

文章编号: 0253-2239(2010)06-1656-06

应用被动傅里叶变换红外光谱技术 探测生物气溶胶研究

兰天鸽 熊 伟 方勇华 李大成 袁越明

(中国科学院安徽光学精密机械研究所通用光学定标与表征技术重点实验室, 安徽 合肥 230031)

摘要 从红外遥感辐射传输理论出发,利用二流近似方法,建立了包含散射影响的生物气溶胶被动红外探测模型;从理论上阐明了气溶胶对四周辐射的散射对生物气溶胶被动红外探测的影响。以某微生物孢子气溶胶为对象开展探测原理试验,研究了生物气溶胶红外光谱特性。给出了生物气溶胶室内吸收池试验结果,用辐射传输模型解释了试验现象。通过试验验证了探测模型的合理性、有效性;结合探测模型和室内试验结果,也可为外场试验的开展提供参考。

关键词 光谱学;生物气溶胶;被动探测;红外光谱;辐射传输;散射

中图分类号 O433.4 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20103006.1656

Study on Passive Detection of Biological Aerosol with Fourier-Transform Infrared Spectroscopic Technique

Lan Tiange Xiong Wei Fang Yonghua Li Dacheng Yuan Yueming

(Key Laboratory of Optical Calibration and Characterization, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics,
Chinese Academy of Science, Hefei, Anhui 230031, China)

Abstract A model is built from the infrared remote sensing radiative transfer theory and the two stream approximation for passive infrared detection of biological aerosol, which theoretically illustrates the effect of scattering of radiances from all sides incident on the aerosol. The laboratory principal experiments are conducted on a microorganism spores aerosol for studying the infrared spectral properties of biological aerosol. The results of preliminary laboratory experiments in bioaerosol cell are presented, and the experimental phenomena are explained with radiative transfer model. It is shown that the detection model are effective and reasonable. Combining the detection model and the laboratory experimental results can give a reference for field passive standoff detection experiments of biological aerosol.

Key words spectroscopy; biological aerosol; passive detection; infrared spectroscopy; radiative transfer; scattering

1 引 言

生物气溶胶是指气溶胶中有生命活性的部分,包括空气中的细菌、真菌、病毒、尘螨、花粉、孢子、动植物碎裂分解体等具有生命活性的微小粒子。生物气溶胶在空气中的扩散、传输会引起人类急、慢性疾病以及动植物疾病的流行传播。生物气溶胶研究涉及环境保护、卫生防疫、畜牧业和工农业生产等领域,有重要的价值和意义。

傅里叶变换红外光谱技术由于其自身独特的优势,在多种领域得到了广泛应用^[1,2]。近几年来,美国、加拿大等国的相关人员开展了利用基于傅里叶变换红外光谱技术的生物气溶胶被动红外遥感探测试验;这些试验虽然是在一定控制条件下完成的,但其结果充分证明了被动红外方法远程遥感监测生物气溶胶的可行性^[3~7]。

在生物气溶胶被动红外探测中,一个合理有效

收稿日期: 2009-05-11; 收到修改稿日期: 2009-08-11

作者简介: 兰天鸽(1981—),男,博士,助理研究员,主要从事红外遥感探测、遥感信息分析与处理等方面的研究。

E-mail: tingerlan@aiofm.ac.cn

的辐射传输模型有助于实验方案设计、实验数据理解以及光谱信号预处理、识别分类、定量反演等分析算法的开发,最终改善气溶胶探测能力。目前相关研究中采用的红外辐射传输模型大都忽略了散射,对散射作用过程及其影响还没有充分的研究和理解^[8]。本文考虑生物气溶胶散射效应在红外辐射传输中的作用和影响,建立了一个包含散射作用的被动红外辐射传输模型,用于生物气溶胶红外探测。给出了生物气溶胶室内吸收池试验初步结果,并用辐射传输模型解释了试验现象。

2 生物气溶胶被动红外探测模型

2.1 气溶胶探测三层模型

当利用被动遥感傅里叶变换红外光谱仪对其视场中的目标污染气溶胶云团进行探测时,可以用一个三层模型来对测量的过程进行介绍。如图 1 所示,第一层是目标污染云团到光谱仪之间的大气,第二层是目标气溶胶云团,第三层是视场背景如低平天空、建筑物、树木、山峰等。在这一模型中,认为各层都是均匀的而且充满了仪器视场。

