

分类号_____

密级_____

UDC _____

编号_____

中国科学院研究生院

博士学位论文

面向地面热红外成像光谱系统的岩矿组分精细识别研究

张学文

指导教师 童庆禧 院 士 中国科学院遥感应用研究所

王晋年 研究员 中国科学院遥感应用研究所

张立福 研究员 中国科学院遥感应用研究所

申请学位级别 理学博士 学科专业名称 地图学与地理信息系统

论文提交日期 2012 年 4 月 论文答辩日期 2012 年 5 月

培养单位 中国科学院遥感应用研究所

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席：_____

Ph.D Dissertation

**Study on Fine Determination of Rock-Mineral Components for
Thermal Infrared Field Imaging Spectrometer System**

By

Zhang Xuewen

Supervisor: Prof. Tong Qingxi

Prof. Wang Jinnian

Prof. Zhang Lifu

**A dissertation submitted in fulfillment
of the requirement for the degree of
Doctor of Philosophy**

in

Cartography and Geographical Information System

May 2012

中国科学院遥感应用研究所

学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明： 所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。论文中凡引用他人已经发表或未发表的成果、数据、观点等，均已明确注明出处。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

本声明的法律责任由本人承担。

论文作者签名： 日期： 年 月 日

学位论文使用授权说明

本人在导师指导下完成的论文，知识产权归属中国科学院遥感应用研究所。

本人完全了解中国科学院遥感应用研究所关于收集、保存、使用学位论文的规定，同意研究所保存或向国家有关部门及机构送交论文的印刷版和电子版，允许论文被查阅和借阅；同意授权研究所采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存和汇编本学位论文。

本人保证毕业后，以本论文数据和资料发表论文（著作）或使用论文工作成果时，第一署名单位为中国科学院遥感应用研究所，并征得导师同意。

保密论文在解密后遵守此规定。

论文作者签名： 导师签名：

日期： 年 月 日

摘 要

热红外成像光谱数据具有极其广泛的应用需求,特别是在地质领域具有不可替代的作用。目前国际上,美国、日本、加拿大等发达国家已开展了热红外成像光谱的应用研究。相对于星载/机载平台,地面热红外成像光谱仪大大拓宽了其应用领域,其仪器研制正方兴未艾。在可见光近红外波段,我国第一套地面成像光谱辐射测量系统(Filed Imaging Spectrometer System, FISS)研制成功并取得了诸多应用成果。为了进一步扩展 FISS 的应用范围,使之能够应用于地质领域,推动我国热红外成像光谱技术的进步,地面热红外成像光谱系统(Filed Imaging Spectrometer System - Thermal Infrared, FISS-TR)的研发被列入研究计划。

本文主要面向 FISS-TR,利用国内外已有岩石和矿物的热红外光谱库数据,开展了岩石组分及含量的精细识别模型研究,为 FISS-TR 的应用提供新方法,同时为 FISS-TR 成像光谱仪器的技术指标设计提供重要的技术支持。论文的主要工作及成果总结如下:

(1) 介绍了矿物发射光谱分类的原理,在包络线去除的基础上,定量研究了碳酸盐、硫酸盐和硅酸盐类矿物在热红外波段的发射光谱特征,包括吸收位置、吸收深度、吸收宽度、吸收面积和吸收对称性。

碳酸盐类矿物在热红外波段仅有一个很窄在强吸收谷,在 $11.3\mu\text{m}$ 左右。硫酸盐类矿物在 $8.5\text{-}9\mu\text{m}$ 的区间有一个明显的宽吸收带;硅酸盐类矿物的发射光谱特征比较复杂,不同结构的硅酸盐矿物发射光谱略有差异,总体表现为复杂的 Si-O 基团的振动,在 $8.5\sim 12.0\mu\text{m}$ 区间有强的吸收特征,一般具有多个吸收峰。

分析结果表明,同一类的矿物的热红外波段的发射光谱基本上是相似的,通过矿物的发射率光谱特征,可以对岩矿进行定性识别。

(2) 在岩石矿物组分精细识别算法研究方面,比较了最小二乘不同约束模型算法反演精度,提出了基于阈值的最小二乘线性解混算法(Threshold Constrained Least Squares, TCLS),从而可以更好地反演出岩石中的矿物端元及其含量。

在确定端元的情况下,TCLS 模型、无约束模型(Unconstrained Least Squares,

ULS) 和非负约束模型 (Abundance Nonnegativity Constraint, ANC) 具有相同的矿物丰度反演结果, 其反演精度比和 1 约束模型 (Abundance Sum-to-one Constraint, ASC) 和全约束模型 (Fully Constrained Least Squares, FCLS) 要高, 这可能是因为实际情况中, 岩石中的矿物端元并不完备, 强行将解得的矿物端元丰度和约束到 1, 反而会降低解的精度及可靠性。

在未知端元的情况下, TCLS 模型能够剔除微量矿物对端元识别的影响, 具有最优的矿物端元识别能力及丰度反演精度。在一定程度上, ULS 模型、ANC 模型、ASC 模型和 FSLC 模型也能识别矿物端元, 但其反演的端元数远多于岩石中实际含有的矿物, 降低了其丰度反演的精度。

(3) 结合实测发射光谱和数值模拟发射光谱, 研究了光谱分辨率、信噪比和包络线去除等因素对发射光谱识别矿物精度的影响。

随着光谱分辨率的降低, 矿物含量反演精度呈阶梯性降低, 其中 $0.177\mu\text{m}$ 的光谱分辨率是精度变化的重要分水岭。研究表明, 成像光谱仪器的最佳光谱分辨率约为 $0.177\mu\text{m}$, 波段数量最佳为 32 个, 为 FISS-TR 传感器的设计提供了重要的理论参考。

随着信噪比的降低, TCLS 模型反演的模型误差逐步增大。在已知端元的条件下, 信噪比对矿物丰度反演精度影响较小, 当信噪比为 30 时, 反演丰度最大误差 $<10\%$, 模型误差 $<5\%$; 在盲端元的条件下, 信噪比对端元识别及其丰度反演有较大影响, 当信噪比降低到 40 时, 岩石中含量较低的端元会难以识别。研究表明, 光谱数据的信噪比至少要达到 50, 才能够满足模型误差小于 1% 的精度要求, 为 FISS-TR 的信噪比参数设计提供重要参考依据。

在确定端元的情况下, 包络线去除算法可以用于矿物丰度反演。如果对岩石光谱经过包络线去除处理, 则矿物端元光谱同样要去除包络线, 其丰度反演精度最大误差小于 2%, 模型误差在 1% 左右。

关键字: 发射率; 矿物识别; 最小二乘; 地面热红外成像光谱系统

ABSTRACT

Thermal infrared imaging spectrometer has broad applications. Presently, several developed countries carried out the application study of thermal infrared imaging. Compared to the satellite / airborne platforms, field thermal infrared imaging spectrometer has more broaden applications, and its instrument development is in the ascendant. The first self-developed Filed Imaging Spectrometer System (FISS) is successfully developed in the visible/near-infrared region and gets some good application results. In order to further expand the application range of the FISS, to be applied to the geology, the plan about thermal infrared (FISS-TR) region is going to be developed.

To promote the FISS-TR on the development of rock and mineral identification, as well as to provide technical parameters of the instrument manufacturer, the dissertation carries out basic research on mineral end member and abundance determination using thermal infrared hyperspectral data. Main work and results are summarized as follows:

1. The mineral emission spectra classification principle is introduced. Based on the continuum removed, the characteristics of the emission spectra, including absorption position, absorption depth, absorption width, absorption area, and absorption symmetry, of the carbonate, sulphate and silicate minerals are quantitative studied in the thermal infrared bands.

Carbonate minerals have only a very narrow, strong absorption valley, around 11.3 μm in the thermal infrared band. Sulfate minerals have an obvious broad absorption features in the range 8.5~9 μm . The emission spectra features of the silicate minerals are more complex than others, which different structures of silicate minerals could display slightly different emission spectra features. Because of complex Si-O vibration, silicate minerals show strong absorption features in the 8.5 ~ 12.0 μm interval and have multiple absorption peaks.

The results show that the emission spectra of the same type of minerals in thermal infrared bands are basically similar. It is possible to identify the rock and mineral by analysis of mineral emissivity spectral features.

2. The dissertation studies the algorithm for recognition rock and determination of mineral composition, compares mineral inversion accuracy of the least squares algorithm using different constraint model, and presents the threshold constrained least squares linear unmixing algorithm (TCLS) which could retrieve mineral end member and their abundance better.

Under the condition of known end member mineral, TCLS model, ULS model and ANC model could obtain the same mineral abundance, the retrieval accuracy better than ASC model and FCLS model. This may be due to the fact that end member of rocks are not complete in reality. The abundance sum-to-one constraint might reduce the accuracy and reliability of the results.

In the case of the unknown end member, TCLS model can remove trace mineral end member obstruction, identify end member mineral and get optimal abundance inversion accuracy. ULS model, ANC model, ASC model and the FSLC model can also identify the mineral end member, but inversion end member are far more than the mineral contained in rock, as well as reduce the accuracy of the mineral abundance.

3. With combination of the measured spectra and numerical simulation spectra, the impact of the spectral resolution, signal-to-noise ratio (SNR) and continuum removal on determination of mineral in thermal infrared band have been studied, respectively.

The lower spectral resolution is, the worse retrieval results of mineral end member and abundance are obtained. In the case of unknown end members, TCLS model can correctly identify the mineral end member and its model difference vary small with spectral resolution declining from 279 bands ($0.021\mu\text{m}$) to 32 bands ($0.177\mu\text{m}$). When the spectral resolution is less than to 32 bands, model difference increases fast, and results of identification of the mineral become incorrect. So, 32

bands can be taken as reference for design of FISS-TR sensor.

With the SNR declining, the model retrieval error becomes higher. When SNR reaches 30, the maximum error of the abundance is less than 10%, model error is less than 5%. If the end member is unknown, SNR impacts on inversion accuracy more seriously. While SNR equals 40, it is difficult to identify the mineral end member. The results show that in order to meet the model error less than 1%, the SNR of the data could achieve 50 at least. It is important for FISS-TR to design SNR parameter.

In the case of known end member, the continuum removal algorithm can be used for mineral abundance inversion. If rock spectrum is preprocessed by continuum removal, the mineral spectrum also needs to be. The maximum error of abundance is less than 2%; the model error is about 1%.

Key words: Emissivity; Mineral Determination; Least Squares; FISS-TR

目 录

摘 要.....	I
ABSTRACT	III
目 录.....	VI
第一章 绪论.....	1
1.1 研究背景	1
1.2 国内外研究现状	4
1.2.1 热红外成像光谱仪研究现状	4
1.2.2 岩石矿物的发射率光谱研究现状	7
1.2.3 发射率在岩矿识别中的应用研究现状	14
1.3 主要研究内容和技术路线	17
1.3.1 研究内容.....	17
1.3.2 技术路线.....	17
1.4 本文的数据源	18
1.5 论文的组织结构	19
第二章 热红外高光谱岩矿识别基础	21
2.1 热红外遥感的基本概念	21
2.2 黑体辐射	23
2.3 热红外成像光谱数据发射率反演.....	25
2.4 岩矿概述	30
2.5 岩矿的发射理论基础	31
第三章 热红外波段常见矿物类的发射光谱特征研究	35
3.1 矿物发射光谱分类	35
3.2 矿物的发射光谱特征参数	37
3.3 常见矿物的热红外波段发射光谱特征分析.....	39
3.3.1 发射光谱包络线去除	40
3.3.2 发射光谱特征定量分析	42
3.4 本章小结	55
第四章 基于阈值的最小二乘线性解混及岩矿组分识别研究	57
4.1 岩矿的发射光谱解混研究	57
4.2 基于阈值的最小二乘线性解混算法研究.....	59
4.2.1 传统发射率光谱解混的不足	59
4.2.2 算法改进及流程.....	60
4.2.3 算法精度分析.....	62
4.3 岩石光谱线性解混与矿物含量提取.....	64
4.3.1 酸性火成岩	64

4.3.2 基性火成岩	71
4.3.3 流纹岩	75
4.3.4 超基性火成岩	80
4.4 本章小结	83
第五章 基于发射光谱的矿物精细识别影响因素分析	85
5.1 光谱分辨率对矿物精细识别的影响	85
5.1.1 光谱分辨率的定义	85
5.1.2 光谱分辨率的数值模拟分析	86
5.1.3 不同光谱分辨率数据的矿物含量反演	88
5.2 信噪比对矿物精细识别的影响	91
5.2.1 不同信噪比数据的模拟	92
5.2.2 不同信噪比数据的矿物含量反演	93
5.3 包络线去除法对矿物精细识别的影响	98
5.4 本章小结	100
第六章 结论和展望	102
6.1 本文主要工作	102
6.2 创新点	104
6.3 问题与展望	104
参考文献	106
博士期间发表的论文	120
博士期间参加的科研活动及野外实验	121
致谢	122

第一章 绪论

1.1 研究背景

地质是成像光谱技术应用中最成功的领域之一(Vane 等, 1993)。地物的光谱特性是成像光谱遥感的基础, 遥感对岩性的识别依赖于岩石的光谱特征, 依据实测光谱、光谱库光谱或图像纯像元的光谱, 可以对岩石类型进行识别并提取定量信息(童庆禧等, 2006)。早在 20 世纪 80 年代, 在归纳各种地物光谱特征的基础上, Hunt (1980, 1989) 提出, 如果能实现连续的窄波段成像, 则可能实现地面矿物的直接识别。

经过多年的发展, 在可见光到短波红外谱段, 成像光谱遥感在地质领域的技术体系及方法已逐渐成熟并得到很好的推广应用。通过光谱分析技术, 本来在常规遥感中不能识别的地物, 在高光谱遥感中就能得到有效识别。高光谱遥感可识别矿物种类已达几十种 (Clark, 2003)。尽管取得明显成效, 可见光-短波遥感仍有其难以克服的缺点, 主要表现在两个方面: ①光谱区间有限。可见光到短波红外谱段 ($0.4\sim 2.5\mu\text{m}$) 反映的是矿物的反射光谱特征, 在此区间主要识别含羟基矿物基频振动的合频与倍频, 难以探测硅酸盐矿物的 Si-O 键振动光谱, 同时组成地球表面大部分岩石的阴离子如硅酸盐、碳酸盐、磷酸盐在这个区间缺少光谱特征(Gupta R. P, 2003), 对不含水造岩矿物也无法探测识别; ②在此光谱区间, 反射光谱表现为非线性混合, 混合特性极为复杂, 光谱解混与矿物含量反演难度很大(闫柏琨, 2006)。

热红外遥感 ($8\sim 14\mu\text{m}$) 在上述两个方面有独到优势: ①可以探测硅酸盐矿物 Si-O 键振动光谱, 以及 SO_4^{2-} 、 CO_3^{2-} 、 PO_4^{3-} 等原子基团基频振动及其微小变化, 容易识别地表的矿物成分, 包括硅酸盐 (包括不含水造岩矿物)、硫酸盐、碳酸盐、磷酸盐、粘土、火成岩和铁镁硅酸岩等 (Christensen, 2000b; Kahle 等, 1983; Sabine 等, 1994), 从而大大拓宽了遥感矿物识别的广度 (矿物大类) 与深度 (矿物种属); ②在该波段范围内, 矿物的发射光谱显示出线性可加性(Lyon,

1965; Gillespie, 1992; Crown, 1987; Thomson, 1993; Hamilton, 2000a), 从而避免了可见光-短波红外波段的光谱非线性混合的难题, 在光谱分辨率足够高的情况下, 对矿物进行线性解混, 从而可以精确提取矿物含量。

在早期的热红外波段地质应用研究中, 由于热红外图像都是宽谱带的单波段图像, 岩石热力学性质特别是热惯量的差异便成为其遥感探测的主要依据, 而对岩石发射光谱的差异信息却利用很小(丑晓伟, 2006)。研究方法主要是通过对热红外图像进行温度定标, 图像上每一灰阶均代表一定的温度范围, 色调的深浅主要反映地物的表面温度差异, 因而较多地应用于地热资源调查、水文地质调查和火山与地震预报等方面(Gillespie 等, 1986)。在岩性识别和找矿方面, 虽然利用岩矿热惯量和发射率的差异, 亦能将热惯量差异较大的岩石如白云岩和灰岩和发射率较高或有热量放出的矿种如煤矿和铀矿识别出来, 但由于其图像特征受地形、气候和成像时间等因素的影响较大, 以及单波段图像受光谱分辨率和图像处理方法的限制, 使其应用程度大大降低, 应用效果也不甚理想。

热红外多(高)光谱遥感数据源逐渐丰富为深入研究地物发射率特性及地质应用创造了条件。目前, 一批热红外多(高)光谱传感器已研制成功并投入运营, 从而为反演地物的发射率光谱并用于地物识别提供了条件。对地观测中有航空多光谱传感器 MASTER (MODIS/ASTER Airborne Simulator, Hook, 2001)、TIMS (Thermal Infrared Multispectral Scanner, Coll, 2003; Sabine, 1994; Hook, 1994)、SEBASS (Spatially Enhanced Broadband Array Spectrograph System, Hackwell, 1996; Kirkland, 2002)以及加拿大的 TASI (Thermal Airborne Spectrographic Image)。航天传感器有 MODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer, <http://modis.gsfc.nasa.gov/>)与 ASTER (Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer, Abrams, 2000; Kahle, 1991)。MODIS 虽然在热红外区间设置了几个波段, 但由于信噪比较低, 只能用于反演温度, 无法反演地表发射率。ASTER 热红外波段数据可用于反演地表发射率与温度。火星探测中热红外遥感也起到很大作用, 有 TES (Thermal Emission Spectrometer, Christensen, 1992) 高光谱传感器、THEMIS (Thermal Emission Imaging System, Smith, 2000) 多

光谱传感器。

与早期的热红外宽谱带单波段图像相比,热红外多光谱图像可直接探测岩石的成分信息,从而识别不同岩性(Ninomiya, 2002)。Hunt 等(Hunt and Salisbury, 1976c)对岩石发射光谱特征的研究表明,岩石在热红外发射光谱域的谱带特征均是由造岩矿物的原子振动内部振动、外部振动或晶格振动激发产生的。通过探测不同岩石的发射光谱特征,热红外多光谱遥感技术可以直接识别不同岩石的矿物成分信息,从而实现地质填图工作(Hamilton, 2000a; 2000b)。热红外多/高光谱技术的发展和广泛应用有可能使地质找矿以至地质找矿理论研究方法都发生重大变化。

以 SEBASS 和 ASTER 为代表的基于航空/航天平台的热红外多/高光谱技术在对地观测科学中的应用和研究开展的如火如荼之际,另一类基于地面或室内小型平台的热红外高光谱系统的研制也在悄然的开展着,随着应用领域的需求牵引,在国际上得到了高度的重视,除了可以继续服务于遥感的地面试验及研究外,弥补了航空航天热红外高光谱遥感的不足之处,并在其它领域得到了广泛的应用,与实际生活密切相关,展示了极大的商业化潜力,大大拓展了热红外高光谱技术的应用范围。无论与国际上该类系统相比,还是与我国热红外高光谱遥感技术应用相比,基于地面或室内小型平台的热红外高光谱成像系统研制则起步较晚,处于萌芽或者起步阶段。

为了促进国内有关地面波谱测量和航空成像光谱技术的进一步发展和完善,中国科学院遥感应用研究所和上海技术物理研究所中国自行研制的航空推扫成像光谱仪 PHI 为原型,联合研制了地面成像光谱辐射测量系统(Field Imaging Spectrometer System, FISS)(童庆禧等, 2010)。利用研制成功的 FISS 系统,进行了大量的室内和野外试验,取得了丰富的成果(黄长平等, 2011; 刘波等, 2010; 张学文等, 2011)。在此基础上,为了扩大 FISS 的应用范围,满足遥感地质研究的需要,中国科学院遥感应用研究所和上海技术物理研究所开展了 FISS 系统计划,将 FISS 系统从可见光近红外波段(Visual Near Infrared, FISS-VR)发展至短波红外(Shortwave Infrared, FISS-SR)和热红外波段(Thermal Infrared,

FISS-TR)。纵观国内外遥感地学应用研究,热红外高光谱遥感地质仍处于试验研究阶段,虽然取得一些研究成果,但未进入实用阶段,FISS-TR 的提出可以有力的推进我国在热红外遥感地质领域发展。

本文正是面向 FISS-TR 系统研发和应用研究不足的现状,基于精细矿物识别的需求,主要在以下两个方面展开工作。第一,系统定量研究了矿物的发射率光谱特性,利用国内外已有岩石和矿物的热红外光谱库数据,开展了岩石组分及含量的精细识别模型研究,为 FISS-TR 在矿物识别方面提供新方法,以推进热红外高光谱技术在基础地质、地质矿产资源评价等领域的深入应用;第二,分析和探讨了光谱分辨率和信噪比以及去包络线等因素对矿物识别的影响,为 FISS-TR 成像光谱仪器的技术指标设计、数据预处理提供重要的技术支持。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 热红外成像光谱仪研究现状

成像光谱技术的出现是遥感界的一场革命。自世界首台成像光谱仪 AIS-1 于 1983 年在美国研制成功,并在矿物填图、植被生化特征等研究方面取得了诸多成果,初显了高光谱遥感的魅力。在此后,许多国家先后研制了多种类型的成像光谱仪。如美国的 AVIRIS、DAIS,加拿大的 FLI、CASI/SASI/TASI,德国的 ROSIS,澳大利亚的 HyMap 等。经过近 30 年的发展,成像光谱仪已经成为机载/星载遥感中及其重要的仪器设备。

相比于可见近红外、短波红外波段,由于技术限制,热红外成像光谱仪的研制相对困难,但近年来已有了实质性发展。国际上,热红外成像光谱仪首先在航空平台获得了成功应用。美国研制的机载热红外成像光谱仪(AHS)在 $7.95\sim 13.14\mu\text{m}$ 波段范围内有 10 个波段。美国夏威夷大学研制的热红外成像光谱仪(airborne hyperspectral imager, AHI)在 $7.5\sim 11.7\mu\text{m}$ 波段范围内有不同的测量模式,光谱分辨率为 125nm 时有 32 个波段,当光谱分辨率为 100nm 时有 256 个波段,主要用来从空中探测地雷(薛永祺等,1991)。美国的 DAIS 数字式航空成像光谱仪在 $8\sim 14\mu\text{m}$ 波谱范围内有 6 个波段(Strobl 等,1997)。Coll 等(2001)

利用在西班牙 Barrax 农场获取的 DAIS 数据,研究了针对该数据的温度与比辐射率分离算法精度验证。Schmugge 等 (1998)将 DAIS 数据用于模拟星载数据的研究。美国能源部所属的橡树岭国家实验室 (Oak Ridge National Laboratory) 采用机载热红外成像光谱仪 (TIRIS) 进行化学成分检测、毒气探测、空气污染以及灾害应急监测。美国宇航公司研制的空间增强宽带阵列光谱仪系统 (SEBASS) 在热红外范围 $7.5\sim 13.5\mu\text{m}$ 有 128 个波段,并成功应用于发射率测量和矿物填图 (Vanghan, 2003)。芬兰的 LWIR 系列的热红外成像光谱仪在 $7.8 - 12.0 (13.0)\mu\text{m}$ 波谱范围内有 22 (30) 个波段, AisaOWL 在 $8.0 - 12.0\mu\text{m}$ 范围内有 84 个波段。加拿大的 ITRES 公司研制的热红外成像光谱仪 (Thermal Airborne Spectrographic Imager, TASI) 在航空成像光谱领域里拥有世界领先的性能和指标,在 $8\sim 11.5\mu\text{m}$ 内可同时获取 32 个波段的图像,在资源勘查、热异常检测、核电站环境监测、特定目标识别等众多方面有着广泛的应用前景。

随着航空热红外高光谱传感器的研制成功与广泛应用,航天热红外高光谱传感器研究也进入高潮, MODIS 与 ASTER 的成功发射表示热红外高光谱遥感开始进入实用阶段。MODIS 虽然在热红外区间设置了几个波段,但由于信噪比较低,只能用于反演温度,无法反演地表发射率。ASTER 热红外波段数据可用于反演地表发射率与温度。

我国热红外成像光谱技术起步晚,发展比较慢。上世纪 80 年代初根据我国海洋环境监测和森林探火的需求,研制发展了以红外和紫外波段以及以中波和长波红外为主体的航空专用扫描仪。80 年代中期,面向地质矿产资源勘探,又研制了工作在短波红外光谱区间 ($2.0\sim 2.5\mu\text{m}$) 的 6-8 波段细分红外光谱扫描仪 (FIMS) 和工作波段在 $8\sim 12\mu\text{m}$ 光谱范围的航空热红外多光谱扫描仪 (ATIMS)。在此基础上于 80 年代后期又研制和发展了新型模块化航空成像光谱仪 (MAIS)。MAIS 系统在可见-近红外-短波红外具有 64 波段,并可与 6-8 波段的热红外多光谱扫描仪集成使用,从而使其总波段达到 70-72 个。此后,我国又自行研制了更为先进的推扫式成像光谱仪 (PHI) 和实用型模块化成像光谱仪 (OMIS) 等,并在国内外得到多次应用。上海技术物理研究所研究的实用性模块化成像光谱仪 (OMIS) 在 $8\sim 12.5\mu\text{m}$ 范围内有 8 个波段。该仪器能提供定量化、标准化、数

数字化高光谱图像产品,广泛用于环境监测、植被长势和胁迫监测、农林资源制图、地质填图以及探矿等许多领域。

相对机载/星载热红外成像光谱技术的发展,地面热红外成像光谱技术研究相对滞后。虽然非成像的测量装置-傅立叶变换红外光谱仪在仪器分析领域中早已被人们广泛应用,是现代化分析实验室必备的常规仪器之一(周长玉, 2004; 翁诗甫, 2005)。但是地面成像光谱技术对于成像光谱的基础研究工作具有不可替代的作用,因此成为国内外研究的热点,法国的 DLK Spectro、美国的 Spectral Imaging Ltd 和英国的 PP Systems 等已有产品推出。美国的 Physical Sciences Inc (PSI)公司研制的地面成像光谱系统(Adaptive Infrared Imaging Spectroradiometer, AIRIS)在 $8\sim 12\mu\text{m}$ 有 40 个波段,并成功的推出商业化产品,成功的用于地质、生命科学、消防等相关应用领域(图 1.1)。



图1.1 PSI 公司地面热红外成像光谱仪器

美国的 Solid State Scientific Corp (SSSC) 公司研制的地面和实验室成像光谱系统 (Chromotomographic Hyperspectral Imaging Spectrometer, CTHIS), 其 LWIR CTHIS 仪器在 $8\sim 10.5\mu\text{m}$ 有 24 个波段,广泛应用于国防、生物技术领域中(图 1.2)。



图1.2 SSSC 公司地面热红外成像光谱仪器

受制于该类系统背景辐射十分严重、缺少优性能热红外面阵探测器,国内针对这一领域的研究开展相对滞后,至今仅有几个研究型的试验系统(N.Gat 等, 1999; 林颖等, 2010)。王建宇等(2010)建立了一套高背景抑制的热红外高光谱推帚式成像实验装置,实现了地面试验成像,并根据冷背景实验结果,分析了热红外高光谱成像系统的性能和各种影响因素的关系,并提出了系统性能优化的可行性。

目前国际上对热红外矿物成像光谱仪的研究比较热门,近两年来我国科研人员也对热红外光谱的矿物信息提取方法进行了研究,然而国内专门用于测量热红外矿物的仪器开发还是空白,从而影响了该领域研究的进展。

1.2.2 岩石矿物的发射率光谱研究现状

对岩石和矿物热红外发射光谱行为进行详细透彻的研究是热红外遥感岩矿精细识别和定量反演的基础及依据所在。上世纪 60 年代美国为发射地球资源卫星开始了全面的地物波谱特征研究(Leeman, 1971; Hunt 等, 1976b), 70 年代该研究进入高潮。这些研究对人们认识遥感成像机理、遥感图像解译、遥感图像分类、遥感器最佳探测波段的选择和遥感器的研制等起到了很好的促进作用(田国良, 1994)。在地物波谱特征研究中,人们对热红外波段的研究水平远不如可见光、短波红外的研究。随着热红外遥感仪器的应用,研究热红外波段的地物发射率特性显得越来越重要。

目前对岩矿发射率特性的研究方法大致可分为运用岩矿辐射传输模型模拟研究(Hapke, 1993a; Hapke, 1993b)与实验室实测研究两个方面。前者利用岩矿辐射传输模型来计算岩石矿物的发射光谱,并通过改变模型参数来研究岩石矿物发射光谱特征与其化学及物理参数的依赖关系。后者是通过对岩石矿物的热红外发射光谱和样品的成分、结构、粒度等化学及物理参数进行实测,并对二者进行统计学研究和对比研究,进而归纳岩石矿物光谱特征与其化学及物理参数的内在联系并建立二者的对应关系,以此作为热红外遥感岩矿信息提取的依据。

1) 基于岩矿辐射传输模型的方法

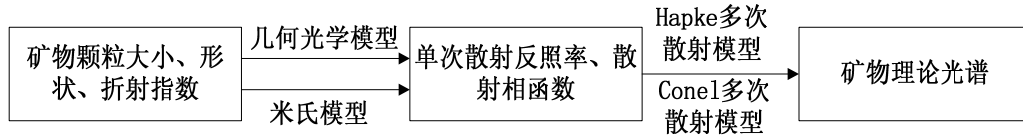


图1.3 矿物辐射传输模型概念框图（闫柏琨等，2005）

岩矿辐射传输模型（图 1.3）是以 Chandrasekhar 辐射传输方程为基础（Moersch, 1995）。Chandrasekhar 辐射传输方程（Chandrasekhar, 1960）描述了对光具有吸收、散射作用并能向外发射能量的无穷小介质层的光谱行为，各种模型的不同之处在于对辐射传输方程求解时所作的假设简化不同。一般来讲，模型分为两部分：①对单颗粒矿物光谱散射行为的描述；②对多颗粒矿物介质光谱散射行为的描述。描述单颗粒矿物光谱散射行为的物理量有单次散射反照率（ w ）与单次散射相函数（ $p(g)$ ），常用的求解模型有几何光学模型（Geometric Optical Model）（Hapke, 1993b）与 Mie 散射模型（Mie Model）。

岩矿辐射传输模型可以使人们更好的了解岩石矿物发射光谱特征的内在决定因素及各种外部变异因素，有助于提高遥感在地质应用中的定量化水平，例如，地物方向发射率（directional emissivity）是热红外遥感领域的基本问题，它可能影响到地表温度与发射率提取的精度（Gutman, 1994）。利用岩矿辐射传输模型模拟计算地物的方向发射率，可能是解决这一基本问题的途径之一（Wald, 1995）。就目前的研究水平而言，很难找到矿物光谱与其内在决定因素（光学常数 n^* ）、变异因素（颗粒大小、形状、结构、孔隙率、表面粗糙度）之间确定的函数关系（闫柏琨，2006）。岩矿辐射传输模型仅仅是一个近似的函数关系，尽管如此，岩矿辐射传输模型使我们可以对岩石矿物光谱开展定量研究。现有的岩矿辐射传输模型包括 Hapke 反射模型（Hapke, 1986）、Hapke 发射模型（Hapke, 1993b）、Mie/Hapke 模型（Moersch, 1995）、Mie/Conel 模型（Conel, 1969）。模型的对比研究（Moersch, 1995）表明，总体而言 Mie/Hapke 模型能更好的预测石英颗粒大小对其发射光谱的影响。各种岩矿辐射传输模型都是针对矿物粉末颗粒集合体的，固体岩石样品光谱特征的影响因素比矿物粉末颗粒集合体可能更复杂。矿物晶体形态、晶体内部解理、岩石结构都可能是不可忽略的光谱变异因素。根据

实验室研究，固体岩石样品与粉末颗粒集合体的光谱存在一定的差异（Copper, 2002），这是岩矿辐射传输方程应该完善的一个方面。另外，辐射传输模型反向求解（Shkuratov, 1999）也是研究中的薄弱环节。

2) 基于统计研究的方法

在对各种岩石矿物的化学物理参数及其发射光谱进行了大量的实测研究的基础上，归纳出与矿物成分、结构相关的发射光谱特征，奠定了现今热红外遥感岩矿识别的基础（Cooper 等, 2002）。目前有两个较完善的光谱库可供使用：ASU 光谱库（Christensen, 2000b）与 ASTER 光谱库（Baldridge, 2009）。光谱库中包括样品光谱及其物理与化学特征的描述。前一光谱库中只有矿物光谱，其优势是其中光谱都为发射光谱；后一光谱库后者包含矿物、岩石及一些人造地物，收录地物种类齐全，但其中光谱为反射光谱，应用时需要用基尔霍夫定律将其转换为发射光谱，会引入很大的误差。

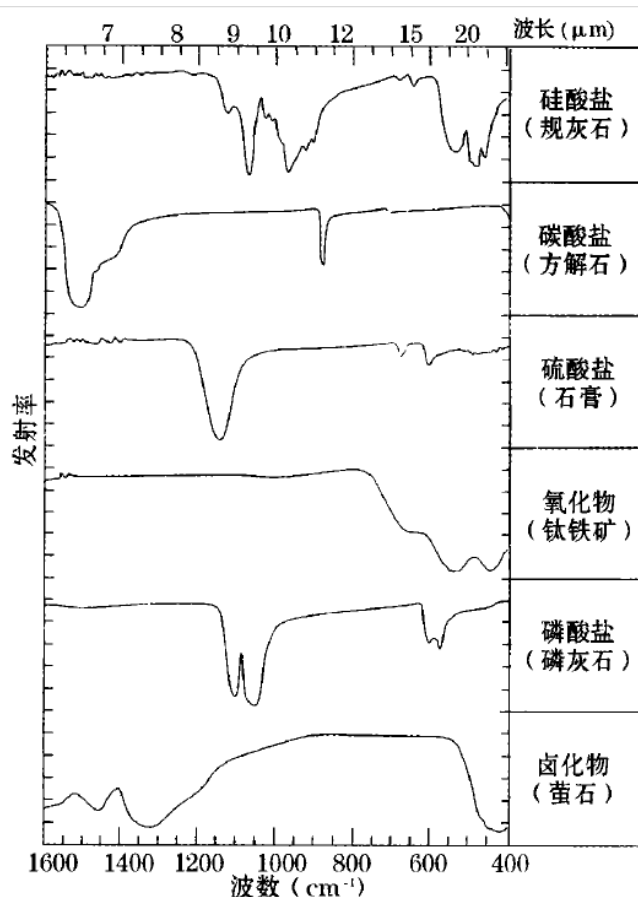


图1.4 矿物大类发射光谱曲线（Ramsey and Christensen, 1998）

各矿物大类发射光谱（图 1.4）之间差异较大，容易予以区分识别。硅酸盐矿物在 $850\sim 1200\text{cm}^{-1}$ 与 $400\sim 600\text{cm}^{-1}$ 之间分别有 2 个宽缓复杂的复合吸收特征；硫酸盐矿物在 1150cm^{-1} 处有一吸收特征；磷酸盐矿物在 $550\sim 650\text{cm}^{-1}$ 之间有一弱的双吸收特征，在 $1000\sim 1150\text{cm}^{-1}$ 之间有一强的双吸收特征；碳酸盐矿物在 1500cm^{-1} 处有一宽吸收特征，在 900cm^{-1} 处有一窄吸收特征；氧化物在 $400\sim 800\text{cm}^{-1}$ 之间有一宽缓的双吸收特征；卤化物在 $1150\sim 1500\text{cm}^{-1}$ 之间有一宽缓的双吸收特征。

相对于矿物大类间的区分识别，矿物亚类间的区分识别难度要大的多。硅酸盐亚类（从岛状到架状硅酸盐）之间发射光谱特征差异相对于矿物大类之间要小得多（图 1.5）。

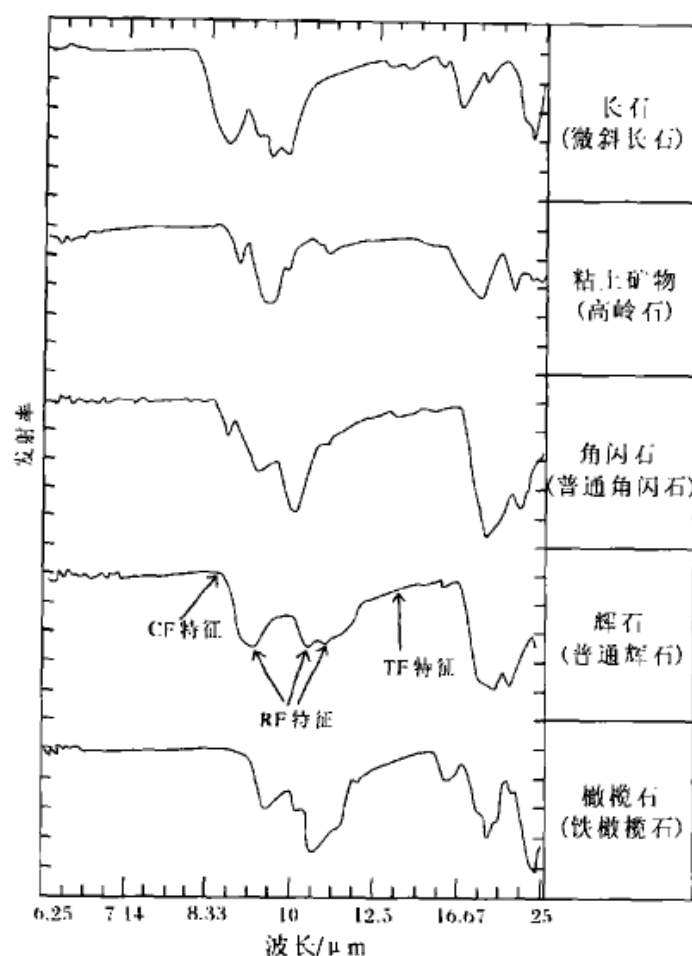


图1.5 硅酸盐矿物发射光谱曲线（ASU 光谱库）

从岛状到架状硅酸盐 $850\sim 1200\text{cm}^{-1}$ 之间的吸收特征位置逐渐向短波方向移动,这是由于矿物晶格中连接 SiO_4^{2-} 四面体的桥氧增加, Si-O 化学键增强的缘故 (Sabine, 1994)。由于各亚类间差异较小,两个吸收谱带复杂多变,识别难度较大。通过测量方解石、菱镁矿、菱铁矿、菱锰矿、菱锌矿、白云石及镁菱锰矿各种无水碳酸盐发射光谱特征, Lane (1997) 发现这些矿物种在 10cm^{-1} 光谱采样率条件下可以区分识别,方解石与镁菱锰矿的谱带位置十分相近,需要在更高的光谱采样率 (2cm^{-1}) 条件下区分识别。Hamilton (2000a) 对辉石发射光谱特征的系统研究结果表明, RF 特征 (reststrahlen features) 的个数及位置与晶格中 M1、M2 离子占位有关,根据 RF 特征的位置、个数、深度等特征不仅可以区分斜方辉石与单斜辉石,而且可以分辨两个大类中的主要端元,比如顽火辉石、铁辉石、透辉石、钙铁辉石、硬玉等不同端元。由于传感器分辨率以及各种噪声的影响,有些实验室可以识别的微小光谱差异现今难以在图像光谱中识别出来。

