

基于亮温光谱的红外背景压缩方法

崔方晓 方勇华

(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 大部分污染气体在红外波段具有明显的发射或吸收特征, 被动傅里叶变换红外 (FTIR) 遥感技术可以对污染气体进行远距离探测和识别。当利用移动平台对污染气体进行遥测时, 背景辐射是未知的, 且光谱中包含大气等干扰物特征, 需要研究相应的背景压缩方法, 提取目标光谱特征。研究了基于亮温光谱的红外背景压缩方法, 认为背景辐射在亮温光谱上是缓变的基线, 并利用中光谱分辨率大气辐射传输模型 (MODTRAN) 软件包模拟大气干扰物特征, 根据最小二乘拟合原理实现红外背景压缩。实验以氨气作为目标气体, 以低平天空作为背景。结果表明, 本方法能够成功扣除背景辐射和大气干扰特征, 提取氨气的光谱特征, 并计算了氨气的浓度程长积值。

关键词 遥感; 红外; 亮温光谱; 背景压缩; 污染气体

中图分类号 TP722.5 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.1130001

Infrared Background Compression Method Based on Brightness Temperature Spectrum

Cui Fangxiao Fang Yonghua

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

Abstract Most pollutant gases have obvious absorbing or emitting features in the infrared band. Passive Fourier transform infrared (FTIR) remote sensing technology is used to detect and identify pollutant gases in a standoff distance. In the case of remote sensing pollutant gases on the mobile platform, the background is unknown and the spectrum includes interferents' spectral features such as atmospheric gases, thus background compression method is needed to extract target spectral features. An infrared background compression method based on brightness temperature spectrum is proposed, in which the background radiance is referred as a slowly-varied baseline. The radiance transmitting simulation software named MODTRAN is used to simulate interferents' spectral features such as atmospheric gases, and the infrared background compression is realized based on least-square fitting principle. The experiment takes ammonia as the target gas and the low altitude sky as the background. The results indicate that this method can effectively compress the background and interferents' features, extract the ammonia's spectral features and calculate the concentration-path-length.

Key words remote sensing; infrared; brightness temperature spectrum; background compression; pollutant gas

OCIS codes 300.6300; 070.4790; 120.0280

1 引言

随着工业的发展, 有害工业气体的排放和突发的气体污染事件越来越多, 人们对释放在大气中的污染气体进行探测和识别。被动傅里叶变换红外 (FTIR) 遥感技术是一种对污染气体进行遥测的有效手段, 能够对多种成分气体进行远距离探测, 探

测范围可达几千米^[1]。

当背景和污染气体存在温度差时, 傅里叶变换红外光谱仪能够检测到污染气体的发射或吸收辐射信号, 通过相应的信号处理可实现对污染气体识别分类, 并定量估计气体污染程度。随着应用需求的发展, 遥测系统需要搭载在移动平台上, 以便对污染

收稿日期: 2013-04-10; **收到修改稿日期**: 2013-06-27

作者简介: 崔方晓 (1985—), 男, 博士研究生, 主要从事光学遥感信号处理方面的研究。E-mail: cfx2010ep@hotmail.com

导师简介: 方勇华 (1966—), 男, 博士生导师, 主要从事遥感光电信息技术方面的研究。E-mail: yhfang@aiofm.ac.cn

气体进行实时动态遥测。由于背景辐射是未知的,且目标气体信号只占总能量的极小部分^[2](1%以下),而且开放路径测量的光谱存在大气等干扰物的发射或吸收辐射信号,因此需要研究相应的背景压缩算法,扣除背景辐射和干扰物信号,提取目标光谱特征^[3]。

国内外对于污染气体红外光谱背景信息抑制算法开展多种探索研究。Tarumi等^[4]提出利用数字滤波器和模式识别算法对干涉图进行处理,在干涉图上直接压缩背景,提取目标特征,但是水汽等干扰物信号难以扣除。Manolakis等^[5-6]针对光谱成像数据提出统计方法压缩背景信息,这一方法需要测量不同地域不同气象条件下的大量光谱数据。当允许测量背景光谱时,利用能同时测量两个相邻视场光谱的干涉仪直接得到差谱信号,但是这种光谱仪的结构比较复杂^[7-8]。亮温光谱法是将辐射亮度转换成亮温,在亮温光谱上扣除背景辐射,具有直观、简单的特点,且易于实现^[9]。

