

基于高光谱热红外发射率光谱的地表岩石 CaO 含量定量估计

张立福^{1,2}, 张学文², 黄照强³, 杨 杭², 张飞舟^{1*}

1. 北京大学地球与空间科学学院, 北京 100871

2. 中国科学院 遥感应用研究所, 遥感科学国家重点实验室, 北京 100101

3. 中国冶金地质总局矿产资源研究院, 北京 100025

摘 要 通过对西藏冈底斯山东段 23 种岩石固体样本的野外发射率光谱测量, 分别分析了这些样本的 CaO 含量与热红外发射率原始光谱和一阶微分光谱的相关关系。在此基础上, 建立了几种典型的回归模型, 并对各种建模结果进行了比较。结果表明, 利用高光谱热红外发射率光谱反演地表岩石 CaO 的含量是可行的; 地表岩石 CaO 含量与热红外发射率光谱特征之间有良好的对应关系; 在 10.3~13 μm 波长范围内, 岩石的发射率随 CaO 的含量增加而降低; 相比原始发射率光谱, 一阶微分光谱具有更好的预测效果。结果为遥感岩矿识别提供了一种新的思路。

关键词 发射率光谱; 高光谱热红外; CaO 含量

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2011)11-2940-04

引 言

在遥感应用领域, 8~14 μm 的热红外波段是重要的大气窗口, 在这个波段范围内, 许多造岩矿物都具有各自的选择性发射特征^[1]。这些特征光谱是利用热红外遥感技术提取和识别岩石和矿物信息的理论基础^[2-5]。通过热红外光谱数据, 能够很容易的识别硅酸盐、硫酸盐、碳酸盐、磷酸盐、氧化物、氢氧化物等矿物^[6, 7]。

在地表岩石成分定量反演方面, 岩矿中 SiO_2 含量与发射率光谱的相关性较好, 国内外学者利用热红外遥感进行岩矿 SiO_2 含量反演研究有较多报道^[8, 9], 但是 CaO 的研究尚未见报道。本文通过对西藏冈底斯山东段 23 种岩石固体样本的野外发射率光谱测量, 尝试寻找岩矿中 CaO 的含量与高光谱发射率的相关关系, 研究利用高光谱热红外发射率反演岩石中 CaO 含量的能力, 为遥感岩矿识别提供一种新的思路。

1 岩石发射率光谱的野外测量

1.1 原理与方法

不考虑发射率的方向性, 在地表观测到目标的辐射亮度是目标自身的热辐射加上目标反射的大气下行辐射, 表达公

式为

$$L_{\text{grn}}(\lambda) = \epsilon(\lambda)B(\lambda, T) + (1 - \epsilon(\lambda))L_{\text{atm}}^{\downarrow}(\lambda) \quad (1)$$

式中, λ 为测量的波长, $\epsilon(\lambda)$ 为目标发射率, $B(\lambda, T)$ 为目标温度为 T 时的普朗克黑体辐射亮度, $L_{\text{atm}}^{\downarrow}(\lambda)$ 为大气下行辐射。

假设大气下行辐射和目标温度已知, 发射率的计算式为

$$\epsilon(\lambda) = \frac{L_{\text{grn}}(\lambda) - L_{\text{atm}}^{\downarrow}(\lambda)}{B(\lambda, T) - L_{\text{atm}}^{\downarrow}(\lambda)} \quad (2)$$

由上式可知, 发射率测量过程中需要解决的两个关键问题, 一是大气下行辐射的精确测量, 二是物体表面温度的精确测量。

1.2 野外岩石辐射亮度测量

本实验光谱测量采用 BOMEN MR304 Fourier transform infrared(FTIR)高精度光谱辐射计。该辐射计的波段范围为 0.75~19.5 μm , 光谱分辨率分别为 1 cm^{-1} 。对应于近红外、中红外和热红外波段有两个探测器, 均采用液氮制冷, 定标后的噪声等效辐射亮度在 8~14 μm 优于 $2.0 \times 10^{-4} \text{ W}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \mu\text{m})$ 。