火山岩的发射光谱特征与其化学成分也有很好的对应关系 (Copper, 2002),火山岩发射光谱克里斯琴森特征 (Christiansen Features)、透射特征 (Transparency Features) 与岩石 SiO_2 含量、DI 指数、SCFM 指数存在很好的线性关系,利用这些化学参量可以对火山岩进行大类划分 (酸性、中性、基性、超基性),可以计算火山岩形成时的分异演化特性。

矿物发射光谱不仅能够反映其成分特征,而且能够反映矿物结构的变化,用于矿物同质多像变体的探测识别。例如,尽管磷石英、方石英、石英、柯石英、蛋白石化学成分完全一致,晶体结构不一致导致的发射光谱差异很明显 (图 1.6, Michalski, 2003)。

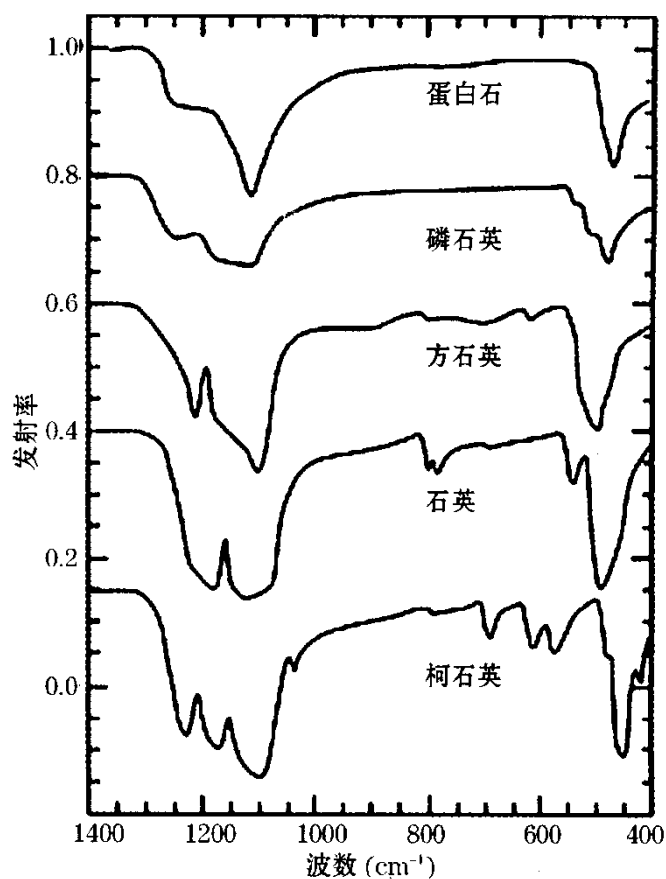


图1.6 石英多型发射率光谱 (Michalski, 2003)

矿物岩石发射光谱变异因素包括粒度、形状、表面粗糙度、结晶方位、空气压力、地表温度梯度、矿物遭受的冲击压力等。只有充分理解这些因素对发射光谱特征造成的影响，才能在实际应用中充分考虑并剔除这些干扰因素，提高矿物识别的准确性与可靠性。

很早人们就注意到了矿物粒度对其发射光谱曲线的影响 (图 1.7)，之后一直不断对其进行研究和解释 (Hunt, 1976a; Salisbury, 1992)。

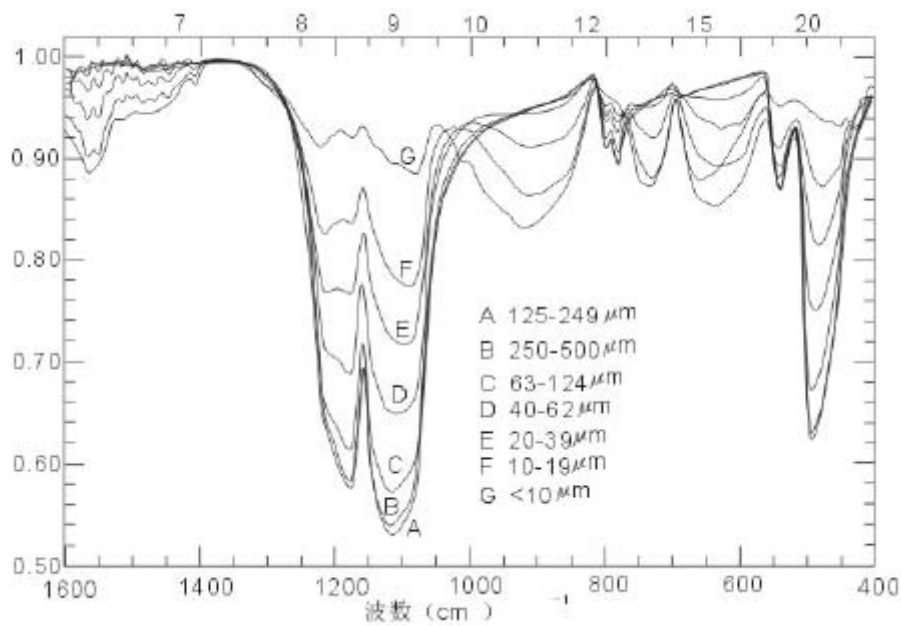


图1.7 光谱特征随粒度变化图 (Hamilton, 2004)

在 RF 波段,吸收系数(光学常数虚部)较大,散射以表散射(Surface Scattering)为主,粒度减小,颗粒前向散射增强,导致发射率增大。矿物粒度大于 $60\mu\text{m}$ 时, RF (reststrahlen features) 仅仅随粒度变小而变浅,其形状并不发生变化,粒度小于 $60\mu\text{m}$ 时, RF 形状也会发生变化。CF 特征(Christiansen Features)并不随粒度的变化而变化。在 TF 特征 (Transparency Features) 波段,吸收系数相对较小,散射以体散射 (Volume Scattering) 为主,当矿物颗粒减小到一定程度时,后向散射增强, TF 特征开始出现并随着粒度变小而变深。除了定性研究外,利用岩矿辐射传输模型进行定量研究也有一定进展 (Moersch, 1995)。针对岩石表面粗糙度对发射光谱的影响提出了有效发射率的概念 ($\epsilon_e = 1 - (1 - \epsilon)^{(\text{rcount}+1)}$, rcount 为岩石表面小洞坑壁反射次数) (Kirkland, 2003)。地表微观尺度 (~ 0.2 波长) 与宏观尺度粗糙度都会使光谱对比度 (Spectral Contrast) 减少,这就是图像光谱、野外地面光谱相对于室内样品光谱来说光谱对比度变小的原因,会导致一些矿物的漏提 (Kirkland, 2003)。矿物结晶方位不同,光学常数亦有很大差异,因此发射光谱曲线差异也非常大 (Hamilton, 2004) (图 1.8)。在实际应用中,矿物颗粒一般随机排列,因此,这一影响因素一般不予考虑。由于空气压力的变化,矿物相对于外界环境的折射率就会发生变化,从而改变其光谱特征,在真空条件下,

CF 会得到加强并向短波方向移动 (Copper, 2002)。

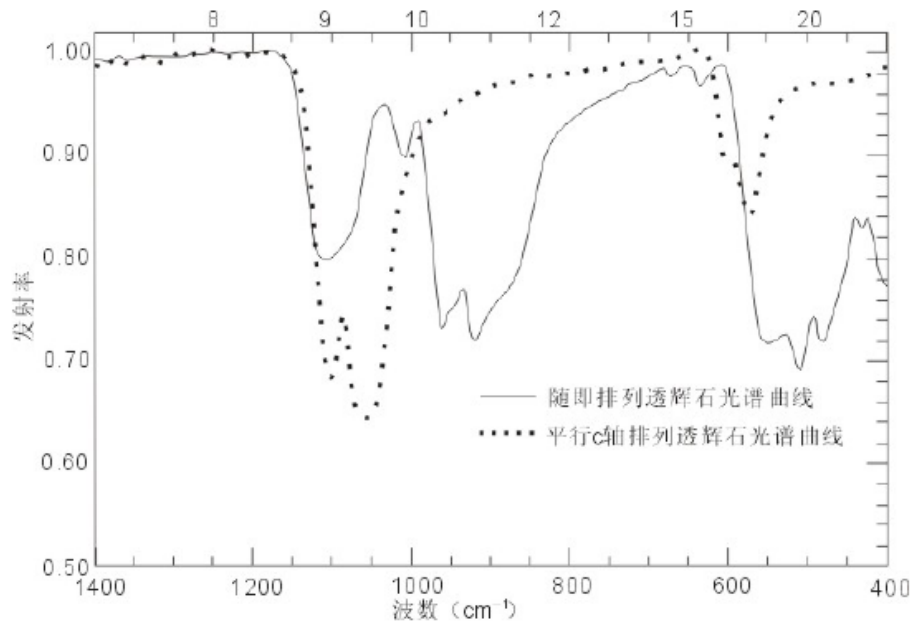


图1.8 不同结晶方位光谱特征对比图 (Hamilton, 2004)

1.2.3 发射率在岩矿识别中的应用研究现状

地质学中最为重要的研究课题之一就是岩石、矿物的形成以及其物理、化学特性研究。由于岩石、矿物的发射光谱是岩石、矿物的组成成份、结构构造的一种表现形式之一,它指示着岩石、矿物成份以及结晶的结构构造,因此,反过来,通过其光谱特性分析来分析、理解岩石、矿物各种物理、化学特性,为岩矿的基础理论研究提供一种新的方法技术。

地质学中除研究岩石、矿物、地质构造、地质演变过程之外,另一重要目的就是找矿勘查。找矿勘查是为了寻找固体金属矿、石油与天然气以及稀有金属矿等等。找矿的一个重要标志线索之一,就是寻找蚀变带,有利于缩小找矿范围(靶区)。以岩矿发射光谱特征形成的理论为指导,在系统研究分析和理解岩矿发射光谱特征基础上,根据岩矿发射光谱特征应用高光谱数据有可能直接识别岩矿类型,特别是识别与成矿作用密切相关的矿化异常信息和蚀变矿物,定量或半定量估计相对蚀变强度和蚀变矿物含量,为圈定找矿靶区提供极有参考价值的信息。热红外高光谱技术的发展和广泛应用有可能使地质找矿以至地质找矿理论研究方法都发生重大变化。

Hunt G.R.和 Salisbury (1976c) 通过在实验室中测量的岩石和矿物光谱已得出结论, 依据光谱特征可以识别出大部分具有光谱特征的岩石和矿物。热红外高光谱技术的出现, 使得实验室中所得结论得到充分的表现。技术方法及整个流程完全可以借鉴可见光/近红外高光谱的技术方法及“沙漏形”的数据处理流程及多光谱数据的处理方法, 而且, 矿物热红外发射光谱的混合行为为线性混合, 只要光谱分辨率允许, 利用线性解混技术可以更好的对矿物进行定量识别 (Bandfield, 2000; Hamilton, 1997; Hamilton, 2000b; Ramsey, 1998; Wyatt, 2001)。线性解混技术不仅可用于岩石中矿物含量反演, 同样可用于岩石化学成分的反演。Wyatt (2001) 将反演矿物与电子探针扫描成像结果进行了对比, 平均标准偏差为 4.8vol%。说明线性解混技术是热红外遥感岩矿精细识别的有力工具。

热红外发射率光谱特征一直是研究地表和行星表面地质状况的有力工具。Bandfield (2000) 和 Christensen 等 (1997; 2000c) 分别利用 TES (Thermal Emission Spectrometer) 高光谱热红外数据对火星进行了矿物定量填图, 提取出火星表面角闪石、碳酸盐、赤铁矿、高钙辉石、低钙辉石、钾长石、橄榄石、斜长石、石英、玻璃、硫酸盐等 11 种矿物种类及其分布、含量。Christensen 等 (2000a; 2001) 利用热红外发射率光谱数据, 通过线性解混技术, 在火星上识别赤铁矿、碳酸盐、硫酸盐等矿物, 为揭示火星水体的存在及演化提供证据。Ruff 和 Christensen (2002) 根据 TES 高光谱红外数据研究火星表面明暗部分矿物特征和颗粒大小。

在对地观测中热红外遥感技术也起到很重要的作用。80 年代初期, Kahle 等 (1980, 1983) 和 Gillespie 等 (1984) 使用航空热红外多光谱扫描仪 (Airborne Thermal Infrared Multispectral Scanner, TIMS), 利用去相关拉伸技术 (decorrelation technique) 和彩色合成技术 (color composite) 技术, 对加利福尼亚州死谷 (death valley) 和内华达州 Cuprite 矿区的矿物信息进行研究, 识别出玄武岩、硅质岩、碳酸岩和未蚀变的凝灰岩, 取得了令人鼓舞的成果。TIMS 也可用来进一步识别玄武岩年代 (Kahle 等, 1988; Crisp 等, 1990; Weitz and Farr, 1992)。Goetz (1992) 利用航天 SMIR 数据实现了从空中直接鉴别粘土和碳酸盐矿物。Christensen 和

Harrison (1993) 对岩石的自然表面及其覆盖物的发射率光谱特性进行了研究。Ninomiya (1995) 利用热红外光谱数据, 通过神经网络算法估计火成岩中的 SiO_2 含量。Rowan (2003) 利用 ASTER 热红外数据在加利福尼亚地区进行岩性分类识别试验, 结果表明, ASTER 数据可以识别出 AVIRIS 数据无法识别的以石英为主的岩石、花岗闪长岩、中基性岩, 但是 ASTER 数据波段有限, 难以精确提取矿物含量。Vaughan (2005) 利用 SEBASS 航空高光谱热红外数据在内华达州里诺进行了矿物填图, 试验结果表明, JPL、ASU、USGS 光谱库的线性混合光谱与影像光谱吻合很好, 证明了线性解混技术的可行性。同时, 研究表明对于发射光谱特征非常相近的矿物, 高光谱的识别能力并没有比多光谱表现出太多的优势, 研究区石英、明矾石、玉髓的识别比较困难, 因为三者的光谱特征相似, 并且是伴生出现, 更加大了识别难度。二宫芳树等 (2003) 基于地表典型岩石类型的热红外光谱特征分析, 建立了几种石英指数、碳酸盐指数、 SiO_2 含量指数, 可用来进行半定量反演, 提取矿物及化学成分的相对含量。

我国热红外成像光谱技术起步晚, 但发展比较快。80 年代中期, 中国科学院上海技术物理研究所对航空热红外多光谱扫描仪 (ATIMS) 的研制成功 (沈鸣明和杨存武, 1992), 我国学者利用其获取的数据在岩性识别和地质找矿等方面也取得了较大进展。童庆禧等 (1992) 根据航空遥感实验获取的 TIMS 图象, 利用主成分分析和去相关等方法, 提取出花岗岩、斜长片麻岩以及粘土化、硅化等蚀变岩岩性和丰富的断层信息, 圈出金矿化异常区。傅碧宏 (1994) 和金浩 (1994) 利用航空 TIMS 数据在塔里木盆地进行了地层分类识别, 利用去相关拉伸技术压制地表温度信息, 突出发射率信息实现对岩性的区分。闫柏琨等 (2006) ASU、JHU 光谱库为数据源, 利用 ASTER 热红外数据对东天山黄山东地区 SiO_2 进行了定量反演。陈江和王建安 (2007) 利用 ASTER 数据, 在四川省西范坪矿区利用模拟公式对 SiO_2 , Na_2O , K_2O 三种氧化物进行了岩石填图。杨长保 (2009) 等通过建立 SiO_2 含量与发射率光谱两个多元线性回归分析模型, 利用 ASTER 热红外数据反演东乌珠穆沁北部地区的 SiO_2 含量。王俊虎等 (2010) 利用 ASTER 数据对地表 SiO_2 含量进行定量反演, 从而识别出研究区内明显的硅化断裂带、酸性岩及红层分布信息, 提取铀矿成矿信息。张立福等 (2011) 和杨杭等 (2012)

通过地面实测岩石在热红外波段的发射光谱,分别定量反演了岩石中 CaO 和 SiO_2 含量,取得了较好的结果。

1.3 主要研究内容和技术路线

1.3.1 研究内容

组成岩石的矿物在热红外谱段 ($8\sim 14\mu\text{m}$) 具有选择性发射的特性,同一矿物在不同的波长具有不同的发射率,不同矿物在同一波长也可能具有不同的发射率,矿物的选择发射特性在岩石发射率光谱曲线上表现为矿物的特征发射率谷。这些特征是利用热红外高光谱遥感技术提取和识别岩石和矿物信息的理论基础。只有充分研究各种岩石矿物的发射率光谱特征,才能从遥感数据中挖掘出更多更精细更准确的信息。同时,为我国在 FISS-TR 成像光谱仪研制和应用打下基础,为此,本论文针对以下三个方面内容开展研究:

(1) 各种矿物类的热红外发射光谱特征分析研究。定量提取了碳酸盐、硫酸盐和硅酸盐矿物的发射光谱特征,分析了不同种类的矿物的吸收位置、吸收深度、吸收宽度、吸收对称性和吸收面积等特征指标。

(2) 热红外高光谱数据在岩矿组分识别及其含量精细反演算法研究。在岩矿发射率线性混合的理论基础上,针对传统最小二乘不同约束模型的不足,提出了基于阈值的最小二乘线性解混算法,从而可以在未知矿物端元的条件下,更好的识别矿物端元,提取其丰度信息。

(3) 发射光谱的岩矿精细识别影响因素分析。从 FISS-TR 成像光谱仪器研制的技术指标设计需求出发,利用模拟和实测岩石光谱数据,分析了光谱分辨率、信噪比,以及去包络线算法等因素对岩矿精细识别的影响,进而总结出 FISS-TR 传感器的最佳的技术指标设计及数据处理方法。

1.3.2 技术路线

本文的研究的总体技术路线如图 1.9 所示:

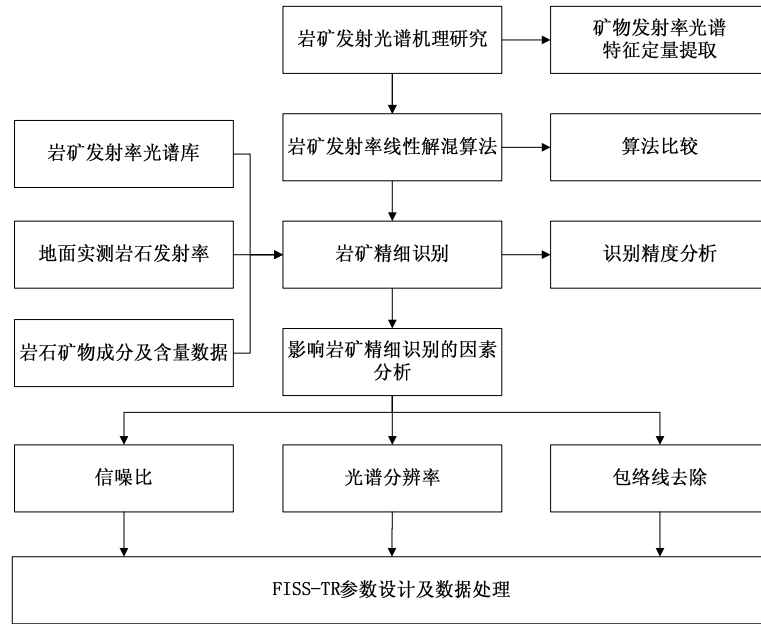


图1.9 热红外高光谱矿物精细识别的总体技术路线图

1.4 本文的数据源

由于 FISS-TR 还处于关键技术研究阶段，因此利用当前常见的红外光谱库（USGS、JPL、JHU、ASU）和野外实测岩石发射率光谱数据来模拟 FISS-TR 数据，进行岩矿精细识别研究。

（1）红外光谱库

USGS（United States Geological Survey）光谱库是美国地质勘探局光谱实验室在 1993 年建立的（Clark 等，2007）。该光谱数据库是利用 Hunt 和 Salisbury 在 20 世纪 60 至 70 年代对光谱分析所用样品的基础上建立的，存储了利用 Perkin 仪器测量的 131 种岩矿光谱，其中矿物类 26 种，岩石类 105 种，波谱覆盖范围为 $0.4\mu\text{m}\sim 14.05\mu\text{m}$ 。

JPL（Jet Propulsion Laboratory）光谱库来源于是美国喷气推进实验室。它利用 Nicolet FTIR 仪器对 160 种不同粒度（ $45\mu\text{m}$ ， $45\sim 125\mu\text{m}$ ， $125\sim 500\mu\text{m}$ ）的常见岩石矿物进行了测量，波谱覆盖范围大致为 $2.0\sim 15.39\mu\text{m}$ 。其中矿物类有 135 种，并同时进行了 X 射线分析其纯度；岩石类 30 多种，并有电子探针分析其化学组成。除光谱数据外，还规范了样品采集、样品纯度和组分分析方法。

JHU（Johns Hopkins University）光谱库来源于是约翰霍普金斯大学。它针

对不同的地物类型（人造物、陨石、岩石、土壤、植被、水体和矿物）选用了不同的分光计，并且每种地物都给出了详细的文本介绍，特别是岩石和矿物都有详细的化学成分含量说明。其中岩石类的波谱范围为 $0.4\sim 14\mu\text{m}$ ，是采用双向反射率测量的方式得到，不能利用基尔霍夫定律将其转化为发射率；矿物类的波谱范围为 $2.0\sim 25\mu\text{m}$ ，采用的是方向半球反射率测量，可以利用基尔霍夫定律将其转化为发射率。

ASU（Arizona State University）光谱库来源于美国亚利桑那州立大学，光谱库提供了多种矿物的热红外发射率数据的同时，还提供了矿物的纯度分析和化学成分即氧化物含量的分析结果，同时还包括样品光谱及其物理与化学特征的描述。该光谱库只含有矿物光谱，其特点是光谱数据都为发射率光谱（Christensen, 2000b）。

（2）野外实测光谱数据

实验利用 BOMEN MR304 FTIR 高精度光谱辐射计在野外对 29 种岩石样品进行发射率测量得到，并同时利用 X 射线荧光光谱仪分析其化学含量。该辐射计的波段范围为 $0.75\sim 19.5\mu\text{m}$ ，实验采用光谱平滑迭代算法进行发射率反演（张立福等，2011）。

1.5 论文的组织结构

本论文共分六章，其组织结构如下：

第一章绪论。主要介绍本文的选题背景和研究意义，以及国内外研究现状，并由此提出了本论文的研究内容和技术路线。

第二章热红外高光谱岩矿识别基础。介绍了热红外遥感的基本概念、基本定律、发射率反演算法以及岩矿的相关知识和岩矿的发射光谱理论等。

第三章热红外波段常见矿物类的发射光谱特征研究。介绍了矿物发射光谱分类的理论依据，选择了三种常见的矿物种类，对其经过包络线去除的发射光谱，定量研究其光谱特征，包括吸收位置、吸收深度、吸收宽度、吸收面积和吸收对称性。

第四章基于阈值的最小二乘的线性解混及矿物组分识别研究。提出了基于阈值的最小二乘约束模型,并和其它最小二乘约束模型在矿物组分识别精度和能力进行了比较。

第五章基于发射光谱矿物精细识别影响因素分析。利用模拟和实测的岩石发射光谱,研究了不同光谱分辨率、信噪比以及去包络线算法对矿物端元识别及其含量反演的精度的影响。

第六章结论与展望。对全文工作进行了总结,并对今后工作进行了展望。

第二章 热红外高光谱岩矿识别基础

2.1 热红外遥感的基本概念

所有的物质，只要其热力学温度超过 0K 时，就会不断向外发射红外辐射。地表常温物体发射的红外辐射主要在 $3\mu\text{m}$ 以外的中远红外区，所以又称热辐射。

1. 辐射能量 (radiant energy)

以电磁波形式传送的能量，符号为 Q ，单位为焦耳 (J)。

2. 辐射通量 (radiant flux)

在单位时间内通过某一表面积辐射的能量。符号 Φ ，单位为瓦 (W)， $\Phi = dQ / dt$ ， t 为时间。

3. 辐射通量密度 (radiant flux density)

在单位时间内，通过单位面积的辐射能量，符号为 F ，单位为 W/m^2 ， $F = d\Phi / dS$ ， S 为面积。

4. 辐射出射度 (radiant exitance) 与辐射照度 (irradiance)

在单位时间内，从辐射源单位面积上辐射出的辐射通量，称为辐射出射度，简称辐出度。符号 M ，单位为 W/m^2 ， $M = d\Phi / dS$ ， S 为面积。

在单位时间内，被辐射物体表面单位面积上接收到的辐射通量，称为辐射照度。符号为 E ，单位为 W/m^2 ， $E = d\Phi / dS$ ， S 为面积。

辐射出射度和辐射照度都是辐射通量密度的概念，区别在于辐射出射度 M 为物体发出的辐射，辐射照度 E 为物体接收的辐射。它们都与波长有关，如果是单位光谱波长上的，单位为 $\text{W}/\text{m}^2/\mu\text{m}$ 。

5. 辐射强度 (radiant intensity)

点辐射源在单位立体角、单位时间内向某一方向辐射的通量，符号为 I ，单位为瓦/球面度 (W/sr)， $I = d\Phi / d\Omega$ ， Ω 为立体角。

6. 辐射亮度 (radiance)

辐射源在某一方向的单位投影面积、单位立体角上的辐射通量，符号为 L ， $L = \Phi / \Omega (S \cos \theta)$ ，单位为 $\text{W}/\text{m}^2/\text{sr}$ 。如果是单位光谱波长上的，单位为 $\text{W}/\text{m}^2/\mu\text{m}/\text{sr}$ 。

当辐射源向外辐射电磁波时，辐射亮度 L 往往随着角度变化而变化，对于那些辐射亮度 L 与角度无关的辐射源，称为朗伯体。

7. 温度 (temperature)

热红外遥感中常用的温度有：辐射温度和亮度温度。

辐射温度 (radiant temperature)，又称表征温度 (apparent temperature)，被定义为所测量物体的辐射能量所对应的温度。

亮度温度 (brightness temperature) 是指与星载/机载热红外传感器所获得的辐射能量相同的黑体所对应的温度。

习惯上用一个比该物体的真实温度低的等效黑体温度来表征物体的温度。亮度温度是衡量物体温度的一个指标，但不是物体的真实温度。亮度温度与辐射温度、表征温度是一致的。在微波遥感中常用亮度温度，而在红外遥感中常用辐射温度。只有同时获得亮度温度、方向发射率和环境辐照度三个基本要素，才能反演出真正的地表温度。

8. 发射率 (emissivity)

发射率又称比辐射率，符号为 ε 。发射率是 0~1 之间的无量纲物理量，表征物体向周围环境辐射本领大小。发射率定义为物体在温度 T 、波长 λ 处的辐射出射度 $M_s(T, \lambda)$ 与同温、同波长下的黑体辐射出射度 $M_B(T, \lambda)$ 的比值。发射率在较大的温度变化范围内为常数，故常不标注为温度的函数。

$$\varepsilon(T, \lambda) = \frac{M_s(T, \lambda)}{M_B(T, \lambda)} \quad (2.1)$$

9. 基频、倍频、和频

振动能级由基态跃迁到第一激发态时产生的吸收峰称为基频峰，相应的频率称为基频。一般从基态跃迁到第一激发态的几率较大，所以基频吸收的强度也较大。

振动能级由基态跃迁至第二、三振动能级所产生的吸收峰，称为倍频峰，相应的频率称为倍频。

合频是两种振动的基频之和，例如：基频为 ν_1 和 ν_2 的两个峰，合频峰为 $\nu_1+\nu_2$ 。

10. 差频、泛频

基频之差称为差频。

倍频、合频和差频的统称为泛频。

2.2 黑体辐射

为了便于讨论物体的热辐射性质，需要一个理想的标准热辐射体作为参照源，这就是绝对黑体，简称黑体。黑体是指在任何温度下，入射的全部电磁波被完全吸收，既无反射也无透射的物体。显然，黑体吸收系数 $\alpha=1$ ，反射系数 $\rho=0$ ，透射率 $\tau=0$ 。

(1) 普朗克定律

研究绝对黑体的辐射分布对一切物体的辐射规律具有根本的意义。1900 年普朗克假设物质的辐射为不连续的能量发射，成功的由从数学上推导出与实验精确符合的普朗克公式，完满地解释了黑体辐射分布规律。对于物体温度为 T 、波长为 λ 的黑体，Planck 定律表示如下：

$$M_{\lambda}(T) = \frac{c_1}{\lambda^5} (e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1)^{-1} \quad (2.2)$$

式中， $M_{\lambda}(T)$ 是绝对温度为 T 黑体辐射出射度，单位为 $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ 。 λ 为波长，单位为 μm ， T 为热力学温度，单位为 K ， c_1, c_2 分别是普朗克常量， $c_1 = 1.191 \times 10^8 \text{ W} \cdot \mu\text{m}^4 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1}$ ， $c_2 = 14388 \mu\text{m} \cdot \text{K}$ 。

表面温度与黑体（发射率 ε 为 1）发射的辐射能量和物体本身的温度有关，然而大多数自然界物体并不是黑体（ $0 < \varepsilon_{\lambda} < 1$ ），其光谱发射率 ε_{λ} 是地物的辐射率与同温条件下黑体的辐射率的比值。对于这些不是黑体的物体，普朗克函数要乘以 ε_{λ} ：

$$R_{\lambda}(T) = \varepsilon_{\lambda} M_{\lambda}(T) = \varepsilon_{\lambda} \frac{c_1 \lambda^{-5}}{\exp(c_2 / \lambda T) - 1} \quad (2.3)$$

其中 $R_{\lambda}(T)$ 是物体的实际辐射出射度, ε_{λ} 是地物在波长 λ 的比辐射率。

(2) 基尔霍夫定律

1860 年, 基尔霍夫发现, 吸收率较大的物体, 其辐射出射度也大; 吸收率较小的物体, 其辐射出射度也小。他将该定律表达为: 在一定温度下, 物体表面的辐射出射度 $M_{\lambda,T}$ 与其吸收率 $A_{\lambda,T}$ 的比值是一个普适函数。该函数 $E_{\lambda,T}$ 与物体的性质无关, 只是与温度和波长有关的函数。

$$E_{\lambda,T} = \frac{M_{\lambda,T}}{A_{\lambda,T}} \quad (2.4)$$

基尔霍夫定律表明: 任何物体的辐射出射度和其吸收率之比都等于同一温度下的黑体辐射出射度。该定律是发射率定义的基础, 通常把物体的辐射出射度与同温度黑体的辐射出射度的比值, 称为物体的发射率或比辐射率, 它表征物体的发射本领:

$$\varepsilon_{\lambda,T} = \frac{M_{\lambda,T}}{E_{\lambda,T}} \quad (2.5)$$

可见 $\varepsilon_{\lambda,T} = A_{\lambda,T}$, 即物体的发射率等于物体的吸收率。

(3) 斯蒂芬--玻尔兹曼定律

1879 年, 史蒂芬发现, 黑体的总辐射能量与其温度的 4 次方成正比, 即

$$M(T) = \sigma T^4 \quad (2.6)$$

1884 年, 玻尔兹曼由热力学理论也得出了这个公式。式中, $M(T)$ 为黑体表面发射的总辐射出射度, σ 为斯蒂芬--玻尔兹曼常数, 取值 $5.6697 \times 10^{-8} \text{W/m}^2/\text{K}^4$ 。此式表明, 任何一个物体辐射能量的大小是物体表面温度的函数, 物体发射的总能量与物体绝对温度的四次方成正比。该定律从本质上说明了单位面积上温度较高的黑体辐射的能量要多余温度较低的黑体, 同时, 该定律也表明, 随着温度的增加, 辐射能量增加是非常迅速的。

(4) 维恩位移定律

1893 年, 维恩根据热力学理论, 推导出黑体辐射出射度的峰值所对应的波长:

$$\lambda_{\max} = \frac{A}{T} \quad (2.7)$$

式中, λ_{\max} 为辐射出射度最大处的波长; A 为常数, $A = 2897.8 \mu\text{m} \cdot \text{K}$; T 为热力学温度, 单位为 K 。

这就是维恩位移定律。此式表明, 黑体最大辐射出射度所对应的波长 λ_{\max} 与黑体的热力学温度 T 成反比。该定律表明, 随着黑体温度的升高 (或降低), 黑体最大辐射峰值波长 λ_{\max} 向短波 (或长波) 方向变化。

图 2.1 为几种温度下用普朗克公式 (2.2) 绘制的黑体辐射波谱曲线, 由图可知, 该曲线分布规律遵循斯蒂芬-玻尔兹曼定律和维恩位移定律。

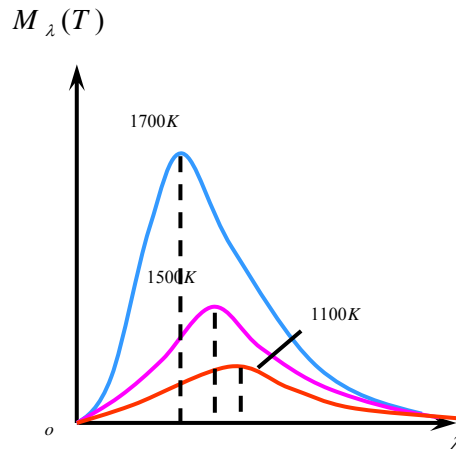


图2.1 不同温度的黑体辐射

2.3 热红外成像光谱数据发射率反演

地物热红外辐射能量是其温度与发射率的函数。利用热红外成像光谱数据首先要反演发射率, 即对温度和发射率温度进行分离 (temperature-emissivity separation, TES)。

机载/星载热红外成像传感器接收到的辐射亮度值是主要包括三部分: 经大

气削弱后被传感器接收的地表热辐射,大气下行辐射经地表反射后再被大气削弱,最终被传感器接收的那部分能量和大气上行辐射:

$$L(\lambda)_{sensor} = \tau_{\lambda}(\varepsilon_{\lambda}B(\lambda,T) + (1 - \varepsilon_{\lambda})L_{\lambda}^{\downarrow}) + L_{\lambda}^{\uparrow} \quad (2.8)$$

式中, $L(\lambda)_{sensor}$ 为传感器接收的辐射亮度值, ε_{λ} 为地表发射率, $B(\lambda,T)$ 表示温度为 T 时的普朗克函数, τ_{λ} 为大气透过率, L_{λ}^{\downarrow} 为大气的下行辐射, L_{λ}^{\uparrow} 为大气的上行辐射。

利用热红外数据进行地物发射率的反演,首先需要解决的问题是对遥感数据进行大气校正。大气校正的精度会直接影响到发射率的反演精度,从而影响热红外遥感地质应用效果。

1) 大气校正

热红外遥感的大气校正通常是指将遥感器获取的数据校正到地表出射辐射 (ground-leaving radiance), 该辐射数据可以直接用于发射率与温度的反演。根据热辐射传输方程式(1.2), 热红外波段的大气校正一般需要解决三个问题: 大气上行辐射 (L_{λ}^{\uparrow})、大气下行辐射 (L_{λ}^{\downarrow}) 和大气透过率 (τ_{λ})。目前针对热红外数据的大气纠正方法主要有基于图像自身的大气纠正、基于辐射传输方程的大气纠正以及两种方法相结合的大气校正。

如何从图像中估算出大气纠正参数是大气纠正的最难问题之一。Young (2002) 提出了一种基于图像的大气纠正方法 Inscene Atmospheric Compensation (ISAC)。针对 ISAC 方法的不足, Gu (2002) 提出了自动大气纠正的方法 (Autonomous Atmospheric Compensation), 该算法可以看成大气纠正的劈窗算法向高光谱数据领域的扩展。

大气纠正的劈窗算法主要是利用在一个大气窗口的两个临近的红外通道存在与大气的影响密切相关的不同的大气吸收、散射的信息来进行大气纠正, 也就是说利用大气本身的波谱信息来纠正大气的影响。该算法多是使用 AVHRR 的 4 (10.5~11.5 μm)、5 (11.5~12.5 μm) 通道对大气的吸收不同, 通过两个通道测量

值的各种组合来剔除大气的影响,进行大气和发射率的订正。常用的是利用两个相邻通道亮度温度的线性组合来反演地表温度。发射率经验线性法(the emissive empirical line method, EELM)是经验线性法向热红外波段的延伸。该方法假设已经获取地物目标的发射率和温度,建立地表辐射与传感器接收到辐射之间的线性回归方程来求取大气参数(透过率、大气上行辐射、大气下行辐射)。根据热红外辐射传输方程可知:对于某一特定波段 λ ,如果发射率和温度已知,那么只要有三个方程就可以求出该波段对应的大气透过率,大气下行辐射和大气上行辐射。因此,发射率经验线性法至少需要知道三种地表类型在某一特定波段的发射率和温度,就可以获取相应的大气参数。

大气透过率和大气上/下行辐射很难实时获取,通常的做法是利用辐射传输方程进行模拟计算,目前比较常用的热红外大气模拟软件主要是低分辨率大气辐射传输模式(LOWTRAN)和中分辨率大气辐射传输模式(MODTRAN)。模型的求解需要输入大气温度廓线、湿度廓线、大气分子含量、气溶胶参数等大气状态参数。求解误差有两个来源:大气廓线参数误差、模型误差。已有研究表明(Coll, 2003; Coll, 2001),如果用实测大气廓线参数作为大气辐射传输模型的输入参数,大气校正精度较高,主要误差来源为大气廓线参数误差,模型误差可忽略不计。然而,在大多数情况下难以获取与遥感数据同步的大气廓线参数,所以只能用卫星遥感数据来反演大气廓线参数。ASTER 热红外数据大气校正所用的大气温度廓线、湿度廓线等参数就是从 MODIS 数据反演得到,但反演精度有限。MODIS 系列卫星反演的大气温度误差在 $\pm 1 \sim \pm 2^{\circ}\text{C}$ 之内,大气湿度相对误差在 $\pm 20\% \sim \pm 10\%$ 之内,而且在可以预见的将来没有提高精度的可能性(徐希孺, 1998)。大气廓线参数反演算法复杂,难以推广应用。以目前的发展水平来看,大气校正误差仍然是 MODIS 与 ASTER 陆地温度与发射率反演的主要误差来源。这样,如何利用低精度的大气廓线参数,或者在没有完全大气廓线参数的情况下实现高精度的大气校正成为必须解决的问题。