本文以亮温光谱为基础,利用中光谱分辨率大气辐射传输模型(MODTRAN)软件包计算软件计算水汽、二氧化碳等大气干扰物特征,通过最小二乘拟合法扣除背景辐射和干扰物特征,提取目标光谱特征;以事先训练好的神经网络对目标进行识别分类;并在线性模型的基础上,计算目标的浓度程长积值,定量估计气体的污染程度。

2 理论基础

当利用红外遥测光谱仪对其视场中的污染气体云团进行探测时(如图1所示),可以用一个三层模型来对测量的过程进行描述:第一层是大气,第二层是污染气体云团,第三层是视场背景。在这一模型中,认为各层都是均匀的而且充满了仪器视场。

基于以上假设,系统接收到的辐射亮度 L (单位为 $W/m^2 \cdot Sr \cdot cm^{-1}$)可以表示为

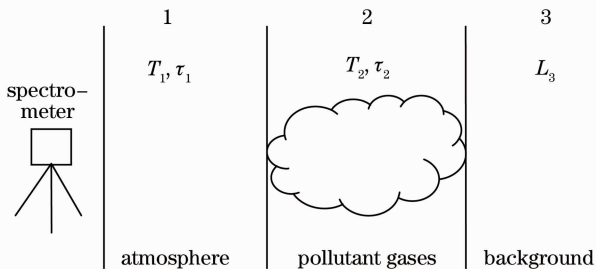


图1 污染云团的被动红外遥测示意图

Fig. 1 Passive infrared remote sensing of pollutant gases

$$L = (1 - \tau_1)B_1 + \tau_1[(1 - \tau_2)B_2 + \tau_2L_3], \quad (1)$$

式中 τ_i 为第 i 层的透射率, B_i 为第 i ($i = 1, 2$) 层温度下的黑体辐射亮度, L_3 为在污染气体云团前面的光谱辐射亮度。

假设第一层大气可以忽略($\tau_1 = 1$),且第一层和第二层温度相同($T_1 = T_2$),遥感模型可以简化为

$$L = (1 - \tau_2)B_2 + \tau_2L_3, \quad (2)$$

写成比值的表达形式可表示为

$$\tau_2 = \frac{L - B_2}{L_3 - B_2}. \quad (3)$$

根据普朗克辐射定律,通过普朗克公式变换可以得到辐射亮度谱 $L(\nu)$ (ν 为波数)的等效亮温 $T(\nu)$:

$$T(\nu) = \frac{hc\nu}{k \ln \left[\frac{L(\nu) + 2hc^2\nu^3}{L(\nu)} \right]}, \quad (4)$$

式中 h 为普朗克常数, c 为光速, k 为玻尔兹曼常数。

根据(4)式把(3)式的辐射亮度转换成亮温,得

$$\tau_2 = \frac{T - T_2}{T_3 - T_2} = \exp(-\alpha C), \quad (5)$$

式中 α 是污染气体吸收系数, C 是云团浓度程长积。

令 $\Delta T = T_3 - T_2$, $\Delta^2 T = T_2 - T$, 得

$$\Delta^2 T = \Delta T[1 - \exp(-\alpha C)], \quad (6)$$

式中 $\Delta^2 T$ 是目标云团的亮温光谱特征, ΔT 是背景层和观测层的亮温差。

当污染气体是单种气体薄云团时,(6)式可以表示为简单的线性模型:

$$\Delta^2 T \cong \alpha C * \Delta T. \quad (7)$$

污染气体的吸收系数 α 已知,如果能够获取目标气体的亮温光谱特征 $\Delta^2 T$, 并已知 ΔT , 可以由(7)式计算得到污染气体的浓度程长积值 C 。

