测值,分别与本研究的模拟估算结果进行对比。KEO站的有效实测数据取自2001—2002年、2005—2011年,CCE1站取自2001—2004年、2010—2011年,Kaneohe站取自2001年、2003—2005年、2012—2014年,对比结果见图11。KEO站的 ΔpH ($pH_{\text{预测}} - pH_{\text{实测}}, n=57$) = $-0.0008 \pm 0.0195 pH$, CCE1站的 ΔpH ($n=26$) = $-0.0014 \pm 0.0240 pH$, Kaneohe站的 ΔpH ($n=37$) = $0.0226 \pm 0.0135 pH$ 。研究表明,KEO站的 ΔpH 最小,其次是CCE1站和Kaneohe站。CCE1站由于温跃层较浅,会受到稳

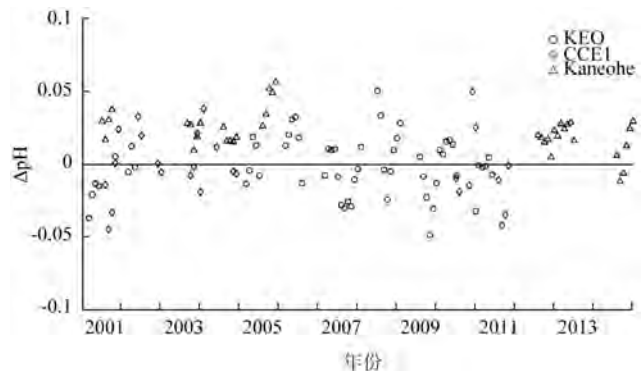


图11 KEO、CCE1、Kaneohe站pH实测值与预测值之间的差异

Fig.11 Difference in pH between predicted values and measured values at Station KEO, CCE1 and Kaneohe

定信风的强迫^[39]; Kaneohe 站 pH 的波动主要是因为区域海洋气候会对珊瑚礁海水与开放大洋海水交换产生影响^[40]。在 NAKANO 等^[12]对北太平洋表层海水 pH 的重建结果中,夏威夷区域的 ΔpH 为 $0.012 \pm 0.025\text{pH}$, 西北太平洋 ΔpH 为 $0.026 \pm 0.032\text{pH}$; LI 等^[14]基于参数化技术研究北太平洋次极地海水 pH 的时空分布时发现,西北太平洋 ΔpH 为 $0.017 \pm 0.020\text{pH}$, 这与本文模型的重建结果具有很好的一致性。

5 结论

本研究将与表层海水 pH 显著相关的理化参数作为建模参数,比较传统线性回归分析和 BP 神经网络算法在重建北太平洋表层海水 pH 值方面的能力。结论如下:

(1)两种方法对北太平洋表层海水 pH 值都有较好的重建能力,线性回归模型基于 SSS、Chl-*a*、 $p\text{CO}_2$ 模拟精度最佳,BP 神经网络模型基于 SST、SSS、Chl-*a*、 $p\text{CO}_2$ 模拟精度最佳。

(2)对比两种最佳模型的 RMSE 和拟合系数发现,BP 神经网络模型优于线性回归模型,而且在四季都有很强的适用性。

(3)表层海水 pH 值受多种环境因子的综合影响,与 $p\text{CO}_2$ 、SST 呈现负相关,与 SSS、Chl-*a* 呈现正相关。应用本研究最佳模型分析北太平洋表层海水 pH 值的空间分布特征发现,冬季表层海水 pH 值整体高于夏季,其中,冬季的海水 pH 在 $20^\circ \sim 48^\circ\text{N}$ 海域较高,西侧高于东侧,而夏季则是北侧和南侧海域较中部海域高,北侧最高。2016 年北太平洋表层海水 pH 的平均值约为 8.04,整体呈现西北高东南低的分布趋势。

(4)本文建立的模型在季节分布和空间分布上都与已有研究有很好的一致性,但由于近岸海域表层海水 pH 受到复杂的物理、化学和生物过程的影响,重建误差较大。除了本研究考虑到的 SST、SSS 和生产力因素外,还应该进一步探索利用营养物质浓度、上升流、ENSO 等参数参与建模。

参考文献:

- [1] 陈清华, 彭海君. 海洋酸化的生态危害研究进展[J]. 科技导报, 2009, 27(19): 108-111.
- [2] 郭景腾. 15 万年来热带西太平洋表层 pH 和 $p\text{CO}_2$ 演化及其影响因素[D]. 青岛: 中国科学院大学(海洋研究所), 2015.
- [3] 陈烈庭, 吴仁广. 太平洋各区海温异常对中国东部夏季雨带类型的共同影响[J]. 大气科学, 1998, 22(5): 718-726.
- [4] HUANG H C, FENG R D, ZHU J, et al. Prediction of pH value by multi-classification in the Weizhou island area[J]. Sensors, 2019, 19(18): 3875.
- [5] GONSKI S F, HORWITH M J, ALBERTSON S, et al. Monitoring ocean acidification within state borders: lessons from Washington State (USA)[J]. Coastal Management, 2021, 49(5): 487-509.
- [6] 於维樱, 张灿影, 冯志纲, 等. 全球海洋酸化研究态势与最新进展分析[J]. 海洋科学集刊, 2016: 296-307.
- [7] 贺仕昌, 张远辉, 陈立奇, 等. 海洋酸化研究进展[J]. 海洋科学, 2014, 38(6): 85-93.
- [8] 唐启升, 陈镇东, 余克服, 等. 海洋酸化及其与海洋生物及生态系统的关系[J]. 科学通报, 2013, 58(14): 1307-1314.
- [9] 李福荣. 1985 年 8 月黄河口邻近海区海水 pH 的分布特征及影响因素[J]. 海洋湖沼通报, 1988(4): 33-38.
- [10] 石强, 杨鹏金, 霍素霞, 等. 近 36 年来渤海海水酸化进程[C]//2013 中国环境科学学会学术年会浦华环保优秀论文集. 昆明: 中国环境科学学会, 2013: 114-121.
- [11] 杨顶田, 单秀娟, 刘素敏, 等. 三亚湾近 10 年 pH 的时空变化特征及对珊瑚礁石影响分析[J]. 南方水产科学, 2013, 9(1): 1-7.
- [12] CHEN Q H, PENG H J. Ecological impact of ocean acidification[J]. Science & Technology Review, 2009, 27(19): 108-111.
- [13] GUO J T. The variations and controls of sea surface pH and $p\text{CO}_2$ in the tropical western Pacific during the last 150 Ka[D]. Qingdao: University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Oceanography), 2015.
- [14] CHEN L T, WU R G. The joint effects of SST anomalies over different pacific regions on summer rainbelt patterns in eastern China[J]. Scientia Atmospherica Sinica, 1998, 22(5): 718-726.
- [15] YU W Y, ZHANG C Y, FENG Z G, et al. Bibliometric analysis on research trends and latest developments of global ocean acidification[J]. Studia Marina Sinica, 2016: 296-307.
- [16] HE S C, ZHANG Y H, CHEN L Q, et al. Advances in the studies of ocean acidification[J]. Marine Science, 2014, 38(6): 85-93.
- [17] TANG Q S, CHEN Z D, YU K F, et al. The effects of ocean acidification on marine organisms and ecosystem[J]. Chinese Science Bulletin, 2013, 58(14): 1307-1314.
- [18] SHI Q, YANG P J, HUO S X, et al. Process of seawater acidification in Bohai Sea in recent 36 years[C]//2013, Academic Annual Meeting of the Chinese Society of Environmental Sciences. Kunming: China Society of Environmental Sciences, 2013: 114-121.
- [19] YANG D T, SHAN X J, LIU S M, et al. Spatial and temporal distribution of pH in Sanya Bay in recent 10 years and its effects