2) 发射率与地表温度分离

对热红外成像光谱数据进行大气校正之后,得到的辐射亮度值仍是发射率与

地表温度耦合的结果,我们很难单凭热红外辐射亮度的测量将二者分离。这是因为 N 个通道的测量只能建立有 N 个方程的方程组,却带有 $N+1$ 个未知数(N 个通道的发射率值和一个地表温度),是一个典型的病态反演问题(Liang, 2001);除此之外,辐射亮度值与温度之间为非线性关系,也增加了求解难度。影响热红外信号的诸多因素决定了发射率反演的复杂性,也就造成了发射率反演方法的多样性(田国良等, 2006)。根据热红外数据的波段数目,发射率与温度分离算法可以分为三类:单通道算法、劈窗算法和多光谱/高光谱算法。

早期的卫星遥感数据只有一个热红外波段(如 TM、MSS),因此单通道法(Price, 1983; 覃志豪等, 2001; Jimenez-Munoz and Sobrino, 2003; Sobrino et al., 2004)是其唯一选择。随着技术的发展,NOAA 系列卫星携带的 AVHRR 传感器具有两个热红外通道,这为劈窗算法的产生和使用提供了数据基础,由此劈窗算法反演技术迅速发展起来(Anding and Kauth, 1970; McMillin, 1975; Price, 1984; Sobrino et al., 1991; Becker and Li, 1990)。单通道算法和劈窗算法都是以温度为主要目标的算法,其发射率假设已知,不能用来反演发射率曲线。

当热红外传感器发展到多光谱和高光谱阶段,人们开始利用地表发射率光谱曲线进行地物识别(Ninomiya et al., 2005),因此各种多/高光谱的温度与发射率分离的算法也涌现出来,这些算法不但最求高精度的温度反演,同时精确的发射率光谱曲线也是反演的主要目标。根据所采取的构造额外方程的策略差异,形成了各具特色的温度与发射率分离算法,算法中假设或近似的合理性成为制约温度和发射率反演精度的主要因素。

在很多应用中,人们通过发射率波谱曲线的形状来识别地物的化学构成,这时只要发射率波谱曲线的形状大致正确就可以满足应用需求,而发射率绝对数值的大小却不必非常准确,因此,先后发展了多种相对发射率反演算法,包括包络线法、参考通道法(Reference Channel Method)(Lyon, 1965)、发射率归一化法(Normalization Emissivity Method)、比值法(SR 法—Spectral Ratio Method)(Watson, 1992)、ADE 法(Alpha Derived Emissivity)(Hook et al., 1992)和温度独立光谱指数算法(temperature-independent spectral indices, TISI)(Becker and

Li, 1990)等。

在已有算法的基础上, Gillespie 等人(Gillespie et al., 1998; Gillespie et al., 1999)基于 ASTER 数据提出了 ASTER TES 算法, 该算法综合了三个基本模块 NEM、RATIO、MMD, 计算过程中, 首先使用 NEM 模块计算温度和发射率的初值, 再利用比值法和 MMD 法进行迭代计算, 直到相邻两次计算得到的地表温度差值达到精度要求为止。研究表明(Gillespie et al., 1998), TES 反演温度误差一般小于 1.5K, 发射率误差一般小于 0.015。值得提出的是, MMD 是基于植被、土壤、雪、岩石、矿物等各类地物且针对 ASTER 传感器的经验关系式, 对于不同的传感器应拟合相应的经验关系式来提高反演精度(张霞, 2000)。

Borel 提出了光谱平滑迭代法 (Iterative Spectrally Smooth Temperature/Emissivity Separation, ISSTES)(Borel, 1998)可看作对阿尔法剩余法的进一步改进, 它基于大气下行热辐射的波谱曲线为不平滑曲线, 相对来讲地物发射率的波谱曲线基本平滑这一假设, 通过测量目标辐射亮度和环境辐射, 利用迭代优化方法, 获得目标的光谱发射率和温度。该方法对发射率与温度分离的准确度相当高。Ingram (Ingram and Muse, 2001)等对该分离算法进行的误差分析表明, 在 $8\sim 13\mu\text{m}$ 范围内、分辨率在 2cm^{-1} 以上时, 除了一种石灰岩外, 对其它 145 种物质的发射率, 该分离算法误差仅为 0.0008。肖青等(2003)在土壤热红外发射率特性研究中利用 ISSTES 法进行了发射率和温度的分离, 光谱分辨率为 1cm^{-1} 时该算法获得温度优于 0.6K、发射率优于 0.01 的反演精度。

为了解决温度反演中未知数个数多于观测数的问题, 需要用多次(多角度或多时相)观测来提供信息。万正明和李召良等提出了利用 MODIS 7 个波段的白昼和夜间的观测数据来估算陆地表面温度和发射率的方法(Wan and Li, 1997), 可以说是这一类方法的典型。该方法充分利用 MODIS 数据的特点, 可以同步反演三类参数: 地表温度、通道比辐射率及必要的大气参数。

国内学者在前人研究的基础上也取得了丰硕的成果。唐世浩(2005)从普朗克方程的维恩近似出发, 定义并推导出与温度无关的 ALPHA 差值谱, 并进一步提出消除维恩近似影响的修正项。以此为基础, 在不考虑大气下行辐射影响的条

件下, 借鉴 ALPHA 和 ASTER TES 算法的优点, 提出一个新的发射率和温度分离算法, 该算法原理清楚, 流程简单, 求解速度快, 结果精度高, 并且适用的温度和下垫面范围较宽。程洁(2008)提出了基于相关性的温度与比辐射率分离算法, 该算法利用大气下行辐射和地表发射率之间的相关性优化地表温度, 进而获得地表发射率, 结果表明该算法具有和 ISSTES 算法相当的精度, 具有一定的抗噪性, 对测量过程中大气下行辐射的变化不敏感, 在 $714\sim1250\text{ cm}^{-1}$ 光谱区间内多个窄光谱区间反演的等效温度可以较好的刻画非同温像元辐射温度的变化趋势。

这些方法的共同点: 一是利用了高光谱或者多波段的热红外观测; 二是都假设能够通过别的途径获取大气参数, 大气校正比较准确; 三是因为增加了发射率这一未知数, 所以必须引入对发射率或温度无关波谱指数(TISI)的某种经验性约束条件或先验知识才能实现反演。

随着热红外成像光谱技术的发展, 高光谱红外传感器的已经初步具备实用化的能力, 光谱分辨率的提高, 可以凸现地物特征光谱, 有助于提炼具有物理意义的约束, 形成相对稳定的约束条件, 有利于提高发射率反演精度。

2.4 岩矿概述

岩石 (rock) 是由矿物 (mineral) 或类似矿物 (mineraloids) 的物质 (如有机质、玻璃、非晶质等) 组成的固体集合体 (路风香等, 2002)。多数岩石是由几种不同的矿物组成的, 单一矿物组成的岩石相对较少。

岩石是构成地壳和上地幔的物质基础。自然界的岩石按成因可以划分为三大类: 火成岩 (igneous rocks)、沉积岩 (sedimentary rocks) 和变质岩 (metamorphic rocks)。其中火成岩是由地幔或地壳的岩石经熔融或部分熔融 (Partial melting) 的物质, 也就是岩浆 (magma) 冷却固结形成的, 也称岩浆岩或喷出岩; 沉积岩是在地表条件下由生物作用、风化作用和火山作用的产物经水、空气和冰川等外力的搬运、沉积和成岩固结而形成的岩石; 变质岩是由火成岩及沉积岩经过变质作用形成的。它们的矿物成分及结构构造都因为温度和压力的改变以及应力的作用而发生变化, 但它们并未经过熔融的过程, 主要是在固体状态下发生的。变质

岩形成的温、压条件介于地表的沉积作用及岩石的熔融作用之间。三大类岩石的划分是根据自然界岩石的特征及形成作用的差异进行的，它们之间有较明显的差异，但是三种岩石可以相互转化，三种作用可以相互过渡。

地壳深处和上地幔的上部主要由火成岩和变质岩组成。从地表向下 16 公里范围内火成岩大约占 95%，沉积岩只有不足 5%，变质岩最少，不足 1%。地壳表面以沉积岩为主，它们约占大陆面积的 75%，洋底几乎全部为沉积物所覆盖。研究岩石的物质成分、结构、构造、分类命名、形成条件、分布规律、成因、成矿关系以及岩石的演化过程等是地质科学中的重要基础内容。

矿物的概念是人类在漫长的生活、生产和科学研究实践的基础上建立起来的。古时候，人们把采掘得到的岩石或矿石碎块叫做矿物，随着人类对自然界的认识逐渐深入，人们发现天然产出的石块并非是成分均一的物体，并逐渐形成了科学的岩石、矿石和矿物等概念。

目前一般认为，矿物是地壳中的化学元素经过各种地质作用所形成的自然物体。矿物可以是单质的，也可以是化合物，它们一般具有一定的化学成分和内部结构，因而呈现一定的形态、物理性质和化学性质；它们在一定的地质和物理化学条件下稳定；是组成岩石和矿石的基本单元。一般矿物学教科书只把由地质作用形成的晶质固体称为矿物，而将在产出状态、成因和化学组成等方面与矿物相似，但不具有结晶构造的少数均匀固体称为准矿物或似矿物，至于呈液态、气态等物质，因其特殊的属性而被纳入其他学科的研究范围。

每种矿物都有其特定的化学成分和内部结构，从而表现出一定的形态、物理和化学性质。然而，由于形成的条件不同，同一种矿物的成分、结构、形态、物理性质和化学性质可以有不同程度的差异，但这种差异只发生在一定范围之内，且其主要成分、结构不会改变，以此与其它矿物相区分。这种在一定范围内发生的变化，可以为进一步研究矿物的形成条件、用途等提供依据。

2.5 岩矿的发射理论基础

任何物质其光谱的产生均有着严格的物理机制。其本质上都可归结于与其物质组分、内部晶格结构等有关的电子过程或分子振动过程，是其物理化学性质的

外在反映。对于一个分子，其能量由电子能量、振动能量和转动能量组成，对于矿物晶体来说，转动能量并不存在。根据理论计算显示，电子能级之间的能量差距一般较大，产生的光谱位于近红外、可见光范围内。在 $0.4\sim 1.3\mu\text{m}$ 波谱范围内的光谱特征，主要取决于矿物中晶格结构中存在的铁等过渡性金属元素， $1.3\sim 2.5\mu\text{m}$ 波谱范围内的光谱特征是由矿物组成中的碳酸根、羟基及可能存在的水分子决定的（陈述彭等，1998）。振动能级之间的能量级差较小，一般在 $0.25\sim 1.0\text{eV}$ 之间，相应的光谱出现于近中热红外（ $2.5\sim 40\mu\text{m}$ ）区间。在该区间，岩矿的光谱特征是矿物晶格分子振动过程的基频（Hunt G R, 1976c），能识别氧化物、氢氧化物、架状硅酸盐、岛状硅酸盐、单链状硅酸盐、层状硅酸盐、碳酸盐、硫酸盐、磷酸盐等众多矿物种类。

大多数成岩矿物(包括硅酸盐，氧化物，氢氧根，碳酸根，磷酸根，硫化物，硝酸盐)在短波红外和热红外区域有明显的原子一分子振动特征。它们是分子运动弯曲与拉伸的结果，并可以在基频、外形和组成上加以区分。基频区别主要在热红外区域，组成成分与外形区别主要在短波红外区域（王钦军，2006）。

由于电子在各个不同能级之间的跃迁或发射特定波长的电磁辐射，从而形成特定的光谱特征。由于各种岩石矿物晶体结构不同，各种晶格振动而产生的光谱特征与其特有的晶体结构有关。岩石矿物发射光谱是矿物晶格中原子基团各种振动的反映，其热红外波段发射光谱特征与晶格中原子基团的基频振动有关。各种晶体由于其结构的不同，由晶格振动产生的基频位置也不一样。当一个基频受外能量激发，便会产生基频的整数倍位置的倍频，当不同的基频和倍频发生时，就会在基频和倍频原处或附近产生合频谱带。由于晶格振动而产生的光谱特性是与其独特的晶格结构相关的。

分子振动模式和频率决定矿物红外光谱的特点。分子振动模式取决于分子的几何构型和对称性，同一构型但不同对称性的分子，其红外活性谱带数目，简并分裂程度有较大差别，并产生不同特征的红外光谱。分子伸缩(价键)振动是原子沿价键方向来回运动所引起的键长变化；弯曲(变形)振动是原子垂直于价键方向作相对运动时所引起的键角变化。键长、键角的改变依赖于化学键的强度。因此，分子振动频率与化学键强度密切相关。矿物中不同键的强度差异大小有着很重要

的意义。

大多数矿物，如碳酸盐、硫酸盐、磷酸盐、硅酸盐及硼酸盐等，晶体结构中可以分出络阴离子或“封闭”的基团。如 CO_3 、 SO_4 、 PO_4 、 SiO_4 及 BO_5 等。这些基团内部主要为共价键，其外部阳离子为离子键。基团内原子间的结合力比基团之间大得多，故可以把基团看成是一个独立单位。这些基团内部的振动称为内振动，振动模式及谱带数决定于基团本身的构型及晶胞的对称性。其频率较高，一般位 $1500\sim 600\text{cm}^{-1}$ 范围内。虽然这些基团处在周围由阳离子所构成的晶体场中，振动频率会受到周围环境的影响，但是它的频率主要取决于内部坚固的共价键，晶体场的影响是次要的，故频率较稳定。大量红外光谱实验证实，每种基团，在不同化合物中频率大体相同，即每种基团有其特征吸收频率。因此，这些基团振动模式和频率可决定矿物红外光谱的主要轮廓，是各种矿物红外光谱的主要特征。基团除有内振动外，还有外振动(或晶格振动)，包括晶格中基团的转动以及结构单元之间的相对平动。它们的频率较低，一般位于 400cm^{-1} 以下。含络阴离子的矿物是矿物红外光谱的主要研究对象。氢氧化物及含水矿物中，OH 及 H_2O 的作用和特征与上述基团相当，它们的振动模式和频率也是这些矿物红外发射光谱的主要特征。

以方解石族矿物为例，如图 2.2 所示，方解石（紫色）、白云石（黑色）、菱锰矿（红色）和菱铁矿（蓝色）的红外光谱有以下特点。这些矿物在 $3100\sim 2800\text{cm}^{-1}$ ， $2650\sim 2420\text{cm}^{-1}$ ， $1850\sim 1560\text{cm}^{-1}$ 区间有三个主要的吸收带；在 3600，2150，1970，870， 730cm^{-1} 处有五个主要吸收峰。 3600cm^{-1} 处的窄吸收特征与 OH 关系紧密， 2150cm^{-1} 处的窄吸收峰是由 CO^3 振动模式造成的(田丰, 2010)。

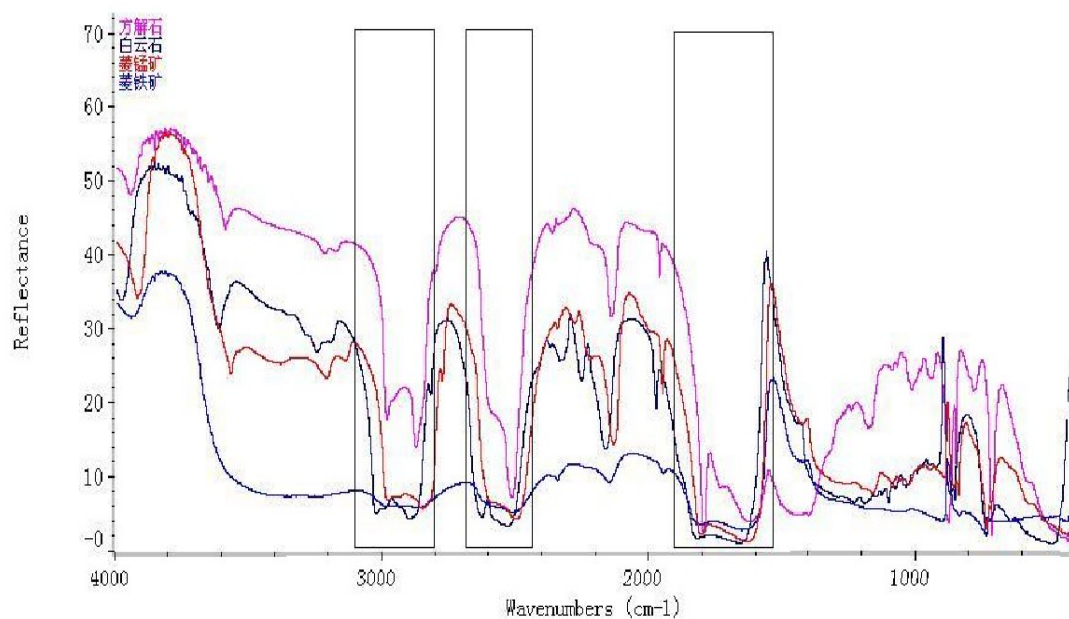


图2.2 碳酸盐矿物漫反射红外光谱（田丰，2010）

一些矿物，如氧化物、硫化物及卤化物等，晶体结构中发不出络阴离子。它们的振动频率较低，一般位于 600cm^{-1} 以下。

Si-O 四面体振动的基频在 $10\mu\text{m}$ 附近，其在 $10\mu\text{m}$ 的谱带是红外范围内最强的一个，这一谱带是硅酸盐矿物所特有的，且随着 Si 含量降低，即由酸性岩石到超基性岩石，该谱带向长波方向微弱的漂移。

第三章 热红外波段常见矿物类的发射光谱特征研究

矿物的发射光谱特性是热红外高光谱在地质领域应用的基础。矿物的发射光谱特征研究,一方面是可以为 FISS-TR 提取岩石信息,定性识别岩石、定量分析其矿物组成成分提供了理论依据;另一方面也为 FISS-TR 传感器最佳地质应用光谱段的选择提供了研究基础。

3.1 矿物发射光谱分类

矿物是组成岩石的基本单元,裸露岩石的发射光谱特征主要是由矿物发射光谱的叠加而成。因此不同的矿物成分组成的岩石其发射光谱特征是不一样的。矿物种类繁多,在对其进行光谱分析之前,有必要先要对其发射光谱类别进行介绍。

关于矿物的发射光谱分类,目前研究得还不够,至今仅提出过几个分类意见。对于振动光谱学来说,大多数天然矿物的分类首先根据矿物中存在的单原子阴离子,确定它是否为氧化物、氟化物或硫化物等,然后类似根据结构来区分矿物的原理,再根据络阴离子进行细分,例如碳酸盐、硫酸盐、硅酸盐等等。

大部分矿物的分子式可以写成 $AaBb\cdots Xx$, 其中 A, B, \cdots 是具有真实的或有效的正电荷的阳离子, X 是单原子阴离子。阴离子的重要性主要在于它处于中心,把阳离子联系在一起。因此,在晶体结构的最强键中一定涉及到阴离子,并且,阴离子参与频率最高的振动。而原子 X 常常是晶体中最轻的原子。因此,这些频率最高的振动基本上取决于 X 原子。阳离子的质量与决定频率的键的强度相比,只起到很小的作用。

对于矿物的一般化学式 $AaBb\cdots Xx$, 一个最重要的考虑是, B-X 键是否比 A-X 键强很多,以至于通常可以把结构中的 (BX_n) 络阴离子区分开。对于碳酸盐、硝酸盐、硫酸盐和磷酸盐来说,区分阴离子的理由十分清楚,它们的 B-X 伸缩振动和 X-B-X 弯曲振动都取决于这些阴离子,并且涉及到补充的阳离子 A 产生很小的位移,或不产生位移。但是,与孤立的阴离子相比, A-B 键可能会明显地改变阴离子的对称性以及它的振动频率,但是,这些变化只反映结构的几何

形状，而不反映阳离子的确切性质。所以，在阳离子 A 可以变更的类质同象系列中，阴离子的振动谱型十分相似。

在 A 和 B 阳离子共用同样的 X 阴离子的 $AaBbX_x$ 结构中， AX_n 和 BX_n 多面体的振动不能简单的相加，并且当 A-X 和 B-X 的频率不相上下时，它们之间的干扰最大，认识到这一点十分重要。当 $A=B$ 时，即在聚合硅酸盐、硼酸盐和磷酸盐的情况下，出现了一些重要的特殊情况。由于在聚合结构中出现 B-X-B 键合，氧参与两个强度相等的键，所以必须把聚合的结构与孤立四面体分开来考虑，自然就将环、链、层和三维硅酸盐阴离子加以分别考虑 (Farmer, 1974)。

根据以上所述，矿物的发射光谱可分为两大类型：

(1) 含有络阴离子的矿物，如①含平面阴离子 XO_3 的矿物：这些矿物包括碳酸盐，硝酸盐及硼酸盐；②含四面体基团 XO_4 的矿物：属于这类的矿物非常多，包括硫酸盐，硒酸盐、碲酸盐、铬酸盐、钼酸盐、钨酸盐，磷酸盐，砷酸盐、钒酸盐，硼酸盐、硅酸盐及铍酸盐；③含 XO_3 及 YO_4 两种基团的矿物：这些矿物包括碳酸盐与硫酸盐、磷酸盐或硅酸盐结合的矿物。这类矿物的络阴离子内部主要为共价键，与其外部阳离子为离子键。

络阴离子内原子间的结合力比络阴离子之间大的多，所以，可以把络阴离子看成是一个独立单位。这些络阴离子内部的振动为内振动，振动模式和频率决定于络阴离子本身的构型和晶胞的对称性，其波长较短，一般位于 $6\sim 15\mu m$ 波长范围内(闻格, 1988)。虽然这些络阴离子处在周围由阳离子所构成的晶体场中，振动频率会受到周围环境的影响，但是它的频率主要取决于内部坚固的共价键，晶体场的影响是次要的，所以频率较稳定。大量波谱实验证明，每种络阴离子，在不同化合物中频率大体相同。因此，络阴离子的振动模式和频率可决定矿物红外波谱的主要轮廓，是各种矿物红外波谱的主要特征。也就是说，矿物的红外波谱主要体现在一定晶体场中络阴离子团的振动。络阴离子除有内振动外，还有外振动或晶格振动，包括晶格中基团的转动和结构单元之间的相对平动，它们频率一般较低，位于 $25\mu m$ 之上。

(2) 晶体结构中分不出络阴离子的矿物，如①无络阴离子的氧化物；②卤化物矿物；③硫化物矿物。这些矿物 A—X 键与 B—X 键强度差别不大，因此，

波谱特点主要受阴阳离子间的振动控制。

上述的划分不是截然的，但对于我们理解矿物发射光谱的概貌是有益的。目前矿物学中广泛采用的是以矿物的成分、结构为依据的晶体化学分类，即基于矿物内部络阴离子团的种类和排列方式相同与否。从应用热红外光谱研究矿物的角度来看，可以根据络阴离子团所表现的光谱特征确定出矿物种类，振动频率（吸收带位置）是最有实际意义的，因为它给我们提供了有关矿物成分和结构方面的许多信息。

尽管作为矿物晶体化学分类基础的成分和结构因素决定了发射光谱的总面貌，但是成分和结构上的微小变化都会使光谱发生较大变化。研究表明，决定矿物发射光谱的因素是多样的，其影响和变化也比较大，而且物理属性如颗粒大小、堆积方式等都会引起发射光谱的变化，这种变化是由于相对吸收深度，而不是所处波段的位置产生的。同时，在晶体化学分类时对各种成分和结构因素作用的认识，与它们对发射光谱的影响大小也是不完全一致的，因此，晶体化学分类不能完全代替发射光谱分类，后者涉及的问题更复杂。

3.2 矿物的发射光谱特征参数

在高光谱热红外波段，遥感识别矿物主要依赖于矿物成分的吸收特征。研究表明，具有稳定化学组成和物理结构的岩石矿物具有稳定的本征光谱吸收特征。常见造岩矿物在热红外波段的特征低发射率谱带与硅酸根 (Si-O) 基团的伸缩振动和碳酸根 (CO₃) 基团内部基谱振动有关。而岩石的发射光谱特征主要与硅酸盐类矿物、碳酸盐类矿物以及铁质矿物等的选择性发射特性有关。

光谱的吸收特征可用一系列波形形态参数表达。一般而言，岩石矿物的吸收特征可以用吸收波段位置，吸收深度，吸收宽度，吸收面积，吸收对称性以及吸收的数目和排序等参数作为完整的表征 (Kruse F A, 1988; Crowley J. K, 1989; 王晋年, 1996)。这些光谱的吸收参数尤其是吸收深度与岩石中矿物成分的含量具有定量关系 (陈述彭, 1998)。J.P.Mustard (1992) 发现矿物中 Fe²⁺ 含量与 0.9μm、1.03μm、1.04μm 和 1.39μm 4 个吸收面积之间的线性关系：

$$Fe^{2+} = 3.19 \times 10^{-3} A_{0.9} + 1.45 \times 10^{-3} A_{1.03} + 10 \times 10^{-3} A_{1.04} + 7.20 \times 10^{-3} A_{1.39} - 4.69 \times 10^{-3} \quad (3.1)$$

Felzer 等 (1991) 研究了铵化长石中 NH_4^+ 基团浓度与 $2.11\mu\text{m}$ 波段深度之间的定量关系, 即 NH_4^+ 的浓度:

$$Y = 1472.8 + 48006H_{2.11} \quad (3.2)$$

由此可知, 岩矿光谱遥感主要依赖于其光谱吸收特征, 光谱吸收波长的位置 (λ) 信息可以确定对应地物的归属, 成分类别和矿物类型; 光谱吸收深度信息则可以反演矿物含量等定量信息, 同时可以作为光谱吸收识别的指标。总之, 如果能够获取光谱吸收特征信息, 则可以实现遥感矿物识别与地质填图。

光谱吸收峰的存在是识别矿物的依据。矿物单个诊断性吸收特征可以用光谱吸收特征参数来做完整的表征。

光谱吸收特征的量化往往建立在包络线去除后的归一化的光谱曲线上。图 3.1 显示了方解石 (Calcite) 在热红外波段, 经过包络线去除后的发射光谱。分析消除包络线后的发射光谱曲线, 可以定义光谱吸收深度、位置、对称性等量化的光谱吸收特征:

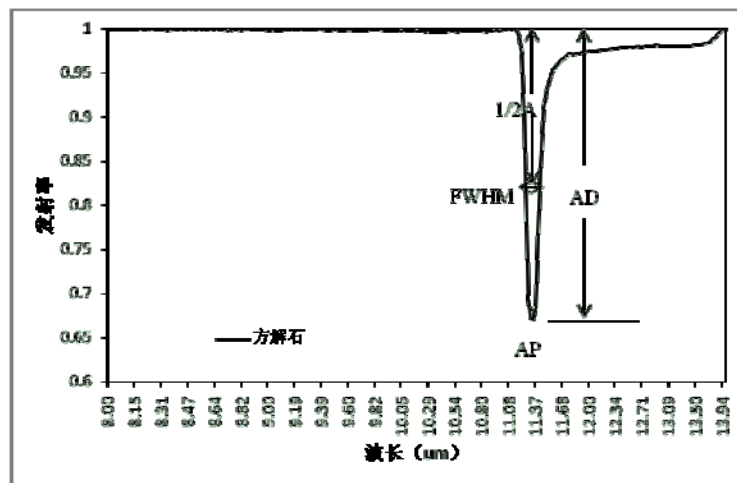


图3.1 去包络线后的方解石发射光谱曲线

(1) 吸收位置 (Absorption Position, AP):

在光谱吸收谷中, 发射率最低处的波长即为吸收谱带的位置, 即 $AP = \lambda$, 当 $\varepsilon_{\lambda} = \text{Min}(\varepsilon)$ 。

(2) 吸收深度 (Absorption Depth, AD):

在某一波段吸收范围内, 发射率最低点到归一化值为 1 的曲线的垂直距离。

$AD = 1 - \varepsilon_0$, ε_0 为吸收谷点的发射率值。

(3) 吸收宽度 (Absorption Width, AW): 最大吸收深度一半处的光谱带宽 FWHM (Full Width at Half the Maximum Depth)。

(4) 吸收面积(A): 归一化值为 1 的曲线和吸收峰之间的面积。

(5) 对称性 (Absorption Asymmetry, AA): 光谱吸收对称性定义为, 以过吸收位置的垂线为界线, 左边区域面积与右边区域面积比值 (如图 3.2 所示)。对称性 S 值的范围从 0 到无穷大。当 $S=1$ 时, 说明左右完全对称。当左边的面积大于右边面积时, $S>1$; 当左边面积小于右边面积时, $0<S<1$ 。

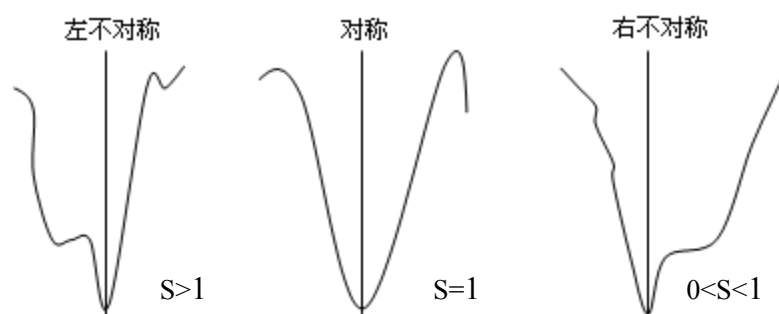


图3.2 光谱吸收对称性分析 (张兵, 2002)

利用上述提取的发射光谱吸收特征参数, 可以分别得到矿物的吸收位置、吸收深度以及对称性特征。

3.3 常见矿物的热红外波段发射光谱特征分析

发射光谱特征的提取其主要内容包括从光谱中提取各波段波长位置、深度、对称度等, 测定实际光谱曲线吸收波段的位置、深度、对称度等吸收特征。分析研究表明, 吸收波段位置基本上可以确定矿物的类型, 吸收深度、面积与岩石中矿物成份分子 (基团) 的含量有关, 含量越多, 吸收深度和面积越大。因此, 既然从这些光谱吸收特征参数中可以获得各种矿物的定性、定量信息, 那么, 计算与提取光谱吸收特征参数就是一系列光谱分析技术的基础。

直接从发射光谱曲线上提取光谱特征不便于计算, 可以采用包络线去除法先对原始光谱曲线做归一化处理。再使用光谱分析的方法提取出不同典型地物类型的特征波段, 包括光谱曲线吸收波段的位置、深度、对称度等特征。

3.3.1 发射光谱包络线去除

包络线去除法（Continuum Removal）是一种常用的光谱分析方法，广泛应用于高光谱遥感中去除背景影响。包络线最早由 Clark 和 Roush 提出，定义为逐点直线连接光谱曲线中随波长变化的吸收或反射凸出的峰值点，并使折线在峰值点处的外角大于 180 度。包络线去除即以发射光谱除以包络线光谱。经过包络线去除之后，端点处发射率为 1，端点之间发射率均小于 1。它可以有效地突出光谱曲线的吸收和反射特征，并且将其归一到一个一致的光谱背景上，最大限度地消除多种外界干扰对光谱的影响，突出光谱吸收特征谱形，有利于和其他光谱曲线进行特征数值的比较，从而提取出特征波段以供分类识别。

光谱曲线的包络线从直观上看，相当于光谱曲线的“外壳”，如图 3.3 所示。因为实际的光谱曲线由离散的样点组成，所以用连续的折线段来近似光谱曲线的包络线。

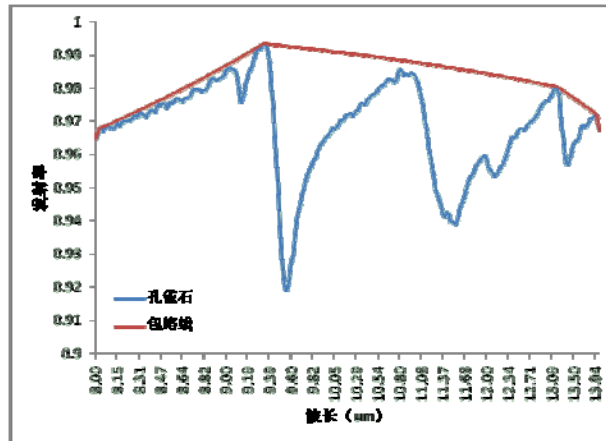


图3.3 孔雀石发射光谱曲线及其包络线

求光谱曲线包络线去除的算法描述如下（张良培等，2005）：

设有发射率曲线样点数组： $r(i), i = 0, 1, \dots, k-1$ ；

波长数组 $w(i), i = 0, 1, \dots, k-1$ 。

- (1) $i = 0$ ，将 $r(i)$ ， $w(i)$ 加入到包络线节点表中；
- (2) 求心的包络节点，如 $j = k-1$ 则结束，否则 $j = i+1$ ；
- (3) 连接 i, j ；检查直线 ij 与反射率曲线的交点，如果 $j = k-1$ ，则结束，

将 $w(j)$, $r(j)$ 加入到包络线节点表中, 否则:

1) $m = j + 1$;

2) 若 $m = k - 1$ 则完成检查, j 是包络线上的点, 将 $w(j)$, $r(j)$ 加入到包络线节点表中, $i = j$, 转到 (2);

3) 否则, 求直线 ij 与 $w(m)$ 的交点 $r_1(m)$ 。

4) 如果 $r(m) < r_1(m)$, 则 j 不是包络线上的点, $j = j + 1$, 转到 (3);

如果 $r(m) \geq r_1(m)$, 则直线 ij 与光谱曲线最多有一交点, $m = m + 1$, 转到 (2);

(4) 得到包络线节点表后, 将相邻的节点用直线段依次相连, 求出 $w(i), i = 0, 1, \dots, k - 1$ 所对应的折线段上的点的函数值 $h(i), i = 0, 1, \dots, k - 1$; 从而得到该光谱曲线的包络线。显然有

$$h(i) \geq r(i)$$

(5) 求出包络线后对光谱曲线进行包络线消除:

$$r'(i) = r(i) / h(i), i = 0, 1, \dots, k - 1 \quad (3.3)$$

图 3.4 (a) 为原始钠长石和微斜长石的发射光谱曲线, 图 3.4 (b) 为它们包络线消除后的光谱曲线。进行包络线消除后的发射率归一化到 0~1, 光谱的吸收和发射特征也归一到一个一致的光谱背景上, 并且得到了很大的增强。因此可以更加有效的和其他光谱曲线进行光谱特征数值的比较并进行光谱的匹配分析。

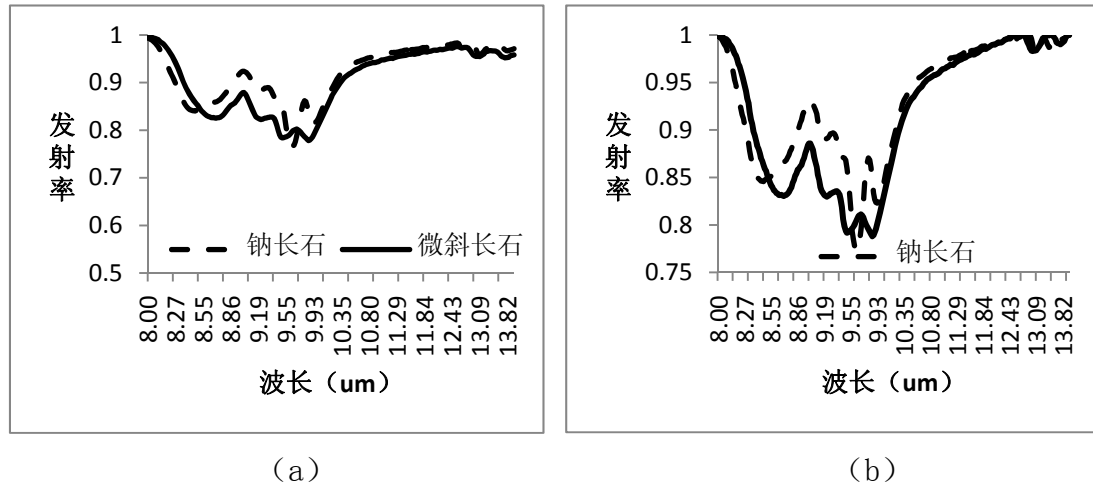


图3.4 包络线消除前后的光谱曲线图 (a) 原始光谱, (b) 去包络线光谱

3.3.2 发射光谱特征定量分析

经过包络线消除后, 那些“峰”值点上的相对值均为 1, 相反, 那些非“峰”值点均小于 1。分析经过包络线去除后的发射光谱曲线, 利用上述方法, 提取发射光谱的吸收特征参数, 可以分别得到矿物的吸收位置、吸收深度、吸收宽度、吸收面积以及吸收对称性等特征。

此次热红外波段的发射光谱特征分析, 主要选择矿物分类中有代表性的含氧盐矿物大类。含氧盐是各种含氧酸的络阴离子与金属阳离子所组成的盐类化合物。它们约占已知矿物种数的三分之二, 是地壳中分布最广、最常见的一大类矿物。国民经济中许多重要的矿物原料, 特别是非金属矿物原料, 如化工、建材、陶瓷、冶金辅助原料以及许多贵重的宝(玉)石原料, 主要来自于含氧盐矿物。自然界中含氧盐矿物中最重要的络阴离子有碳酸根离子(CO_3^{2-})、硫酸根离子(SO_4^{4-})、硅酸根离子(SiO_4^{4-})等。本研究选择碳酸盐(方解石族)、硫酸盐、硅酸盐(岛状结构、链状结构、层状结构和架状结构)等含氧盐矿物类进行分析比较。

(1) 碳酸盐矿物(方解石族)

目前已知的碳酸盐矿物超过 100 种。碳酸盐矿物是提取铁、镁、锰、锌、铜等金属元素及稀土元素的重要矿物来源, 也是重要的非金属矿物原料, 具有重要的经济意义(潘兆橹等, 1994)。方解石族矿物是指晶体结构与方解石相似的碳酸盐类矿物, 包括方解石(Calcite, CaCO_3)、白云石(Dolomite, $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$)、菱镁矿(Magnesite, MgCO_3)、菱铁矿(Siderite, FeCO_3)、菱锌矿(Smithsonite,