3 背景压缩方法

大部分污染气体在 $1300 \sim 700 \text{ cm}^{-1}$ 波段具有明显的吸收或发射特征,以这一波段作为污染气体的检测波段。由于作为背景的自然界的大部分物质发射率很高,且在 $1300 \sim 700 \text{ cm}^{-1}$ 范围近似为常数,因此在亮温光谱上可以将背景作为缓变的基线。野外测量的光谱不仅含有背景信号和污染气体云团信号,也含有水、臭氧、二氧化碳等干扰物信号,因此亮温光谱是大气和云团的信号叠加在以背景亮温谱为基线的亮温谱上的线性混合谱^[1]。

以实测的亮温光谱和辐射传输软件计算的模拟值作差的平方和为代价,建立如下的代价函数:

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N [\mathbf{T}_{\text{model}}(\nu_i) - \mathbf{T}_{\text{measure}}(\nu_i)]^2, \quad (8)$$

式中 $\mathbf{T}_{\text{model}}$ 是模拟计算得到的亮温光谱, $\mathbf{T}_{\text{measure}}$ 是测量得到的亮温光谱, N 是光谱维数。

根据第 2 节的理论分析, 亮温光谱可以用参考光谱的线性组合来表示:

$$\mathbf{T} = \mathbf{K}\mathbf{y}, \quad (9)$$

式中 \mathbf{T} 是 N 行 1 列的矩阵; \mathbf{K} 是 N 行 M 列的参考光谱矩阵, 参考光谱的个数为 M , 每种物质的参考光谱以列矢量形式保存在 \mathbf{K} 中; \mathbf{y} 是 M 行 1 列的矩阵, 表示对应的参考光谱的系数。

将(9)式代入(8)式并写成矩阵乘积的形式:

$$\mathbf{J} = (\mathbf{T}_{\text{model}} - \mathbf{T}_{\text{measure}})^t (\mathbf{T}_{\text{model}} - \mathbf{T}_{\text{measure}}) = (\mathbf{K}\mathbf{y} - \mathbf{T}_{\text{measure}})^t (\mathbf{K}\mathbf{y} - \mathbf{T}_{\text{measure}}), \quad (10)$$

式中 t 表示矩阵转置。

取 \mathbf{y} 使模拟值与测量值的差值平方和最小, 即求 \mathbf{J} 关于 \mathbf{y} 的导数, 并使其等于 0, 得

$$\hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{K}^t \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^t \mathbf{T}_{\text{measure}}, \quad (11)$$

式中 $\hat{\mathbf{y}}$ 表示 \mathbf{y} 的最小二乘估计。

将 $\hat{\mathbf{y}}$ 中背景和干扰物特征对应的系数代入(9)式中, 得到背景和干扰物的估计值 $\hat{\mathbf{T}}_{\text{bi}}$, 实测值与估计值作差, 得到目标气体的光谱特征:

$$\Delta^2 \mathbf{T} = \mathbf{T}_{\text{measure}} - \hat{\mathbf{T}}_{\text{bi}}. \quad (12)$$

在获取目标气体的光谱特征之后, 需要采用相应的识别方法对气体进行分类识别, 并计算气体的浓度程长积值。

需要说明的是, 根据(6)式, 亮温光谱是透射率谱的线性函数, 因此采用透射率谱作为矩阵 \mathbf{K} 中的参考光谱。在实际的野外测量中, 常见干扰物质主要是大气中的水、臭氧、二氧化碳等, 其透射率谱可由 MODTRAN 软件包分别模拟得到。但是, 辐射

进入仪器后, 光谱会与仪器线型函数(ILS)、切趾函数等产生卷积^[10], 导致实际测量的光谱比模拟得到的光谱更为平滑, 吸收(发射)特征峰形状比模拟得到的特征峰宽度更宽。由于参考光谱特征峰的形状直接影响到最小二乘拟合的准确度, 需要将模拟得到的光谱形状与实际测量的光谱形状相匹配, 使模拟的参考光谱特征与实际测量的光谱形状一致。

综上所述, 污染气体的背景压缩、特征提取及定量化按照如下步骤执行:

1) 构建参考光谱矩阵 \mathbf{K} 。利用 MODTRAN 软件包计算大气干扰特征, 根据实际测量参数进行匹配计算, 并利用多个高斯函数拟合缓变背景。

2) 背景压缩。将辐射亮度光谱转换为亮温光谱, 减去均值, 根据(11)式计算系数 $\hat{\mathbf{y}}$; 将背景和干扰物特征对应的系数代入(9)式中, 得到背景与干扰的拟合值, 实测值与拟合值作差, 得到目标气体的光谱特征。

3) 识别和量化。利用分类器对目标进行识别。根据测量得到的亮温光谱的水汽或二氧化碳的饱和吸收带得到背景与环境温度差 ΔT , 并根据(7)式计算目标气体的浓度程长积值。

4 实验与分析

4.1 实验数据

本文的实验数据来自布鲁克公司的 OPAG 33 型 FTIR 光谱仪, 光谱范围 $1350 \sim 650 \text{ cm}^{-1}$, 分辨率为 4 cm^{-1} , 背景为低平天空, 实验气体为氨气。

图 2(a) 显示实际测量的背景为远处的低平天空; 图 2(b) 是背景的亮温光谱, 图中可以看到明显的水汽吸收和发射特征、臭氧的发射特征及二氧化

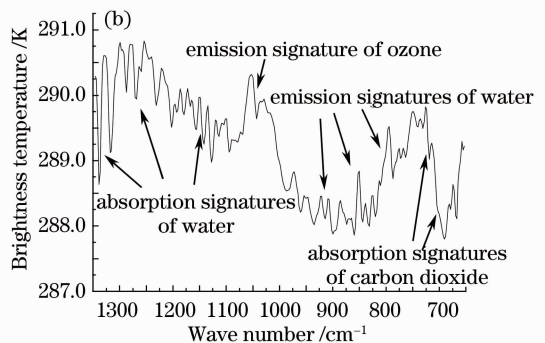


图 2 (a) 野外测量的低平天空背景; (b) 背景的亮温光谱

Fig. 2 (a) Low altitude sky background in the field; (b) brightness temperature spectrum of the background

碳的吸收特征。理想情况下,认为背景辐射是某一温度下的黑体辐射,在亮温光谱上表现为一条平直的线;但是实际的背景辐射在亮温光谱上不是一条直线,而是表现为缓变的基线。

同时从图 2(b)中可以看到,水汽的 $1350 \sim 1250 \text{ cm}^{-1}$ 波段和二氧化碳的 $750 \sim 650 \text{ cm}^{-1}$ 波段是饱和吸收带,由于大部分污染气体特征在 $1250 \sim 750 \text{ cm}^{-1}$ 波段,因此选择 $1250 \sim 750 \text{ cm}^{-1}$ 波段作为污染气体的检测波段。在对污染气体进行定量处理时,需要已知背景与环境的温度差 ΔT ,由于背景温度不可能直接测量,此时可以利用水汽的 $1350 \sim 1250 \text{ cm}^{-1}$ 波段或二氧化碳的 $750 \sim 650 \text{ cm}^{-1}$ 波段的饱和吸收峰的亮温差值作为背景与环境温度差 ΔT 。

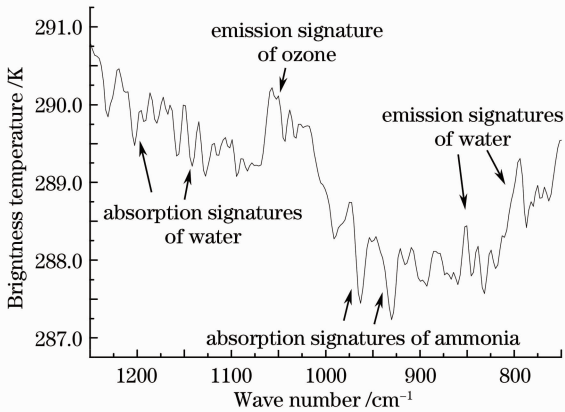


图 3 以低平天空为背景的氨气亮温光谱

Fig. 3 Brightness temperature spectrum of ammonia with the sky at a low angle of elevation as the background