- on coral reef[J]. South China Fisheries Science, 2013, 9(1): 1-7.
- [12] NAKANO Y, WATANABE Y W. Reconstruction of pH in the surface seawater over the North Pacific basin for all seasons using temperature and chlorophyll-a[J]. Journal of Oceanography, 2005, 61(4): 673-680.
- [13] ALIN S R, FEELY R A, DICKSON A G, et al. Robust empirical relationships for estimating the carbonate system in the southern California Current System and application to CalCOFI hydrographic cruise data (2005-2011)[J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 2012, 117(C5): C05033.
- [14] LI B F, WATANABE Y W, YAMAGUCHI A. Spatiotemporal distribution of seawater pH in the North Pacific subpolar region by using the parameterization technique[J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 2016, 121(5): 3435-3449.
- [15] SRIDEVI B, SARMA V V S S. Role of river discharge and warming on ocean acidification and $p\text{CO}_2$ levels in the Bay of Bengal[J]. Tellus B: Chemical and Physical Meteorology, 2021, 73(1): 1971924.
- [16] WOOTTON J T, PFISTER C A, FORESTER J D. Dynamic patterns and ecological impacts of declining ocean pH in a high-resolution multi-year dataset[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2008, 105(48): 18848-18853.
- [17] GREGOR L, GRUBER N. OceanSODA-ETHZ: a global gridded data set of the surface ocean carbonate system for seasonal to decadal studies of ocean acidification[J]. Earth System Science Data, 2021, 13(2): 777-808.
- [18] 郭燕娟, 杨修群. 全球海气系统年际和年代际变化的时空特征分析[J]. 气象科学, 2002, 22(2): 127-138.
- GUO Y J, YANG X Q. Temporal and spatial characteristics of interannual and interdecadal variations in the global ocean-atmosphere system[J]. Scientia Meteorologica Sinica, 2002, 22(2): 127-138.
- [19] FRIEDRICH T, OSCHLIES A. Neural network-based estimates of North Atlantic surface $p\text{CO}_2$ from satellite data: A methodological study[J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 2009, 114(C3): C03020.
- [20] LARUELLE G G, LANDSCHÜTZER P, GRUBER N, et al. Global high-resolution monthly $p\text{CO}_2$ climatology for the coastal ocean derived from neural network interpolation[J]. Biogeosciences, 2017, 14(19): 4545-4561.
- [21] BOSTOCK H C, FLETALHER S E M, WILLIAMS M J M. Estimating carbonate parameters from hydrographic data for the intermediate and deep waters of the Southern Hemisphere oceans [J]. Biogeosciences, 2013, 10(10): 6199-6213.
- [22] SASSE T P, MCNEIL B I, ABRAMOWITZ G. A novel method for diagnosing seasonal to inter-annual surface ocean carbon dynamics from bottle data using neural networks[J]. Biogeosciences, 2013, 10(6): 4319-4340.
- [23] VELO A, PÉREZ F F, TANHUA T, et al. Total alkalinity estimation using MLR and neural network techniques[J]. Journal of Marine Systems, 2013, 111-112: 11-18.
- [24] DESPORTES C, GARRIC G, RÉGNIER C, et al. Quality information document for global ocean reanalysis multi-model ensemble products GREP[EB/OL]. (2019-01). <https://catalogue.marine.copernicus.eu/documents/QUID/CMEMS-GLO-QUID-001-031.pdf>.
- [25] LAMOUROUX J, PERRUCHE C, MIGNOT A, et al. Quality information document for global biogeochemical analysis and forecast product[EB/OL]. (2019-04-19). <https://catalogue.marine.copernicus.eu/documents/QUID/CMEMS-GLO-QUID-001-028.pdf>.
- [26] LO MONACO C, METZL N, FIN J, et al. Distribution and long-term change of the sea surface carbonate system in the Mozambique Channel (1963-2019)[J]. Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography, 2021, 186-188: 104936.
- [27] 张景阳, 潘光友. 多元线性回归与 BP 神经网络预测模型对比与运用研究[J]. 昆明理工大学学报(自然科学版), 2013, 38(6): 61-67.
- ZHANG J Y, PAN G Y. Comparison and application of multiple regression and BP neural network prediction model[J]. Journal of Kunming University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2013, 38(6): 61-67.
- [28] 张玉超, 钱新, 钱瑜, 等. 基于机器学习方法的太湖叶绿素 a 定量遥感研究[J]. 环境科学, 2009, 30(5): 1321-1328.
- ZHANG Y C, QIAN X, QIAN Y, et al. Quantitative retrieval of chlorophyll a concentration in Taihu Lake using machine learning methods[J]. Environmental Science, 2009, 30(5): 1321-1328.
- [29] DUARTE C M, HENDRIKS I E, MOORE T S, et al. Is ocean acidification an open-ocean syndrome? Understanding anthropogenic impacts on seawater pH[J]. Estuaries and Coasts, 2013, 36(2): 221-236.
- [30] MIDORIKAWA T, ISHII M, SAITO S, et al. Decreasing pH trend estimated from 25-yr time series of carbonate parameters in the western North Pacific[J]. Tellus B: Chemical and Physical Meteorology, 2010, 62(5): 649-659.
- [31] BATES N R, BEST M H P, NEELY K, et al. Detecting anthropogenic carbon dioxide uptake and ocean acidification in the North Atlantic Ocean[J]. Biogeosciences, 2012, 9(7): 2509-2522.
- [32] RAVEN J, CALDEIRA K, ELDERFIELD H, et al. Ocean acidification due to increasing atmospheric carbon dioxide[M]. London: The Royal Society, 2005: 5-13.
- [33] ZEEBE R E. History of seawater carbonate chemistry, atmospheric CO_2 , and ocean acidification[J]. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 2012, 40: 141-165.
- [34] 肖征霖. 楚科奇海与北欧海海洋酸化研究[D]. 厦门: 国家海洋局第三海洋研究所, 2015.
- XIAO Z L. Study on ocean acidification at the Chukchi sea and the Nordic Sea[D]. Xiamen: Third Institute of Oceanography, MNR, 2015.
- [35] DENG X W, CHEN J, LARS-ANDERS H, et al. Eco-chemical