ZnCO₃)等, 产量大, 产地多, 是最常见的天然矿物之一。

碳酸盐矿物的发射光谱特征由碳酸根离子振动模式及晶格振动模式构成, 碳酸根阴离子团 CO₃²⁻的内振动模式-弯曲振动, 决定了碳酸盐矿物红外光谱的基本轮廓。如图 3.5 所示, 方解石、白云石、菱镁矿、菱铁矿和菱锌矿的发射光谱在 11.3μm 左右具有相似的吸收特征。

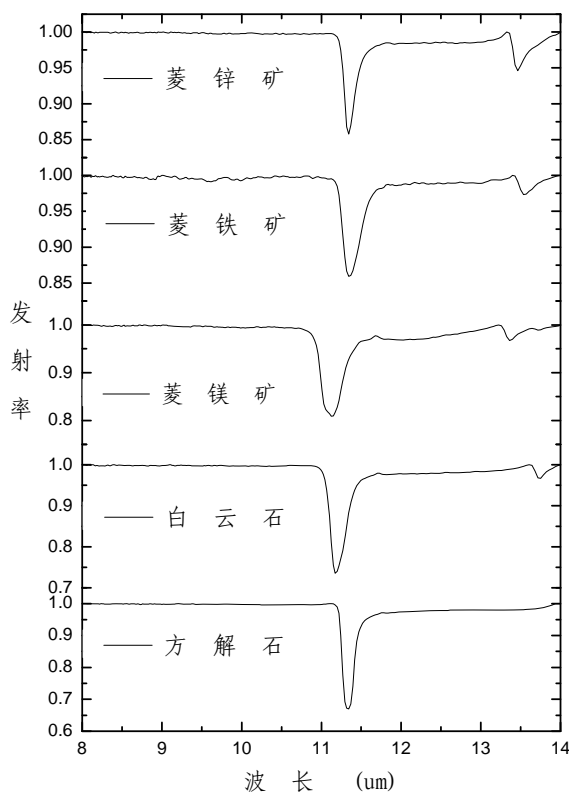


图3.5 碳酸盐矿物热红外波段发射光谱

通过计算碳酸盐类矿物的发射光谱的光谱特征参数, 可以对其进行定量分析。

表3.1 碳酸盐矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度(μm)	面积	对称性
方解石	11.344	0.330	0.174	0.057	0.984
白云石	11.173	0.265	0.219	0.062	0.510
菱镁矿	11.125	0.191	0.312	0.059	0.873
菱铁矿	11.344	0.141	0.250	0.034	0.515
菱锌矿	11.344	0.142	0.175	0.024	0.652

表 3.1 表明, 碳酸盐表现出比较一致的吸收特征, 吸收位置比较固定。在 11.1~11.3μm 处, 有一个强吸收带(伸缩振动带), 吸收宽度较窄: 在 0.1~0.3μm 左右, 吸收面积很小; 另外在 13.5μm 处, 存在着小的特征吸收峰。普遍表现出

右不对称的性质。

(2) 硫酸盐矿物

目前自然界中已发现的硫酸盐矿物有 108 多种,其中如石膏(Gypsum, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)、硬石膏(Anhydrite, CaSO_4)、重晶石(Barite, BaSO_4)、明矾石(Alunite, $\text{KAl}_3(\text{SO}_4)_2$)等都是重要的建材和化工等非金属矿物原料,部分硫酸盐如天青石(Celestite, SrSO_4)亦是提取 Sr 等金属元素的矿物原料。图 3.6 显示了这几种硫酸盐矿物在热红外波段的发射光谱曲线,可以看出硫酸盐类矿物的特征吸收区间比碳酸盐类矿物要宽。

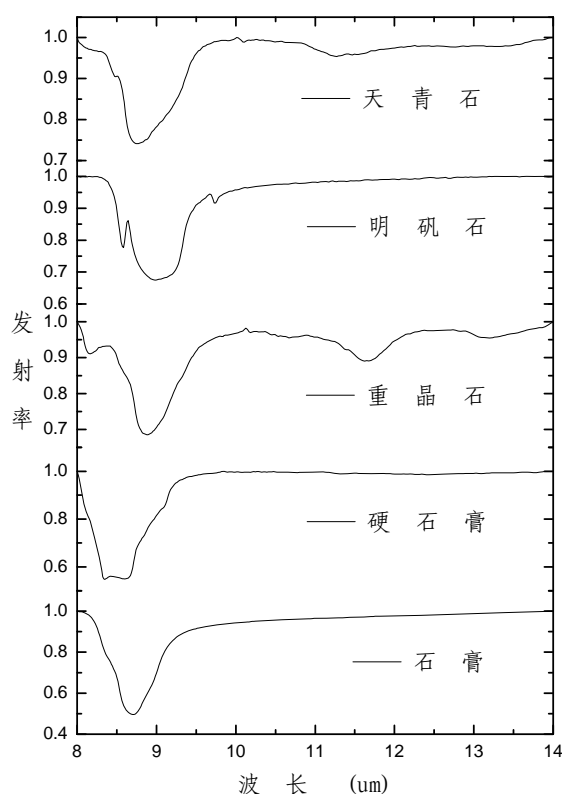


图3.6 硫酸盐矿物热红外波段发射光谱

硫酸盐矿物的热红外发射光谱主要由 SO_4 基团伸缩振动构成,其发射光谱特征相似,拥有较宽的吸收区间,但吸收位置有差异。

表 3.2 表明,这些矿物由于硫酸根络阴离子的伸缩振动,在 $8.5 \sim 9 \mu\text{m}$ 区间有明显的吸收特征,吸收深度在 0.2 以上,吸收宽度在 0.7 左右,一致表现出右不对称性。

表3.2 硫酸盐矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度 (μm)	面积	对称性
石膏	8.714	0.504	0.618	0.330	0.881
硬石膏	8.458	0.452	0.733	0.357	0.568
重晶石	8.893	0.315	0.684	0.166	0.554
明矾石	8.986	0.326	0.706	0.330	0.617
天青石	8.759	0.259	0.742	0.206	0.509

(3) 硅酸盐矿物 (Silicates)

硅酸盐矿物为金属阳离子与硅酸根的化合物。自然界出现的硅酸盐种类很多, 已知的硅酸盐矿物超过 600 种, 约占已知矿物种的四分之一; 其分布极为广泛, 就其质量而言, 约占地壳岩石圈总质量的 85%。

硅酸盐矿物是三大类岩石 (岩浆岩、变质岩、沉积岩) 的主要造岩矿物, 岩石蚀变产物多属于此类, 因此, 研究其波谱特点有重要作用。同时它也是工业上所需要的多种金属和非金属的矿物资源。如锂 (Li)、铍 (Be)、锆 (Zr)、硼 (B)、铷 (Rb)、铯 (Cs) 等元素大部分从硅酸盐矿物中提取; 而石棉、滑石、云母、高岭石、沸石等多种硅酸盐矿物又直接被广泛地应用于国民经济的各有关部门。此外, 还有不少的硅酸盐矿物是珍贵的宝石矿物, 如祖母绿和海蓝宝石 (绿柱石)、翡翠 (翠绿色硬玉)、碧玺 (电气石) 等。

硅酸盐矿物的热红外发射光谱特征主要表现为复杂的 Si-O 基团的振动, 各种 Si-O 都是由 SiO_4 四面体构成。硅氧四面体是硅酸盐矿物的基本构造单元, 根据硅氧四面体之间的连接方式, 又可以分为四个亚类: 岛状结构硅酸盐、链状结构硅酸盐、层状结构硅酸盐和架状结构硅酸盐亚类。硅酸盐矿物的结构复杂, 对称性低, 预示着矿物发射光谱的复杂性(Lazarev, 1972)。

1. 岛状结构硅酸盐亚类 (Nesosilicates)

岛状结构硅酸盐亚类为络阴离子具有孤立硅氧四面体或双四面体结构的硅酸盐矿物, 结构比较紧密, 其发射光谱主要由硅酸根离子基团振动模式及晶格振动模式构成, 而晶格振动一般位于 $25\mu\text{m}$ 以外, 基本位于远红外区, 不在遥感大气窗口内。

图 3.7 显示了以铁橄榄石 (Fayalite), 镁橄榄石 (Forsterite), 钙铝石榴子石

(Grossular Garnet), 铁铝石榴子石 (Almandine Garnet), 黄玉 (Topaz)、锆石 (Zircon) 为代表的岛状结构硅酸盐矿物在热红外波段的去包络线后的发射光谱。

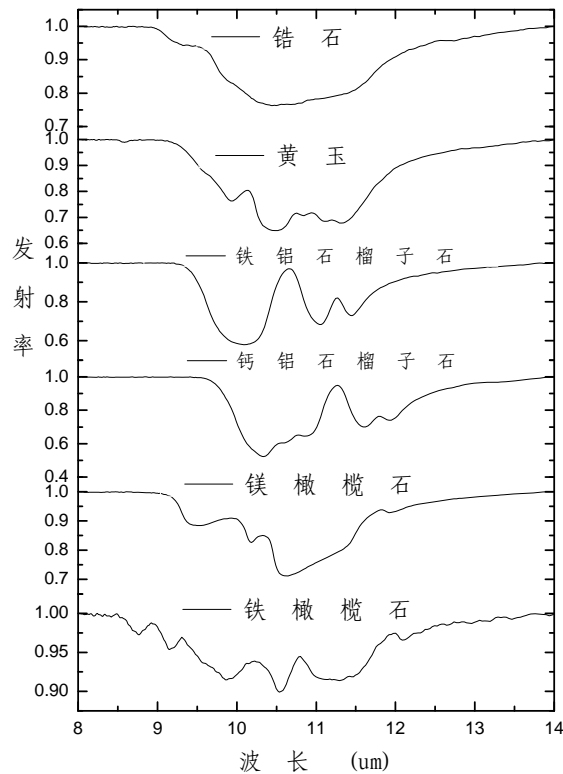


图3.7 岛状硅酸盐亚类矿物红外光谱

表 3.3 显示, 由于 SiO_4 四面体的对称性低, 谱带多, 本类矿物的发射光谱为基频振动引起, 最强的吸收谷集中在 $10.5\mu\text{m}$ 处, 在 $9.5\sim 12\mu\text{m}$ 区间有强吸收区, 具有较大的吸收面积, 其吸收宽度可达 $2\mu\text{m}$ 。由于物质成分不同, 吸收带宽度、数目、强度等都有所差别。

锆石的热红外发射光谱简单, 与其它岛状硅酸盐矿物相比, 吸收带少, 吸收宽度大是锆石的一个特点。

各种石榴子石的红外发射光谱轮廓大体相同, 具有两个强吸收带。如钙铝石榴子石、铁铝石榴子石在 $10\mu\text{m}$ 附近有一宽度较大的吸收谷, 在 $11\mu\text{m}$ 附近也有一吸收带。虽然总体形态相似, 但由于受成分的影响, 某些吸收带移动较明显, 各矿物之间独特的诊断波谱特征容易识别。

在橄榄石结构中, SiO_4 四面体受晶体场影响而发生畸变, 其对称性下降, 红外吸收带较多。吸收带位置与成分也有关系, 不同成分的橄榄石, 吸收带有差别。根据资料研究, Mg-Fe 系列中, 各吸收带位置随成分中 Fe 含量增加而降低, 吸

收带波长位置与代换阳离子成很好的线性关系(闻格, 1988)。

表3.3 岛状结构硅酸盐矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度(μm)	面积	对称性
铁橄榄石	10.538	0.101	2.252	0.229	0.832
	9.876	0.085	-	-	-
	11.296	0.086	-	-	-
镁橄榄石	10.647	0.288	1.370	0.482	0.701
钙铝石榴子石	10.350	0.477	1.089	0.424	0.740
	11.600	0.300	0.833	0.275	0.193
铁铝石榴子石	10.107	0.420	0.795	0.324	1.658
	11.055	0.317	0.880	0.316	0.243
黄玉	10.474	0.351	1.993	0.717	0.475
锆石	10.432	0.237	2.092	0.545	0.474

2. 链状结构硅酸盐亚类-辉石族矿物

链状硅酸盐亚类(Inosilicates)矿物中的络阴离子为 SiO_4 四面体共角顶相连而成的单链或双链结构, 呈平行链延长的柱状、针状或纤维形态。它们多为岩浆岩和变质岩的主要造岩矿物, 尤其以辉石族和角闪石族矿物的分布最为广泛。由于链状硅酸盐在成分和结构上有较多的相似之处, 故反映在热红外波段的发射光谱曲线上亦表现出许多相似性。

链状结构硅酸盐矿物的红外波谱主要由 Si-O 链状基团的振动模式构成, 重要的 Si-O 键是辉石单链和角闪石双链。链内 Si-O 键有两种形式, Si-O 和 Si-O-Si。其中, 前者键强高于后者, 因此, 前者振动引起的吸收带波长比后者要短。

辉石属于链状硅酸盐亚类, 为重要的造岩矿物, 主要出现在岩浆岩和变质岩中。在研究岩石的成因时, 辉石往往能够提供重要的依据。本族矿物属斜方晶系或单斜晶系。其 (Si_2O_6) 长链分子与周围阳离子作用相对较弱, 可以把它单独考虑。Si-O 振动是引起研究范围红外波谱特征的主要原因。此外, 阳离子半径、质量和电负性的不同, 对 Si-O 振动有复杂的影响, 因而导致不同阳离子矿物其波谱特征也不尽相同。

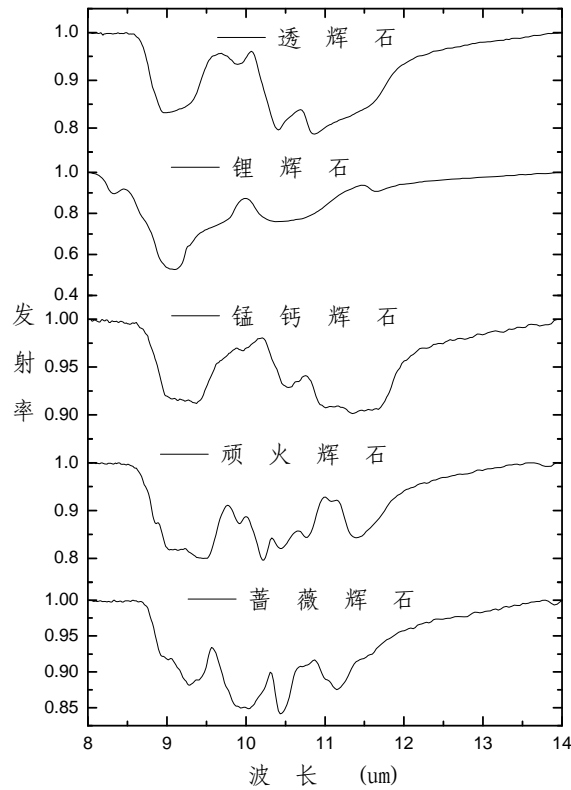


图3.8 辉石族矿物热红外波段发射光谱

辉石族矿物的红外光谱主要由 Si-O 链状基团振动模式构成。图 3.8 显示了以蔷薇辉石 (Rhodonite)、顽火辉石 (Enstatite)、锰钙辉石 (Johannsenite)、锂辉石 (Spodumene)、透辉石 (Diopside) 为代表的辉石族矿物在热红外波段去包络线后的发射光谱曲线。辉石族矿物的发射光谱在以 $9\mu\text{m}$ 、 $11\mu\text{m}$ 为中心的两个吸收带。在各类辉石中各带相对强度、分裂程度都有差异。

链状结构硅酸盐矿物红外波谱与岛状结构硅酸盐矿物的红外波谱差别在于，前者在 $8\sim 10\mu\text{m}$ 区间出现几个中等强度的吸收带(图 3.8)，后者在 $9.5\sim 12\mu\text{m}$ 区间出现几个中等强度的吸收带。双链结构相当于无限连接的环，所以链状结构硅酸盐吸收带位置类似于环状硅氧骨干的矿物。但由于二者成分、结构不相同，发射光谱还是有较大的差别。

对辉石发射光谱特征的系统研究 (Hamilton, 2000a) 结果表明, RF 特征 (reststrahlen features) 的个数及位置与晶格中 M1、M2 离子占位有关, 根据 RF 特征的位置、个数、深度等特征不仅可以区分斜方辉石与单斜辉石, 而且可以分辨两个大类中的主要端元, 比如蔷薇辉石、顽火辉石、锰钙辉石、透辉石、锂辉石等不同端元。

表3.4 辉石族矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度(μm)	面积	对称性
蔷薇辉石	10.432	0.159	1.910	0.357	1.012
	10.029	0.152	-	-	-
	11.150	0.125	-	-	-
	9.292	0.119	-	-	-
顽火辉石	10.227	0.204	1.077	0.492	0.880
	9.461	0.201	-	-	-
	11.395	0.157	-	-	-
锰钙辉石	11.345	0.099	1.584	0.147	0.668
	9.376	0.088	0.810	0.063	2.154
锂辉石	9.096	0.473	1.017	0.274	0.933
	10.390	0.241	2.580	0.298	0.105
透辉石	10.870	0.212	1.577	0.315	0.424
	8.970	0.168	0.691	0.094	0.535

3. 链状结构硅酸盐亚类-角闪石族矿物

角闪石族矿物如同辉石族矿物一样，是岩浆岩和变质岩的主要造岩矿物。对角闪石族矿物的研究对一些地质体的形成条件及矿床成因研究等方面具有实际意义。一些角闪石族矿物，如角闪石石棉、蓝石棉等在国防和其它工业部门还具有较高的实用价值。

角闪石族红外光谱与辉石相似，只是 Si-O 振动谱带更多，显得更复杂。Si-O 伸缩振动最强吸收区，分布在 $10\mu\text{m}$ ；它的弯曲振动与 M—O 振动（M 代表金属离子）和 OH 平动互相偶合振动，位于低频区，构成另一个强吸收区；两个强吸收区之间为 Si-O-Si 对称伸缩振动弱吸收区。

本族矿物类质同象普遍，吸收带复杂。角闪石族矿物与辉石族矿物成分、结构有一定的相似性，其波谱也类似，但有一定的区别，二者在 $8\sim 11\mu\text{m}$ 波谱区间内，吸收带数目、强度、位置也不同。角闪石族矿物在 $8\sim 11\mu\text{m}$ 区间有多个强吸收带，而辉石只有一个强吸收带。

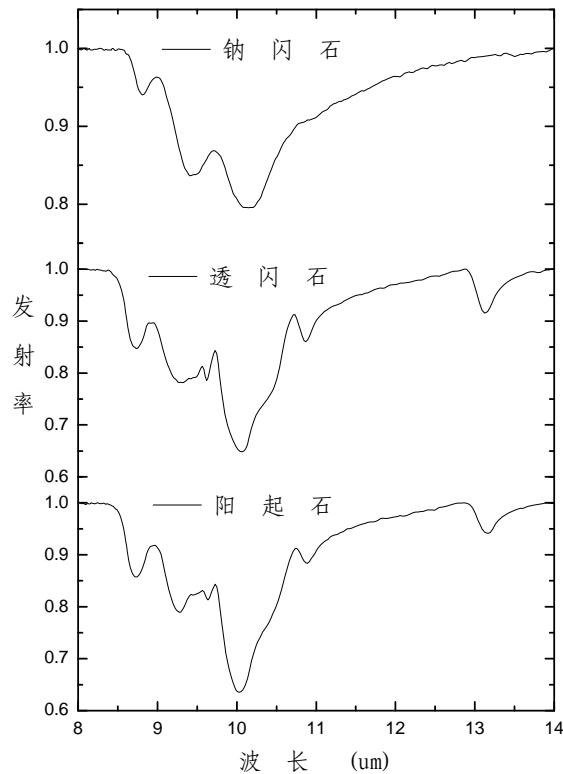


图3.9 角闪石族矿物热红外波段发射光谱

图 3.9 显示了以阳起石(Actinolite)、透闪石(Tremolite)、钠闪石(Riebeckite)为代表的角闪石族矿物在热红外波段的发射光谱曲线, 其光谱吸收特征分布在 $8.5\sim 11\mu\text{m}$ 范围的最强吸收区和 $13\sim 14\mu\text{m}$ 范围的弱吸收区。

表 3.5 表明角闪石发射光谱在 $8.7\mu\text{m}$ 、 $9.2\mu\text{m}$ 、 $10\mu\text{m}$ 处有三个特征吸收带, 其最强的吸收特征位于 $10\mu\text{m}$ 处, 吸收宽度大于 $0.7\mu\text{m}$ 。不同角闪石矿物的吸收带数目取决于结构中的双键类型数。如透闪石—阳起石系列等, 预测有 5 个谱带, 实际观测到有 3~5 个谱带。

表3.5 角闪石族矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度(μm)	面积	对称性
阳起石	10.029	0.364	0.756	0.512	1.030
	9.275	0.210	-	-	-
	8.729	0.143	-	-	-
透闪石	10.067	0.351	0.795	0.548	1.162
	9.275	0.217	-	-	-
	8.743	0.153	-	-	-
钠闪石	10.146	0.205	1.509	0.383	0.856
	9.410	0.164	-	-	-
	8.803	0.059	-	-	-

4. 层状结构硅酸盐亚类 (Phyllosilicates)

本亚类为络阴离子具有许多硅氧四面体在二维方向相连而成的层状结构的硅酸盐矿物。矿物大多平行于结构层并延展呈片状或板状晶形。层状结构硅酸盐矿物可以在各种地质作用中形成，它们是粘土、页岩和土壤的主要组成部分，也是一类颇有经济价值的非金属矿产资源。

层状结构硅酸盐在热红外波段的发射光谱主要由络阴离子 Si-O 伸缩振动引起，图 3.10 显示了滑石 (Talc)、黑云母 (Biotite)、白云母 (Muscovite)、伊利石 (Illite)、绿泥石 (Chlorite) 和海绿石 (Glaucanite) 等典型层状硅酸盐亚类在热红外波段的发射光谱。

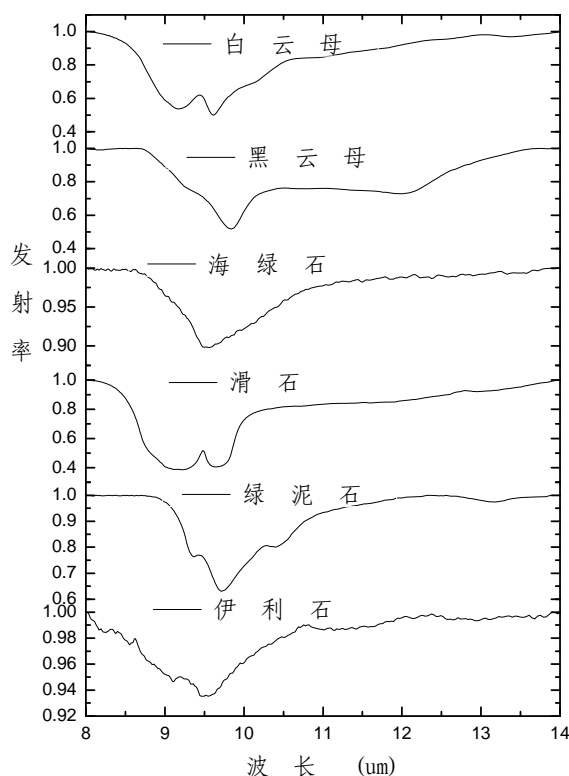


图3.10 层状硅酸盐亚类矿物热红外发射光谱

表 3.6 表明，层状硅酸盐亚类在 9~10 μm 为强吸收带，吸收特征位于 9.5 μm 附近，吸收宽度均在 1 μm 以上，吸收深度不一。滑石有 2 个强吸收带，位于 8.9 μm 和 9.7 μm 左右。黑云母在 12 μm 左右有振动弱吸收区，属于 Si-O-Al 振动。

表3.6 层状硅酸盐亚类矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度(μm)	面积	对称性
伊利石	9.549	0.065	1.432	0.115	0.856
绿泥石	9.709	0.369	1.204	0.438	0.477
滑石	9.226	0.614	1.301	1.258	0.392
海绿石	9.549	0.102	1.214	0.161	0.376
黑云母	9.838	0.482	1.103	1.031	0.331
	12.030	0.271	-	-	-
白云母	9.619	0.500	1.520	0.943	0.721

5. 架状结构硅酸盐亚类 (Tectosilicates)

在架状结构硅酸盐矿物的晶体结构中，每个 SiO_4 四面体的四个角顶全部与其相邻的四个 SiO_4 四面体共用，形成类似氧化物石英中的 Si-O 架状结构，以等轴状为主，有时也呈板状、柱状和片状晶形。由于部分四面体中的 Si 被 Al 代替，出现了多余的负电荷，这些多余的负电荷，要求有阳离子加入进行补偿，从而形成铝硅酸盐。

长石族矿物是主要的架状硅酸盐矿物，其广泛产出于各种成因类型的岩石中，约占地壳总重量的 50%。其主要为岩浆作用和变质作用的产物，是岩浆岩和变质岩的重要的造岩矿物。长石主要用于玻璃和陶瓷工业，长石在玻璃工业中的用量占总用量的 50%-60%，在陶瓷工业中用量占 30%，色泽美丽者可做宝石或玉石。

长石族矿物主要为 Na、Ca、K 和 Ba 的铝硅酸盐。大多数长石都包括在 KAlSi_3O_8 - $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ - $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ 的三成分系中，即相当于有钾长石 (Or)、钠长石 (Ab) 和钙长石 (An) 三种简单的长石端元分子组合而成，可以用端元分子的百分数来表示。

长石分两大类—斜长石 (Plagioclase) 和正长石 (钾钠长石)。斜长石又分为钠长石 (Albite)、奥长石 (Oligoclase)、中长石 (Andesine)、拉长石 (Labradorite)、培长石 (Bytownite)、钙长石 (Anorthite) 等，都是类质同象的混合物，从左向右钠越来越少，钙越来越多。斜长石通常看作是由端元矿物钠长石和钙长石组成的类质同象系列。

图 3.11 显示了斜长石亚类热红外波段的去包络线后的发射光谱曲线。各种

长石矿物的热红外光谱都十分相似，在 $8\sim 11\mu\text{m}$ 区间均有两个较强的吸收谷

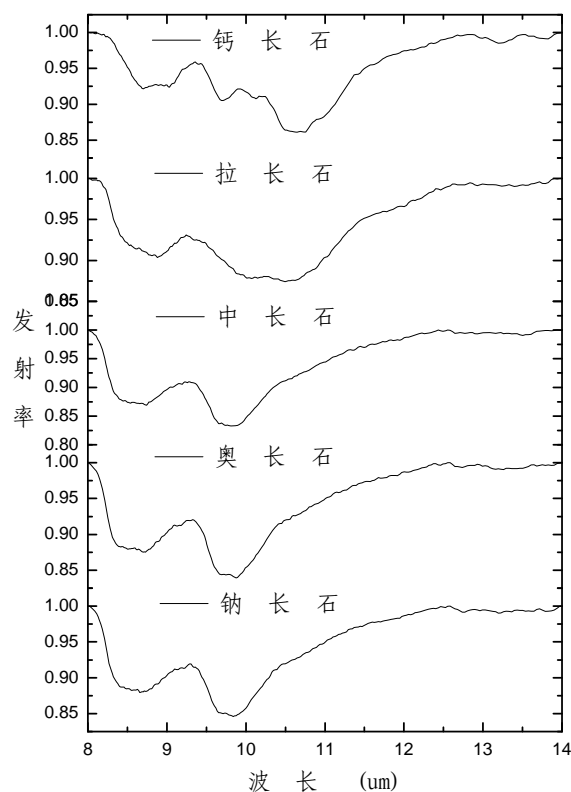


图3.11 斜长石族亚类热红外发射率光谱

表 3.7 表明，斜长石矿物在有两个主要吸收带，属 Si-O 和 Al-O 弯曲振动，分布位于 $9.8\mu\text{m}$ 和 $8.6\mu\text{m}$ 左右，吸收宽度较大，在 $2\mu\text{m}$ 左右，吸收深度和面积均比较接近，分别越为 0.15 和 0.32，一致表现出的左不对称性。

表3.7 斜长石亚类矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度(μm)	面积	对称性
钠长石	9.838	0.154	2.290	0.323	1.268
	8.656	0.120	-	-	-
奥长石	9.876	0.161	2.240	0.331	1.361
	8.729	0.125	-	-	-
中长石	9.801	0.167	2.320	0.350	1.184
	8.743	0.131	-	-	-
拉长石	10.496	0.126	2.931	0.345	1.557
	8.878	0.096	-	-	-
钙长石	10.647	0.139	1.754	0.305	1.460
	9.691	0.095	-	-	-
	8.699	0.078	-	-	-

钾钠长石亚族包括透长石 (Sanidine)、正长石 (Orthoclase)、微斜长石

(Microcline) 三种同质多象变体。图 3.12 显示了这三种矿物在热红外波段的发射光谱曲线。

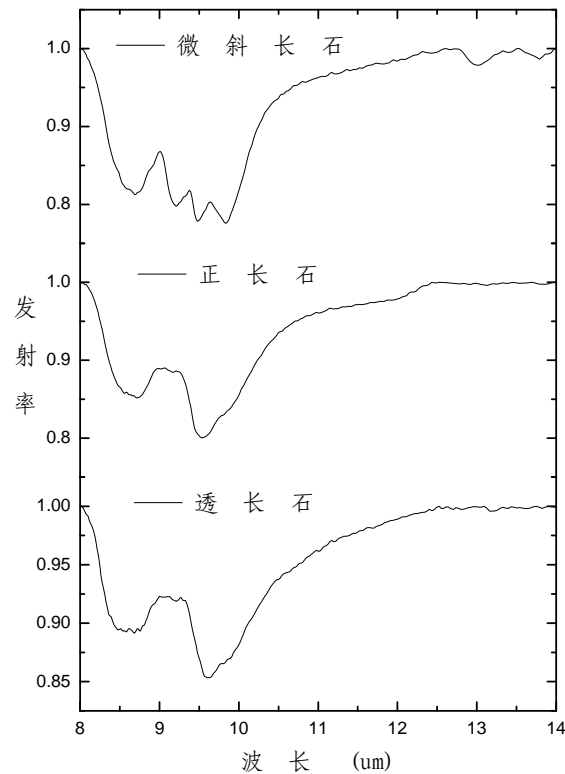


图3.12 钾钠长石亚族同质多象变体发射率光谱

矿物发射光谱不仅能够反映其成分特征，而且可以反映矿物结构的变化，用于矿物同质多象变体（成分相同而结构不同的晶体）的探测识别。例如，尽管透长石、正长石和微斜长石化学成分完全一致，但是晶体结构不一致导致的发射光谱差异却很明显。表 3.8 表明这三种矿物具有不同的吸收位置，吸收深度和宽度有差异。

表3.8 钾钠长石亚族矿物发射光谱特征参数

矿物名称	位置 (μm)	深度	宽度 (μm)	面积	对称性
透长石	9.602	0.147	2.061	0.281	0.908
	8.685	0.109	-	-	-
正长石	9.531	0.200	1.871	0.361	0.886
	8.714	0.148	-	-	-
微斜长石	9.838	0.224	1.857	0.425	2.015
	8.699	0.187	-	-	-

通过对不同结构的硅酸盐矿物的热红外发射光谱的特征分析，可以得到如下

结论:

各硅酸盐亚类矿物之间发射光谱特征存在明显差异, 8.5~12.0 μm 之间最强的吸收特征为 Si-O 键的不对称伸缩振动所致, 该波段位于大气窗口内, 是对地遥感中可利用的重要的光谱特征。吸收强度相对较小的位于 12~14 μm 间的特征是由 Si-O-Si、Si-O-Al、(Si、Al)-O-(Si、Al)对称性振动所致。

在 8.5~12 μm 区间出现了硅的强吸收波段, 其吸收位置大都在 10 μm 附近。因此, 10 μm 一般认为是 Si-O 振动吸收区; 然而, 它的确切位置与硅酸盐结构有密切关系, 吸收峰从 9 μm (块状硅酸盐或长英质矿物)到 11.5 μm 不等(链状硅酸盐或镁铁质矿物)。

12~14 μm 区域对硅酸盐, 网状硅酸盐的 Al、Si 结构较为敏感。其他硅酸盐包括片状结构, 链状结构或其他类型在该区域没有吸收特征。吸收峰的吸收模式(数量和位置)随着长石的不同而发生变化, 根据这种特性可以对它们加以识别 (Gupta R. P, 2003)。

硅酸盐亚类(从岛状到架状硅酸盐)之间发射光谱特征差异相对于矿物大类之间要小得多。从岛状→链状→层状→架状硅酸盐矿物, SiO₂ 聚合程度依次增加, 硅酸盐在 8.5~12 μm 之间的强吸收带位置逐渐向短波方向移动, 吸收带的波长范围趋于变窄, 这是由于矿物晶格中连接 SO₄²⁻四面体的桥氧增加, Si-O 化学键增强的缘故 (Sabine, 1994)。由于各亚类间差异较小, 两个吸收谱带复杂多变, 识别难度较大。

3.4 本章小结

本章主要介绍了矿物的发射光谱分类的基础理论及其类别, 分析和总结了矿物中各常见络阴离子; 并在基于发射光谱包络线去除的基础上, 计算了各种主要矿物类发射光谱的吸收位置、吸收深度、吸收宽度、吸收面积和吸收对称性等特征参数。

分析表明, 矿物的热红外发射光谱与其化学成分有密切关系。矿物发射特征

主要取决于矿物成分中的络阴离子团，因而，同一类或族的矿物的热红外波段的发射光谱基本上是相似的。每种络阴离子团都有其特征的波长范围，根据光谱吸收特征的位置，可以判断该矿物中含有何种络阴离子团，由吸收深度还可能判断络阴离子团的含量。各矿物大类由于络阴离子团的不同，发射光谱之间差异较大，容易予以区分识别。相对于矿物大类间的区分识别，矿物亚类间区别在于阳离子或结构的不同，其对发射光谱的影响与络阴离子团相比较小，因此区分识别难度相对较大。

对碳酸盐、硫酸盐和硅酸盐等常见矿物发射光谱吸收位置分析表明，8~12.5 μm 为矿物主要的吸收波段范围，因此FISS-TR的波段设置也可以此为参考。同时，除碳酸盐外，其它矿物的吸收带宽均在0.5 μm 以上，因此理论上，FISS-TR以0.25 μm 左右的光谱分辨率获取的连续波段数据足以区分出那些具有诊断性光谱特征的地表矿物。当然，实际仪器的光谱分辨率设置需要结合矿物发射率数据进行进一步的研究。

第四章 基于阈值的最小二乘线性解混及岩矿组分识别研究

岩石是由矿物组成的固体集合体。自然界大多数岩石是由不同矿物成分组成的,单矿物组成的岩石相对比较少见。在遥感地质应用中,获取的地表岩石发射光谱数据中很少存在纯净的单矿物光谱,绝大部分是由其组成矿物的发射光谱混合而成,其光谱特征并不是单一矿物的光谱特征,而是几种矿物光谱特征的混合反映。如果每一岩石混合光谱能够被分解,而且它的矿物组分(端元)所占的百分含量(丰度)能够求得的话,地质调查将更精确,因此岩石发射光谱解混研究是遥感矿物填图的基础,也是矿物提取定量化必要的支撑。

4.1 岩矿的发射光谱解混研究

求解每条光谱中所包含的地物类型(端元)的光谱信息及其对应中的含量(丰度)这一过程称为“混合像元分解”或“光谱解混”(Spectral Unmixing)。

光谱混合从本质上可以分为线性混合和非线性混合两种模式。可见光-短波段($0.4\sim 2.5\mu\text{m}$)岩矿反射光谱混合为非线性混合,混合特性极为复杂,光谱解混与矿物含量反演难度很大,而在热红外波段,岩矿的发射光谱显示出线性可加性(Lyon, 1965; Gillespie, 1992; Crown, 1987; Thomson, 1993; Hamilton, 2000a)。

早在 1959 年 Lyon 就对红外吸收波谱进行了研究,发现岩石的波谱特征与矿物成分有关(Lyon, 1959)。此后,一些学者相继研究了岩石光谱与岩石成分的关系,Thomson 等 1993 年通过实验证实了在热红外波段混合矿物产生的发射光谱是各个矿物光谱的线性加和(Thomson and Salisbury, 1993)。Feely 和 Christensen (1999)利用线性混合模型成功定量反演火成岩中矿物组分。Ramsey (1998)对矿物颗粒混合物的实验室光谱进行了系统的线性解混试验,结果表明,矿物颗粒大于 $60\mu\text{m}$ 时遵循线性混合规律,而矿物颗粒小于 $60\mu\text{m}$ 时光谱混合偏离线性规律。线性解混技术可以准确确定端元组分多达 15 种的混合物中各端元

的含量，其精度可达 5vol%。矿物的发射光谱更接近于线性混合，其原因是相对于其它谱段矿物的吸收系数较高，这是岩矿信息提取中热红外发射率光谱优于可见光及短波红外之处。只要光谱分辨率允许，利用线性解混技术可以更好的对岩矿进行定量识别。

由于岩石的热红外波段的发射光谱曲线由各组成矿物端元发射光谱线性混合而成，各组成矿物的发射光谱在混合光谱中的比例就是岩石表面该矿物面积占岩石面积的比例，光谱解混就是求取该面积比例，将其视为矿物在岩石中的体积百分含量，每一光谱波段中单一像元的发射率表示为它的端元组分特征发射率与它们各自丰度的线性组合。因此，第 i 波段发射率可以表示为：

$$\varepsilon_i = \sum_{j=1}^m \varepsilon_{ij} a_j + \delta_i \quad (4.1)$$

其中， $i=1,2,\dots,n$ ， $j=1,2,\dots,m$ 。 ε_i 是混合发射率， ε_{ij} 表示第 i 个波段第 j 个端元组分的发射率， a_j 是第 j 个端元组分的丰度。 δ_i 是第 i 波段拟合光谱与实测光谱之间的误差。 n 表示波段数， m 表示选定的端元组分数，即组成岩石的矿物种类。

公式 (4.1) 可以通过一定的方法求得单个混合光谱中各个端元组分的丰度 a_j 。光谱解混就是在已知 ε_i 、 ε_{ij} 的情况下求解 a_j ，即求解矿物含量。