氨气选择在光谱仪前 20 m 处释放。图 3 是实际测量的氨气亮温光谱,在 963 cm^{-1} 和 930 cm^{-1} 位置是氨气的两个吸收特征峰,同时亮温光谱上还存在水汽、臭氧等吸收和发射特征,因此需要扣除这些干扰物的特征和背景辐射(即基线),提取氨气特征。

4.2 结果与分析

根据第 3 节论述的方法,对实际测量的氨气光谱进行背景压缩,并对获取的氨气光谱特征进行识别和量化。

1) 构建参考光谱矩阵 \mathbf{K} 。利用 MODTRAN4.0 计算大气透射率谱,软件中设置为 1976 年美国标准大气,水平路径为 1 km,光谱范围为 $1350 \sim 650 \text{ cm}^{-1}$,分辨率为 4 cm^{-1} ,其余参数为默认值,计算后分别导出水汽、臭氧和二氧化碳的透射率谱。由于模拟计算没有考虑仪器线型函数对光谱的加宽作用及光谱的切趾过程,因此模拟计算的光谱特征峰形状与实际光谱特征峰形状不符合,需要根据实际仪器的线型函数和切趾函数对模拟光谱进行处

理^[10],使模拟计算的光谱特征峰与实际测量的光谱特征峰形状相符合。

图 4 是对 MODTRAN 计算的透射率谱进行特征峰形状匹配前后的结果(将匹配前的透射率谱线进行了上移)。从图中可以看到,匹配前的透射率谱存在很多窄的吸收特征;匹配后的透射率谱特征峰得到平滑和展宽,与图 2(b)中实际测量的光谱特征峰形状符合。

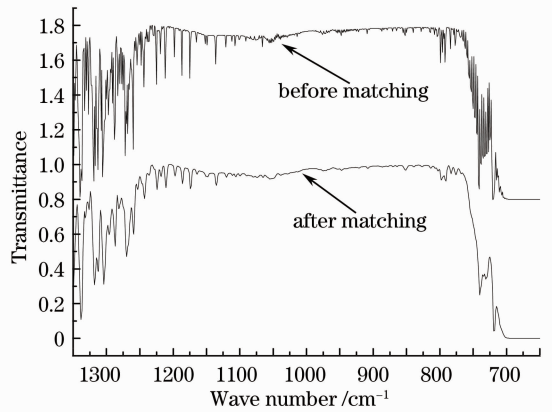


图 4 与实际测量结果匹配前后的总透射率谱线

Fig. 4 Shapes of transmittance spectra before and after matching with measured spectrum

除了干扰物特征以外,还需要对背景辐射(即基线)进行拟合,这里采用 10 个宽高斯函数对亮温光谱进行多项式拟合。此外,还需要氨气的吸收系数谱。

综上所述,构建的参考光谱矩阵 \mathbf{K} 包含了 10 个宽高斯函数和匹配后的水汽、臭氧和二氧化碳的透射率谱,及氨气的吸收系数谱。

2) 压缩背景,提取氨气光谱特征。将测量的亮温光谱减去均值,利用参考光谱矩阵 \mathbf{K} 对去均值后的亮温光谱进行拟合,根据(11)式计算得到系数 $\hat{\mathbf{y}}$ (如表 1 所示)。

图 5 表示利用构建的参考光谱矩阵 \mathbf{K} 对实测的亮温光谱(已减去均值,下同)的拟合结果,图中实线表示实际测量的亮温光谱,虚线表示参考光谱矩阵 \mathbf{K} 对实测光谱最小二乘拟合得到的拟合光谱,点虚线表示拟合的基线,点线表示测量值减去拟合值得到的拟合残差。将拟合残差的均方根值作为拟合噪声,得到图 5 的拟合噪声为 0.2 K。表 1 为根据(11)式计算得到的每个参考光谱在 $\hat{\mathbf{y}}$ 中对应的系数,表中的负号代表实测的特征峰方向与参考光谱特征峰方向相反,由表 1 可以看到,水汽和臭氧的系数分别为 -11.7 和 -3.6 ,这说明以低平天空为背景时,测量路径中存在较多水汽和臭氧成分,氨气的系数为 -15.7 ,这说明测量路径中存在氨气成分。