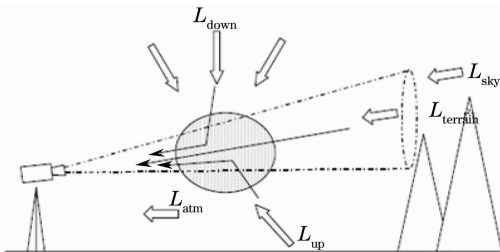


图 1 生物气溶胶被动红外探测示意图

Fig. 1 Schematic representation of passive infrared detection for biological aerosol

入射到光谱仪的辐射亮度 L 为

$$L = (1 - t_1)B_1 + t_1[(1 - \bar{\omega})(1 - t_2)B_2 + t_2L_3 + \Delta L_s], \quad (1)$$

式中 t_i 表示第 i 层的透射率; B_i 为第 i 层温度下的黑体辐射亮度; L_3 为光谱仪视场背景的辐射亮度, $L_3 = L_{\text{sky}} + L_{\text{terrain}}$; $\bar{\omega}$ 为散射比,即散射系数与消光系数的比值,表示散射部分占总体消光的比例; ΔL_s 为各个方向红外辐射经过气溶胶云团多次散射而进入光谱仪部分。 t_2 是气溶胶云团的等效透射率

$$t_2 = \exp(-k_\lambda C l), \quad (2)$$

式中 k_λ 是生物气溶胶云团的消光衰减系数,包含了气溶胶云团对入射光的吸收和散射衰减^[9]。 C 和 l 是仪器视场中云团的浓度和程长。

假设光谱仪视场中没有污染云团出现时,则入

射到光谱仪的辐射亮度

$$L_0 = (1 - t_1)B_1 + t_1L_3. \quad (3)$$

由于污染云团的出现,光谱仪接收到的辐射亮度变化为

$$\Delta L = L - L_0 = t_1[(1 - \bar{\omega})(1 - t_2)B_2 - (1 - t_2)L_3 + \Delta L_s], \quad (4)$$

式中 ΔL 是气溶胶云团对入射光吸收、散射以及自身热辐射的结果,其中包含了目标污染物特有的光谱特征,可以用于目标的定性、定量分析。

假设污染云团和周围大气的温度相同,则 $B_1 = B_2$, (4)式可以变为

$$\Delta L = (1 - t_2)(B_1 - L_0 - \bar{\omega} t_1 B_1) + t_1 \Delta L_s. \quad (5)$$

2.2 散射贡献近似计算——二流近似

如图 2 所示,用 μ 表示光谱仪视线 LOS1 相对于生物气溶胶云团的方向, $\mu = \cos(\theta)$,而 θ 表示视线相对于向上垂线的倾角。光谱仪接收辐射量在垂直光学厚度 τ 位置处,沿 LOS1 反方向经过光学厚度 $d\tau'$,由于气溶胶云团对周围入射辐射的多次散射而增强,用微分辐射传输方程表示为

$$dL_s(\tau, \mu) = J(\tau, \mu)d\tau', \quad (6)$$

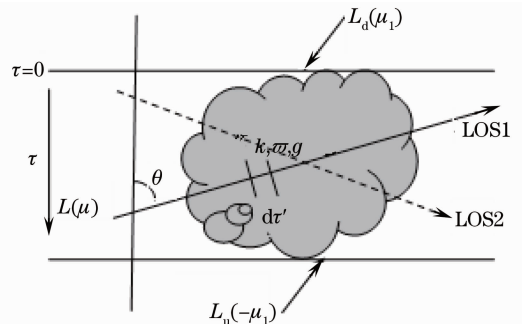


图 2 气溶胶被动红外探测散射近似计算示意图

Fig. 2 Schematic representation of scattering approximation for passive detection of aerosol plume

式中 $J(\tau, \mu)$ 是散射源函数,表征了介质散射造成的对 μ 方向辐射的增强,而

$$J(\tau, \mu) = \frac{\bar{\omega}}{2} \int_{-1}^1 P(\mu, \mu') I(\tau, \mu') d\mu', \quad (7)$$