岩石内各矿物端元组分含量总和为 1，因此，线性限制

$$\sum_{j=1}^m a_j = 1 \quad (4.2)$$

可以当作求解系统的一部分；另外，一个重要的条件就是各矿物端元含量不能为负数，即

$$a_j \geq 0 \quad (4.3)$$

总的说来，为便于求解，未知端元组分数目须小于或等于矩阵行数，这意味着端元组分数 m 应当小于或等于波段数 n 。

进行光谱线性解混时，可以直接用最小二乘法进行计算，它给出了式 (4.1)

在无约束条件下均方根误差意义的最佳解。均方根误差 RMSE 表达式为

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^m \delta_j^2}{m}} \quad (4.4)$$

也可以对解混进行一定的限制。每个混合光谱计算出的百分比之和为 1，或百分比都大小等于 0 都有它们的物理意义。两者可以一起限制，也可以分别限制。式(4.1)称为无约束的线性混合模型(Unconstrained Least Squares, ULS)，加上约束条件式(4.2)则为和为 1 约束(Abundance Sum-to-one Constraint, ASC)模型，式(4.1)与式(4.3)描述的非负约束(Abundance Nonnegativity Constraint, ANC)模型，再加上式(4.2)则为全约束(Fully Constrained Least Squares, FCLS)混合模型。

线性解混就是在已知所有端元的情况下求出们各自的含量所占的比例。利用最小二乘法可以得到方程(4.1)式的无约束解：

$$\hat{a} = (E^T E)^{-1} E^T P \quad (4.5)$$

再加上(4.3)可以得到 ASC 模型的最小二乘解：

$$\hat{\varepsilon} = \left[I - \frac{(E^T E)^{-1} \Pi^T}{I^T (E^T E)^{-1} I} \right] (E^T E)^{-1} E^T P + \frac{(E^T E)^{-1} I}{I^T (E^T E)^{-1} I} \quad (4.6)$$

其中 I 为 N 阶单位矩阵， Π 为分量均为 I 的 N 维列向量。研究证明，很难得到同时满足条件(4.1)、(4.3)和(4.4)的全约束解。

4.2 基于阈值的最小二乘线性解混算法研究

4.2.1 传统发射率光谱解混的不足

目前岩石发射光谱解混和矿物含量定量反演的基本上采用线性模型进行解混。实际应用中，一般根据事先确定的端元，建立线性方程组，然后在各端元组分的含量比都为正数，且和为 1 的约束条件下，求解各端元的含量比。在高光谱遥感中，波段数一般远大于端元数，因此采用最小二乘法求解。这种做法有其不足：

(1) 端元选择问题

对线性模型的解混精度影响最大的就是端元的选择问题。应用线性光谱分解

模型对光谱数据进行分析时，首先需要先求出的所有端元，确定端元的数目。选择哪些类型的、多少数量的端元以及取什么样的端元光谱值是决定混合光谱分解成败的关键。在实际地质应用中，很难在图像中找到纯的矿物端元，而利用全部矿物端元进行解混，精度往往不高。因此如何从全部矿物光谱中，确定岩石中含有的矿物端元，使分解更接近实际情况，从而提高解混的精度是一个关键问题。

(2) 约束条件问题

最小二乘算法被广泛用于高光谱数据的线性求解端元丰度问题 (Ren 等, 2002)。公式(4.5)给出了它在无约束情况下均方误差意义下的最佳解，但是由于没有用到任何约束条件，解混效果也不理想，会出现端元丰度小于 0 或大于 1 的情况，不能反映岩石中实际含有的矿物成分。因此利用最小二乘法求解方程 4.1 时，一般考虑式 (4.3) 的非负约束，利用迭代法获得最优解 (Lawson and Hanson, 1974; Bro and De Jong, 1997)。式 (4.6) 给出了和一约束的解，但是其估计的矿物丰度值仍然不满足非负的条件，一个比较简单的办法是把其中的负值去掉，再把其余的值按比例拉伸到总和为一。但一般来说，这样的估计结果不可能是全局最优估计。在 (4.6) 式上加上组分非负约束的条件时，对其进行最优估计就比较困难，这时对丰度的估计为不等式约束的最小二乘，通常很难找到解析的方法，只好采用数值方法。Heinz 等(2001)提出全约束最小二乘的求解方法。FCLS 在原方程组里添加方程 $\sum_{j=1}^m a_j = 1$ ，并给予其很大的权重，再用 ANC

对新的方程组求解，则求得的解近似满足两个约束条件。但实际地质应用中，由于分析手段的限制，岩石中的矿物端元并不能全部得到，矿物端元的丰度和往往并不为 1。强加的和为 1 的约束条件反而可能会导致新的误差。因此有学者认为，准确的混合光谱模型的分解结果应当自动满足两个约束条件(Mustard J.F. and Pieters C.M.,1987; 1989)。

4.2.2 算法改进及流程

模拟研究表明，理想条件下，最小二乘的无约束、非负约束、和一约束和全约束的解具有相同的值，实际岩矿解混过程中，由于岩石中含有的微量矿物

($w < 1\%$) 很难被鉴别出, 因此矿物端元的和往往并不等于 1, 但是在确定端元条件下, 无约束和非负约束的解混结果具有相同的解。同时, 非端元矿物的加入, 会严重影响端元矿物的丰度反演。本文提出了基于阈值的盲端元最小二乘线性解混算法 (Threshold Constraint Least Squares, TCLS), 在传统的最小二乘解混基础上, 在算法中加入矿物含量阈值 Δ , 同时采用无约束和非负约束模型进行解混, 在解混过程中, 利用非负条件, 删除丰度为负值的端元, 然后重新进行解混, 反复迭代, 直到满足无约束条件和非负约束条件的解相等为止。同时, 为了解决矿物端元发射光谱不唯一的问题, 利用多条光谱拟合一条最佳光谱, 作为该矿物的端元光谱。

算法流程如下:

(1) 光谱相似性计算: 对于具有多条发射光谱的矿物端元, 根据式 (4.7) 计算相互之间的均方根误差;

$$RMSE(EMA, EMB) = \sqrt{\frac{\sum_{\lambda=1}^M (\varepsilon_A(\lambda) - \varepsilon_B(\lambda))^2}{M}} \quad (4.7)$$

(2) 最优端元光谱选取: 剔除均方根误差明显较大的光谱, 选择均方根误差最小的两条或多条光谱, 计算其平均值, 根据式 (4.8) 计算端元平均均方根误差 (End member average root mean square error, EAR), 取 EAR 最小值作为该矿物的端元光谱;

$$EAR(EMA) = \frac{\sum_{i=1}^n RMSE(EMA, EM_i)}{n-1} \quad (4.8)$$

$i = 1, 2, \dots, n$ 为端元 EM 中的变异端元数目。EAR 描述端元中一个变异端元 (EMA) 拟合其他变异端元 $EM(i)$ 的能力, EAR 越小, 其拟合端元能力越强 (Dennison, P. E. and D. A. Roberts, 2003)。

(3) 设定端元丰度百分比阈值 Δ , 初始 $\Delta = 0$, 步长 $i = 0.01$;

(4) 利用最小二乘算法, 分别根据不同的约束条件对岩石发射光谱进行线性解混;

(5) 判断解得的端元丰度值是否有小于 0。小于, 则删除该端元光谱, 转

到 (4); 否则, 转到 (6);

(6) 比较无约束的解和非负约束的解的结果, 不同, 转到 (3), 调整阈值, $\Delta = \Delta + i$; 否则, 满足条件, 终止。

4.2.3 算法精度分析

反演结果的精度评价对不同算法比较具有重要意义, 对于实际遥感地质应用也具有指导意义。对于不同模型的反演精度, 通常用均方根误差 RMSE 和残余误差尽可能小来评价和衡量选择端元的好坏。本文从拟合的光谱曲线和化学成分含量两个方面进行精度分析。

对于反演得到的矿物端元丰度, 进而模拟的岩石发射率光谱曲线, 本文采取了四个指标: 相关系数、光谱角、残差均值、均方根误差来评价和衡量选择端元的好坏。

(1) 相关系数

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (\varepsilon_{Mi} - \bar{\varepsilon}_M)(\varepsilon_{Ri} - \bar{\varepsilon}_R)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\varepsilon_{Mi} - \bar{\varepsilon}_M)^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (\varepsilon_{Ri} - \bar{\varepsilon}_R)^2}} \quad (4.9)$$

式中, $i = 1, 2, \dots, n$ 表示 n 个波段, ε_{Mi} 表示拟合的岩石发射光谱, ε_{Ri} 表示原始的岩石发射光谱。相关系数是变量之间相关程度的指标。相关系数的取值范围为 $[-1, 1]$ 。 $|r|$ 值越大, 变量之间的线性相关程度越高; $|r|$ 值越接近 0, 变量之间的线性相关程度越低。通常 $|r|$ 大于 0.8 时, 认为两个变量有很强的线性相关性。

(2) 光谱角度匹配 (SAM)

光谱角度填图是将 N 个波段的光谱响应作为 N 维空间的矢量, 通过计算两个光谱之间广义夹角来表征其匹配程度: 夹角越小, 说明越相似(F. A. Kruse et al,

1993)。两矢量广义夹角余弦为: $\theta = \cos^{-1} \frac{T \cdot R}{|T||R|}$, 即

$$\theta = \cos^{-1} \frac{\sum_{i=1}^n t_i \bullet r_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n t_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n r_i^2}}, \quad \theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \quad (4.10)$$

式中， θ 值越小 T 和 R 的相似性越大。

(3) 残差均值 (Average Residual Error, ARE)

$$\begin{cases} RE_i = \varepsilon_{Mi} - \varepsilon_{Ri} \\ ARE = \frac{\sum_{i=1}^n |RE_i|}{n} \end{cases} \quad (4.11)$$

(4) 均方根误差

$$RMSE_{-\varepsilon} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n RE_i^2}{n}} \quad (4.12)$$

均方根误差通常用来评价模型拟合的好坏，式中， $RMSE_{-\varepsilon}$ 的值从 0 到 1，值越小，表示模型拟合的程度越好。

对于反演的岩石化学成分的精度分析，本文也采用了四个指标：平均模型误差 (Average Model Difference, AMD)，最大模型误差 (Max Model Difference, MMD)、残差绝对值和均方根误差。

$$\begin{cases} AMD = \frac{\sum_{i=1}^n |W_i - W_{iture}|}{n} \\ MMD = \max(|W_i - W_{iture}|) \\ |\Delta W_i| = |W_i - W_{iture}| \\ RMSE_{-W} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\Delta W_i)^2}{n}} \end{cases} \quad (4.13)$$

其中 W 表示矿物成分的百分比含量， W_i 表示第 i 个矿物端元的反演含量， ΔW 表示矿物含量的反演误差， $|\Delta W|$ 表示误差绝对值， W_{iTrue} 表示岩石中第 i 个端元矿物的实际含量，在本论文中指利用 X 射线衍射或电子探针的实测数据。

$RMSE_{-W}$ 表示矿物含量的均方根误差。 $i = 1, 2, \dots, n$ 表示岩石中矿物端元的

个数或氧化物的个数。

4.3 岩石光谱线性解混与矿物含量提取

本研究从 ASU 等光谱库中，选择纯度等级最高的一些常见典型矿物作为端元，对岩石进行线性解混研究，同时对无约束模型、非负约束模型、和一约束模型、全约束模型以及 TCLS 算法进行比较。

通过选择三大岩石类别中最常见的矿物成分，实验共计选择了 46 种有代表性的典型矿物为端元，对于同一种矿物有多条光谱曲线的情况，计算其 EAR，并选择最小值的光谱，作为其光谱端元。端元矿物包括钠长石、中长石、石英、微斜长石、钙长石、铁铝榴石、无水石膏、歪长石、黑云母、古铜辉石、方解石、绿泥石、透辉石、白云石、顽火辉石、萤石、镁橄榄石、石膏、铁钙辉石、伊利石、硬玉、锰钙辉石、高岭石、红钠闪石、拉长石、镁角闪石、镁钠闪石、菱镁矿、磁铁矿、孔雀石、钙蒙脱石、钠蒙脱石、白云母、绿脱石、奥长石、橄榄石、正长石、锰三斜辉石、蛇纹石、菱铁矿、蒙脱石、菱锌矿、锂辉石、滑石、透闪石、硅灰石。这些矿物或者是重要的成矿指示矿物，或者是与环境变化有关的矿物，它们在地质勘探、全球变化研究中占有重要地位，并且在不同的光谱段上具有典型的和普遍性的可诊断性的光谱吸收特征。

4.3.1 酸性火成岩

实验的酸性火成岩发射光谱来源于 JHU 光谱库。在其对应的辅助文档中，根据岩相分析，该岩石是由石英（34%）、微斜长石（27%）、钠长石（36%），以及少量黑云母（1.3%）和其他微量物质组成。其化学成分见表 4.1。

表4.1 酸性火成岩的化学成分

氧化物	重量 (w%)
SiO ₂	75.8
Al ₂ O ₃	13.99
Na ₂ O	4.31
K ₂ O	3.55
CaO	1.39
H ₂ O	0.38

续表 4.1

FeO	0.30
MgO	0.14
Fe ₂ O ₃	0.04
TiO ₂	0.03
MnO	0.01
P ₂ O ₅	0.0
总计	99.94

该火成岩及其端元在热红外波段的发射光谱如图 4.1 所示。

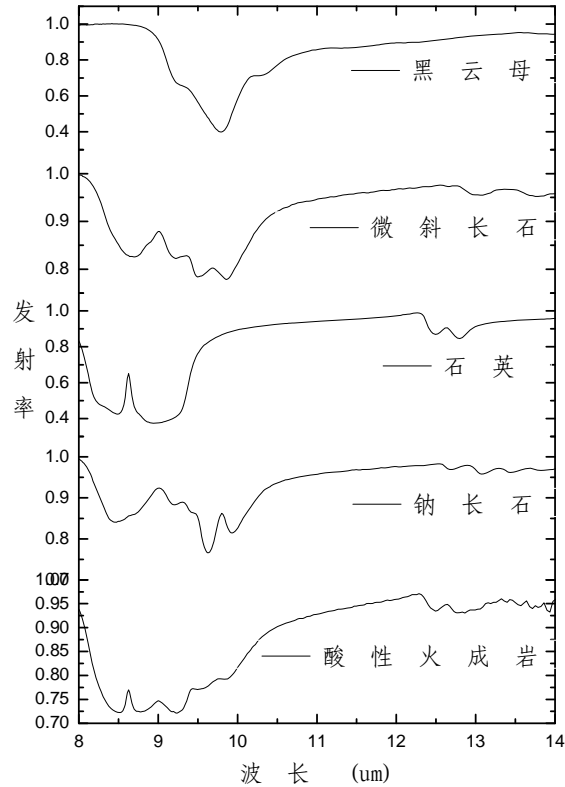


图4.1 酸性火成岩及其端元的发射光谱

1) 确定端元

在已知端元的条件下，利用最小二乘算法，在不同约束模型下，对酸性火成岩进行线性解混，提取其矿物丰度信息。

表 4.2 显示了不同最小二乘约束模型的光谱解混结果。以岩相分析得到的矿物丰度作为测量值，计算不同约束模型反演结果的模型误差。实验结果表明，在确定端元的条件下，几种模型的结果比较接近；TCLS、ULS 和 ANC 模型的结果具有一致性，反演结果比 ASC 和 FCLS 模型具有更好的精度，这可能是由于岩石中含有矿物端元的和并不为 1 的缘故，TCLS、ULS 和 ANC 模型反演得到

的端元丰度之和与岩相分析的结果更为接近。

表4.2 酸性火成岩已知端元的光谱解混结果

端元	岩相分析 (w)	模型(w)				
		TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
钠长石	0.36	0.3977	0.3977	0.3977	0.3929	0.3929
石英	0.34	0.2848	0.2848	0.2848	0.3212	0.3212
微斜长石	0.27	0.2541	0.2541	0.2541	0.1859	0.1859
黑云母	0.013	0.0493	0.0493	0.0493	0.0999	0.0999
总计	0.983	0.9859	0.9859	0.9859	0.9999	0.9999
模型误差 (%)		3.63	3.63	3.63	5.57	5.57

根据不同约束条件模型解得的丰度矿物成分丰度信息,可以反过来合成岩石的发射率光谱。图 4.2 显示了不同模型拟合的岩石光谱与原始的酸性火成岩光谱的比较,由于 TCLS、ULS 和 ANC 模型,ASC 和 FCLS 模型的反演的矿物丰度一样,因此,只选择显示 TCLS 模型和 ASC 的拟合光谱曲线。图 4.3 显示了不同模型的拟合光谱与原始岩石的光谱曲线之间的残差,TCLS 模型残差最小,最大误差在曲线吸收峰处。

对模型的拟合光谱曲线与原始发射率曲线间的相似度分析也表明,TCLS、ULS 和 ANC 模型拟合的光谱与原始光谱曲线最相似(表 4.3)。

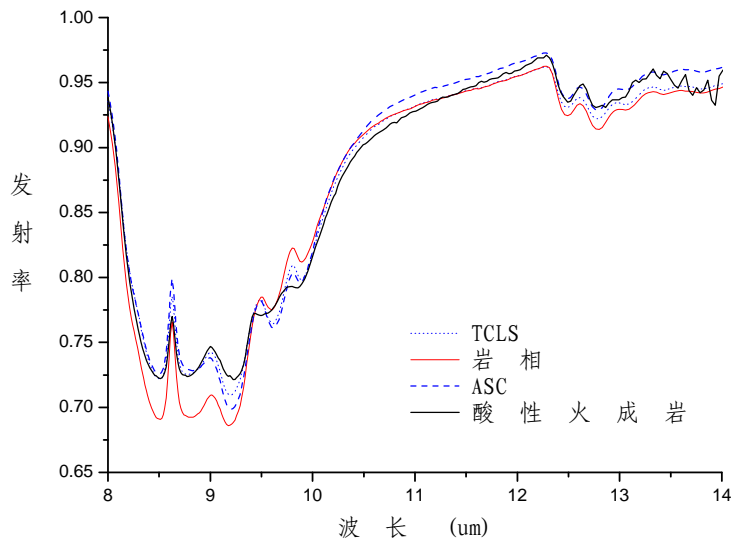


图4.2 不同模型的模拟发射率光谱

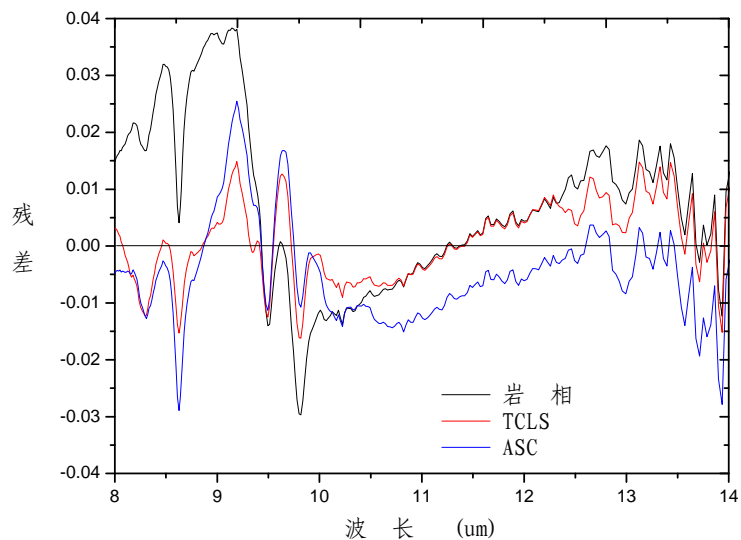


图4.3 不同模型的残差

表4.3 模型拟合光谱相似度分析

	相关系数	光谱角	残差均值	均方根误差
岩相分析	0.9893	0.99981	0.0084	0.0181
TCLS	0.9972	0.99997	0.0057	0.0069
ULS	0.9972	0.99997	0.0057	0.0069
ANC	0.9972	0.99997	0.0057	0.0069
ASC	0.9957	0.99994	0.0086	0.0103
FCLS	0.9957	0.99994	0.0086	0.0103

2) 盲端元

在已知端元的情况下，TCLS、ULS 和 ANC 模型比 ASC、FCLS 反演结果更好，而且比岩相分析得到的拟合光谱，更近似于原始的火成岩光谱。而在实际遥感应用中，岩石所含的矿物成分，即端元也是需要求解的目标，因此盲端元条件下进行光谱解混更适合实际地质应用。

表 4.4 显示了未知端元的情况下，最小二乘在不同约束模型下线性解混的结果。在 ULS 和 ASC 模型中，反演的端元丰度有为负值的情况，严重影响了岩石中实际矿物的识别，不能与其它模型进行比较。因此，对模型结果中的负值进行删除，迭代求解。

表4.4 盲端元下最小二乘解混结果

端元	模型 (w)			
	ULS	ANC	ASC	FCLS
钠长石 (Albite)	0.0939	0.1662	0.0912	0.1193

续表 4.4 (一)

石英 (Quartz)	0.2662	0.2569	0.2666	0.2475
微斜长石 (Microcline)	0.5092	0.2898	0.5053	0.2469
黑云母 (Biotite)	0.0208	0.0881	0.0274	0.0884
中长石 (Andesine)	-0.9447	0.0000	-0.9788	0.0000
钙长石 (Anorthite)	0.2356	0.0000	0.2381	0.0000
铁铝榴石 (Almandine)	-0.0597	0.0000	-0.0595	0.0000
无水石膏 (Anhydrite)	0.0978	0.1122	0.1000	0.1547
歪长石 (Anorthoclase)	-0.2290	0.0000	-0.2254	0.0000
古铜辉石 (Bronzite)	0.0524	0.0000	0.0409	0.0000
绿泥石 (Chlorite)	-0.0592	0.0000	-0.0591	0.0000
方解石 (Calcite)	0.1097	0.0539	0.1109	0.0936
透辉石 (Diopside)	0.2642	0.0000	0.2622	0.0000
白云石 (Dolomite)	0.0002	0.0000	0.0012	0.0000
顽火辉石 (Enstatite)	0.0207	0.0000	0.0207	0.0000
萤石 (Fluorite)	-0.0182	0.0000	-0.0026	0.0000
镁橄榄石 (Forsterite)	-0.0638	0.0027	-0.0595	0.0013
石膏 (Gypsum)	0.0188	0.0000	0.0259	0.0000
铁钙辉石 (Hedenbergite)	-0.6527	0.0000	-0.6383	0.0000
伊利石 (Illite)	-0.4917	0.0000	-0.5078	0.0000
硬玉 (Jadeite)	-0.1214	0.0000	-0.1347	0.0000
锰钙辉石 (Johannsenite)	0.5749	0.0000	0.5695	0.0000
高岭石 (Kaolinite)	-0.0393	0.0000	-0.0482	0.0000
红钠闪石 (Katophorite)	0.1774	0.0000	0.1881	0.0000
拉长石 (Labradorite)	-0.1349	0.0000	-0.1204	0.0000
镁角闪石 (Magnesiohornblende)	-0.0017	0.0240	-0.0009	0.0171
镁钠闪石 (Magnesiokatophorite)	0.0751	0.0000	0.0680	0.0000
菱镁矿 (Magnesite)	0.0533	0.0000	0.0499	0.0000
磁铁矿 (Magnetite)	0.1110	0.0000	0.1201	0.0000
孔雀石 (Malachite)	-0.1885	0.0000	-0.1963	0.0000
钙蒙脱石 (Montmorillonite (Ca))	-0.1320	0.0000	-0.0644	0.0000
钠蒙脱石 (Montmorillonite (Na))	-0.0752	0.0000	-0.0373	0.0000
白云母 (Muscovite)	0.0206	0.0000	0.0427	0.0313
绿脱石 (Nontronite)	-0.1047	0.0000	-0.1338	0.0000
奥长石 (Oligoclase)	0.7142	0.0000	0.6914	0.0000
橄榄石 (Olivine Fo10)	0.0745	0.0000	0.0736	0.0000
正长石 (Orthoclase)	0.0599	0.0000	0.0706	0.0000

续表 4.4 (二)

锰三斜辉石 (Pyroxmangite)	0.0067	0.0000	0.0027	0.0000
蛇纹石 (Serpentine)	0.4279	0.0000	0.4266	0.0000
菱铁矿 (Siderite)	0.1595	0.0000	0.1546	0.0000
蒙脱石 (Smectite)	0.4116	0.0000	0.3924	0.0000
菱锌矿 (Smithsonite)	0.0467	0.0000	0.0501	0.0000
锂辉石 (Spodumene)	-0.0383	0.0000	-0.0403	0.0000
滑石 (Talc)	-0.0853	0.0000	-0.1187	0.0000
透闪石 (Tremolite)	-0.1463	0.0000	-0.1399	0.0000
硅灰石 (Wollastonite)	-0.0227	0.0000	-0.0247	0.0000
总计	0.9935	0.9938	1.0001	1.0001

表 4.5 显示了利用所有矿物端元对酸性火成岩进行光谱解混的结果。其中对 ULS、ASC 模型中的负值进行删除, 采用迭代方法求其最优解。在所有模型中, 端元丰度均为 0 的矿物已经略去。

表4.5 盲端元下最小二乘不同约束模型的光谱解混结果

端元	岩相 (w)	模型 (w)				
		TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
钠长石	0.36	0.3205	0.2118	0.2130	0.1548	0.1785
石英	0.34	0.2643	0.2499	0.2539	0.2445	0.2482
微斜长石	0.27	0.3958	0.2982	0.2786	0.2478	0.2423
黑云母	0.013		0.1010	0.0990	0.1167	0.1142
无水石膏	0		0.1042	0.1046	0.1499	0.1382
萤石	0		0	0	0	0.0036
镁橄榄石	0		0	0.0061	0	0.0154
红钠闪石	0		0	0	0.0585	0
镁角闪石	0		0	0.0296	0	0.0369
镁钠闪石	0		0	0.0028	0	0.0010
白云母	0		0	0	0.0278	0.0217
硅灰石	0		0.0279	0	0	0
总计	0.983	0.9806	0.993	0.9876	1	1
模型误差 (%)		6.35	8.86	8.19	10.67	10.06

研究表明, TCLS ($\Delta=0.07$) 反演结果最优, 可以准确识别岩石中主要的端元矿物, 反演结果其模型误差为 6.35%, 比确定端元的结果精度低, 这是由于岩石中黑云母的含量仅占 1.3%, 小于阈值, 因此未能被算法识别出。ULS 和 ANC 模型比 ASC 和 FCLS 表现要好, 其模型误差分别为 8.86%、8.19%、10.67%和 10.06%。虽然四种模型都可以识别主要的岩石组成矿物, 不过相比 TCLS 模型, 其反演结果中加入了不属于岩石的端元矿物, 其微小含量对主要端元矿物含量有

较大影响。这说明，TCLS 算法可以在未知端元的情况下，反演出主要的矿物端元，并消除岩石中不存在的微量矿物成分作为端元的影响；同时，TCLS 未能识别黑云母 ($w=1.3\%$)，这说明其对微量的矿物端元的识别能力有一定限制。

根据解得的矿物丰度值，可以计算其化学成分含量（表 4.7）。由于未能识别矿物黑云母，TCLS 算法反演的氧化物含量的最大误差为 3.14%，误差均值和均方根误差分别为 1.47%和 1.83%，低于已知端元的解的精度，但是其对于主要矿物端元的识别，及其含量反演要远优于传统的四种约束模型算法。其主要的化学成分 ($w>3\%$) 反演最大误差在 5%以内， $|\Delta W|$ 的均值为 1.47%，均方根误差为 1.83%，完全可以满足实际遥感地质应用需求。

表4.6 模型的化学成分反演

氧化物	测量值 (%)	模型 (w%)					
		岩相 分析	ΔW (%)	确定端元 (TCLS)	ΔW (%)	盲端元 (TCLS)	ΔW (%)
SiO ₂	75.8	76.37	0.92	74.18	-1.62	74.08	-1.72
Al ₂ O ₃	13.99	12.01	-1.88	12.96	-1.03	13.50	-0.49
Na ₂ O	4.31	3.20	-0.04	4.73	0.42	3.79	-0.52
K ₂ O	3.55	6.20	1.13	4.73	1.18	6.69	3.14
CaO	1.39	0.01	-1.38	0.03	-1.36		
FeO	0.30	0.26	-0.04	0.97	0.67		
MgO	0.14	0.18	0.04	0.69	0.55		
Fe ₂ O ₃	0.04	0.00	-0.04	0.00	-0.04		
TiO ₂	0.03	0.03	-0.03	0.11	0.08		
MnO	0.01	0.01	-0.01	0.04	0.03		
P ₂ O ₅	0.0	0	0	0.00	0.00		
总计	99.94	98.26	-	98.44		98.06	
最大误差 (%)			1.88		1.62		3.14
$ \Delta W $ 均值 (%)			0.50		0.63		1.47
RMSE_ $W_i \times 10^{-2}$			0.83		0.85		1.83

图 4.4 比较了根据 TCLS 模型反演端元丰度拟合的岩石光谱曲线与原始岩石光谱曲线。表 4.7 显示了其相似度指标，两条光谱曲线的相关系数和光谱角均在 0.99 以上，残差均值和均方根误差均小于 0.01，说明了 TCLS 模型的反演结果具有较高的精度。

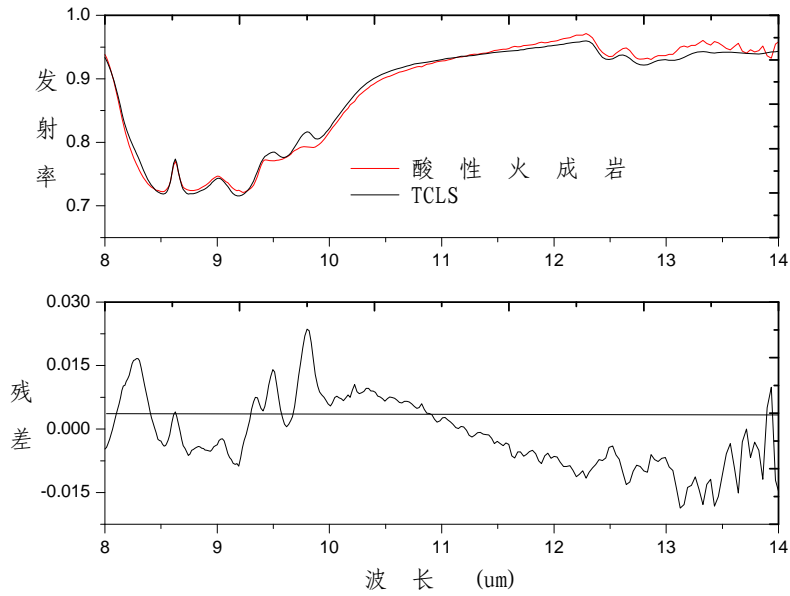


图4.4 模拟岩石发射率光谱及其残差

表4.7 模型拟合光谱相似度分析

	相关系数	光谱角	残差均值	均方根误差
TCLS ($\Delta=0.07$)	0.9962	0.99995	0.0069	0.0083

4.3.2 基性火成岩

实验的基性火成岩发射光谱来源于 JHU 光谱库，其化学成分如表 4.8 所示。

表4.8 基性火成岩的化学成分

氧化物	质量 (%)
SiO ₂	49.81
Al ₂ O ₃	19.35
CaO	9.48
MgO	6.16
FeO	5.34
Na ₂ O	3.86
Fe ₂ O ₃	2.38
TiO ₂	1.27
K ₂ O	1.18
MnO	0.08
P ₂ O ₅	0.08
总计	98.99

在其对应的辅助文档中，根据岩相分析，该岩石主要是由斜长石和角闪石及少量黑云母和其他微量物质组成，其中斜长石分析主要由奥长石和钙长石组成，角闪石分析显示均质成分相当于为红钠闪石。

该火成岩及其端元在热红外波段的发射光谱如图 4.5 所示。

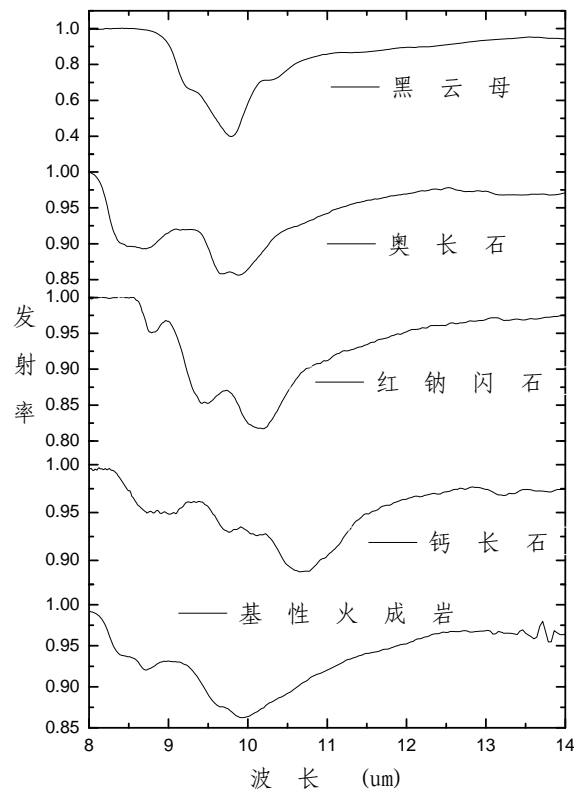


图4.5 基性火成岩及其端元的发射光谱

1) 确定端元

在已知端元的条件下，利用不同的约束模型，对基性火成岩进行最小二乘线性解混，提取其矿物含量丰度信息。表 4.9 给出了不同模型的反演结果，5 种模型的光谱解混结果比较接近。由于岩相分析没有给出具体长石亚类的百分比含量，因此不能评估解混模型精度。

表4.9 基性火成岩已知端元的光谱解混结果

端元	模型				
	TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
钙长石	0.2610	0.2610	0.2610	0.2555	0.2555
红钠闪石	0.2507	0.2507	0.2507	0.2035	0.2035
奥长石	0.4774	0.4774	0.4774	0.5115	0.5115
黑云母	0.0045	0.0045	0.0045	0.0296	0.0296
总计	0.9936	0.9936	0.9936	1.0001	1.0001

根据不同约束模型解得的矿物成分丰度信息，可以反过来合成岩石的发射率光谱。图 4.6 显示了不同模型的拟合光谱与原始的基性火成岩光谱的比较，由于 TCLS、ULS 和 ANC 模型，ASC 和 FCLS 模型的反演结果相同，因此，只选择

TCLS 模型和 ASC 模型的拟合光谱曲线。可以看出，不同模型与原始岩石的光谱曲线之间的残差，以 TCLS 模型残差最小，精度最高。表 4.10 对模型的合成光谱曲线与原始发射率曲线间的相似度分析也表明，TCLS、ULS 和 ANC 模型的模拟光谱与原始光谱曲线最相似。

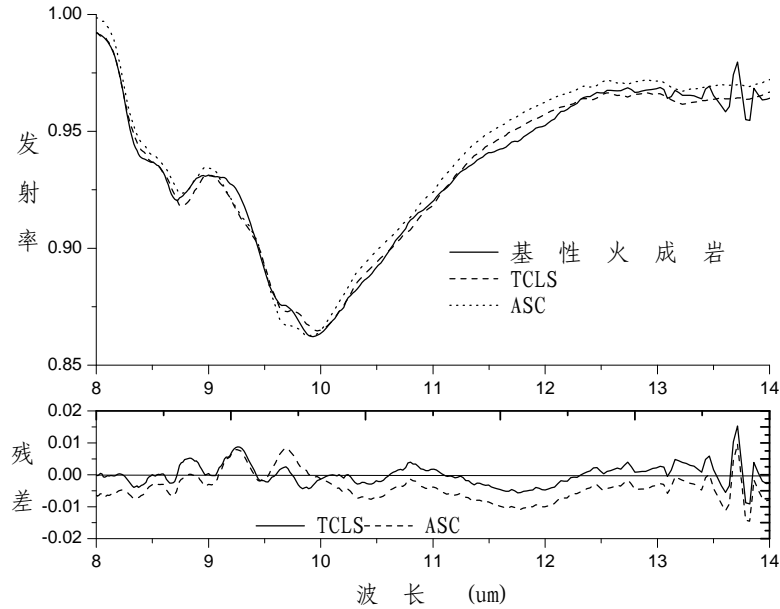


图4.6 不同模型的模拟发射率光谱及其残差

表4.10 模型拟合光谱相似度分析

	相关系数	光谱角	残差均值	均方根误差
TCLS	0.9955	0.99999	0.0024	0.0033
ULS	0.9955	0.99999	0.0024	0.0033
ANC	0.9955	0.99999	0.0024	0.0033
ASC	0.9936	0.99998	0.0050	0.0057
FCLS	0.9936	0.99998	0.0050	0.0057

2) 盲端元

同样利用全部 46 条矿物光谱作为端元，对基性火成岩进行盲端元解混。

表 4.11 显示了 5 种模型在未知端元的情况下的解混结果，其中 TCLS 模型 ($\Delta=0.03$) 可以准确识别岩石中所含有主要矿物端元，其反演结果与在确定端元条件下的结果基本相当，绝对误差小于 2%，这说明 TCLS 算法具有在盲端元条件下准确识别端元矿物的能力，但其未能识别黑云母 ($w<3\%$)，说明其对微量矿物识别能力有限；ULS、ANC、ASC 和 FCLS 模型对矿物端元也有一定的识别能力，以 ULS 和 ASC 反演结果更好，但其受错误选为端元的矿物成分影响，其

解混精度比与 TCLS 相比，有较大差距。

表4.11 盲端元下不同约束模型的解混结果

端元	模型				
	TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
钙长石	0.2493	0.2566	0	0.2861	0
红钠闪石	0.2646	0.2021	0.1399	0.2770	0.1210
奥长石	0.4795	0.4336	0.2609	0.3413	0.2334
黑云母	0	0.0119	0.0166	0.0347	0.0286
铁铝榴石	0	0	0.0090	0	0.0116
无水石膏	0	0.0056	0.0079	0.0358	0.0251
古铜辉石	0	0	0.0074	0	0
镁橄榄石	0	0	0.0294	0	0.0529
拉长石	0	0	0.3753	0	0.2971
镁钠闪石	0	0.0427	0.0074	0	0
菱镁矿	0	0	0	0.0252	0
孔雀石	0	0.0413	0.0771	0	0.0922
钠蒙脱石	0	0	0	0	0.0468
白云母	0	0	0	0	0.0096
蛇纹石	0	0	0.0251	0	0
透闪石	0	0	0.0382	0	0.0817
总计	0.9934	0.9938	0.9942	1.0001	1

