

# 岩石热红外光谱解混与矿物含量反演

刘善军<sup>1</sup>, 卓建英<sup>1</sup>, 吴立新<sup>1,2</sup>, 徐忠印<sup>1</sup>

1. 东北大学资源与土木工程学院, 沈阳 110819
2. 北京师范大学减灾与应急管理研究院, 北京 100875

**摘要** 以碱性长石花岗岩为例, 采用 Turbo FT 便携式红外光谱辐射计对其 4 种组成矿物(钾长石、斜长石、白云母、石英)分别进行 0.71—1mm 颗粒室外常温、0.71—1mm 颗粒室内 80℃、块体室外常温的热红外(7—14 $\mu\text{m}$ )光谱特征测试, 以测试结果作为端元光谱对室外常温下测得的块状碱性长石花岗岩光谱进行解混, 并与将 ASU 光谱作为端元光谱的解混效果进行比较。结果表明, 当岩石与矿物端元的光谱测试条件相同时, 解混效果最好; 使用块状端元光谱能有效解混块状岩石光谱; ASU 颗粒光谱不能解混块体岩石的矿物成分及含量。试验结果对遥感地质及矿物填图的研究具有指导意义。

**关键词** 遥感; 岩石; 矿物; 光谱解混; 热红外

**中图分类号** P58

**文献标识码** A

**doi** 10.3981/j.issn.1000-7857.2011.35.003

## Unmixing of Rock Thermal Infrared Spectrum and Conversion of Mineral Content

LIU Shanjun<sup>1</sup>, ZHUO Jianying<sup>1</sup>, WU Lixin<sup>1,2</sup>, XU Zhongyin<sup>1</sup>

1. College of Resources and Civil Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China
2. Academy of Disaster Reduction and Emergency Management, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

**Abstract** Distinguishing and converting mineral ingredient and content based on the spectrum unmixing of rock are an important direction of high-spectral remote sensing. The thermal infrared spectrum of a block of alkali feldspar granite is measured by using Turbo FT portable infrared spectral radiometer in outdoor site and normal temperature, and the thermal infrared spectrums (7—14 $\mu\text{m}$ ) of four mineral ingredients of the rock, that is, potash feldspar, plagioclase, white mica, and quartz are also measured under three different conditions, i.e. grain sample of 0.71—1mm in outdoor site and normal temperature, grain sample of 0.71—1mm in indoor site and 80 $^{\circ}\text{C}$ , and block sample at outdoor site and normal temperature. Then the spectrum of the rock is linearly decomposed by using the spectrums of the four minerals as the end members, and the results are compared with the results that the ASU spectrum is used as the end member. The result shows that the unmixing effect is best when the spectrums of rock and the end member mineral are measured in the same condition; and that the spectrum of block rock could be decomposed by the spectrums of block minerals, however it could not be decomposed by ASU spectrum. The experimental result is beneficial to the remote sensing geology and mineral mapping.

**Keywords** remote sensing; rock; mineral; spectrum unmixing; thermal infrared

### 0 引言

热红外发射光谱可探测不含水造岩矿物的 Si—O 键振动特征<sup>[1]</sup>, 是对可见光-近红外遥感技术的有效补充。通过对岩石的光谱进行解混可以识别和反演岩石的矿物成分和含量, 进而识别岩石类型, 这是高光谱遥感应用的重要方向。前人研究表明, 在可见光-近红外(0.35—2.5 $\mu\text{m}$ )光谱区间, 岩石

反射光谱是其组成矿物反射光谱的综合反映, 矿物之间的光谱混合属于紧致混合, 单独成分颗粒散射较弱, 互相之间发生多重散射, 光谱混合为非线性混合<sup>[2-3]</sup>; 而对波长为 7—14 $\mu\text{m}$  的热红外发射光谱, 矿物的吸收系数较高, 光谱混合为线性混合<sup>[4-6]</sup>, 采用线性解混技术可以对矿物进行定量识别, 避开了一直阻碍遥感应用的光谱非线性混合的难题, 使同时精确

收稿日期: 2011-08-26; 修回日期: 2011-12-07

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973 计划)项目(2011CB707100); 国家自然科学基金项目(50774017, 41074127)