大气下行辐射采用 57°的天顶角直接测量的大气下行辐射来近似, 文献^[1, 10]表明这种方式获取的结果与同步探空数据具有很好的一致性, 可以满足精度要求。物体表面温度采用红外温度计测量, 测量的精度优于 0.1 K。为了野外测量的方便, 采用冷水和热水进行定标。

收稿日期: 2011-01-11, 修订日期: 2011-05-22

基金项目: 国家(863 计划)重点项目(2008AA121102, 2008AA121103)和国家自然科学基金项目(41072248)资助

作者简介: 张立福, 1967 年生, 中国科学院遥感应用研究所研究员 e-mail: zhanglf@irsa.ac.cn

* 通讯联系人 e-mail: zhangfz@pku.edu.cn

1.3 温度与发射率分离

由红外传感器的辐射测量值分离温度和发射率在本质上是一个病态反演问题。在 N 个波段上的测量，总存在 $N+1$ 个未知量(1 个地表温度和 N 个波段的发射率值)，形成的方程组不完备。为了解决这一病态问题，必须采取一定的策略，在某种假设的前提下组成 $N+1$ 个方程，使方程组完备从而解得温度和发射率。本文针对热红外高光谱测量数据，基于光谱平滑迭代算法(iterative spectrally smooth temperature-emissivity separation, ISSTES)对温度和高光谱发射率进行了分离反演。

该算法的基本思想^[11]：对于高光谱数据而言，地表的发射率光谱要比大气下行辐射平滑，定义一个衡量光谱曲线平滑程度的平滑指数，给定一个温度变化范围，通过不断调整优化温度，使得到的发射率曲线达到最平滑，此时的温度就是目标温度的最佳估值，再由式(2)得到目标的发射率光谱。

2 相关分析

为了研究岩石 CaO 含量与热红外发射率光谱的相关关系，实验在西藏冈底斯山东段采集了 23 种不同岩矿，涵盖岩浆岩、变质岩和沉积岩等三大岩类，通过野外辐亮度测量，反演其发射率光谱，并利用 X 射线荧光光谱法等测定其化学成分含量。

图 1 为不同 CaO 含量的岩石野外实际测量的发射率光谱曲线。由图 1 可见，在 10.3~13 μm 波长范围内，岩石的发射率随 CaO 含量的增加而降低。为了定量研究岩石 CaO 含量与发射率光谱的相互关系，进行了如下相关分析和回归分析。

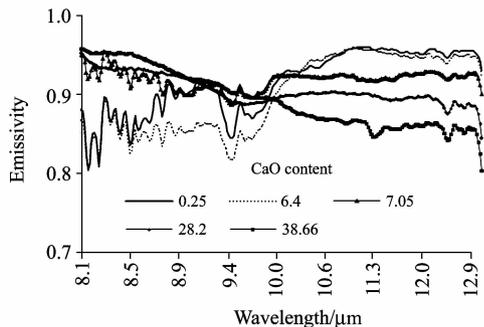


Fig. 1 Emissivity spectra of rocks with different CaO content

2.1 发射率光谱与岩矿 CaO 含量的相关关系

实验对 8~14 μm 波长范围内每个波段都计算了发射率光谱与 CaO 含量的相关系数。图 2 是相关系数的计算结果。结果显示在 11~11.45 μm 内，原始发射率光谱与 CaO 含量有较高的相关系数，其绝对值接近 0.8。

2.2 一阶微分光谱与岩矿 CaO 含量的相关关系

为了进一步揭示发射率光谱与 CaO 含量之间的相关关系，在计算了发射率光谱的一阶微分之后，进行了与原始光谱类似的相关分析，结果如图 3 所示。对微分光谱的分析表明，一阶微分处理可以去除线性或接近线性的背景、噪声对

目标光谱的影响，有效的提高了相关系数。这说明一阶微分光谱在一些特征波段处估计 CaO 含量时具有高的窄波段的预测能力。一阶微分光谱的近似计算方法如下^[12]

$$\epsilon(\lambda_i) = [\epsilon(\lambda_{i+1}) - \epsilon(\lambda_{i-1})] / 2\Delta\lambda \quad (3)$$