式中 $P(\mu, \mu')$ 为散射相函数(与方位角无关),用来描述散射能的角分布,表示沿方向 μ' 入射的辐射强度 $I(\tau, \mu')$ 由于多次散射在 μ 方向上确定的出射强度与各方向平均散射强度的比例,有 $\frac{1}{2} \int_{-1}^1 P(\mu, \mu') d\mu' = 1$ 。

为了计算气溶胶云团散射对光谱仪接收能量的贡献,这里引入二流近似^[10,11],把入射的周围辐射分为上下两个半球。这里根据高斯求积法令 $\mu_1 =$

$1/\sqrt{3}$, 在位置 τ 处, 向下和向上强度分别为 $I(\tau, +\mu_1) = I^\downarrow(\tau), I(\tau, -\mu_1) = I^\uparrow(\tau)$ 。而在二流近似的限制下相函数可写为

$$P(\mu, \mu') = (1 + 3g\mu\mu')\delta(\mu \pm \mu_1)\delta(\mu' \pm \mu_1) = 1 \pm g, \quad (8)$$

式中 g 是非对称因子, 表征了前后向散射不对称的程度。

因此, 散射源函数 $J(\tau, \mu)$ 可以改写为

$$J(\tau, \mu) = \frac{\bar{\omega}}{2} \int_{-1}^1 P(\mu, \mu') I(\tau, \mu') d\mu' = \frac{\bar{\omega}}{2} [(1-g)I^\uparrow + (1+g)I^\downarrow]. \quad (9)$$

假设气溶胶云团在 μ 方向的等效光学厚度为 τ_2 , 那么由于气溶胶云团散射对光谱仪接收能量的贡献为

$$\Delta L_s(\mu) = \int_0^{\tau_2} J(\tau', \mu) \exp[-(\tau_2 - \tau')] d\tau'. \quad (10)$$

把(9)式代入(10)式, 如果 τ_2 较小 ($\tau_2 < 0.1$), 则可得

$$\Delta L_s(\mu) = \tau_2 \frac{\bar{\omega}}{2} [(1-g)L_u(-\mu_1) + (1+g)L_d(\mu_1)], \quad (11)$$

式中 $L_u(-\mu_1)$ 和 $L_d(\mu_1)$ 分别是对气溶胶云团向上和向下辐射的边界条件, 可以用大气辐射软件计算。

至此, 已经得到了在二流近似条件下, 气溶胶云团散射对光谱仪接收能量贡献的数值计算公式。把(11)式代入(5)式可得

$$\Delta L = (1 - t_2)(B_1 - L_0 - \bar{\omega} t_1 B_1) + t_1 \tau_2 \frac{\bar{\omega}}{2} [(1-g)L_u(-\mu_1) + (1+g)L_d(\mu_1)]. \quad (12)$$

已经假设了 τ_2 较小, 那么上式则可以变化为

$$\Delta L = \tau_2 (B_1 - L_0) + t_1 \tau_2 \frac{\bar{\omega}}{2} \{ (1-g)[L_u(-\mu_1) - B_1] + (1+g)[L_d(\mu_1) - B_1] \}. \quad (13)$$

而对于仪器视线方向向下的情况, 如图 2 中 LOS2 所示, 与上述情况类似, 只要对(9)式和(10)式稍作修改即可。

3 吸收池试验及讨论

从红外遥感辐射传输理论出发, 利用二流近似方法, 建立了包含散射影响的生物气溶胶被动红外探测模型。在这一部分, 将通过室内吸收池试验, 来研究生物气溶胶红外光谱特性, 并验证探测模型的合理性、有效性。