表 1 每个参考光谱在 \hat{y} 中对应的系数

Table 1 Corresponding coefficients of every reference spectrum in \hat{y}

Name	Carbon dioxide	Water	Ozone	Ammonia	Gaussian functions 1~10									
Coefficient	-0.47	-11.7	-3.6	-15.7	-4.1	-6.9	-7.1	-6.1	-4.2	-1.3	-3.5	0.1	-5.3	16.7

将 \hat{y} 中除氨气以外的参考光谱对应的系数代入 (9) 式, 得到拟合背景 \hat{T}_{bi} , \hat{T}_{bi} 包含了背景辐射和二氧化碳、水汽、臭氧特征。

图 6(a) 中实线为实测的亮温光谱, 虚线为拟合背景 \hat{T}_{bi} , 拟合背景包含了背景辐射及臭氧、水汽等干扰物信号。图 6(b) 是测量值减去拟合背景后得到的氨气特征, 取 963 cm^{-1} 特征峰绝对值作为信号强度, 得到氨气的信号强度为 0.8 K , 根据拟合噪声为 0.2 K , 得到提取的氨气特征的信噪比为 $4:1$ 。由此可以得出, 氨气光谱特征已经被很好地提取出来。

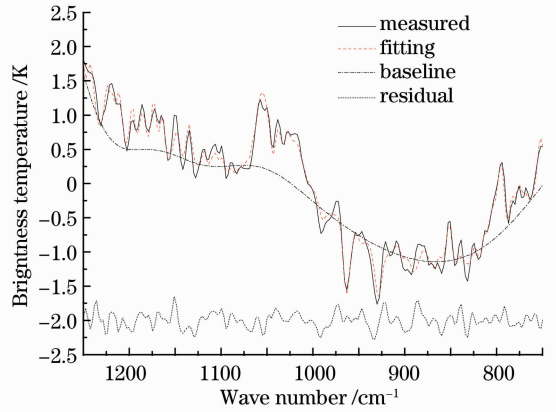


图 5 实测亮温光谱(已减去均值)的拟合

Fig. 5 Fitting of the measured brightness temperature spectrum (after subtraction of the average)

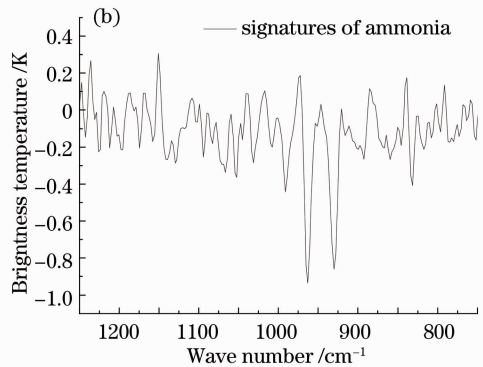
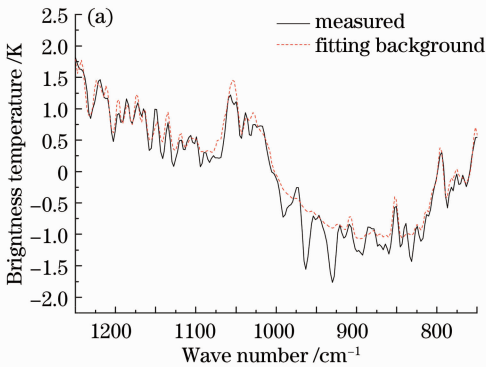


图 6 (a) 实测亮温光谱与拟合背景; (b) 减去拟合背景后得到的氨气特征

Fig. 6 (a) Measured brightness temperature spectrum and fitting background; (b) ammonia signatures after subtraction of fitting background

3) 提取得到氨气的光谱特征后, 需要对其进行识别分类。采用事先训练好的神经网络分类器对氨气进行识别。由于氨气的吸收程长未知, 对氨气的量化处理只能得到其浓度程长积值 C 。将亮温光谱的 $1350\sim 1250\text{ cm}^{-1}$ 水汽饱和吸收峰的温度差作为背景与环境的温差, 得到背景与环境温度差 ΔT 为 2 K , 此时氨气的光谱特征 $\Delta^2 T$ 为 0.8 K , 已知氨气的吸收系数 α , 根据 (7) 式, 计算得到氨气的浓度程长积值为 $4.31 \times 10^{18}\text{ cm}^{-2}$ 。