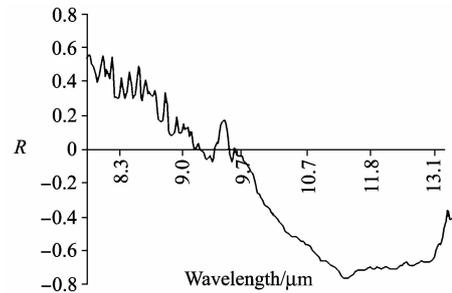


Fig. 2 Correlation of CaO content and emissivity spectra

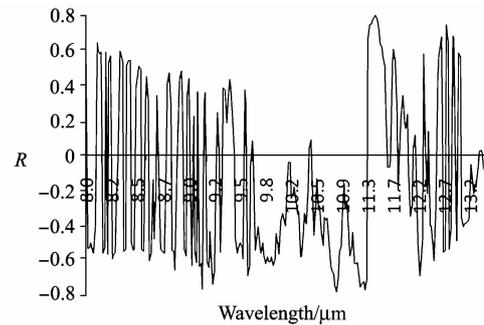


Fig. 3 Correlation of the CaO content and the first derivative of emissivity spectra

3 回归分析

在相关分析的基础上，为了定量估计地表岩石 CaO 含量，建立地表岩石 CaO 含量的预测模型，将 CaO 含量与发射率光谱进行了回归分析。为了寻找最优的预测模型，运用多种典型的回归方法进行建模，并对建模结果进行了比较。

在训练样本集上，利用 SPSS 软件，运用 Wilks' lambda 逐步法选择与 CaO 含量相关的发射率特征波段。然后在选定特征波长的基础上，进行多元逐步回归分析(MLR)、主成分分析(PCR)和偏最小二乘回归分析(PLSR)。原始发射率光谱入选的特征波段分别为(按波段入选顺序)：11.28, 11.23 和 8.23 μm ，一阶微分光谱有四个波段入选：11.40, 10.76, 10.90 和 11.53 μm ，与图 2 和图 3 有较好的一致性。

不同模型的回归方程如表 1 所示，以实测的 CaO 含量为横坐标，以预测值为纵坐标，不同模型的预测结果如图 4—图 6 所示。几个模型都通过对模型线性的 F 检验和对每个回归系数的 t 检验，每个模型的决定系数也相当高。

对于原始发射率光谱数据，在 MLR 模型中，波长 11.23 μm 处的回归系数与其相关系数的符号相反，可知此 3 个波段间存在着严重的多重相关性，虽然相关系数较高，但不适用预测。PCR 模型和 PLSR 模型与 MLR 模型相比，其回归模型的相关系数虽然有所降低，但在 11.23 μm 处，已经不

Table 1 Regression coefficients of models

Model	Emissivity spectra			The first derivative spectra			
	11.28 μm	11.23 μm	8.23 μm	11.4 μm	10.76 μm	10.9 μm	11.53 μm
MLR	-2 720	2 635	33.664	3 732	-8 879	6 081	-5 942
PCR	-53.592	-52.837	51.092	1 587	-6 030	4 146	-3 147
PLSR	-54.316	-52.043	51.17	3 530	-9 037	6 410	-5 220

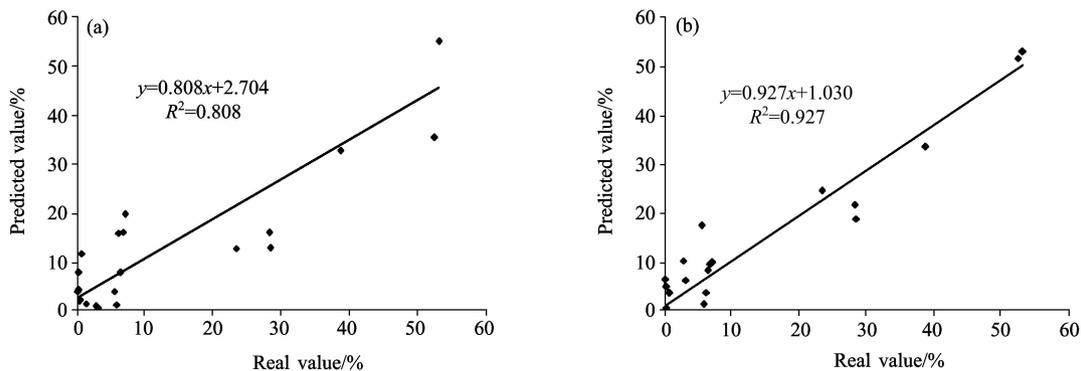


Fig. 4 Relationship between the real CaO contents and the predicted values by MLR