3.1 试验部分

实验使用德国 Bruker 公司的 OPAG33 型傅里叶变换红外光谱仪, MCT 探测器, 其噪声等效光谱辐射 NESR 约为 $10^{-5} \text{ W} \cdot \text{cm} / (\text{m}^2 \cdot \text{Sr})$ 量级。吸收池截面直径 20 cm, 程长 330 cm, 故其容积大约为 0.1 m^3 。在吸收池靠近光谱仪一端 30 cm 处的侧壁向池内释放气溶胶样品, 并有微风使气溶胶向另一端飘逸、扩散, 充满池内空间。以一个面源黑体作为视场背景, 可以通过设定其温度来调节气溶胶与背景之间的等效温差。需要提出的是, 由于面源黑体并不能完全覆盖光谱仪视场, 测量背景的等效亮温不会和黑体显示温度相同, 而要比黑体显示温度低。

以某常见无害微生物孢子气溶胶作为模拟实验样品, 图 4(a) 是其红外光谱特征(透射率)。实验前对其休眠体芽孢干粉进行粉碎加工, 使颗粒直径大部分在 $10 \mu\text{m}$ 以下。试验时首先测量干净背景光谱, 紧接着利用气溶胶发生装置, 向吸收池内分散芽孢干粉, 同时测量其红外光谱信号。傅里叶变换红外光谱仪测量范围为 $1300 \sim 700 \text{ cm}^{-1}$, 输出的干涉图经过傅里叶变换得到光谱, 光谱分辨率约为 2 cm^{-1} 。从测量光谱数据中减掉提前测量的干净背景信息, 并扣除仪器响应参数, 就可以得到包含气溶胶光谱特征的差谱 ΔL 。

3.2 分析与讨论

在室内吸收池试验条件下, 由于吸收池是圆柱形, 上下对称, 且内壁发射率较高, 这样可以认为 $L_u(-\mu_1) = L_d(\mu_1) \approx B_1$, 那么(12)式可以简化为

$$\Delta L \approx \tau_2 (B_1 - L_0). \quad (14)$$

也就是说, 此时光谱仪接收的辐射能量只和气溶胶云团光学厚度以及云团、背景之间亮温对比度有关。

以 $25 \text{ }^\circ\text{C}$ 黑体作为背景, 通过计算得到背景谱 L_0 平均亮温为 285.6 K , 而环境温度为 279 K , 即气溶胶云团和背景之间的亮温温差 $\Delta T = -6.6 \text{ K}$ 。如图 3 所示分别是测量的第 1 和第 7 条差谱信号。

从图中可以看到明显的对背景辐射的消光,但第 1 条差谱中并没有期望的光谱特征,到第 7 条时差谱信号以 1000 cm^{-1} 为中心才有较弱的光谱特征出现。这是因为气溶胶云团在吸收池内出现之初,云团浓度很大,散射在总体消光 k_λ 中占据主导作用,而吸收部分几乎被淹没。随着气溶胶云团在试验池内扩散以及直径较大颗粒沉降,云团消光系数中吸

收光谱特征逐渐明显,而散射作用减弱。

图 4(b)所示,是 $25\text{ }^\circ\text{C}$ 黑体为背景时第 15 条差谱信号。此时芽孢干粉在试验池中充分扩散,形成相对稳定的气溶胶云团,其吸收光谱特征十分明显,与已知的参考透射率谱线图 4(a)相比,无论在吸收峰值位置、宽度以及形状上都十分匹配。

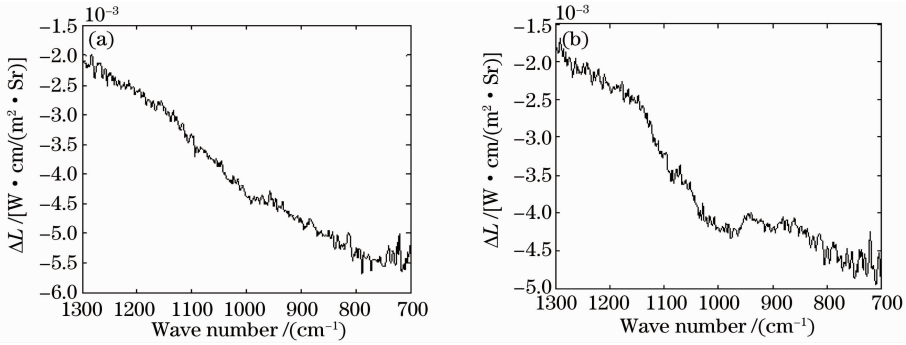


图 3 以 $25\text{ }^\circ\text{C}$ 黑体为背景时的差谱信号。(a)第 1 条;(b)第 7 条

Fig. 3 First (a) and the seventh (b) differential radiance with $25\text{ }^\circ\text{C}$ blackbody as background