光谱仪在开放路径下对污染气体进行遥测时, 存在未知的背景辐射及大气等干扰物信号, 以氨气为例, 在亮温光谱上利用高斯函数多项式拟合缓变的背景辐射, 并利用 MODTRAN 软件包计算的水汽等透射率谱拟合干扰物信号, 实现了对背景压缩,

提取得了氨气的光谱特征, 对于移动平台下实时遥测污染气体具有重要的应用价值。

本文提出的背景压缩方法与差分光学吸收光谱 (DOAS) 方法既有相同之处也有差别。相同之处是两者都采用多项式拟合去除光谱中的缓变成分 (低频成分); 不同之处是 DOAS 方法仅去除光谱中的低频成分, 而本文论述的方法在去除低频成分的同时, 还需要去除水汽、臭氧等高频干扰成分。

5 结 论

移动平台下对污染气体遥测要解决背景未知等问题。以亮温光谱为基础, 利用 MODTRAN 软件包得到大气干扰物特征, 并与实际测量的光谱形状进行匹配计算, 利用宽高斯函数拟合缓变的背景特

征,通过最小二乘拟合法扣除背景和大气干扰物特征,实现了背景未知时对目标的特征提取。实验在野外测量,以氨气为目标气体,低平天空为背景,结果表明,本方法可以在背景未知情况下提取氨气光谱特征,并实现对其进行识别和量化处理。

参 考 文 献

- 1 Andreas Beil, Rainer Daum, Roland Harig, *et al.*. Remote sensing of atmospheric pollution by passive FTIR spectrometry [C]. SPIE, 1998, 3493: 32-44.
- 2 Fang Yonghua, Xun Yulong. Detection and identification of tiny spectral signal [J]. Infrared Technology, 1997, 19(1): 21-26.
方勇华, 荀毓龙. 微弱光谱信号的探测与识别[J]. 红外技术, 1997, 19(1): 21-26.
- 3 Tom Burr, Nicolas Hengartner. Overview of physical models and statistical approaches for weak gaseous plume detection using passive infrared hyperspectral imagery [J]. Sensors, 2006, 6(12): 1721-1750.
- 4 Toshiyasu Tarumi, Gary W Small, Roger J Combs, *et al.*. Infinite impulse response filters for direct analysis of interferogram data from airborne passive Fourier transform infrared spectrometry [J]. Vibrational Spectroscopy, 2005, 37(1): 39-52.
- 5 D Manolakis, L G Jaram, D Zhang, *et al.*. Statistical models for LWIR hyperspectral backgrounds and their applications in chemical agent detection [C]. SPIE, 2007, 6565: 656525.
- 6 Robert S DiPietro, Dimitris G Manolakis, Ronald B Lockwood. Hyperspectral matched filter with false-alarm mitigation [J]. Opt Eng, 2012, 51(1): 016202.
- 7 Jean-Marc Thériault, Eldon Puckrin. Remote sensing of chemical vapours by differential FTIR radiometry [J]. International J Remote Sensing, 2005, 26(5): 981-995.
- 8 Francois Bouffard, Jean-Marc Theriault. Background contributions in direct and differential Fourier transform LWIR measurements; a comparative analysis [J]. International Journal of High Speed Electronics and Systems, 2008, 18(2): 263-276.
- 9 Roland Harig, Gerhard Matz. Toxic cloud imaging by infrared spectrometry; a scanning FTIR system for identification and visualization [J]. Field Analytical Chemistry and Technology, 2001, 5(1-2): 75-91.
- 10 Wu Jinguang. The Technique and Application of Neoteric Fourier Transform Infrared Spectrum [M]. Beijing: Scientific and Technical Documentation Press, 1994, 7-24.
吴瑾光. 近代傅里叶变换红外光谱技术及应用[M]. 北京: 科学技术文献出版社, 1994, 7-24.

栏目编辑: 王晓球