(a): Emissivity spectra; (b): First derivative spectra

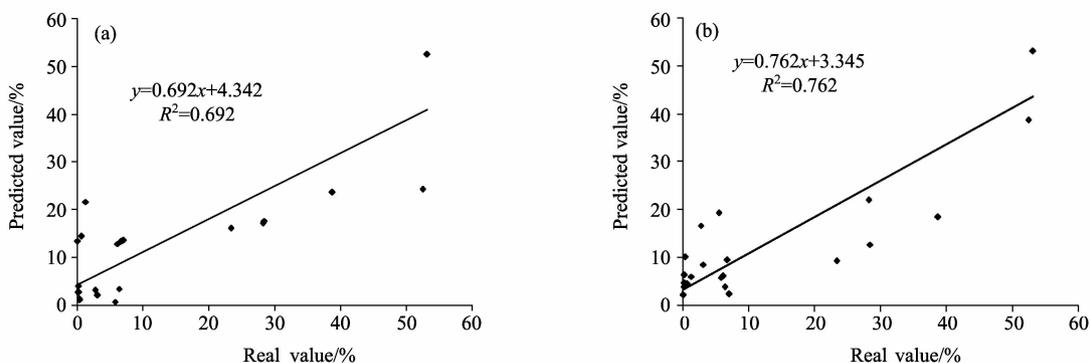


Fig. 5 Relationship between real CaO contents and the predicted value by PCR

(a): Emissivity spectra; (b): First derivative spectra

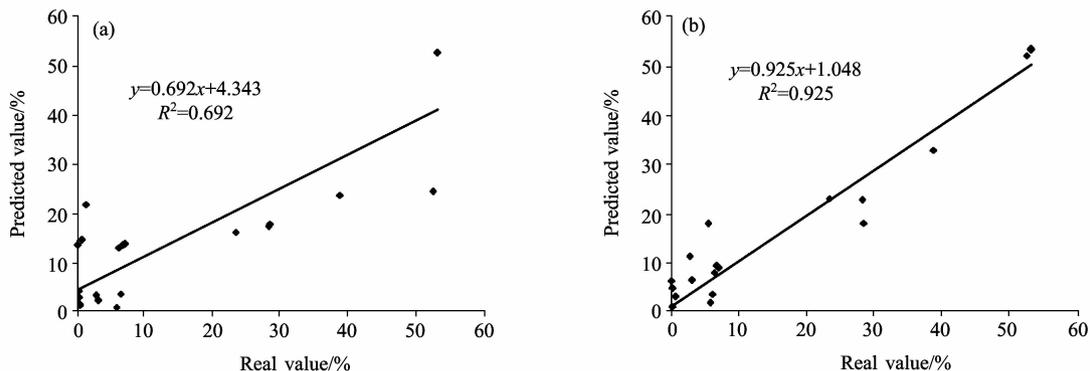


Fig. 6 Relationship between real CaO contents and the predicted value by PLSR

(a): Emissivity spectra; (b): First derivative spectra

存在符号相反的现象,说明模型已经消除了多重相关性的影响,具有较好的预测效果。PCR模型和PLSR模型更适合处

理具有多重相关性的原始光谱数据。

对于一阶微分光谱,全部模型的预测效果比原始光谱有

大幅度的提高,其中 MLR 模型和 PLSR 模型与 PCR 模型相比,预测效果提高更为明显,且决定系数几乎相等。这说明对于一阶微分光谱,MLR 模型和 PLSR 模型具有相同的预测效果。