作者简介: 刘善军, 教授, 研究方向为遥感科学与应用, 电子邮箱: liusjdr@126.com

提取矿物种属及丰度信息成为可能。

在光谱解混之前,必须了解各端元的光谱特征。目前在热红外波段,国际上较常用的两个光谱库是 ASTER 和 ASU。ASTER 光谱库始建于 1998 年 7 月,至今汇集了 2300 多种自然地物和人工目标的波谱数据,光谱测试的岩矿样品的粒径分为  $<45\mu\text{m}$ 、 $45\text{—}125\mu\text{m}$  和  $125\text{—}500\mu\text{m}$ 。ASU 光谱库于 2000 年由美国亚利桑那州大学地质学院建立,包括了硅酸盐、碳酸盐、硫酸盐、磷酸盐、卤化物和氧化物等主要造岩矿物的热红外发射光谱,大多数样品粒径为  $710\text{—}1000\mu\text{m}$ ,截至 2008 年共有 330 多种矿物光谱。这两个数据库在实际遥感应用中存在以下问题:(1) 两个光谱库都是颗粒样品的光谱,只有少数块体样品光谱,由于颗粒光谱不同于块体光谱,使用颗粒端元光谱解混自然界块状岩石光谱时势必会造成误差;(2) ASTER 光谱库虽然收录地物种类齐全,但应用时需要用基尔霍夫定律将反射光谱转换为发射光谱,从而引入误差,而 ASU 光谱库在获取光谱时,需将样品加热到  $80^\circ\text{C}$  进行测试,与野外常温的实际情况不符。

本文采用便携式傅里叶变换红外光谱辐射计,分别在室内和室外测定了颗粒和块状矿物的热红外光谱,将测定光谱作为端元光谱对室外块状岩石测得的光谱进行了解混,并与将 ASU 光谱作为端元的解混效果进行比较,探讨实用于卫星遥感的岩石光谱解混方案。

## 1 试验设备和方案

### 1.1 测试设备

本研究采用美国 Designs & Prototypes (D&P)公司生产的 Turbo FT 傅里叶变换红外光谱辐射计(图 1)。该设备在野外、室内环境均可观测目标发射率光谱,可实现野外目标在自然状态下的快速观测,避免了室内光谱仪观测时需制作压片和颗粒样品形态变化带来的测量误差。其光谱范围为  $2.55\text{—}16\mu\text{m}$ ,光谱分辨率为  $4\text{cm}^{-1}$ ,视场角为  $2.4^\circ$ ,光谱精度为  $\pm 2\text{cm}^{-1}$ ,扫描速率为 100 光谱/s。测试时设备距离样品约

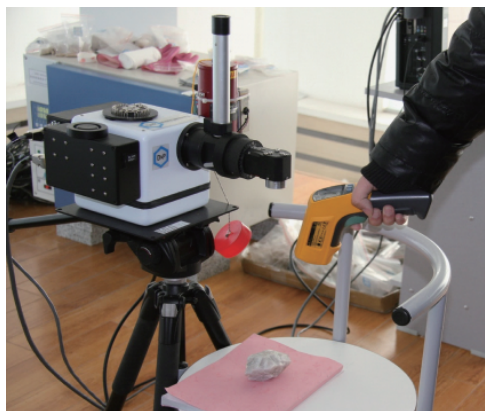


图 1 Turbo FT 便携式红外光谱仪

Fig. 1 Portable infrared spectrometer Turbo FT

$50\text{cm}$ ,垂直观测,同时用红外辐射枪和温度计测量样品、金板温度。

### 1.2 测试方案

选择常见的碱性长石花岗岩作为解混目标进行试验,该岩石的偏光显微镜鉴定结果表明,其钾长石体积分数为 50%,斜长石为 15%,白云母为 5%,石英为 30%。因此,在岩石解混中将这 4 种矿物作为端元矿物。试验时首先对岩石块体进行室外天空冷背景下的发射光谱测试,获得了岩石在野外自然状态下的发射光谱,该光谱获取环境与卫星遥感保持一致;然后分别对钾长石、斜长石、白云母、石英 4 种端元矿物进行  $0.71\text{—}1\text{mm}$  颗粒室外常温、 $0.71\text{—}1\text{mm}$  颗粒室内  $80^\circ\text{C}$ 、块体室外常温的发射率光谱测试;最后用这 3 种状态下所得的矿物光谱对碱性长石花岗岩进行线性解混,并与以 ASU 矿物光谱作为端元的解混结果进行比较。