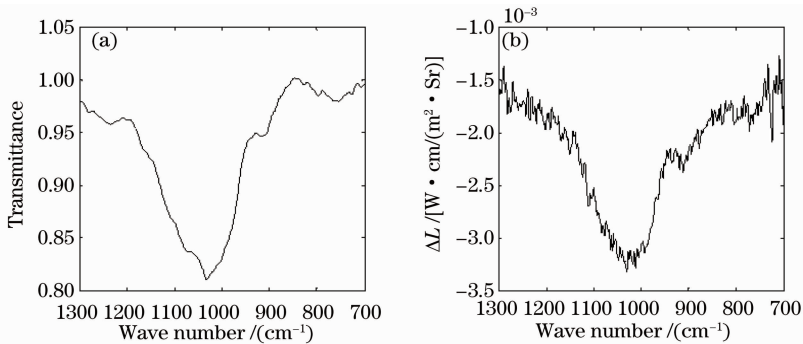


图 4 参考透射率谱(a)和 $25\text{ }^\circ\text{C}$ 黑体为背景时第 15 条差谱信号(b)

Fig. 4 (a) Reference transmittance of bioaerosol and (b) 15th differential radiance with $25\text{ }^\circ\text{C}$ blackbody as background

由于气溶胶颗粒的沉降,而且试验池两端没有封闭,气溶胶云团也会逐渐逸散到池外,仪器视场中气溶胶浓度越来越小。随着试验池内气溶胶云团浓度逐渐变小,在云团、背景亮温对比度一定条件下,

光谱特征也会逐渐的变弱小。如图 5 所示,随着测量时间的推移,差谱信号中吸收光谱特征逐渐变弱,以至最后无法辨别吸收特征。

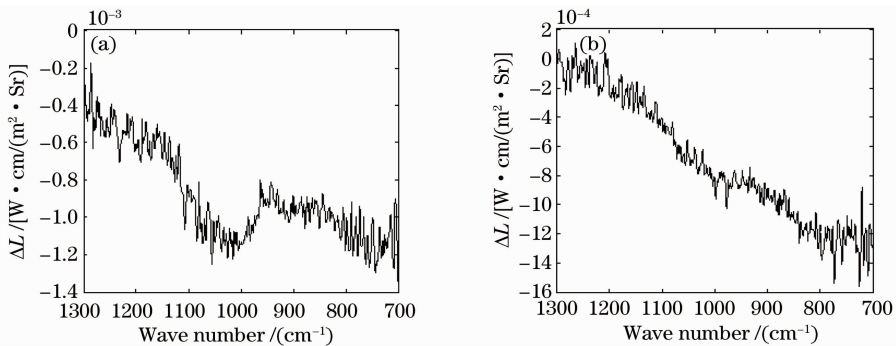


图 5 $25\text{ }^\circ\text{C}$ 黑体为背景时差谱信号。(a)第 35 条;(b)第 45 条

Fig. 5 35th (a) and the 45th (b) differential radiance with $25\text{ }^\circ\text{C}$ blackbody as background

为了进一步检验云团、背景温差在被动红外探测中的作用,以环境温度下黑体作为视场背景开展试验,释放的芽孢干粉数量及操作步骤与前一次试验相同。通过计算得到背景谱 L_0 。平均亮温为 278.2 K,而环境温度为 279 K,即气溶胶云团和背景之间的亮温温差 $\Delta T \approx 0.8$ K。