根据解得的矿物丰度值，可以计算其化学成分含量。由表 4.12 可知，在已知端元的条件下，TCLS、ULS 和 ANC 模型反演岩石主要化学成分的精度最高，最大误差小于 5%， $|\Delta W|$ 的均值为 1.73%，均方根误差为 2.22%；在盲端元解混的条件下，TCLS 模型反演的最大误差为 5.83%， $|\Delta W|$ 的均值为 2.25%，均方根误差为 3.00%，比确定端元条件下的反演精度略低。

表4.12 模型的化学成分反演结果

氧化物	实测 (w%)	模型 (w%)					
		确定端元 (TCLS)	ΔW (%)	确定端元 (ASC)	ΔW (%)	盲端元 (TCLS)	ΔW (%)
SiO ₂	49.81	52.19	2.38	52.89	3.08	52.27	2.46
Na ₂ O	3.86	5.06	1.20	5.10	1.24	5.15	1.29
Al ₂ O ₃	19.35	21.70	2.35	22.26	2.91	21.35	2.00
K ₂ O	1.18	0.74	-0.44	0.92	-0.26	0.72	-0.46
CaO	9.48	8.88	-0.60	8.66	-0.82	8.73	-0.75
FeO	5.34	0.76	-4.58	1.30	-4.04	0.67	-4.67
Fe ₂ O ₃	2.38	5.14	2.76	2.71	0.33	2.90	0.52

续表 4.12							
MgO	6.16	2.82	-3.34	0.29	-5.87	0.33	-5.83
MnO	0.08	0.32	0.24	0.25	0.17	0.23	0.15
TiO ₂	1.27	0.23	-1.04	0.01	-1.26	0.01	-1.26
P ₂ O ₅	0.08	0.01	-0.07	4.17	4.09	5.42	5.34
总质量	98.99	97.85		98.56		97.78	
最大误差			4.58		5.87		5.83
ΔW 均值			1.73		2.19		2.25
RMSE_W			2.22		2.85		3.00

图 4.7 显示了根据 TCLS 模型反演结果模拟的岩石光谱曲线，及其与原始岩石光谱曲线的差值。表 4.13 表明，其残差绝对值均值为 0.0024，均方根误差为 0.0033，模拟光谱与测量的岩石具有很强的相似性。

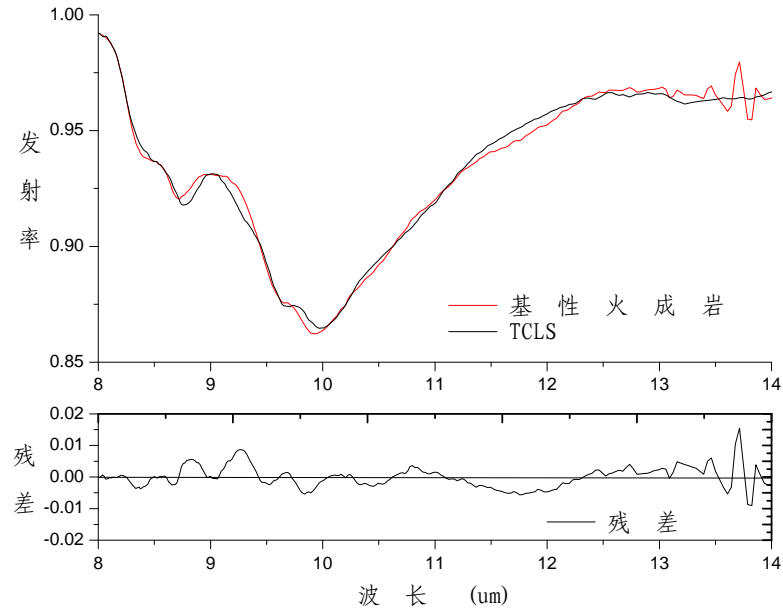


图4.7 模拟岩石发射率光谱及其残差

表4.13 模型拟合光谱相似度分析

	相关系数	光谱角	残差均值	均方根误差
TCLS	0.9955	0.99999	0.0024	0.0033

4.3.3 流纹岩

流纹岩发射率光谱来源于 USGS 光谱库。根据光谱库辅助文档，该岩石由斜长石、石英、绿泥石以及蛇纹石等矿物组成。其化学成分及含量见表 4.14。

表4.14 流纹岩的化学成分

氧化物	质量 (%)
SiO ₂	78.57
Al ₂ O ₃	12.33
Na ₂ O	5.04
K ₂ O	1.85
CaO	0.14
FeO	0.81
MgO	0.14
Fe ₂ O ₃	0.04
TiO ₂	0.05
MnO	0.01
P ₂ O ₅	0.02
总计	99.0

该流纹岩及其端元在热红外波段的发射光谱如图 4.8 所示。

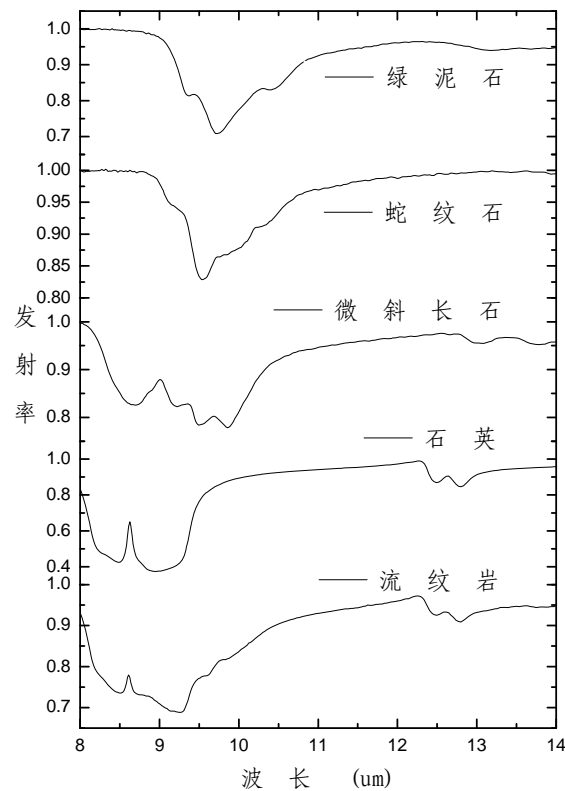


图4.8 流纹岩及其端元矿物光谱

1) 确定端元

在已知端元的情况下，对流纹岩进行线性解混，不同模型解得的矿物含量见表 4.2。TCLS、ULS 和 ANC 模型的反演结果仍然一致，ASC 和 FCLS 模型的结果也相同。5 种模型反演的石英和微斜长石含量基本一致，反演的绿泥石和蛇纹石的含量误差较大，这可能是由于绿泥石和蛇纹石发射光谱形状比较相似的缘故

(见图 4.8)。由于没有实测的矿物含量信息, 只能通过反演的矿物丰度计算岩石的化学成分进行判断。

表4.15 已知端元的光谱解混结果

端元	模型 (w)				
	TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
石英	0.3652	0.3652	0.3652	0.3940	0.3940
微斜长石	0.2941	0.2941	0.2941	0.2897	0.2897
绿泥石	0.1359	0.1359	0.1359	0.3056	0.3056
蛇纹石	0.1887	0.1887	0.1887	0.0106	0.0106
总计	0.9839	0.9839	0.9839	0.9999	0.9999

根据不同约束条件解得的矿物丰度信息, 可以求得化学含量 (表 4.16)。由于 TCLS、ULS 和 ANC 模型的解一致, ASC 和 FCLS 模型的解相同, 因此只列了 TCLS 模型和 ASC 模型的结果。结果表明, TCLS 模型比 ASC 模型精度要高, 其最大误差达到 6.9%, $|\Delta W|$ 均值和 RMSE_W 分别为 1.79% 和 3.03%。

表4.16 不同模型的化学成分反演结果

氧化物	实测 (w%)	模型 (w%)			
		TCLS	ΔW (%)	ASC	ΔW (%)
SiO ₂	78.57	72.22	-6.35	67.37	-11.20
Al ₂ O ₃	12.33	10.35	-1.98	11.23	-1.10
Na ₂ O	5.04	2.29	-2.75	0.00	-5.04
K ₂ O	1.85	3.17	1.32	4.90	3.05
CaO	0.14	0.01	-0.13	0.00	-0.14
FeO	0.81	1.00	0.19	2.24	1.43
MgO	0.14	7.04	6.9	9.73	9.59
Fe ₂ O ₃	0.04	0.00	-0.04	0.00	-0.04
TiO ₂	0.05	0.02	-0.03	0.02	-0.03
MnO	0.01	0.02	0.01	0.04	0.03
P ₂ O ₅	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.02
总质量	98.99	96.12		96.53	
最大误差			6.9		11.20
$ \Delta W $ 均值			1.79		2.88
RMSE_W			3.03		4.82

图 4.9 显示了根据不同模型反演的丰度值, 而拟合的流纹岩发射光谱与原始的岩石的光谱曲线, 及其光谱曲线之间的残差, 可以看出, TCLS 模型残差最小, 对模型的拟合光谱曲线与原始发射率曲线间的相似度分析也表明, TCLS 模型模拟与原始光谱曲线最相似 (表 4.17), 但是石英特征吸收波段处的最大残差表明,

石英的含量估计存在一定误差，这与表 4.16 中最大误差为 SiO₂ 相一致。

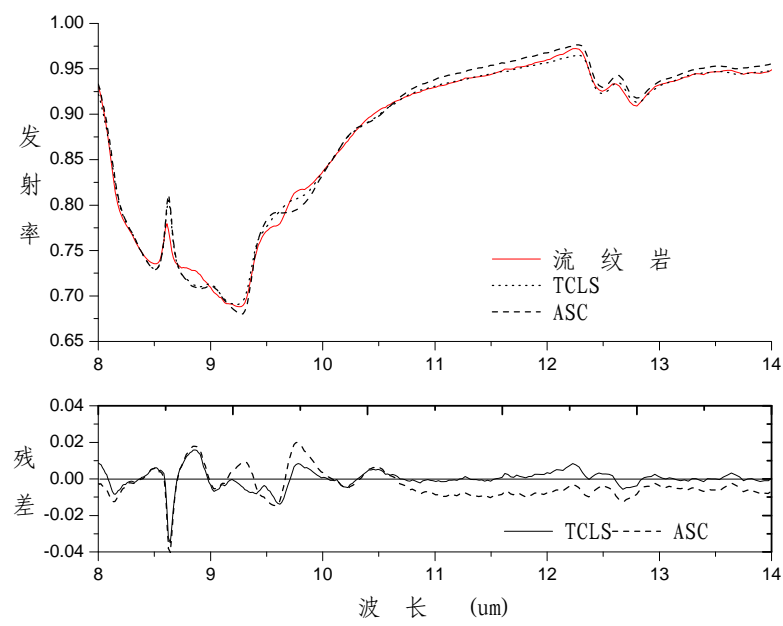


图4.9 不同模型的模拟发射率光谱及其残差

表4.17 模型拟合光谱相似度分析

	相关系数	光谱角	残差均值	均方误差
TCLS	0.9979	0.99997	0.0040	0.0061
ULS	0.9979	0.99997	0.0040	0.0061
ANC	0.9979	0.99997	0.0040	0.0061
ASC	0.9967	0.99995	0.0072	0.0089
FCLS	0.9967	0.99995	0.0072	0.0089

2) 盲端元

表 4.18 显示了在未知端元的情况下，5 种模型的解混结果。TCLS 模型 ($\Delta=0.04$) 反演结果与确定端元反演结果相同，能够反演出主要的矿物端元，ULS 其次，反演结果与 TCLS 接近，增加了钠长石、无水石膏和白云母三种矿物作为端元，ANC、ASC 和 FCLS 反演的矿物端元过多，影响其丰度反演，仅石英含量比较接近。

表4.18 盲端元条件下的解混结果

端元	模型(w)				
	TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
石英	0.3652	0.3555	0.3464	0.3396	0.3179

续表 4.18

微斜长石	0.2941	0.2121	0.1867	0.1228	0.1459
------	---------------	---------------	---------------	---------------	---------------

绿泥石	0.1359	0.1237	0.0755	0.2127	0.1402
蛇纹石	0.1887	0.1861	0.1143	0.1075	0
钠长石	0	0.0634	0.0850	0.0317	0.0481
无水石膏	0	0.0157	0.0201	0.0824	0.0684
黑云母	0	0	0.0316	0	0.0252
萤石	0	0	0.0131	0	0.0603
硬玉	0	0	0.0359	0	0.0079
高岭石	0	0	0.0412	0	0.0581
镁钠闪石	0	0	0.0249	0	0.0329
磁铁矿	0	0	0	0.0179	0
钠蒙脱石	0	0	0	0	0.0149
白云母	0	0.0307	0.0127	0.0854	0.0802
总计	0.9839	0.9872	0.9874	1	1

表 4.19 显示了根据解得的矿物丰度值，计算的 TCLS 和 ULS 模型反演的岩石化学成分（ANS、ASC 和 FCLS 由于反演的矿物端元过多，没有计算其化学成分）。结果表明，TCLS 模型比 ULS 模型反演的化学成分更精确，其均方根误差相对提高了 30%。

表4.19 模型的化学成分反演

氧化物	实测 (w%)	模型 (w%)			
		TCLS	ΔW (%)	ULS	ΔW (%)
SiO ₂	78.57	72.22	-6.35	68.43	-10.14
Al ₂ O ₃	12.33	10.35	-1.98	10.25	-2.08
Na ₂ O	5.04	2.29	-2.75	0.01	-5.03
K ₂ O	1.85	3.17	1.32	4.98	3.13
CaO	0.14	0.01	-0.13	0.01	-0.13
FeO	0.81	1.00	0.19	1.69	0.88
MgO	0.14	7.04	6.9	9.41	9.27
Fe ₂ O ₃	0.04	0.00	-0.04	0.00	-0.04
TiO ₂	0.05	0.02	-0.03	0.01	-0.04
MnO	0.01	0.02	0.01	0.03	0.02
P ₂ O ₅	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.02
总质量	99.0	96.12		94.82	
最大误差			6.9		10.14
ΔW 均值			1.79		2.80
RMSE_W			3.03		4.56

图 4.10 显示了根据 TCLS、ULS、ASC、FCLS4 种模型反演结果的拟合流纹岩的发射光谱曲线，及其残差值。结果表明，TCLS 模型拟合光谱与原始光谱匹配最好，ULS 模型其次，FCLS 模型最差。这与表 4.20 中的均方根误差相一致。

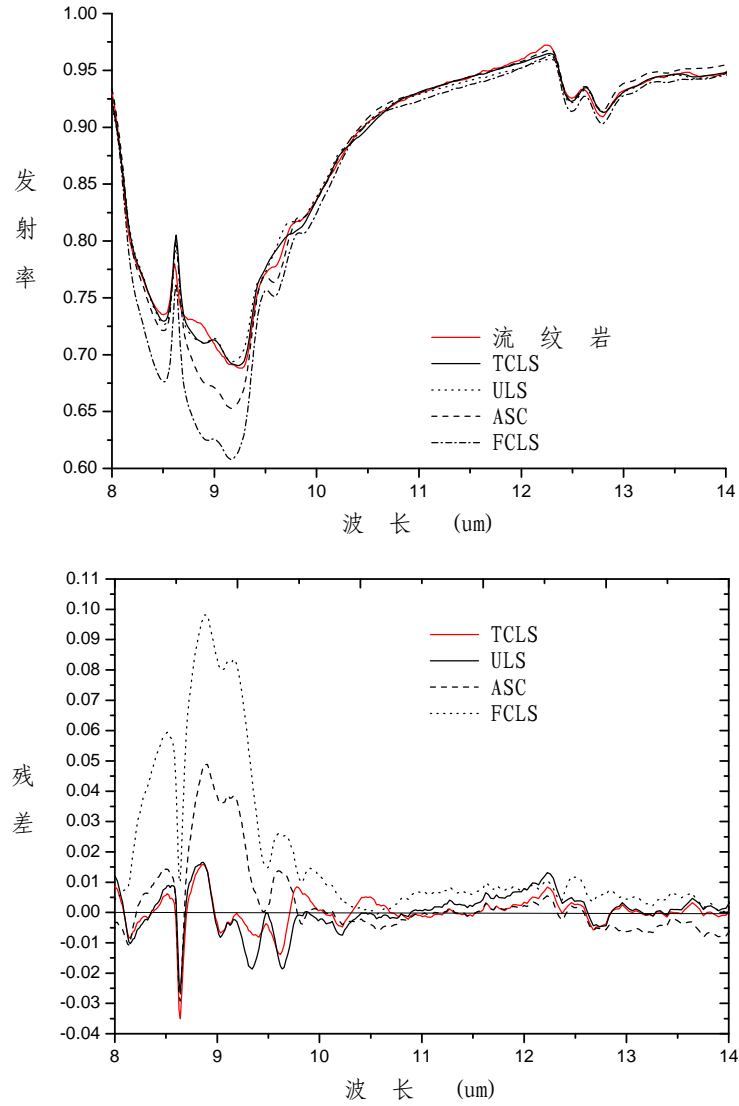


图4.10 模拟岩石发射率光谱及其残差

表4.20 模型模拟光谱相似度分析

	相关系数	光谱角	残差均值	均方根误差
TCLS	0.9979	0.99997	0.0040	0.0061
ULS	0.9971	0.99996	0.0053	0.0072
ASC	0.9949	0.99985	0.0091	0.0151
FCLS	0.9921	0.99936	0.0237	0.0366

4.3.4 超基性火成岩

实验的超基性火成岩发射光谱来源于 JHU 光谱库。在不知道其矿物组成的情况下，只能对其进行盲端元光谱解混。其化学成分见表 4.21 所示。

表4.21 超基性火成岩的化学成分

氧化物	质量 (%)
-----	--------

SiO ₂	43.08
Al ₂ O ₃	13.1
CaO	12.13
MgO	9.66
FeO	7.32
Na ₂ O	3.49
K ₂ O	3.39
Fe ₂ O ₃	2.6
TiO ₂	2.6
P ₂ O ₅	0.54
MnO	0.2
总计	99.94

该火成岩在热红外波段的发射光谱如图 4.11 所示。

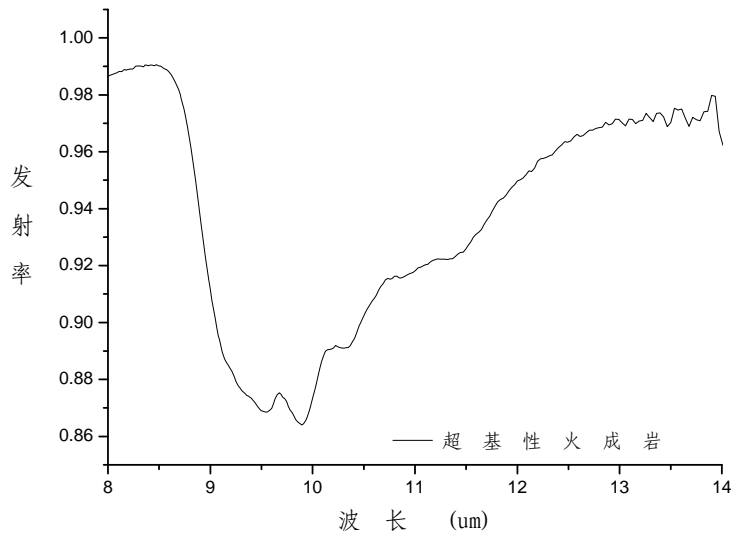


图4.11 超基性火成岩的发射光谱

在不知道端元的情况下，只能对超基性火成岩进行盲端元光谱解混，反演其矿物丰度信息。表 4.22 显示了 5 种模型在盲端元条件下的解混结果，其中在所有模型中，丰度为 0 的矿物已经略去。5 种模型中以 FCLS 模型解的矿物端元最多，多达 14 种，TCLS 模型 ($\Delta=0.05$) 得到的矿物端元最少，只有 6 种矿物，其中有 4 种矿物在 5 个模型中均有反演，且矿物丰度比较接近，很可能为岩石确定存在的矿物端元。这说明 TCLS 模型能够排除微量矿物的干扰，具有准确识别矿物端元的能力。

表4.22 盲端元条件下不同模型的解混结果

端元	模型 (w)				
	TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
黑云母	0.1202	0.1132	0.0971	0.0979	0.0832
顽火辉石	0.1591	0.1530	0.1055	0.1298	0.1171
锰钙辉石	0.1615	0.1707	0.1600	0.2059	0.1053
镁钠闪石	0.1161	0.1181	0.0938	0.1263	0.0751
伊利石	0.2996	0.2593	0	0.2501	0
磁铁矿	0.1426	0	0.2189	0	0.0988
古铜辉石	0	0	0.0285	0	0.0190
透辉石	0	0.0131	0.0228	0.0035	0.0398
萤石	0	0	0.0371	0.0018	0.0232
高岭石	0	0	0	0	0.0209
菱镁矿	0	0.0092	0	0	0
钙蒙脱石	0	0	0	0.0917	0
白云母	0	0	0.0391	0.0056	0.0203
绿脱石	0	0.1452	0	0	0.1137
锰三斜辉石	0	0	0.1130	0	0.1892
蛇纹石	0	0.0170	0.0765	0.0874	0.0865
硅灰石	0	0	0.0141	0	0.0081
总计	0.9991	0.9988	1.0064	1	1.0002

根据 TCLS 模型解得的矿物丰度，可以计算其化学成分含量。

表4.23 TCLS 模型的化学成分反演结果

氧化物	测量(%)	TCLS	$\Delta W(\%)$
SiO ₂	43.08	45.29	2.21
Al ₂ O ₃	13.1	7.56	-5.54
CaO	12.13	5.56	-6.57
MgO	9.66	11.87	2.21
FeO	7.32	9.11	1.79
Na ₂ O	3.49	0.72	-2.77
K ₂ O	3.39	3.23	-0.16
Fe ₂ O ₃	2.6	9.05	6.45
TiO ₂	2.6	0.47	-2.13
P ₂ O ₅	0.54	0.00	-0.54
MnO	0.2	3.58	3.38
总质量	98.11	96.45	
最大误差			6.57
ΔW 均值			3.07
RMSE_W			3.72

表 4.23 显示了 TCLS 模型反演的化学成分计算结果，其最大误差为 6.57%， $|\Delta W|$ 均值和均方根误差分别为 3.07%和 3.72%，可以说明其反演的矿物端元及其

含量是合理的。其模拟的岩石光谱曲线与测量的岩石光谱曲线相比，也显示了很强的相似性，其最大残差不超过 0.01（图 4.12），残差均值为 0.0027，光谱均方根误差为 0.0036（见表 4.24）。

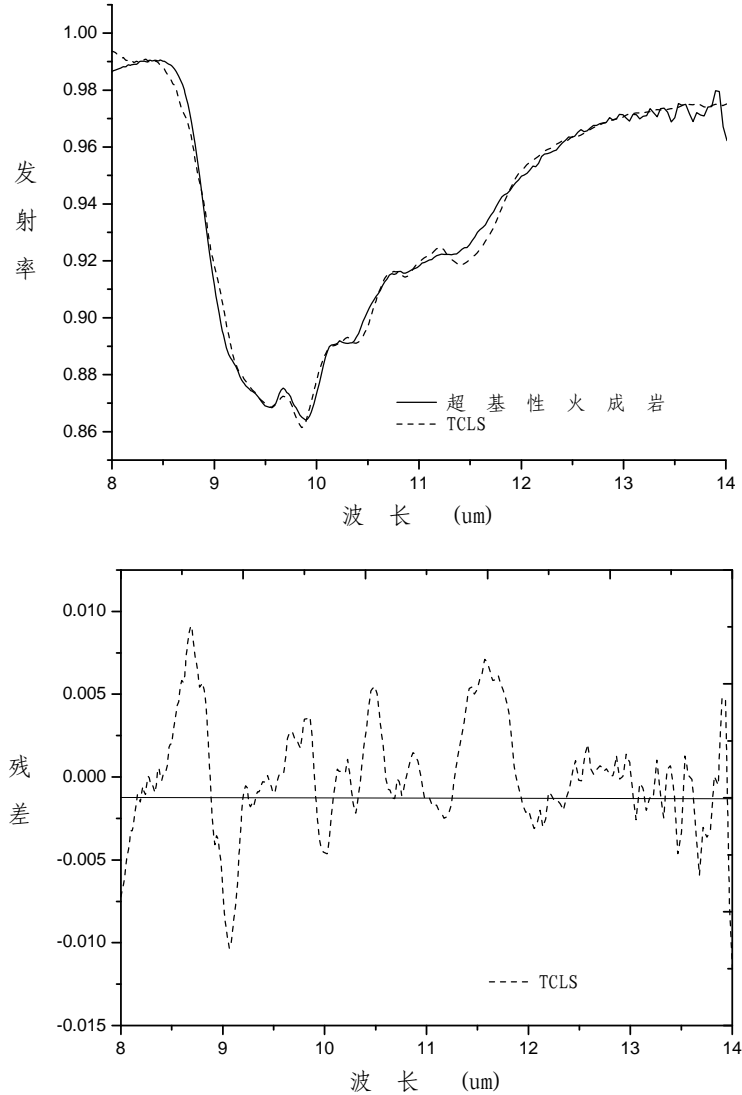


图4.12 模拟岩石发射率光谱及其残差

表4.24 模型拟合光谱相似度分析

	相关系数	光谱角	残差均值	均方根误差
TCLS	0.9963	0.99999	0.0027	0.0036

4.4 本章小结

本章通过对不同光谱库中的实测岩石发射率光谱，利用 46 种矿物作为端元，反演其矿物端元及丰度，并计算其化学成分。在此过程中，针对最小二乘的不同

约束模型算法, 比较其反演结果的可靠性及精度, 同时针对这些约束模型的不足进行了改进, 提出了 TCLS 模型, 从而可以更好的识别岩石中的矿物及其含量。实验结果表明:

1) 在确定端元的条件下, TCLS、ULS 和 ANC 模型的反演结果具有一致性; ASC 和 FCLS 的解也具有一致性; 同时, TCLS、ULS 和 ANC 模型比 ASC 和 FCLS 反演矿物含量精度要高, 其拟合岩石光谱与实际测量的岩石发射率光谱更相似。这可能是因为实际中, 往往有些微小的矿物成分未被考虑, 矿物端元的和并不为 1。因此 ASC 和 FCLS 模型的解反而引入其它误差, 比 TCLS、ULS 和 ANC 反演结果的精度较低。

2) 在盲端元条件下, TCLS 模型可以准确识别岩石中主要的矿物端元, 剔除微量矿物对其解混结果的影响, 而 ULS 模型、ANC 模型、ASC 模型和 FCLS 模型反演结果中, 虽然也包括实际含有的矿物端元, 但是其解中含有诸多不存在的矿物端元, 受其影响, 丰度反演的精度较差。

3) 对几种岩石的化学分析可以看出, 各种岩石中含有多种矿物成分, 但是对热红外发射光谱来说, 无论波长的细分程度, 无法检测到一些含量很低的矿物对其光谱行为的影响。因此, 实际上对该岩石发射率影响最大的就只剩下那些占主导地位的化学元素或矿物。以 TCLS 算法的结果来看, 含量为 5% 以上的矿物容易识别, 其丰度反演结果比较可信。

4) 根据多种不同的岩石发射光谱解混结果, TCLS 模型可以作为 FISS-TR 在地质方面应用的数据反演算法。

第五章 基于发射光谱的矿物精细识别影响因素分析

5.1 光谱分辨率对矿物精细识别的影响

5.1.1 光谱分辨率的定义

光谱分辨率(Spectral Resolution)指探测器在波长方向上的记录宽度, 又称波段宽度(Bandwidth)。如下图 5.1 所示, 纵坐标(Y 轴)为探测器的光谱响应, 它是横坐标(X 轴)所代表的波长的函数。光谱分辨率被严格定义为仪器在达到 50%光谱响应时的波长宽度(童庆禧等, 2006)。

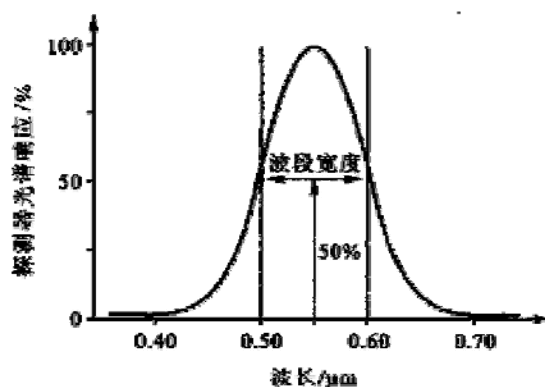


图5.1 光谱分辨率定义

严格地说, 波段的带宽和光谱分辨率是两个不同的概念。光谱分辨率不仅与波段的带宽有关, 还与光谱采样间隔有关。根据采样定理, 在带宽范围内必须至少采集两个样本, 才不会造成光谱高频信息的损失。但在实际应用中, 通常指传感器的波段数目、每个通道的中心波长位置和波段带宽, 这三个因素共同决定光谱分辨率(赵英时等, 2003)。

高光谱遥感岩性识别和矿物填图主要利用不同岩矿种类、矿物丰度和不同组分的光谱特征差异, 特别是光谱吸收谱带波长位置、吸收深度和谱带形态特征。光谱分辨率直接影响对岩矿光谱吸收谱带及其形态特征的探测和分辨能力, 从而直接影响高光谱数据对矿物种类及其成分的区分能力和识别精度。

光谱分辨率越高, 专题研究的针对性越强, 对物体的识别精度越高。高光谱分辨率遥感的应用, 是进行定量分析的前提, 它大大提高了遥感应用分析的效果。

但是光谱分辨率并不是简单的越高越好，而要区别对待。波段分得越细，各波段数据间的相关性可能越大，增加数据的冗余度，往往相邻波段间的数据相互交叉、重复，而未必能达到预期的识别效果。同时，波段的增多，光谱分辨率的提高，必然导致传感器成本的增加，也会降低图像的空间分辨率和信噪比，给数据传输、处理和鉴别带来新的困难。尤其是能达到几十甚至上百个的波段的星载/机载高光谱热红外数据，还是比较稀少的。因此有必要分析波段数和光谱分辨率对岩矿信息定量提取的影响，从而保证传感器获取的数据的科学性和先进性。

5.1.2 光谱分辨率的数值模拟分析

本文对 46 种端元的发射光谱曲线进行不同光谱分辨率的数值模拟，研究不同光谱分辨率下，矿物发射光谱及其光谱特征的表现。

本研究对每种矿物都进行了 6 次模拟。通过重采样和归一化的处理分别模拟波段数为 8、16、32、64、128、256 的发射光谱曲线 (图 5.2)。图中显示了 4 种具有典型波谱特征的矿物发射光谱曲线 (窄单吸收谷、宽单吸收谷、双吸收谷和多吸收谷)，每种矿物有 7 条光谱曲线，从上到下分别代表原始光谱曲线和重采样为 256、128、64、32、16 和 8 个波段的光谱曲线。由下列典型的矿物光谱模拟图可看出，大部分矿物光谱分辨率为 $0.354\mu\text{m}$ (波段数为 16) 时吸收特征仍然明显，但是谱带特征 (中心波长位置、深度、宽度和对称性) 都会发生不同程度的改变。

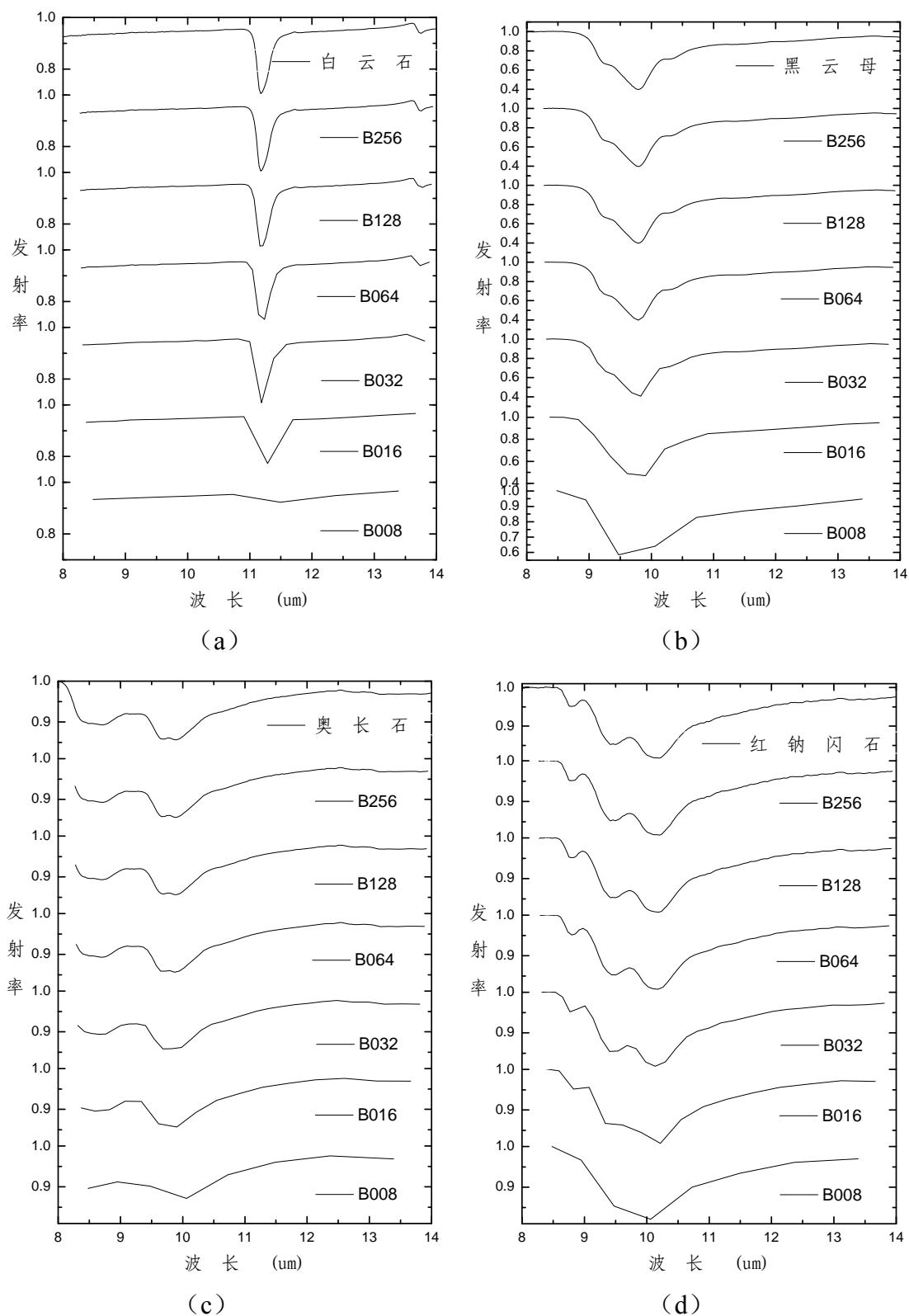


图5.2 不同分辨率的矿物发射光谱曲线 (a) 白云石, (b) 黑云母, (c) 奥长石, (d) 红钠闪石

对于那些较窄的吸收谱带，它们的峰值波长位置、宽度、深度和对称性随着光谱分辨率的变化从 128 个波段开始都会发生明显变化，深度变浅，宽度变大，形态变缓，中心波长位置有所飘移，如图 5.2 (a)；对于那些较宽的特征谱带，随着光谱分辨率的降低，其谱带的特征谱带的吸收深度、宽度及峰值波长位置基本上不变，如图 5.2 (b)，但形态逐渐变缓，中心波长位置越来越不明显；而对于那些具有双吸收谱带，甚至更多吸收谱带的矿物，其在相邻波长位置上的吸收峰随光谱分辨率的降低，虽然形态逐渐变缓，但是在波段数 16 时，还可以保持吸收峰的个数，吸收峰波长也发生偏移，如图 5.2 (c) 和图 5.2 (d)。

5.1.3 不同光谱分辨率数据的矿物含量反演

为了分析光谱分辨率对矿物反演精度的影响，本文分析了以上述酸性火成岩光谱数据，在不同波段数时（图 5.3），矿物端元信息定量提取的结果。

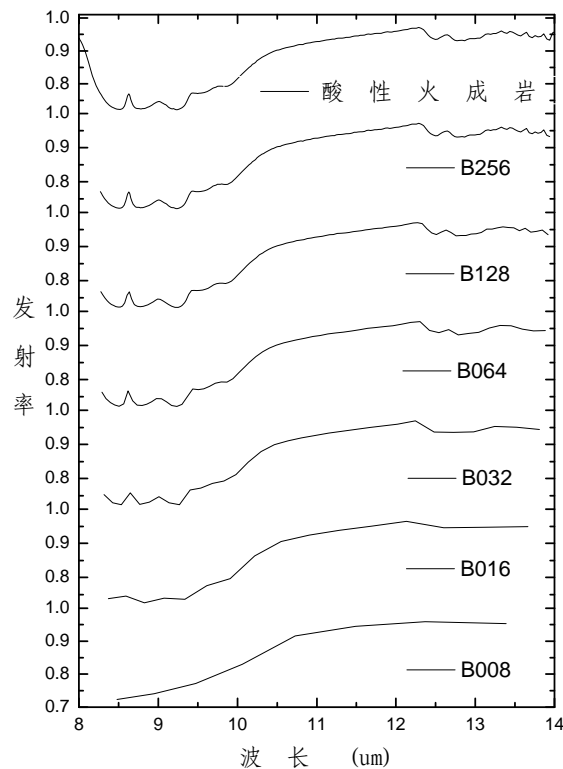


图5.3 不同光谱分辨率的酸性火成岩发射光谱曲线

1) 确定端元

在已知端元的条件下，利用不同的最小二乘约束模型对酸性火成岩进行解混。表 5.1 显示了不同光谱分辨率下，矿物含量的反演误差。由于在不同光谱分辨率

下, TCLS 模型、ULS 模型和 ANC 模型反演丰度相同, ASC 和 FCLS 反演丰度也相同, 因此, 表中只列出 TCLS 模型和 ASC 模型的结果。

表5.1 不同光谱分辨率下的矿物含量反演误差

波段数	光谱分辨率(μm)	TCLS(w%)		ASC(w%)	
		平均模型误差	均方根误差 ^a	平均模型误差	均方根误差
B279	0.021	3.63	0.85	5.57	0.97
B256	0.022	3.11	0.97	3.66	1.01
B128	0.044	3.10	0.97	3.67	1.01
B064	0.089	3.06	0.97	3.65	1.01
B032	0.177	3.21	0.97	3.62	1.02
B016	0.354	2.92	0.91	3.18	1.01
B008	0.709	14.26 ^b	5.04	13.98 ^b	5.30