## 2 光谱测试

图 2—图 6 重点显示了花岗岩测试光谱以及在不同条件下测得的 4 种矿物的热红外 ( $7\text{—}14\mu\text{m}$ ) 光谱特征。花岗岩光谱在  $8\text{—}10.5\mu\text{m}$  处有 1 个强的低发射带(图 2)。同一种矿物在不同条件下所测的光谱形态不同,在室外常温块状条件下光谱的  $8\text{—}10.5\mu\text{m}$  处的低发射带特征更加明显,而其他几种条件下的低发射带光谱特征相对较弱,特征深度较浅(图 3—图 6)。

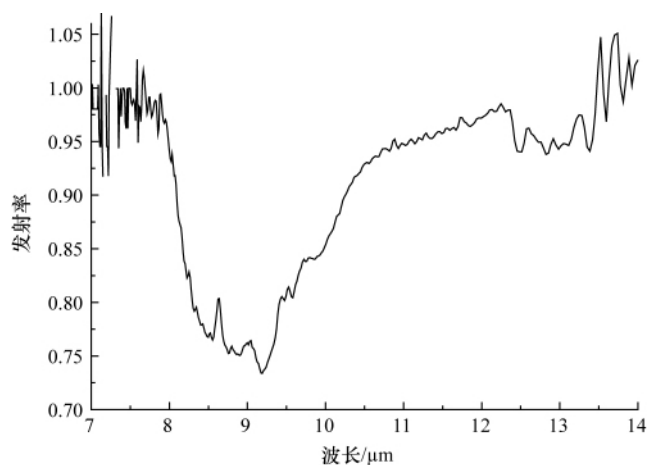


图 2 块状碱性长石花岗岩在室外常温下测得的发射光谱  
Fig. 2 Emission spectrum of a block of alkali feldspar granite under outdoor and normal temperature

## 3 光谱解混

### 3.1 发射光谱的线性解混原理

岩石光谱由其组成矿物的多种光谱线性混合而成,各组成矿物的光谱在混合光谱中的比重由岩石表面上该矿物面积占岩石总面积的比重决定,光谱解混是求取该面积比重并将其视为矿物在岩石中的体积分数。线性混合数学表达式为