如图 6 所示,(a)图是目标光谱和背景的差谱信号,可以看到该差谱中存在明显的基线漂移;图中虚

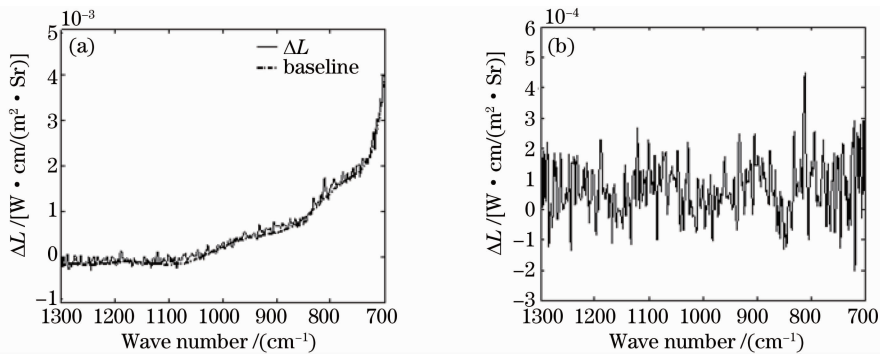


图 6 以环境温度下黑体为背景时差谱信号(a)及基线校正结果(b)

Fig. 6 Differential radiance with environment temperature blackbody as background (a) and the result of baseline correction (b)

在外场试验时,即使云团与背景之间温差较小,但云团光学厚度 τ_2 则可能会比较大,这样就可以使测量的光谱信号有足够的信噪比用于生物气溶胶探测、识别。需要注意的是,气溶胶云团浓度 C 不能太大,只能通过增加程长 l 来获得较大的光学厚度。另外,(13)式中第二项不能忽略,气溶胶对四周辐射的散射则会对生物气溶胶被动红外探测产生影响,根据向上、向下辐射与云团亮温对比度,增强或者减弱差谱信号中有效光谱特征的强度。

4 结 论

从红外遥感辐射传输理论出发,利用二流近似方法,建立了包含散射影响的生物气溶胶被动红外探测模型;从理论上阐明了气溶胶对四周辐射的散射对生物气溶胶被动红外探测的影响。通过开展探测原理试验,研究了生物气溶胶红外光谱特性。结合探测模型和室内试验结果,可以知道气溶胶云团温度与仪器视场背景辐射、投射到云团的四周辐射的等效亮温之间温差以及云团光学厚度是影响生物气溶胶被动红外探测的关键因素;通过增加程长 l 来获得较大的光学厚度,可以使测量的光谱信号有足够的信噪比用于生物气溶胶探测、识别;试验结果也验证了探测模型的合理性、有效性。

线是提取的基线。(b)图显示的是对其作基线校正后的差谱信号^[12],从图中并没有看到由于气溶胶云团的出现而产生的消光光谱特征。这是由于以环境温度下黑体为背景,背景等效亮温和目标气溶胶温度太接近,使得 $(B_1 - L_0)$ 很小,在气溶胶云团同等光学厚度条件下,差谱中有效部分 $\tau_2(B_1 - L_0)$ 就会也很小,被淹没在噪声中。

参 考 文 献

- Xiong Wei, Fang Yonghua, Huang Ye *et al.*. Remote sensing of pollution cloud by passive Fourier-transform infrared spectrometry[J]. *Opto-Electronic Engineering*, 2006, **33**(4): 27~30
熊 伟,方勇华,黄 烨等. 基于亮温光谱法的大气污染气体探测[J]. *光电工程*, 2006, **33**(4): 27~30
- Shi Youming, Liu Gang, Liu Jianhong *et al.*. Identification of auricularia auricula from different regions by Fourier transform infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(1): 129~132
时有明,刘 刚,刘剑虹等. 不同产地黑木耳的傅里叶变换红外光谱鉴别[J]. *光学学报*, 2007, **27**(1): 129~132
- K. P. Gurton, D. A. Ligon, R. Kvavilashvili. Measured infrared spectral extinction for aerosolized *Bacillus subtilis* var. niger endospores from 3 to 13 μm [J]. *Appl. Opt.*, 2001, **40**(25): 4443~4448
- A. Ben-David, H. Ren. Detection, identification and estimation of biological aerosols and vapors with Fourier transform infrared spectrometer[J]. *Appl. Opt.*, 2003, **42**(24): 4887~4900
- A. Ben-David. Remote detection of biological aerosols at a distance of 3 km with a passive Fourier transform infrared (FTIR) sensor[J]. *Opt. Express*, 2003, **11**(5): 418~429
- J. M. Therault, E. Puckrin, J. O. Jensen. Passive standoff detection of BG aerosol; method and field trial results[C]. *SPIE*, 2004, **5268**. 163~172
- A. Ifarraguerri, A. Ben-David, R. G. Vanderbeek. Estimating the limit of bio-aerosol detection with passive infrared spectroscopy[J]. *International J. High Speed Electronics and Systems*, 2008, **18**(3): 701~711
- Jiang Yuesong, Li Xiaolu, Zhao Yiming *et al.*. Effects of atmospheric scattering on thermal infrared remote sensing of the earth[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(12): 1766~1771
江月松,李小路,赵一鸣等. 热红外对地遥感中的大气散射效应[J]. *光学学报*, 2006, **26**(12): 1766~1771