4 结 论

通过对 23 种岩石固体样品的野外发射率光谱测量,分别分析了这些样品的 CaO 含量与热红外发射率原始光谱和一阶微分光谱的相关关系。结果表明,利用高光谱热红外发射率光谱反演地表岩石 CaO 的含量是可行的,地表岩石 CaO

含量与热红外发射率光谱特征之间有良好的对应关系;在 10.3~13 μm 波长范围内,岩石的发射率随 CaO 的含量增加而降低。结果为遥感岩矿识别提供了一种新的思路。

通过几种典型的回归模型,对各种建模结果进行了比较。分析结果表明,PCR 模型和 PLSR 模型更适合处理未做微分处理的光谱数据,对于一阶微分光谱,MLR 模型和 PLSR 模型比 PCR 模型预测效果更好。

一些高光谱数据的处理方法能够改善 CaO 含量的预测精度。一阶微分处理的数据产生的预测精度与未做微分处理的数据产生的精度差异是明显的。相比原始发射率光谱,一阶微分光谱具有更好的预测效果。

References

- [1] TIAN Guo-liang(田国良). Thermal Remote Sensing(热红外遥感). Beijing: Publishing House of Electronics Industry(北京:电子工业出版社), 2006.
- [2] Salisbury J W, D'Aria D M. Remote Sensing of Environment, 1992, 42: 83.
- [3] Lee R J, King P L, Ramsey M S. Journal of Geophysical Research, 2010, 115: B06202.
- [4] Aboelkhair H, Ninomiya Y, Watanabe Y, et al. Journal of African Earth Sciences, 2010, 58: 141.
- [5] Gabra S, Ghulamb A, Kusky T. Ore Geology Reviews, 2010, 38: 59.
- [6] Hecker C, van der Meijde M, van der Meer F D. Earth-Science Reviews, 2010, 103: 60.
- [7] Cooper B L, Salisbury J W, Killen R M, et al. Journal of Geophysical Research, 2002, 107(E4): 1.
- [8] YAN Bo-kun, LIU Sheng-wei, WANG Run-sheng(闫柏琨, 刘圣伟, 王润生). Geological Bulletin of China(地质通报), 2006, 25(5): 639.
- [9] Ninomiya Y, Fu B, Cudahy T J. Remote Sensing of Environment, 2005, 99: 127.
- [10] XIAO Qing, LIU Qin-huo, LI Xiao-wen, et al(肖青, 柳钦火, 李小文, 等). Journal of Infrared and Millimeter Waves(红外与毫米波学报), 2003, 22: 372.
- [11] Ingram P M, Henry M A. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2001, 39(10): 2158.
- [12] ZHANG Liang-pei, ZHANG Li-fu(张良培, 张立福). Hyperspectral Remote Sensing(高光谱遥感). Wuhan: Wuhan University Press(武汉:武汉大学出版社), 2005.

Quantitative Estimation of CaO Content in Surface Rocks Using Hyperspectral Thermal Infrared Emissivity

ZHANG Li-fu^{1, 2}, ZHANG Xue-wen², HUANG Zhao-qiang³, YANG Hang², ZHANG Fei-zhou^{1*}

1. School of Earth and Space Sciences, Peking University, Beijing 100871, China

2. The State Key Laboratory of Remote Sensing Sciences, Institute of Remote Sensing Applications, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China

3. Institute of Mineral Resources, China Metallurgic Geology Bureau, Beijing 100025, China

Abstract The objective of the present paper is to study the quantitative relationship between the CaO content and the thermal infrared emissivity spectra. The surface spectral emissivity of 23 solid rocks samples were measured in the field and the first derivative of the spectral emissivity was also calculated. Multiple linear regression (MLR), principal component analysis (PCR) and partial least squares regression (PLSR) were modeled and the regression results were compared. The results show that there is a good relationship between CaO content and thermal emissivity spectra features; emissivities become lower when CaO content increases in the 10.3~13 mm region; the first derivative spectra have a better predictive ability compared to the original emissivity spectra.

Keywords Emissivity spectra; Hyperspectral thermal infrared; CaO content

* Corresponding author

(Received Jan. 11, 2011; accepted May 22, 2011)