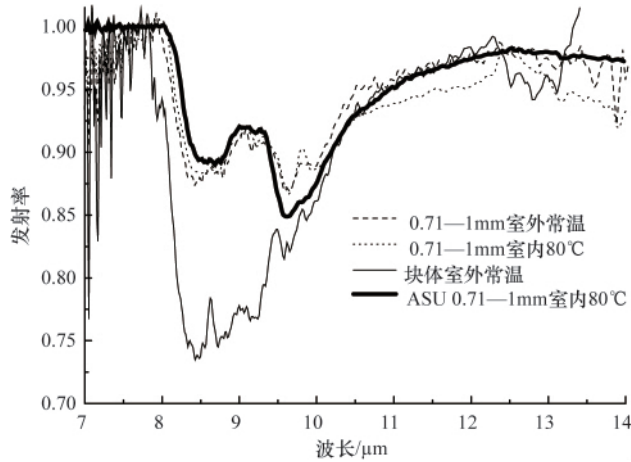


图3 钾长石发射光谱

Fig. 3 Emission spectrum of feldspar

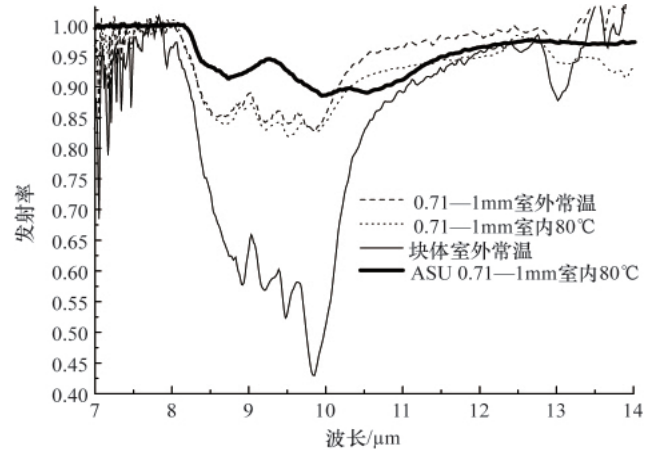


图4 斜长石发射光谱

Fig. 4 Emission spectrum of plagioclase

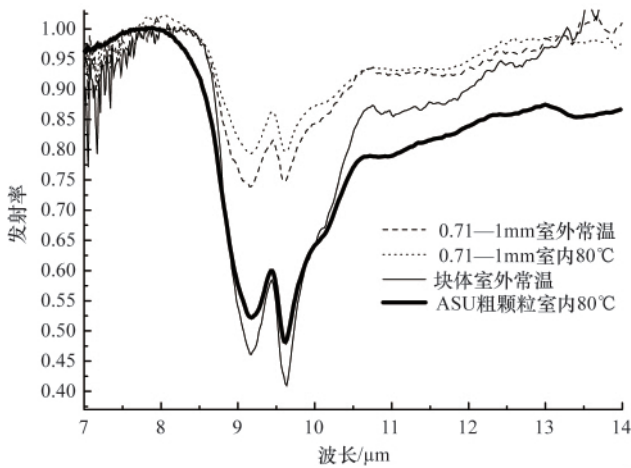


图5 白云母发射光谱

Fig. 5 Emission spectrum of white mica

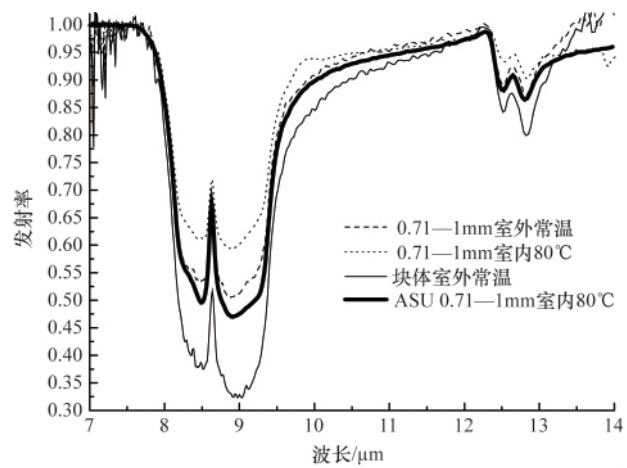


图6 石英发射光谱

Fig. 6 Emission spectrum of quartz

$$\omega_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n a_i \omega_i + \delta \quad (1)$$

式中,  $\omega_{\text{mix}}$  为混合光谱;  $a_i$  为各个混合端元的含量;  $\omega_i$  为各端元的光谱;  $\delta$  为拟合光谱与实测光谱之间的差值;  $i$  为端元的编号;  $n$  为组成岩石的矿物总数。

光谱分解是在已知  $\omega_{\text{mix}}$ 、 $\omega_i$  的情况下求解  $a_i$ 。求解矿物含量就是求解均方根最小值的过程, 均方根表达式为

$$RMS = \sqrt{\sum_{j=1}^m \delta(\lambda_j)^2 / m} \quad (2)$$

式中,  $j$  为波长编号;  $m$  为波长的总个数;  $\delta(\lambda_j)$  表示第  $j$  个波长上的拟合光谱与实测光谱之间的差值。

在光谱分解过程中引入两个约束条件: 各端元体积分数总和为 100% 以及各端元体积分数为 0—100%。鉴于颗粒大小对光谱特征造成的影响, 以及岩石和矿物光谱特征深度不同, 光谱分解时在端元光谱中加入 1 条各波段发射率均为 1

的黑体光谱, 对特征深度进行补偿, 这一端元代表“无光谱特征矿物”的光谱。计算时再剔除黑体光谱所占比例。这样, 分解得到的就是矿物的“真实含量”, 即各个端元在参与分解端元中所占的绝对比例。

### 3.2 不同方案的解混结果比较

表 1 显示了不同测试条件下碱性长石花岗岩光谱解混结果。在 3 种端元测试条件(室外常温 0.71—1mm 颗粒物、室内 80°C 0.71—1mm 颗粒物、室外常温块体)的光谱解混结果中, 室外常温块体下的光谱解混效果最好, 平均体积分数误差仅为 6.83%; 室外常温 0.71—1mm 颗粒物条件下的解混效果次之, 平均误差为 15.63%; 而室内 80°C 0.71—1mm 颗粒物条件下的解混效果最差, 且斜长石漏解。此外, 使用 ASU 光谱库的 4 种矿物辐射光谱作为端元进行解混时, 也出现了斜长石漏解的现象。试验结果表明, 当端元矿物光谱与所解混的岩石光谱的测试条件相同时, 解混效果最好, 误差最小。