注: B279、B256、B128、B064、B032、B016、B008 分别表示波段数为 279 (原始光谱)、256、128、64、32、16 和 8。^a 为反演计算的氧化物化学含量与实测含量的均方根误差。

^b 当波段数为 8 时, 模型中端元微斜长石矿物不能被识别, 其丰度反演为 0, 因此只以其余三个端元进行解混。

由表 5.1 可以看出, 在确定端元的情况下, 光谱分辨率从初始的 0.021 μm (279 波段) 降到 0.354 μm (16 波段) 时, 矿物含量反演的精度基本保持不变, 这可能与其光谱吸收宽度有关; 256 个波段的反演的模型精度比原始光谱反演的模型精度更好, 这可能是因为 256 波段数据去除了原光谱前 (8.002 μm ~8.270 μm) 后 (13.939 μm ~14.015 μm) 误差较大的部分。当分辨率降到 0.709 μm (8 波段) 时, 岩石发射光谱的吸收特征变得不明显, 端元矿物识别出现错误, 反演的模型精度误差和均方根误差也因此急剧降低, 其化学成分含量均方根误差大于 5%, 最大误差超过 8% (为 SiO_2)。

表 5.2 显示了不同光谱分辨率下, 不同约束模型拟合的光谱与实测岩石光谱的相似程度。由于不同模型计算得到的光谱角的数值都接近于 1, 不能反映不同模型间的差异, 因此表中只列出相关系数作为评价指标。同理, 在残差均值和均方根误差中, 均方根误差变化较大, 因此, 只列出均方根误差作为光谱相似度的评价依据。

表5.2 不同光谱分辨率下的矿物丰度反演光谱拟合精度

波段数	光谱分辨率(μm)	TCLS		ASC	
		相关系数	均方根误差	相关系数	均方根误差
B279	0.021	0.9972	0.0069	0.9957	0.0103
B256	0.022	0.9973	0.0069	0.9957	0.0106
B128	0.044	0.9974	0.0068	0.9958	0.0105
B064	0.089	0.9974	0.0069	0.9958	0.0104
B032	0.177	0.9977	0.0064	0.9959	0.0107
B016	0.354	0.9977	0.0064	0.9964	0.0100
B008	0.709	0.9994	0.0032	0.9994	0.0035

表 5.2 也表明, 在光谱分辨率从 $0.021\mu\text{m}$ 降至 $0.354\mu\text{m}$ 时, 模型拟合光谱和实测岩石的发射光谱的相似度保持不变, 其相关系数和均方根误差基本一致。但光谱分辨率在 $0.709\mu\text{m}$ 时, 光谱相似度突然提高, 这是由于岩石的发射光谱不再具有矿物的吸收特征, 曲线变得比较平坦光滑 (图 5.4), 因此, 利用光谱相似度进行判断, 不再可靠。这说明波段数较少时, 高的光谱拟合精度, 并不一定反映高的反演精度。

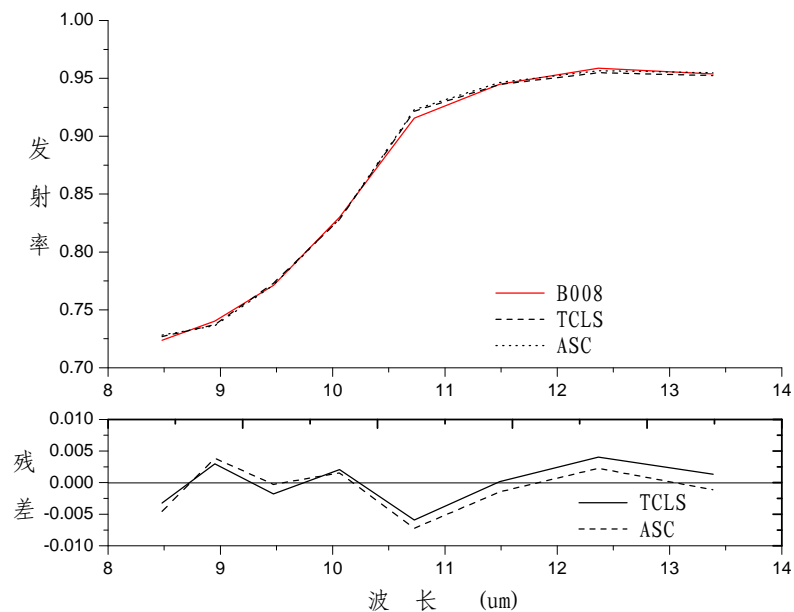


图5.4 8个波段时发射光谱拟合精度

2) 盲端元

在实际地质应用中, 岩石中的矿物端元往往不可得, 因此, 研究在盲端元条件下, 光谱分辨率对岩矿识别精度的影响更有意义。

表 5.3 显示了不同光谱分辨率下, 模型在盲端元条件下的矿物端元及丰度反

演结果。实验表明, TCLS 模型反演结果普遍比其它四种模型要好, 由于能准确确定端元及端元个数, 因此反演精度高于其它模型; 光谱分辨率从 $0.021\mu\text{m}$ 降至 $0.177\mu\text{m}$ (32 个波段) 时, TCLS 模型能准确识别矿物端元, 且模型误差能保持一致, 当光谱分辨率继续降低到 $0.354\mu\text{m}$ (16 波段) 时, TCLS 不能识别黑云母, 降低至 $0.709\mu\text{m}$ 时, TCLS 模型不能识别微斜长石和黑云母, 且端元中出现错误矿物, 因此模型精度急剧降低。ULS 模型反演结果其次, 但是其结果稳定性较差。ANC 模型、ASC 模型和 FCLS 模型反演结果精度总体上比较接近, 能识别岩石中存在的矿物, 但是其端元中含有不属于岩石的矿物种类, 因此, 误差较大。

表5.3 不同光谱分辨率下的矿物含量反演误差

波段数	光谱分辨率 (μm)	模型平均误差 (w%)				
		TCLS	ULS	ANC	ASC	FCLS
B279	0.021	3.63 (3, 3) ^a	11.03 (5, 3)	9.30 (8, 4)	10.92 (6, 3)	10.79 (9, 4)
B256	0.022	3.11 (4, 4)	3.11 (4, 4)	9.41 (8, 4)	11.98 (7, 3)	9.81 (9, 4)
B128	0.044	3.10 (4, 4)	6.25 (6, 4)	9.36 (8, 4)	10.63 (7, 4)	9.80 (9, 4)
B064	0.089	3.06 (4, 4)	3.06 (4, 4)	9.55 (8, 4)	3.98 (5, 4)	9.87 (8, 4)
B032	0.177	3.62 (4, 4)	5.59 (6, 4)	8.98 (7, 4)	9.60 (7, 4)	9.63 (9, 4)
B016	0.354	7.13 (3, 3)	3.10 (4, 3)	8.90 (7, 4)	9.08 (3, 2)	10.61 (8, 4)
B008	0.709	10.27 (3, 2)	15.16 (4, 3)	13.27 (5, 3)	12.21 (3, 2)	12.11 (6, 4)

注: ^a 由于在盲端元解混的情况下, 不同模型解得的端元及其个数不尽相同, 为了保持计算的一致性, 平均模型误差只计算四种矿物端元 (钠长石、石英、微斜长石和黑云母), 括号中的数字表示模型反演的总矿物端元和正确的矿物端元个数。

5.2 信噪比对矿物精细识别的影响

信噪比 (Signal-to-noise ratio, SNR) 是遥感器采集到的特定波长的信号和噪声之比, 是遥感器一个极其重要的性能参数。遥感数据的信噪比的高低直接决定数据质量的好坏, 在高光谱遥感地质应用中, 直接关系着矿物填图的精度与效果。数据的信噪比越高, 提取的岩石光谱曲线附加的噪声越少, 曲线越光滑, 较弱的光谱特征也清晰可见, 识别的矿物种类多, 可信度高; 反之, 信噪比越低, 提取的岩石光谱曲线附加的噪声越多, 弱光谱特征被噪声淹没, 能识别矿物的种类自然也就少, 识别的精度也会随之降低。但是, 信噪比和图像的空间分辨率、光谱

分辨率是相互制约的，空间分辨率和光谱分辨率的提高都会降低信噪比，实际应用中，信噪比的选择都是在一定的目标要求下进行考虑的结果。因此，研究信噪比对岩矿精细识别精度的影响对 FISS-TR 遥感器的研制有重要的参考价值。

本文通过模拟岩石发射光谱数据，增加不同程度的噪声，降低光谱数据的信噪比，分析信噪比对矿物组分识别精度的影响，为 FISS-TR 传感器信噪比指标设置提供理论依据。

5.2.1 不同信噪比数据的模拟

遥感数据的噪声类型及其产生机理包括许多复杂的研究内容，大多数研究中都采用一个简单的高斯噪声模型来描述噪声分布 (Sabol et al., 1992)。高斯噪声指概率密度分布服从高斯分布 (正态分布) 的噪声。本章根据指定的信噪比以及已知的岩石发射光谱数据，计算出对应的噪声数据，然后将光谱数据与噪声数据相加，得到信噪比为给定值的模拟高光谱发射率数据。

信噪比是指信号能量与噪声能量的比值，用公式表示为：

$$SNR = \frac{P_{signal}}{P_{noise}} = \left(\frac{A_{signal}}{A_{noise}} \right)^2 \quad (5.1)$$

其中， P 表示平均能量 (average power)， A 表示均方根 (root mean square, RMS)。具体来说，信号的能量指的就是信号的强度，对于离散的情况，就是求平方和，即 A^2 。由于许多信号动态变化的幅度较大，因此信噪比通常采用分贝 (decibel, dB) 来描述，定义为：

$$SNR_{dB} = 10 \log_{10} \left(\frac{P_{signal}}{P_{noise}} \right) = 10 \log_{10} \left(\frac{A_{signal}}{A_{noise}} \right)^2 \quad (5.2)$$

如果信号和信噪比已知，则噪声能量可以表示为：

$$A_{noise}^2 = \frac{A_{signal}^2}{10^{(SNR/10)}} \quad (5.3)$$

对于某一具体的岩石发射率光谱数据，以信噪比为 SNR 向其中加入噪声，得到给定信噪比的模拟光谱数据，其实现步骤如下：

- 1) 根据公式(5.3)计算出光谱数据的噪声能量 A_{noise}^2 ；

2) 对第 i 个波段, 生成服从均值为 0, 方差为 A^2_{noise} 的高斯分布的随机数据 n_i , 即为所需的噪声数据。

3) 利用公式(5.4)即可得到信噪比为 SNR 的模拟岩石发射率光谱数据 $\varepsilon_{模拟_i}$ 。

$$\varepsilon_{模拟_i} = \varepsilon_{rock_i} + n_i \quad (5.4)$$

图 5.5 显示了钠长石矿物在热红外波段的发射光谱曲线, 以及信噪比分别为 100、50、30 和 20 的模拟光谱曲线。可以看出, 随着信噪比的降低, 光谱数据中噪声逐渐增大。当信噪比为 30 时, 钠长石的发射光谱曲线虽然还保持着整体的形状, 但是其光谱吸收特征逐渐模糊不清, 曲线不再光滑。

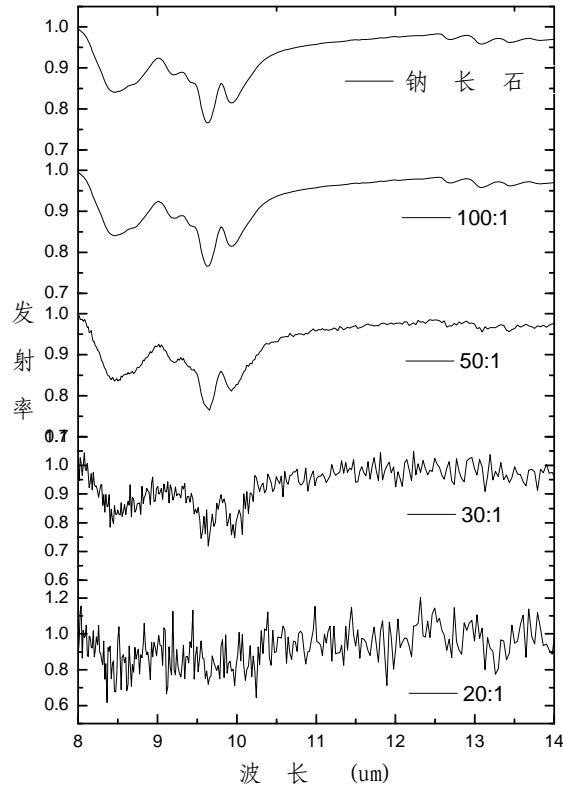


图5.5 模拟不同信噪比下的矿物发射光谱曲线 (钠长石)

5.2.2 不同信噪比数据的矿物含量反演

本章利用钠长石、石英、微斜长石、方解石和顽火辉石 5 种矿物作为端元, 分别按照 20: 20: 20: 20: 20 和 10: 20: 25: 40: 5 的丰度比生成岩石的发射光谱曲线 (图 5.6)。理论研究和实际计算表明, 完全理想的情况下, 矿物按一定比例线性混合而成的岩石光谱, 不论确定端元与否, 不同模型的最小二乘算法的

解混结果都相同，与真实的混合比例一致（表 5.4）。即使增加混合的矿物端元个数，其反演结果也一样。

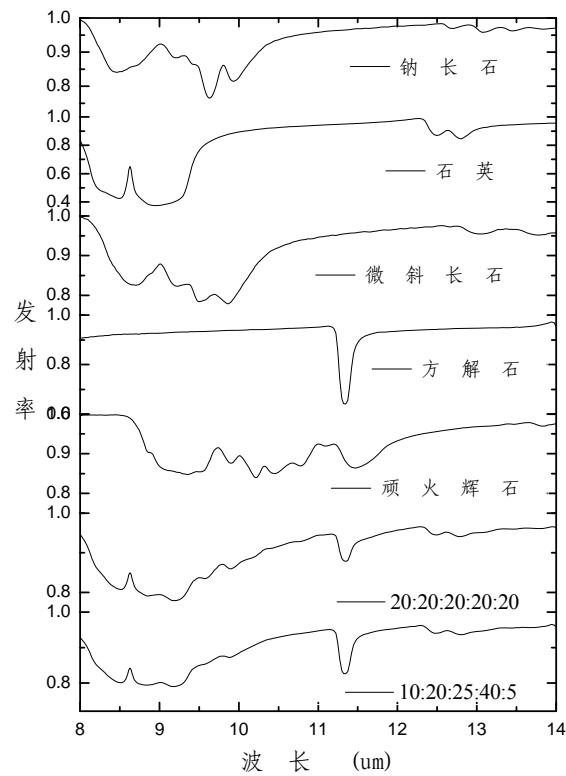


图5.6 模拟岩石及其端元发射光谱

表5.4 理想条件下模型反演结果

混合百分比 (w%)				模型 (w%)			
钠长石	中长石	石英	微斜长石	钠长石	中长石	石英	微斜长石
5	5	45	45	5	5	45	45
20	20	30	30	20	20	30	30
25	25	25	25	25	25	25	25
40	10	33	27	40	10	33	27
60	10	10	20	60	10	10	20
80	5	5	10	80	5	5	10
90	5	2.5	2.5	90	5	2.5	2.5

1) 确定端元

表 5.7 显示了不同信噪比的模拟岩石发射光谱。在确定端元的情况下，利用 TCLS 算法，对该模拟发射光谱进行线性解混。

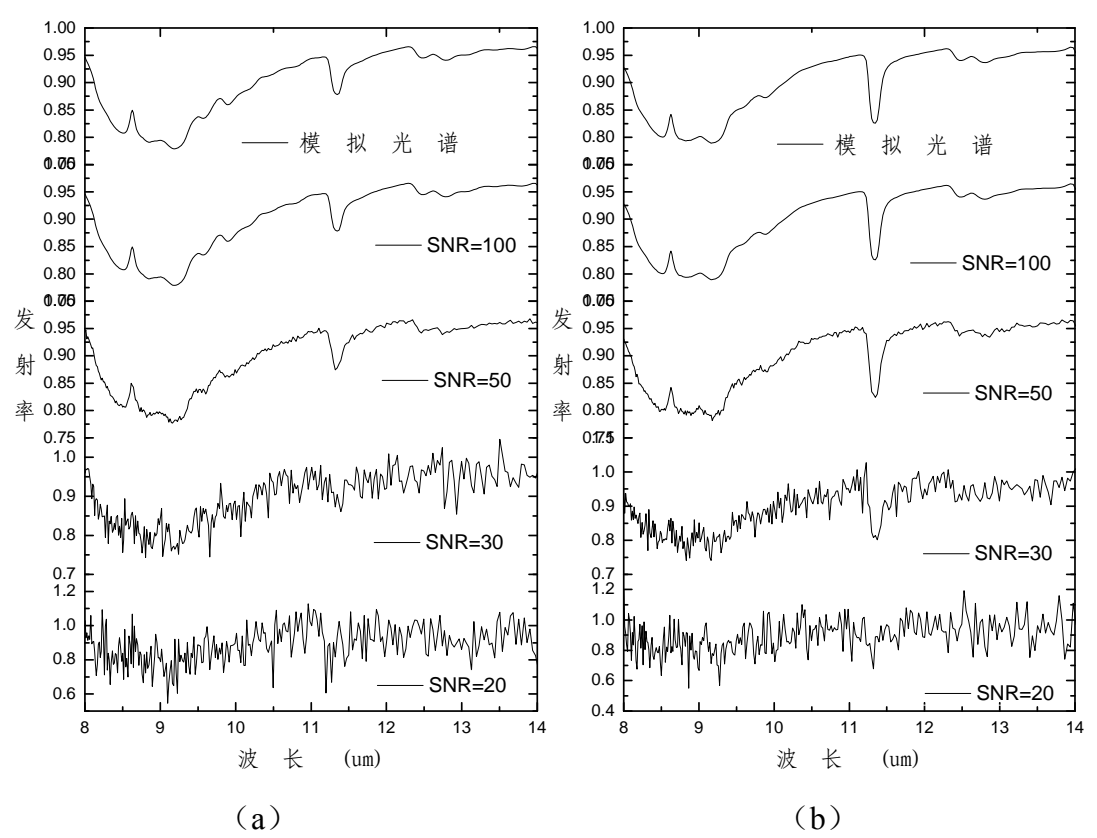


图5.7 不同信噪比的模拟岩石发射光谱 (a) 20: 20: 20: 20: 20, (b) 10: 20: 25: 40: 5

表 5.5 显示了在确定端元下，随着模拟岩石光谱（20: 20: 20: 20: 20）的信噪比的降低，岩石中矿物丰度的反演结果。

表5.5 不同信噪比的模拟数据的反演结果（20: 20: 20: 20: 20）^a

端元	测量 (%)	模型 (%)				
		SNR=100	SNR=50	SNR=40	SNR=30	SNR=20
钠长石	20.00	20.00	20.82	19.13	27.90	---
石英	20.00	20.00	19.87	19.76	18.74	20.24
微斜长石	20.00	20.00	19.49	19.20	16.57	34.08
方解石	20.00	20.00	19.96	19.85	17.54	29.18
顽火辉石	20.00	20.00	19.82	22.04	19.14	16.29
最大误差(%)		0.00	0.82	2.04	7.90	20.00
模型误差(%)		0.00	0.34	0.82	3.18	9.44

注：^a 由于添加的噪声为随机噪声，因此每次解得的端元丰度有微小的变化，此为其中一次的反演结果。---表示未能识别出矿物。

多次试验表明，在确定端元的情况下，随着信噪比的降低，矿物含量反演误差在逐渐增大。当 SNR=100 时，反演丰度最大误差和模型误差均小于 0.01%；当 SNR=50 时，最大误差小于 1%，模型误差小于 0.5%；当信噪比降低到 20 时，

钠长石矿物端元无法识别，因此其最大误差可达 20%。

表 5.5 反映了岩石中矿物含量平均分布的情况。实际上，自然界中多数岩石中矿物的含量分布并不均匀。表 5.6 显示了岩石中矿物分布不均一时端元丰度反演的结果。

表5.6 不同信噪比的模拟数据的反演结果（10： 20： 25： 40： 5）^a

端元	测量（%）	模型（%）				
		SNR=100	SNR=50	SNR=40	SNR=30	SNR=20
钠长石	10.00	10.00	10.24	13.53	7.58	4.84
石英	20.00	20.00	19.89	19.83	18.93	17.84
微斜长石	25.00	25.00	24.72	21.12	27.63	27.73
方解石	40.00	40.00	39.72	39.01	45.73	43.36
顽火辉石	5.00	5.00	5.43	6.51	---	6.02
最大误差(%)		0	0.43	3.88	5.73	5.16
模型误差(%)		0	0.27	2.02	3.37	2.89

注：^a 由于添加的噪声为随机噪声，因此每次解得的端元丰度有微小的变化，此为其中一次的反演结果。---表示未能识别出矿物。

多次试验表明，在确定端元的条件下，当岩石中矿物的含量分布不均匀时，随着光谱数据中信噪比的下降，主要矿物含量反演精度能保持稳定，微量（ $w\% \leq 5$ ）矿物含量反演结果波动较大。当信噪比降到 30 时，个别试验数据中，顽火辉石有不能识别的情况，这说明噪声增加至一定程度，微量矿物难以识别。矿物含量非均匀分布的岩石的总体反演精度与平均分布的反演精度相当，但是因为微量矿物的存在，准确识别所有矿物端元，前者需要更高的信噪比。

2) 盲端元

为了进一步分析信噪比对岩石发射率光谱解混精度的影响，在未知端元的条件下，对岩石光谱数据进行端元识别和丰度反演更有意义，更符合实际遥感地质应用的需求。

表 5.7 和表 5.8 分别显示了在盲端元条件下，利用 TCLS 模型，对不同信噪比的模拟岩石光谱数据进行矿物端元识别和丰度反演的结果。

表5.7 盲端元下不同的信噪比的模拟数据的反演结果（20： 20： 20： 20： 20）^a

端元	测量（%）	模型（%）				
		SNR=100	SNR=50	SNR=40	SNR=30	SNR=20

续表 5.7

钠长石	20.00	20.00	19.27	15.42	38.40	---
石英	20.00	20.00	20.03	20.37	17.40	17.05
微斜长石	20.00	20.00	20.49	24.49	14.43	---
方解石	20.00	20.00	19.46	21.91	10.21	26.25
顽火辉石	20.00	20.00	20.76	17.97	19.55	---
最大误差(%)		0	0.76	4.58	18.40	---
模型误差(%)		0	0.51	2.68	7.36	---

注：^a 由于添加的噪声为随机噪声，因此每次解得的端元丰度有微小的变化，此为其中一次的反演结果。---表示未能识别出矿物。

表 5.7 为岩石中矿物均匀分布的情况。多次试验表明，在盲端元条件下，信噪比=50 时，端元矿物含量反演最大误差一般小于 1%，模型误差小于 1%，反演精度与确定端元条件下相当；随着信噪比的降低，反演误差快速增大，当信噪比=30 时，个别端元识别出现困难，最大误差可达到 20%；当信噪比降至 20 时，钠长石、微斜长石和顽火辉石出现错误识别，不同的模拟数据反演结果中，只有石英和方解石矿物能一定被识别出。这可能是由于石英和方解石的吸收特征比较明显的缘故。

表5.8 盲端元下不同信噪比的模拟数据的反演结果（10：20：25：40：5）^a

端元	测量 (%)	模型 (%)				
		SNR=100	SNR=50	SNR=40	SNR=30	SNR=20
钠长石	10.00	10.00	9.34	9.59	---	---
石英	20.00	20.00	19.89	18.39	19.75	21.83
微斜长石	25.00	25.00	25.51	22.14	38.44	---
方解石	40.00	40.00	39.97	41.25	39.47	27.85
顽火辉石	5.00	5.00	5.29	---	---	---
最大误差(%)		0	0.66	5.00	13.44	---
模型误差(%)		0	0.32	2.23	5.84	---

注：^a 由于添加的噪声为随机噪声，因此每次的解得的端元丰度有微小的变化，此为其中一次的反演结果。---表示未能识别。

表 5.8 显示了岩石中矿物含量分布不均匀的情况。多次实验表明，当 SNR=50 时，在盲端元条件下的解混结果与已知端元的解混结果的精度相当，矿物含量反演最大误差小于 1%，模型误差下于 0.5%。随着信噪比的降低，含量较低的矿物端元逐渐不能准确识别，当 SNR=40 时，反演结果开始出现不能识别顽火辉石

($w=5\%$)的情况;当信噪比继续降低时,钠长石($w=10\%$)也开始不能被识别,而含量最高的矿物方解石始终可以识别。石英也容易识别,这可能是因为石英的发射光谱特征比较明显。

通过上述模拟试验数据分析结果表明,在热红外波段,光谱数据的信噪比对岩矿识别精度有较大影响。如果能准确确定岩石中矿物成分,信噪比对端元丰度反演精度影响较小,因此降低对信噪比的要求。不过在实际遥感应用中,不能确定岩石的组成矿物,而且矿物的含量并不均衡,信噪比小于 40 时,含量小于 5% 的矿物端元,往往不能被识别。因此,FISS-TR 传感器的信噪比参数设计要保证 ≥ 50 能够满足对矿物的精细识别需求。

5.3 包络线去除法对矿物精细识别的影响

包络线去除法是一种常用的光谱分析方法,它可以有效的突出光谱曲线的吸收特征,如吸收位置,吸收深度等,并将其归一化到一个一致的光谱背景上,有利于和其它光谱曲线进行特征数值的比较。它作为一种十分常见的预处理方法,被用于高光谱数据处理的各个方面。但是,在实际光谱解混中,包络线去除对解混的精度有无影响,值得我们去了解。

为了准确确认去包络线对光谱解混的影响,去除其它方面的影响因素,本文利用端元矿物模拟岩石光谱数据,然后对模拟后的光谱数据进行包络线去除,再利用端元矿物进行解混,流程图如图 5.8 所示。

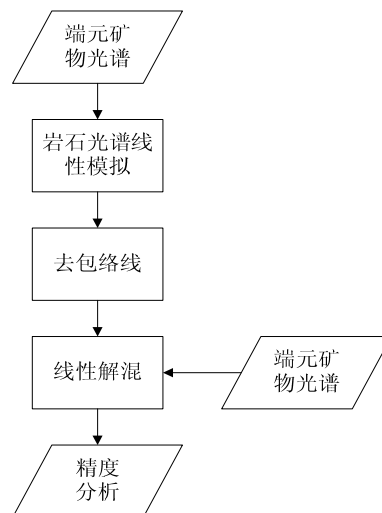


图5.8 包络线去除对岩石精细识别的影响流程图

选择三种常见的，且具有不同发射光谱特征的矿物石英、方解石、顽火辉石作为端元，以不同的含量，线性拟合岩石的发射光谱曲线（图 5.9）。

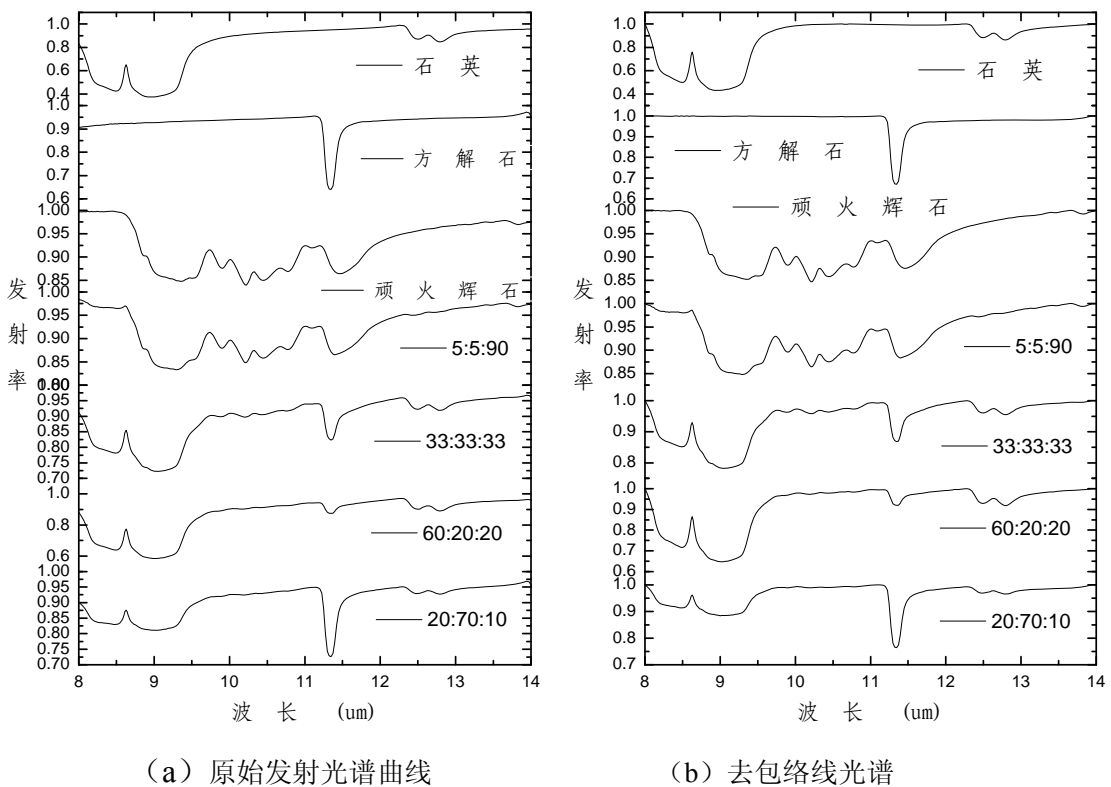


图5.9 端元矿物及其拟合岩石光谱

表 5.9、5.10 和 5.11 显示了在确定端元的条件下，经过包络线去除的岩石发射光谱，端元丰度反演的结果。实验结果表明，在确定端元条件下，包络线去除作为一种光谱预处理的方法，可以作为发射光谱线性解混的预处理方法，其对反演精度的影响最大误差<2%，模型误差在 1%左右。如果岩石发射光谱经过包络线去除处理，那么作为端元的矿物光谱，同样也要经过包络线去除处理，在端元中加入一条各波段为 1 的辅助光谱参加解混，对丰度反演结果基本没有影响。

表5.9 确定端元反演结果(端元未做包络线去除)

测量 (%)			模型 (%)			最大误差 (%)	模型误差 (%)
石英	方解石	顽火辉石	石英	方解石	顽火辉石		
5.00	5.00	90.00	5.99	4.53	91.60	1.60	1.02
33.33	33.33	33.33	29.94	38.78	36.78	5.45	4.10
60.00	20.00	20.00	55.18	26.09	24.48	6.09	5.13
20.00	70.00	10.00	14.02	77.32	14.29	7.32	5.86

表5.10 确定端元反演结果(端元经过包络线去除)

	测量 (%)		模型 (%)			最大误差 (%)	模型误差 (%)
	方解石	顽火辉石	石英	方解石	顽火辉石		
石英							
5.00	5.00	90.00	4.64	5.27	90.46	0.46	0.36
33.33	33.33	33.33	32.85	34.58	33.92	1.25	0.77
60.00	20.00	20.00	58.77	21.02	21.13	1.23	1.13
20.00	70.00	10.00	19.12	71.30	10.36	1.30	0.85

表5.11 确定端元反演结果(端元经过包络线去除且加入 “1” 端元)

	测量 (%)		模型 (%)			最大误差 (%)	模型误差 (%)
	方解石	顽火辉石	石英	方解石	顽火辉石		
石英							
5.00	5.00	90.00	4.55	4.37	89.94	0.63	0.38
33.33	33.33	33.33	32.51	31.07	31.90	2.26	1.50
60.00	20.00	20.00	58.53	18.57	19.71	1.47	1.06
20.00	70.00	10.00	18.95	69.50	9.32	1.05	0.74

5.4 本章小结

本章具体分析了光谱分辨率、信噪比和包络线去除等因素对热红外高光谱数据在岩矿精细识别方面的影响。

1) 光谱分辨率对岩石发射光谱反演矿物及其丰度有较大影响,随着光谱分辨率的降低,矿物含量的反演精度呈阶梯性下降。在确定端元的情况下,光谱分辨率降至 $0.354\mu\text{m}$ 时,矿物含量反演的精度基本保持不变;当分辨率降至 $0.709\mu\text{m}$ 时,端元矿物识别出现错误,反演的模型误差和均方根误差也因此急剧降低。在盲端元解混的情况下,TCLS 模型表现比其它模型优越,光谱分辨率降至 $0.177\mu\text{m}$ 时,TCLS 模型仍能准确识别矿物端元,且模型误差下降平缓;当光谱分辨率继续降低到 $0.354\mu\text{m}$ 以及 $0.709\mu\text{m}$ 时,TCLS 模型对黑云母,微斜长石的识别出现错误。因此, $0.177\mu\text{m}$ (32 个波段) 可作为 FISS-TR 传感器光谱分辨率的重要参考。

2) 信噪比对发射光谱反演矿物及其含量有一定影响,随着信噪比的降低,TCLS 模型反演的模型误差逐步增大。在已知端元的条件下,信噪比对矿物丰度反演精度影响较小,当 $\text{SNR}=30$ 时,反演丰度最大误差 $<10\%$,模型误差 $<5\%$;在盲端元的条件下,信噪比对端元识别及其丰度反演有较大影响,当信噪比降低

到 40 时，岩石中含量较低的端元会难以识别。这表明 FISS-TR 传感器的信噪比至少要达到 50 才能满足矿物精细识别的需求。

3) 在确定端元的情况下，包络线去除算法可以用于热红外波段的矿物丰度反演，即 FISS-TR 的数据预处理。如果对岩石光谱经过包络线去除处理，则矿物端元同样要去除包络线，其对丰度反演精度的影响最大误差小于 2%，模型误差在 1%左右。

第六章 结论和展望

我国第一套地面成像光谱系统（FISS）研制成功以来，取得了极大的成果，相关的后续产品 FISS-TR 也已提上议事日程。而相关的基础研究在我国尚处于起步阶段。本文立足于国内外已有的热红外高光谱数据库和野外实测光谱数据，通过对矿物的发射光谱特征，岩石的发射光谱线性解混模型以及影响岩矿精细识别的各种因素的分析研究，最终目的是为了深入研究热红外高光谱对矿物精细识别的能力及局限，为 FISS-TR 的研制提供参考指标，同时也为 FISS-TR 在地质上的应用提供新方法。

6.1 本文主要工作

围绕本文的研究目标，本文的主要工作及成果总结如下：

（1）介绍了矿物发射光谱分类的原理，在包络线去除的基础上，定量研究了几类典型矿物的热红外波段的发射光谱特征：吸收位置、吸收深度、吸收宽度、吸收面积和吸收对称性。

- 碳酸盐类矿物在热红外波段仅有一个很窄在强吸收谷，在 $11.3\mu\text{m}$ 左右，吸收宽度不超过 $0.3\mu\text{m}$ ，吸收深度从 0.1 到 0.3 不等，吸收面积小于 0.1，普遍为右不对称性。
- 硫酸盐类矿物在 $8.5\sim 9\mu\text{m}$ 的区间有一个明显的强吸收特征，吸收宽度在 $0.7\mu\text{m}$ 左右，吸收深度在 0.2 以上，甚至可达 0.5，因此吸收面积大于 0.1，一致表现出右不对称性。
- 硅酸盐类矿物的发射光谱特征比较复杂，根据硅氧四面体之间的连接方式，可以分为岛状结构、链状结构、层状结构和架状结构硅酸盐亚类。不同结构的硅酸盐矿物发射光谱略有差异。岛状结构硅酸盐在 $9.5\sim 12\mu\text{m}$ 区间有强吸收特征，最强的吸收谷集中在 $10.5\mu\text{m}$ 处，具有较宽的吸收宽度，可达 $2\mu\text{m}$ ，吸收面积较大。由于物质成分不同，吸收带数目、强度等都略有差别；链状结构硅酸盐在 $8\sim 10\mu\text{m}$ 区间有几个中等强度的

吸收带,吸收深度在 0.2 左右,吸收宽度 $1\sim 2\mu\text{m}$,吸收面积在 0.2 以上,对称性不一;层状结构硅酸盐在 $9.5\mu\text{m}$ 处有一个强吸收带,吸收深度不一,宽度在 $1.2\mu\text{m}$ 左右,普遍表现为右不对称性;架状结构硅酸盐有两个主要吸收带,分别位于 $9.8\mu\text{m}$ 和 $8.6\mu\text{m}$ 附近,吸收深度在 0.15 左右,吸收宽度大于 $2\mu\text{m}$,吸收面积大于 0.3,普遍表现为左不对称性。

同一类或族的矿物的热红外波段的发射光谱基本上是相似的,通过分析研究各种不同种类的矿物和及其发射率光谱特征,可以对岩矿进行定性识别。各矿物大类发射光谱之间差异较大,容易予以区分识别。相对于矿物大类间的区分识别,矿物亚类间的区分识别难度要大得多。

(2) 在岩石组分精细识别算法研究方面,针对传统最小二乘约束模型的不足,提出了 TCLS 模型,从而可以更好地识别出岩石中的矿物端元,提取其丰度信息。

- 在确定端元的情况下, TCLS 模型、ULS 模型和 ANC 模型具有相同的矿物丰度反演结果,其反演精度比 ASC 模型和 FCLS 模型要高,这可能是因为在实际情况中,岩石中的矿物端元并不完备,强行将解得的矿物端元丰度和约束到 1,反而会降低解的精度及可靠性。
- 在未知端元的情况下, TCLS 模型能够剔除微量矿物对端元识别的影响,具有最优的矿物端元识别能力及丰度反演精度。ULS 模型、ANC 模型 ASC 模型和 FSLC 模型也能识别矿物端元,但其反演的端元数远多于岩石中含有的矿物。
- 研究表明,最小二乘线性反演能够识别岩石中主要的化学成分含量,但是对含量小于 5% 的化学成分难以识别。

(3) 结合实测光谱和数字模拟相结合的方法,研究了光谱分辨率、信噪比和包络线去除等因素对发射光谱矿物识别的影响,得到以下初步结论:

- 随着光谱分辨率的降低,矿物含量反演精度呈阶梯性降低,在盲端元条件下需要更高的光谱分辨率。在确定端元的情况下,光谱分辨率降至 16 个波段时,矿物含量反演的精度基本保持不变;在盲端元条件下,光谱分辨率降至 32 个波段时,模型能准确识别矿物端元,且模型误差能保