- mechanisms govern phytoplankton emissions of dimethylsulfide in global surface waters[J]. *National Science Review*, 2021, 8(2): 38-45.
- [36] 季轩梁. 西北太平洋海洋生态系统碳循环数值模拟研究[D]. 北京: 国家海洋环境预报中心, 2013.
- JI X L. Numerical study of marine ecosystem and carbon numerical study of marine ecosystem and carbon[D]. Beijing: National Marine Environmental Forecasting Center, 2013.
- [37] JIANG L Q, CARTER B R, FEELY R A, et al. Surface ocean pH and buffer capacity: past, present and future[J]. *Scientific Reports*, 2019, 9(1): 18624.
- [38] TAKAHASHI T, SUTHERLAND S C, CHIPMAN D W, et al. Climatological distributions of pH, $p\text{CO}_2$, total CO_2 , alkalinity, and CaCO_3 saturation in the global surface ocean, and temporal changes at selected locations[J]. *Marine Chemistry*, 2014, 164: 95-125.
- [39] DUARTE C M, HENDRIKS I E, MOORE T S, et al. Is ocean acidification an open-ocean syndrome? Understanding anthropogenic impacts on seawater pH[J]. *Estuaries and Coasts*, 2013, 36(2): 221-236.
- [40] 曲宝晓, 宋金明, 李学刚. 海洋酸化之时间序列研究进展[J]. *海洋通报*, 2020, 39(3): 281-290.
- QU B X, SONG J M, LI X G. Advances in ocean acidification time-series studies[J]. *Marine Science Bulletin*, 2020, 39(3): 281-290.
- [41] 陈雪霏, 韦刚健, 邓文峰, 等. 珊瑚礁海水 pH 变化及其对海洋酸化的意义[J]. *热带地理*, 2016, 36(1): 41-47.
- CHEN X F, WEI G J, DENG W F, et al. Reef water pH variation and its implications for ocean acidification[J]. *Tropical Geography*, 2016, 36(1): 41-47.

Reconstruction of pH value of the surface seawater in the North Pacific

WANG Jie^{1,2}, MAO Jingjing¹, LYU Yangyang¹, WANG Jie¹, LUAN Kuifeng^{1,2*}

(1. College of Marine Sciences, Shanghai Ocean University, Shanghai 201306, China; 2. Shanghai Engineering Research Center of Estuarine and Oceanographic Mapping, Shanghai 201306, China)

Abstract: Based on the data of sea surface temperature (SST), sea surface salinity (SSS), chlorophyll-*a* (Chl-*a*) concentration and carbon dioxide partial pressure ($p\text{CO}_2$) in the North Pacific from 1993 to 2018, a prediction model for the pH value of surface seawater in the North Pacific is established using the traditional linear regression and the BP neural network algorithm. The results show that the two methods have good consistency for the reconstruction of the pH value of the surface seawater in the North Pacific. The linear regression model is of the best performance based on the parameters of SSS, Chl-*a*, $p\text{CO}_2$, and the BP neural network model is of the best performance based on the parameters of SST, SSS, Chl-*a* and $p\text{CO}_2$. Comparing the root mean square error and fitting coefficient of the two best models, it is found that the BP neural network model is better than the linear regression model. In addition, the applicability of the best BP neural network model in spring, summer, autumn and winter is much higher than that of the best linear regression model. The pH value of surface seawater is affected by many factors, which shows a negative correlation with $p\text{CO}_2$ and SST and a positive correlation with SSS and Chl-*a*. Using the best BP neural network model to reconstruct the surface seawater pH value in the North Pacific, it is found that the prediction results of the model are in good agreement with the existing research, Copernicus Marine Environment Monitoring Service data and the measured site data. The pH value of the surface seawater in winter is higher than that in summer with the overall trend being higher in the northwest and lower in the southeast.

Key words: linear regression; BP neural network; surface seawater pH; model; reconstruction