表 1 碱性长石花岗岩解混结果

Table 1 Linear unmixing results of alkali feldspar granite

矿物端元光谱测试条件	矿物体积分数解混结果/%				平均体积分数的误差/%	均方根误差
	钾长石	斜长石	白云母	石英		
室外常温 0.71—1mm 颗粒物	19.61	39.6	11.66	29.13	15.63	0.0133
室内 80℃ 0.71—1mm 颗粒物	72.93	0	3.26	23.81	漏解, 失败	0.0226
室外常温 块体	36.34	24.55	6.25	32.86	6.83	0.0128
ASU(0.71— 1mm 颗粒 物)	0	0	30.71	69.29	漏解, 失败	0.0402

注:碱性长石花岗岩的真实矿物体积分数为钾长石 50%、斜长石 15%、白云母 5%、石英 30%。

Notes: Real mineral bulk fraction of alkali feldspar granite is that among them, 50% is feldspar, 15% is plagioclase, 5% is white mica, and 30% is quartz.

#### 4 结论

本文采用红外光谱的线性解混方法,以碱性长石花岗岩为例,对岩石在不同方案下的解混效果进行比较。结果表明,在热红外(7—14 $\mu\text{m}$ )波段,矿物发射光谱符合线性加和规律;当岩石与矿物端元的光谱测试条件相同时,解混效果最好;使用块状端元光谱能够有效解混块状岩石光谱,而 ASU 颗粒

光谱不能解混室外块状岩石的矿物成分及含量。由于卫星观测的目标是自然块体岩石,且观测环境为天空冷背景,因此,实际利用高光谱遥感进行岩石识别时,应要求端元矿物的光谱测试条件与岩石保持一致。

#### 参考文献 (References)

- [1] Christensen P R, Bandfield J L, Hamilton V E. A thermal emission spectral library of rock-forming minerals [J]. *Journal of Geophysical Research*, 2000, 105(E4): 9735–9739.
- [2] Johnson P M, Smith M O, Adams J B. Simple algorithms for remote determination of mineral abundances and particle sizes from reflectance spectra[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1992, 97(E2): 2649–2657.
- [3] Clark R N. Spectral properties of mixtures of montmorillonite and dark carbon grains: Implications for remote sensing minerals containing chemically and physically adsorbed water [J]. *Journal of Geophysical Research*, 1983, 88(B12): 10635–10644.
- [4] Ramsey M S, Christensen P R. Mineral abundance determination: Quantitative deconvolution of thermal emission spectra [J]. *Journal of Geophysical Research*, 1998, 103(B1): 577–596.
- [5] Mathew G, Nair A, Rao T K, et al. Laboratory technique for quantitative thermal emissivity measurements of geological samples [J]. *J Earth Syst Sci*, 2009, 118(4): 391–404.
- [6] Wyatt M B, Hamilton V E, Mcsween H Y, et al. Analysis of terrestrial and Martian volcanic compositions using thermal emission spectroscopy: 1. Determination of mineralogy, chemistry and classification strategies[J]. *Journal of Geophysical Research*, 2001, 106(E7): 14711–14732.
- [7] Thomson J L, Salisbury J W. The mid-infrared reflectance of mineral mixtures (7–14 $\mu\text{m}$ )[J]. *Remote Sensing of Environment*, 1993, 45(1): 1–13.
- [8] Hamilton V E. Thermal infrared emission spectroscopy of the pyroxene mineral series[J]. *Journal of Geophysical Research*, 2000, 105(E4): 9701–9716.

(责任编辑 孙秀云,代丽)

#### ·学术动态·

### “第九届全国转化膜及表面精饰学术年会”征文

由中国表面工程协会转化膜专业委员会主办的“第九届全国转化膜及表面精饰学术年会”拟于 2012 年 5 月 1 日在安徽省黄山市召开。

征文范围:(1)金属转化膜技术(包括阳极氧化、化学氧化、磷化、钝化和发黑)及其他金属表面处理(包括电镀、真空镀、化学镀、达克罗、涂装、防锈等)现状和发展趋势;(2)金属转化膜及其他金属表面处理节能减排新技术、新工艺、新材料、新设备;(3)镁及其合金转化膜新技术及应用;(4)转化膜纳米材料研究和应用;(5)转化膜技术和涂装技术复合工艺研究和应用;(6)分析测试新方法及其仪器、仪表;(7)三废治理与资源回收的新方法、新设备;(8)企业管理、技术质量管理先进经验。

论文截止日期:2012 年 3 月 30 日。

联系电话:027-83617083。

通信地址:武汉市汉口宝丰二路 126 号 (430030)。

会议网站:<http://www.bmgc.cn/>。