持一致，当光谱分辨率继续降低时，模型对矿物端元的识别出现错误，但是含量较高的矿物，其含量反演精度仍然保持一定的精度。

- 信噪比对发射光谱识别矿物及其含量反演有一定影响，随着信噪比的降低，模型反演的误差也随之增加。研究表明，在确定端元的条件下，信噪比对矿物丰度反演精度影响较小，当 $SNR=30$ 时，反演丰度最大误差 $<10\%$ ，模型误差 $<5\%$ ；在盲端元条件下，信噪比对端元识别及其丰度反演有较大影响，当信噪比小于 50 时，岩石中含量较低的端元会难以识别。
- 在确定端元的情况下，包络线去除算法可以用于发射光谱数据的预处理。如果对岩石光谱经过包络线去除处理，则矿物端元也要去除包络线，其对丰度反演精度的影响，最大误差小于 2%，模型误差在 1% 左右。

6.2 创新点

(1) 针对传统最小二乘约束模型的不足，提出了基于阈值约束的最小二乘算法。在盲端元条件下，该算法能够自动剔除微量矿物端元，减小了端元数量，提高了矿物丰度反演的精度。

(2) 利用光谱分辨率模拟技术，对热红外光谱数据的光谱分辨率和岩矿精细识别精度进行了研究，得到了热红外波段 ($8\sim14\mu m$) 成像光谱仪器的最佳光谱分辨率约为 $0.177\mu m$ ，波段数量最佳为 32 个，为 FISS-TR 传感器的设计提供了重要的理论参考。

(3) 通过研究信噪比对热红外波段岩矿精细识别的影响，证明 FISS-TR 传感器信噪比应该保证不低于 50，才能够满足模型误差小于 1% 的精度要求，为 FISS-TR 的信噪比参数设计提供重要参考。

6.3 问题与展望

热红外高光谱遥感在地质上的应用一直是国际研究的热点和难点 FISS-TR 研制有助于星载/机载平台的地面试验验证，真实性检验以及模型算法的验证，对推动热红外高光谱遥感在地质上的应用有重要意义。本文的研究工作是面向

FISS-TR 的研发和应用,对热红外高光谱数据在矿物精细识别方面开展系统研究,为 FISS-TR 的设计提供指标依据,为其数据处理提供新方法。尽管得出了一些结论,取得了一定的成果,但是还有很多工作要做。

(1) 本文主要关注于地面实测发射光谱的解混与组分识别,由于航空和卫星热红外高光谱数据的缺乏,不能利用机/星载数据对算法进行验证,是本文工作的一个缺憾,下一步的工作将研究成果运用到航空或卫星遥感数据进行检验。

(2) 实验数据主要来源于国外光谱数据库,国内的发射光谱数据缺乏,而且完整性和可靠性不足。建立详细、可靠的岩矿热红外光谱库,是热红外高光谱遥感研究中必不可少的工作。今后的研究中,需要对地面实测发射光谱的测量方法和发射率反演进行研究,建立 FISS-TR 的标准测量规范。

(3) 本文的光谱分辨率的结论需要结合相应的卫星数据,进一步的研究和验证。对信噪比的研究结果,由于缺乏对实际发射率的噪声性质的分析,结果也需要进一步的验证。

参考文献

- [1] Abrams M. The Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer (ASTER): data products for the high spatial resolution imager on NASA's Terra platform [J]. International Journal of Remote Sensing, 2000,21 (5): 847-859.
- [2] Anding D., R. Kauth. Estimation of sea surface temperature from space* [J]. Remote Sensing of Environment, 1970,1 (4): 217-220.
- [3] Baldridge A. M., S. J. Hook, C. I. Grove, et al. The ASTER spectral library version 2.0 [J]. Remote Sensing of Environment, 2009,113 (4): 711-715.
- [4] Bandfield J. L. Global mineral distributions on Mars [J]. Journal of Geophysical Research. E. Planets, 2002,107: 9-1.
- [5] Bandfield J. L., V. E. Hamilton, P. R. Christensen. A global view of Martian surface compositions from MGS-TES [J]. Science, 2000,287 (5458): 1626.
- [6] Becker F., Z. L. Li. Temperature-independent spectral indices in thermal infrared bands [J]. Remote Sensing of Environment, 1990,32 (1): 17-33.
- [7] Becker F., Z. L. Li. Towards a Local Split Window Method over Land Surfaces [J]. International Journal of Remote Sensing, 1990,11 (3): 369-393.
- [8] Borel C. C. Surface emissivity and temperature retrieval for a hyperspectral sensor [M]. IEEE; 1998, New York.
- [9] Bro R., S. De Jong. A fast non - negativity - constrained least squares algorithm [J]. Journal of Chemometrics, 1997,11 (5): 393-401.
- [10] Chandrasekhar S. Radiative transfer[M]. Dover, New York, 1960.
- [11] Christensen P. R., D. L. Anderson, S. C. Chase, et al. Thermal Emission Spectrometer Experiment - Mars-Observer Mission [J]. Journal of Geophysical Research-Planets, 1992,97 (E5): 7719-7734.
- [12] Christensen P. R., J. C. Pearl. Initial data from the Mars Global Surveyor thermal

- emission spectrometer experiment: Observations of the Earth [J]. *Journal of Geophysical Research-Planets*, 1997,102 (E5): 10875-10880.
- [13] Christensen P. R., J. L. Bandfield, M. D. Smith, et al. Identification of a basaltic component on the Martian surface from Thermal Emission Spectrometer data [J]. *Journal of Geophysical Research-Planets*, 2000c,105 (E4): 9609-9621.
- [14] Christensen P. R., J. L. Bandfield, R. N. Clark, et al. Detection of crystalline hematite mineralization on Mars by the Thermal Emission Spectrometer: Evidence for near-surface water [J]. *Journal of Geophysical Research-Planets*, 2000a,105 (E4): 9623-9642.
- [15] Christensen P. R., J. L. Bandfield, V. E. Hamilton, et al. A thermal emission spectral library of rock-forming minerals [J]. *Journal of Geophysical Research-Planets*, 2000b,105 (E4): 9735-9739.
- [16] Christensen P. R., J. L. Bandfield, V. E. Hamilton, et al. Mars Global Surveyor Thermal Emission Spectrometer experiment: Investigation description and surface science results [J]. *Journal of Geophysical Research-Planets*, 2001,106 (E10): 23823-23871.
- [17] Christensen P. R., S. T. Harrison. Thermal Infrared-Emission Spectroscopy of Natural Surfaces - Application to Desert Varnish Coatings on Rocks [J]. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 1993,98 (B11): 19819-19834.
- [18] Clark R. N., G. A. Swayze, K. E. Livo, et al. Imaging spectroscopy: Earth and planetary remote sensing with the USGS Tetracorder and expert systems [J]. *Journal of Geophysical Research-Planets*, 2003,108 (E12).
- [19] Clark, R.L., Swayze, G.A., Wise, R., Livo, K.E., Hoefen, T., Kokaly, R.F., & Sutley, S.J.. USGS Digital Spectral Library splib06a. In: U.S. Geological Survey, 2007.
- [20] Coll C., V. Caselles, E. Rubio, et al. Temperature and emissivity separation from calibrated data of the Digital Airborne Imaging Spectrometer [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2001,76 (2): 250-259.

-
- [21] Coll C., V. Caselles, E. Valor, et al. Validation of temperature-emissivity separation and split-window methods from TIMS data and ground measurements [J]. Remote Sensing of Environment, 2003,85 (2): 232-242.
 - [22] Conel J. E. Infrared emissivities of silicates: Experimental results and a cloudy atmosphere model of spectral emission from condensed particulate mediums [J]. Journal of Geophysical Research, 1969,74 (6): 1614-1634.
 - [23] Cooper B. L., J. W. Salisbury, R. M. Killen, et al. Midinfrared spectral features of rocks and their powders [J]. Journal of Geophysical Research-Planets, 2002,107 (E4): 5017.
 - [24] Crisp J., A. B. Kahle, E. A. Abbott. Thermal Infrared Spectral Character of Hawaiian Basaltic Glasses [J]. Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets, 1990,95 (B13): 21657-21669.
 - [25] Crowley J. K., Brickey D. W., Rowam L. C. Airborne Imaging Spectrometer Data of the Ruby Mountains, Montana: Mineral Discrimination Using Relative Absorption Band-depth Images. Remote Sens Environ, 1989, 29: 121~134.
 - [26] Crown D. A., C. M. Pieters. Spectral properties of plagioclase and pyroxene mixtures and the interpretation of lunar soil spectra [J]. Icarus, 1987,72 (3): 492-506.
 - [27] Dennison P. E., D. A. Roberts. Endmember selection for multiple endmember spectral mixture analysis using endmember average RMSE [J]. Remote Sensing of Environment, 2003,87 (2-3): 123-135.
 - [28] Farmer V. C., M. Society 1974. The infrared spectra of minerals [M]. Mineralogical Society London.
 - [29] Feely K. C., P. R. Christensen. Quantitative compositional analysis using thermal emission spectroscopy: Application to igneous and metamorphic rocks [J]. Journal of Geophysical Research-Planets, 1999,104 (E10): 24195-24210.
 - [30] Gillespie A. R. Enhancement of Multispectral Thermal Infrared Images - Decorrelation Contrast Stretching [J]. Remote Sensing of Environment, 1992,42

- (2): 147-155.
- [31] Gillespie A. R., A. B. Kahle, F. D. Palluconi. Mapping Alluvial Fans in Death-Valley, California, Using Multichannel Thermal Infrared Images [J]. Geophysical Research Letters, 1984,11 (11): 1153-1156.
- [32] Gillespie A. R., A. B. Kahle, R. E. Walker. Color Enhancement of Highly Correlated Images .1. Decorrelation and HSI Contrast Stretches [J]. Remote Sensing of Environment, 1986,20 (3): 209-235.
- [33] Gillespie A., S. Rokugawa, S. Hook, et al. Temperature/emissivity separation algorithm theoretical basis document, version 2.4 [J]. USA: National Aeronautics and Space Administration (NASA), 1999.
- [34] Gillespie A., S. Rokugawa, T. Matsunaga, et al. A temperature and emissivity separation algorithm for Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer (ASTER) images [J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1998,36 (4): 1113-1126.
- [35] Goetz A. F. H. Imaging Spectrometry for Earth Observations [J]. Episodes, 1992,15 (1): 7-14.
- [36] Gu, D., A. Gillespie, et al. Autonomous atmospheric compensation (AAC) of high resolution hyperspectral thermal infrared remote-sensing imagery. Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on. 2002, 38(6): 2557-2570.
- [37] Gupta R. P. Remote sensing geology [M]. Springer Verlag. 2003.
- [38] Gutman G.G. Global data on land surface parameters from NOAA AVHRR for use in numerical climate models[J].Journal of Climatic,1994,7:670-680.
- [39] Hamilton V. E. Thermal infrared emission spectroscopy of the pyroxene mineral series [J]. Journal of Geophysical Research, 2000a,105: 9701-9716.
- [40] Hamilton V. E., P. R. Christensen, H. Y. McSween. Determination of Martian meteorite lithologies and mineralogies using vibrational spectroscopy [J]. Journal of geophysical research-all series, 1997,102(E11): 25593-25603.

-
- [41] Hamilton V. E., P. R. Christensen. Determining the modal mineralogy of mafic and ultramafic igneous rocks using thermal emission spectroscopy [J]. Journal of Geophysical Research-Planets, 2000b,105 (E4): 9717-9733.
 - [42] Hamilton V. Overview of TIR spectroscopy [M]. 2004.
 - [43] Hapke B. Bidirectional reflectance spectroscopy,4, The extinction coefficient and the opposition effect[J].Icarus,1986,67(2):264-280.
 - [44] Hapke B. Combined theory of reflectance and emittance spectroscopy, In Remote Geochemical analysis: Elemental and Mineralogical Composition[M].London: Cambridge University Press, 1993a:31-41.
 - [45] Hapke B. Theory of reflectance and emittance spectroscopy[M].London: Cambridge University Press, 1993b.
 - [46] Heinz D.C. and Chang C.I., Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2001. 39(3): 529-545.
 - [47] Hook S.J., Gabell A.R., Green A.A.et al. A comparison of techniques for extracting emissivity information from thermal infrared data for geological studies[J].Remote Sensing of Environment, 1992, 42(2):123-135.
 - [48] Hook S.J., Karlstrom K.E., Miller C.F., et al. Mapping the Piute Mountains, California, with thermal infrared multispectral scanner(TIMs)images[J]. Journal of Geophysical Research, 1994, 99(B8):15605-15622
 - [49] Hook S.J., Myers J.J., Thome K.J. The MODIS/ASTER airborne simulator (MASTER)—a new instrument for earth studies[J].Remote Sensing of Environment, 2001, 76(1):93-102.
 - [50] Hunt G R. Electromagnetic Radiation: The Omuniation Link in Remote Sensing. In: Siegal B, Gillespie A. Remote Sensing Geology. New York, Wiley: 1980.702.
 - [51] Hunt G R. Spectroscopic Properties of Rocks and Minerals. In Practical Handbook of Physical Properties of Rocks and Minerals. Edited by Carmichael R

- C. Boca Raton Florid: C R C Press Inc, 1989.599~669.
- [52]Hunt G. R. Infrared Spectral Behavior of Fine Particulate Solids [J]. Journal of Physical Chemistry, 1976a,80 (11): 1195-1198.
- [53]Hunt G. R., J. Salisbury. Visible and near infrared spectra of minerals and rocks. XI- Sedimentary rocks. XII- Metamorphic rocks [J]. Modern Geology, 1976b,5: 211-217.
- [54]Hunt G. R., J. W. Salisbury. Mid-infrared spectral behavior of metamorphic rocks [J]. Environmental Research Papers Air Force Cambridge Research Labs, 1976c,1.
- [55]Ingram P.M. , Muse A.H. Sensitivity of iterative spectrally smooth temperature/emissivity separation to algorithmic assumptions and measurement noise[J].IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing , 2001 , 39(10):2158-2167.
- [56]Jimenez-Munoz J. C., J. A. Sobrino. A generalized single-channel method for retrieving land surface temperature from remote sensing data. Journal of Geophysical Research-Atmospheres [J], 2003, 108(D22): 4688.
- [57]Kahle A. B., A. F. H. Goetz. Mineralogic Information from a New Airborne Thermal Infrared Multispectral Scanner [J]. Science, 1983,222 (4619): 24-27.
- [58]Kahle A. B., A. R. Gillespie, E. A. Abbott, et al. Relative Dating of Hawaiian Lava Flows Using Multispectral Thermal Infrared Images - a New Tool for Geologic Mapping of Young Volcanic Terranes [J]. Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets, 1988,93 (B12): 15239-15251.
- [59]Kahle A. B., D. P. Madura, J. M. Soha. Middle Infrared Multispectral Aircraft Scanner Data - Analysis for Geological Applications [J]. Applied Optics, 1980,19 (14): 2279-2290.
- [60]Kahle A. B., L. C. Rowan. Evaluation of Multispectral Middle Infrared Aircraft Images for Lithologic Mapping in the East Tintic Mountains, Utah [J]. Geology, 1980,8 (5): 234-239.

-
- [61] Kahle, A.B., F.D. Palluconi and S.J.Hook et al. The Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflectance Radiometer(ASTER).International Journal of Imaging Systems and Technology, 1991, 3:144-156.
- [62] Kirkland L.E.,Herr K.C.,Adams P.M. Infrared stealthy surfaces: Why TES and TEMIS may miss some substantial mineral deposits on Mars and implications for remote sensing of planetary surfaces[J].Journal of Geophysics Research, 2003, 108(E12): 5137-5151.
- [63] Kruse F A. Use of Airborne Imaging Spectrometer Data to Map Minerals Associated with Hydrothermally Altered Rocks in the Northern Grapevine Mountuin Nevadaand California. Remote Sens Environ, 1988,24: 31-51.
- [64] Kruse F., A. Lefkoff, J. Boardman, et al.The spectral image processing system (SIPS)--interactive visualization and analysis of imaging spectrometer data [J]. Remote Sensing of Environment, 1993,44 (2-3): 145-163.
- [65] Lane M.D. Midinfrared optical constants of calcite and their relationship to particle size effects in thermal emission spectra of granular calcite [J]. Journal of Geophysical Research,1999,104(E6):14099-14108.
- [66] Lane M.D., Christensen P.R. Thermal infrared emission spectroscopy of anhydrous carbonates[J].Journal of Geophysical Research, 1997, 102(E11): 25581-25592.
- [67] Lawson, C.L. and R.J. Hanson, Solving Least Squares Problems, Prentice-Hall, 1974, Chapter 23, p. 161.
- [68] Lazarev A. N. Vibrational spectra and structure of silicates [M]. Consultants Bureau. 1972
- [69] Leeman V. The NASA Earth Resources Spectral Information System: A Data Compilation [M]. National Technical Information Service. 1971
- [70] Liang S. L. An optimization algorithm for separating land surface temperature and emissivity from multispectral thermal infrared imagery. Ieee Transactions on Geoscience and Remote Sensing [J], 2001, 39(2): 264-274.

- [71] Lyon R.J. P. Analysis of rock spectra by infrared emission(8 to 25 microns)[J]. Economic Geology, 1965, 60(4):745-750.
- [72] McMillin, L.M. Estimation of sea surface temperature from two infrared window measurements with different absorption. Journal of Geophysical Research, 1975, 90:11,587-11,600.
- [73] Michalski J.R., Kraft M.D., Diedrich T. et al. Thermal emission spectroscopy of the silica polymorphs and considerations for remote sensing of Mars[J]. Geophysical Research Letters, 2003, 30(19).
- [74] Moersch J.E., Christensen P.R. Thermal emission from particulate surfaces: A comparison of scattering models with measured spectra[J]. Journal of Geophysical Research, 1995, 100(E4):27465-7477.
- [75] Mustard J.F. and Pieters C.M., Abundance and distribution of ultramafic microbreccia in Moses rock dike: Quantitative application of mapping spectrometer data[J]. Journal of Geophysical Research. 1987. 92: 13619 - 13634.
- [76] Mustard J.F. and Pieters C.M., Photometric phase functions of common geologic minerals and applications to quantitative analysis of mineral mixture reflectance spectra[J]. Journal of Geophysical Research, 1989. 94: 13619 - 13634.
- [77] N.Gat, 顾聚兴. 热红外成像光谱仪(上) [J]. 红外, 1999, (04): 30-34.
- [78] N.Gat, 顾聚兴. 热红外成像光谱仪(下) [J]. 红外, 1999, (05): 38-42.
- [79] Ninomiya Y. Mapping quartz, carbonate minerals and mafic-ultramafic rocks using remotely sensed multispectral thermal infrared ASTER data [J]. Thermosense Xxiv, 2002, 4710: 191-202.
- [80] Ninomiya Y. Quantitative Estimation of SiO₂ Content in Igneous Rocks Using Thermal Infrared-Spectra with a Neural-Network Approach [J]. Ieee Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1995, 33 (3): 684-691.
- [81] Ninomiya Y., B. Fu, T. Cudahy. Detecting lithology with Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer (ASTER) multispectral thermal

- p>infrared “radiance-at-sensor” data [J]. Remote Sensing of Environment, 2005,99 (1-2): 127-139.
- [82] Price J. C. Estimating surface temperatures from satellite thermal infrared data--A simple formulation for the atmospheric effect. Remote Sensing of Environment [J], 1983, 13(4): 353-361.
- [83] Price J. C. Land Surface-Temperature Measurements from the Split Window Channels of the Noaa-7 Advanced Very High-Resolution Radiometer. Journal of Geophysical Research-Atmospheres [J], 1984, 89(Nd5): 7231-7237.
- [84] Qin Z. H., A. Karnieli. Progress in the remote sensing of land surface temperature and ground emissivity using NOAA-AVHRR data [J]. International Journal of Remote Sensing, 1999,20 (12): 2367-2393.
- [85] Ramsey M. S., P. R. Christensen. Mineral abundance determination: Quantitative deconvolution of thermal emission spectra [J]. Journal of Geophysical Research, 1998,103 (B1): 577-596.
- [86] Ren H, Du Qian, Jensen J Q. Constrained Weighted Least Squares Approaches for Target Detection and Classification in Hyperspectral Imagery [C].IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium, Toronto, Canada, 2002.
- [87] Rowan L.C., Mars J.C. Lithologic mapping in the Mountain Pass, California area using Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer (ASTER) data [J]. Remote Sensing of Environment, 2003, 84(3):350-366.
- [88] Ruff S. W., P. R. Christensen. Bright and dark regions on Mars: Particle size and mineralogical characteristics based on Thermal Emission Spectrometer data [J]. Journal of Geophysical Research-Planets, 2002,107 (E12).
- [89] Sabine C., Realmuto V.J., Taranik J.V. Quantitative estimation of granitoid composition from thermal infrared multispectral scanner(TIMs) data , Desolation Wilderness, northern Sierra Nevada, California[J]. Journal of Geophysical Research, 1994, 99(B3):4261-4271

- [90] Sabol D. E., J. B. Adams, M. O. Smith. Quantitative Subpixel Spectral Detection of Targets in Multispectral Images [J]. Journal of Geophysical Research-Planets, 1992,97 (E2): 2659-2672.
- [91] Salisbury J. W., D. M. Daria. Infrared (8-14 μ -M) Remote-Sensing of Soil Particle-Size [J]. Remote Sensing of Environment, 1992,42 (2): 157-165.
- [92] Schmugge, T., S. Hook, et al. Recovering surface temperature and emissivity from thermal infrared multispectral data. Remote Sensing of Environment. 1998, 65(2): 121-131.
- [93] Shkuratov Y., Starukhina L., Hffmann H. A model of spectral albedo of particulate surfaces: Implications for optical properties of the Moon[J]. Icarus, 1999, 137(2): 235-246.
- [94] Smith, M.D., Bandfield, J.L., and Christensen P.R. Separation of atmospheric and surface spectral features in Mars Global Surveyor Thermal Emission Spectrometer(TES)spectra. Journal of Geophysical Research , 2000 , 105(E4):9589-9607.
- [95] Sobrino J. A., C. Coll, V. Caselles. Atmospheric Correction for Land Surface-Temperature Using Noaa-11 Avhrr Channel-4 and Channel-5. Remote Sensing of Environment [J], 1991, 38(1): 19-34.
- [96] Sobrino J. A., J. C. Jimenez-Munoz, L. Paolini. Land surface temperature retrieval from LANDSAT TM 5. Remote Sensing of Environment [J], 2004, 90(4): 434-440.
- [97] Strobl, P., A. Mueller, et al. Laboratory calibration and in-flight validation of the Digital Airborne Imaging Spectrometer DAIS 7915, Spie International Society For Optical.1997, 3071:225-236.
- [98] Thomson J. L., J. W. Salisbury. The Midinfrared Reflectance of Mineral Mixtures (7-14- μ -M) [J]. Remote Sensing of Environment, 1993,45 (1): 1-13.
- [99] Vane G., A. F. H. Goetz. Terrestrial Imaging Spectrometry - Current Status, Future-Trends [J]. Remote Sensing of Environment, 1993,44 (2-3): 117-126.

-
- [100] Vaughan R. G., S. J. Hook, W. M. Calvin, et al. Surface mineral mapping at Steamboat Springs, Nevada, USA, with multi-wavelength thermal infrared images [J]. Remote Sensing of Environment, 2005,99 (1-2): 140-158.
 - [101] Vaughan, R., W. Calvin, et al. SEBASS hyperspectral thermal infrared data: surface emissivity measurement and mineral mapping. Remote Sensing of Environment. 2003, 85(1): 48-63.
 - [102] Wald A.E., Salisbury J.W. Thermal infrared direction emissivity of powdered quartz[J]. Journal of Geophysical Research, 1995, 100(B12): 24665-24675.
 - [103] Walter L., J. Salisbury. Spectral characterization of igneous rocks in the 8-to 12um region [J]. Journal of Geophysical Research, 1989, 94 (B7): 9203-9213.
 - [104] Wan Z., Li Z.L. A physics-based algorithm for retrieving land-surface emissivity and temperature from EOS/MODIS data[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1997, 35: 980-996.
 - [105] Watson K. Spectral ratio method for measuring emissivity[J]. Remote Sensing of Environment, 1992, 42(2): 113-116.
 - [106] Weitz C. M., T. G. Farr. Effects of Surficial Modification Processes on Thermal Infrared Signatures in the Arid Southwestern United-States [J]. Journal of Geophysical Research-Solid Earth, 1992, 97 (B4): 4649-4665.
 - [107] Wyatt M. B., H. Y. McSween Jr, L. A. Taylor, et al. Analysis of terrestrial and Martian volcanic compositions using thermal emission spectroscopy. I- Determination of mineralogy, chemistry, and classification strategies [J]. Journal of Geophysical Research, 2001, 106 (E7): 14.
 - [108] Young, S., B. Johnson, et al. An in-scene method for atmospheric compensation of thermal hyperspectral data. Journal of Geophysical Research. 2002, 107(D24): 4774.
 - [109] Zhou J., W. F. Zhan, D. Y. Hu, et al. Improvement of Mono-window Algorithm for Retrieving Land Surface Temperature from HJ-1B Satellite Data [J]. Chinese Geographical Science, 2010, 20 (2): 123-131.

- [110]陈江, 王安建.利用 ASTER 热红外遥感数据开展岩石化学成分填图的初步研究 [J]. 遥感学报, 2007,(04): 601-608.
- [111]陈述彭, 童庆禧, 郭华东.遥感信息机理研究, 北京: 科学出版社, 1998.
- [112]程洁, 柳钦火, 李小文等.基于相关性的热红外温度与发射率分离算法 [J]. 中国科学(D 辑:地球科学), 2008,(02): 261-272.
- [113]程洁, 柳钦火等. 基于相关性的热红外温度与比辐射率分离算法. 中国科学: D 辑. 2008, 38(002): 261-272.
- [114]丑晓伟, 傅碧宏, 郑建京.沉积岩石信息的热红外多光谱遥感探测及有效性评价 [J]. 遥感技术与应用, 1996,3 (1): 7-13.
- [115]二宫芳树, 傅碧宏.帕米尔东北缘 ASTER 多光谱热红外遥感数据的岩性信息提取[J].新疆地质 2003, 21(1):22-30.
- [116]傅碧宏, 丑晓伟.利用热红外多光谱遥感技术提取和识别岩石、矿物信息 [J]. 遥感技术与应用, 1994,9 (01).
- [117]黄长平, 张立福, 张晓红等.基于 FISS 成像光谱数据牛奶品种识别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(1): 214-218.
- [118]金浩, 童庆禧, 郑兰芬等.成像光谱和热红外多光谱技术地质制图研究 [J]. 环境遥感, 1994,5 (02): 138-144.
- [119]林颖, 徐卫明, 袁立银等.热红外高光谱系统信号成分分析及处理 [J]. 激光与红外, 2010,(12): 1324-1329.
- [120]刘波, 方俊永, 刘学等.基于成像光谱技术的作物杂草识别研究[J].光谱学与光谱分析, 2010, 30(7): 1830-1833.
- [121]路凤香, 桑隆康等.岩石学, 北京: 地质出版社, 2002.
- [122]潘兆橹, 赵爱醒, 潘铁虹.结晶学及矿物学(下册), 北京: 地质出版社, 1994.
- [123]沈鸣明, 杨存武.热红外多光谱扫描仪.红外与毫米波学报, 1992, 11 (3): 249-255.
- [124]覃志豪, Z. Minghua, A. Karnieli 等.用陆地卫星 TM6 数据演算地表温度的单窗算法. 地理学报 [J], 2001, (04): 456-466.

- [125]唐世浩,李小文等. 改进的基于订正 ALPHA 差值谱的 TES 算法. 中国科学: D 辑. 2006 , 36(7): 663-671.
- [126]田丰.全波段(0.35-14 μm) 高光谱遥感矿物识别和定量反演技术研究.中国地质大学(北京) 博士论文, 2010.
- [127]田国良.遥感基础研究的范畴及其在遥感应用发展中的意义 [J]. 环境遥感, 1994,(03): 168-176.
- [128]田国良等.热红外遥感.北京: 电子工业出版社, 2006.
- [129]童庆禧, 薛永祺, 王晋年, 张立福, 方俊永, 杨一德, 刘学, 亓洪兴, 郑兰芬, 黄长平. 地面成像光谱辐射测量系统及其应用. 遥感学报, 2010, 14(3): 409-422.
- [130]童庆禧, 郑兰芬, 金浩等.热红外多光谱遥感技术金矿调查应用研究 [J]. 红外与毫米波学报, 1992,11 (03): 249-256.
- [131]童庆禧, 张兵, 郑兰芬.高光谱遥感—原理、技术与应用[M].北京: 高等教育出版社, 2006.
- [132]王建宇, 徐卫明, 袁立银, et al.热红外高光谱成像系统的背景抑制和性能优化 [J]. 红外与毫米波学报, 2010,(06): 419-423+430.).
- [133]王晋年, 郑兰芬, 童庆禧. 成像光谱图像光谱吸收鉴别模型与矿物填圈研究. 环境遥感, 1996, 11(1): 20-31.
- [134]王俊虎, 张杰林, 张静波.基于热红外数据的花岗岩铀矿田地表 SiO_2 含量反演及其铀成矿要素识别 [J]. 地球信息科学学报, 2010,(01): 126-132.
- [135]王钦军.高-多光谱遥感目标识别算法及其在岩性目标提取中的应用, 中国科学院研究生院博士论文, 2006.
- [136]闻轲, 梁婉雪, 章刚进等.矿物红外波谱学.重庆: 重庆大学出版社, 1988.
- [137]翁诗甫.傅里叶变换红外光谱仪[M].北京:化学工业出版社, 2005:34~58.
- [138]肖青, 柳钦火, 李小文等.热红外发射率光谱的野外测量方法与土壤热红外发射率特性研究. 红外与毫米波学报 [J], 2003, (05): 373-378.
- [139]薛永祺, 王建宇.机载成像光谱仪的发展[J].成像光谱技术, 1991: 1-12.
- [140]闫柏琨, 刘圣伟, 王润生等.热红外遥感定量反演地表岩石的 SiO_2 含量 [J].

- 地质通报, 2006,(05): 639-643.
- [141] 闫柏琨, 王润生, 甘甫平等. 热红外遥感岩矿信息提取研究进展 [J]. 地球科学进展, 2005,(10): 1116-1126.
- [142] 闫柏琨. 热红外遥感岩矿波谱机理及信息提取技术方法研究. 中国地质大学 (北京) 博士学位论文, 2006.
- [143] 杨长保, 朱群, 姜琦刚等. ASTER 热红外遥感地表岩石的二氧化硅含量定量反演 [J]. 地质与勘探, 2009,(06): 692-696.
- [144] 杨杭, 张立福, 黄照强, 张学文, 童庆禧. 基于热红外发射光谱的岩石 SiO_2 定量反演模型研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32 (06) .
- [145] 张兵. 时空信息辅助下的高光谱数据挖掘, 中国科学院研究生院博士论文, 2002.
- [146] 张立福, 张学文, 黄照强, 杨杭, 张飞舟. 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[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(12): 2187-2190.
- [147] 张良培, 张立福. 高光谱遥感. 武汉: 武汉大学出版社, 2005.
- [148] 张霞, 张兵, 郑兰芬等. 航空热红外多光谱数据的地物发射率谱信息提取模型及其应用研究[J]. 红外与毫米波学报, 2000, 19(5): 361-365.
- [149] 张学文, 张立福, 黄长平等. 基于 FISS 成像光谱数据的鲜-解冻肉识别研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(08): 2187-2190.
- [150] 赵英时等. 遥感应用分析原理与方法. 北京科学出版社, 2003
- [151] 周长玉. 傅立叶变换红外光谱仪的特点[J]. 内蒙古石油化工. 2004, 4 (35): 34~35.

博士期间发表的论文

- [1] 张学文, 张立福, 黄长平, 郑兰芬, 童庆禧. 基于 FISS 成像光谱数据的鲜-解冻肉识别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(8): 2187~2190. (SCI)
- [2] **Xuewen Zhang**, Lifu Zhang , and Changping Huang. Quantitative Estimation of Cold Storage Time of Meat Using Hyperspectra Data. RSETE 2011. (EI)
- [3] **Xuewen Zhang**, Lifu Zhang, Caixiang Xie. Estimation of Glycyrrhizic Acid Content Using Canopy Spectroscopy In Visible-Shortwave Infrared Region. IGARSS 2011. (EI)
- [4] 张立福, **张学文**, 黄照强, 杨杭, 张飞舟. 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[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(12): 2187-2190. (SCI)
- [5] 谢彩香, **张学文**, 黄长平, 张立福, 周应群, 曹海禄, 贾光林, 邓庭伟, 黄照强. 基于冠层光谱数据的甘草产地识别研究[J]. 中国现代中药, 2011, 10: 7-9.
- [6] 杨杭, 张立福, **张学文**, 房丛卉, 童庆禧. TASI 数据的温度与发射率分离算法[J]. 遥感学报, 2011, 06: 1242-1254.
- [7] 杨杭, 张立福, 黄照强, **张学文**, 童庆禧. 基于热红外发射光谱的岩石 SiO₂ 定量反演模型研究[J]. 光谱学与光谱分析 (待刊) (SCI)

博士期间参加的科研活动及野外实验

- [1] 中国科学院重大科研装备研制项目——“地面成像光谱辐射计研制”。主要参与 FISS 系统应用研究、野外试验的数据采集以及 FISS 数据应用评价。
- [2] 863 项目 “地质应用系统建设与典型应用示范”。参与项目文档的编写。
- [3] 863 课题 “热红外高光谱遥感应用技术研究”。参与算法研究和数据处理。
- [4] 参与 “覆盖区卫星高光谱数据岩性弱信息提取模型与软件设计” 项目设计书编写工作；
- [5] 参与 “基于高光谱遥感的尾矿监测系统研究” 项目设计书编写工作。
- [6] 参与 “波段可选主动激光光源高光谱成像系统” 项目论证报告的编写工作。
- [7] 参与 TG 项目算法研究工作。
- [8] 参加热红外岩矿和建筑材料的发射率测量实验以及实验数据分析。
- [9] 参加石家庄热红外高光谱航空-地面综合遥感试验, 负责部分实验遥感图像的地表温度反演。
- [10] 参加北京小汤山, FISS 农作物光谱测量实验。
- [11] 组织 FISS 猪肉冷藏光谱测量实验。
- [12] 参加北京冶金地质总局, 药材显微光谱测量实验。
- [13] 参加北京药植所, 药材光谱测量实验。
- [14] 组织甘肃-内蒙古-宁夏栽培与野外甘草光谱测量实验。
- [15] 参与天然气水合物野外实验设计。

致 谢

考入遥感所，与高光谱室的相遇仿佛还在眼前。可是，一转眼离去的脚步声越来越近。回首过去，一路上不断努力，洒下了许多汗水，却也收获了众多师友的帮助和关怀。

衷心感谢我的导师童庆禧院士。三年的博士期间多次聆听您在科研、工作和生活上的教诲，让我获益匪浅，这是我一生宝贵的财富。对我来说，您不仅是我的导师，更是我的精神榜样。愿在您带领之下，祖国的高光谱遥感事业蒸蒸日上，我们的高光谱室的发展更上一层楼，取得一个又一个的突破。

衷心感谢我的导师王晋年研究员。王老师思维活跃、见解独到，对科研问题具有敏锐的洞察力。您在繁重忙碌的行政与科技工作之中，多次关心我的论文开展情况，提出了许多宝贵的建议。您的教诲让我收获良多，对我产生了非常深远的影响。

衷心感谢我的导师张立福研究员。感谢福老师在日常学习、生活和工作上的指导与关心。从论文的开题、中期到答辩，您对我论文的倾注大量的时间和精力，提出了许多具体指导意见。福老师的殷切期望给了我很大的鼓励和信心，让我在三年的学习和科研中能够克服一个又一个的难关。

感谢郑兰芬老师在生活和学习上对我的关心和照顾。您如亲人般的照顾，让我在高光谱找到了像家一样的感觉，感谢郑老师！

衷心感谢方俊永老师、张霞老师和刘学师兄在学习与生活上给予的指导、关心、帮助和支持。特别感谢方老师，难以忘记您对我进入高光谱室的面试，您工作的勤恳钻研和忘我投入就是我学习的好榜样！

感谢刘少创老师的大力帮助。刘少创老师工作热情、待人宽容，在您指导下的半年，是我从一个硕士转变为一个博士的半年。您长期以来对我的教诲、指导与帮助使我受益良多。

特别感谢周丽萍女士在生活上的关心和帮助。感谢研究生部的吴晓清、刘戈平老师在学习、生活方面的关心和帮助。

感谢刘波师兄、杨杭师兄、赵冬师兄、吴太夏师兄、王树东师兄、王潇师姐、

张晓红师姐、岑奕师姐等师兄师姐的关心和帮助，特别感谢刘波师兄在学习上的关心与帮助，每次与你讨论都能极大地开阔我的思路；特别感谢杨杭师兄，一起在石家庄做实验的愉快经历是我宝贵的财富。

感谢高光谱研究室成员以及众师弟师妹们的帮助与支持，他们是：孙韬、黄长平、陈小平、胡顺石、王倩、帅通、覃环虎、兰穹穹、姜海玲、谢一淞、尚坤、张明、赵恒谦、刘凯、孙雪剑、丰明博、张旭凯、朱海涛、宁艳玲、丁玲、李晶宜、吴向楠、吴松、房丛卉、朱文君等，与你们一起度过的日子，历历在目。特别感谢黄长平师弟，在论文写作过程中给予的热心帮助。感谢姜海玲、赵恒谦、刘凯和孙雪剑在论文校稿方面的帮助，论文的顺利完成有你们的功劳。

感谢出席论文答辩的评委老师们对论文提出的宝贵建议；感谢三位审稿人对论文的认真评阅和宝贵建议。

感谢我的好朋友，好兄弟们，大家相互鼓励，共同奋进。他们是胡成凯、赵生兵、周杰、周志生、魏士俨和张亦。感谢你们一直以为的关心和鼓励。

最后特别感谢我家人的支持。谁言寸草心，报得三春晖。父母的养育之恩，无私的关爱，无限的宽容和无尽的支持，是我支持到现在的无穷动力。感谢我的姐姐和弟弟对我的支持、关心和鼓励。

感谢所有关心和帮助过我的人们！