- 9 Han Daowen, Liu Wenqing, Lu Yihuai *et al.*. A retrieve method for aerosol extinction coefficient based on madaline networks[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(3): 384~390
韩道文, 刘文清, 陆亦怀等. 基于 Madaline 网络的气溶胶消光系数反演算法[J]. *光学学报*, 2007, **27**(3): 384~390
- 10 A. Ben-David, J. Embury, C. E. Davidson. Radiative transfer model for aerosols in infrared wavelengths for passive remote sensing applications[J]. *Appl. Opt.*, 2006, **45**(26): 6860~6875
- 11 K. N. Liou. An Introduction to Atmospheric Radiation[M]. Guo Caili, Zhou Shijian Trans. Beijing: China Meteorological Press, 2004, 161~165
廖国男. 大气辐射导论[M]. 郭彩丽, 周诗健译. 北京: 气象出版社, 2004, 161~165
- 12 Tiange Lan, Yonghua Fang, Wei Xiong *et al.*. Automatic baseline correction of infrared spectra[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2007, **5**(10): 613~616

《中国激光》“激光分子影像诊断与治疗监控”专题 征 稿 启 事

随着光学成像技术、分子标记技术和基因组学/蛋白质组学的发展,激光分子影像已经成为光子学技术与生命科学和医学应用交叉的关键技术科学,发展十分迅猛。激光分子影像可在细胞和分子层面探索生命最小基本单元的功能、疾病发生发展的分子机理,可为疾病的早期诊断及其治疗进行无创、实时、靶向性的检测和监控提供有效手段;有望解决长期困扰人类健康与发展的重大关键难题,从而有效改善人类生存与生活质量。《中国激光》计划于**2010年10月正刊**(EI核心收录)上推出“激光分子影像诊断与治疗监控”专题栏目,现特向国内外广大专家学者征集“激光分子影像诊断与治疗监控”方面原创性的研究论文和综述,旨在集中反映该方面最新的研究成果及研究进展。

征稿范围包括:

光学分子成像的新技术与新方法:主要包括荧光分子成像技术(FRET、FRAP、FCS等);光声成像(PAI);光学相干层析成像(OCT);激光散斑成像(LSI);微波热声成像(TAI);近红外光学漫射成像(DOT)以及太赫兹成像(THz)等。

光学分子探针与分子诊断:主要包括近红外高效光学分子探针;多模态复合纳米探针;蛋白质和多肽小分子光学探针;分子水平诊断光谱学研究(荧光、吸收、偏振和拉曼光谱等)以及基于纳米技术的高效基因检测、单分子识别等。

光学分子成像在疾病早期诊断和治疗监控中的应用:主要包括疾病早期诊断中的基础研究;肿瘤的光热、光化学治疗及其监控;低强度光子治疗技术及其机制;手术过程中的光学导航以及预后的无损伤光子学疗效评估与检测技术等。

特邀组稿专家:

邢 达 教授 华南师范大学

截稿日期: 2010年6月30日

投稿方式以及格式:可通过中国光学期刊网网上投稿系统直接上传稿件(主题标明“激光分子影像诊断与治疗监控”投稿),详情请参见 <http://www.opticsjournal.net/zgjj.htm>。本专题投稿文体不限,中英文皆可,其电子版请使用 MS-word 格式,有任何问题请咨询马沂编辑, E-mail: C JL@siom. ac. cn; 电话: 021-69918427。