

# 基于 Hapke 模型的矿物红外发射光谱 随粒度与发射角的变异规律

闫柏琨<sup>1</sup>, 陈伟涛<sup>2</sup>, 王润生<sup>1</sup>, 杨苏明<sup>1</sup>, 孙卫东<sup>3</sup>, 陈建明<sup>3</sup>

1. 中国国土资源航空物探遥感中心对地观测技术工程实验室, 北京 100083

2. 中国地质大学国家遥感中心地壳运动与深空探测部以及生物地质与环境地质教育部重点实验室, 湖北武汉 430074

3. 新疆地矿局信息中心, 新疆乌鲁木齐 830000

**摘要:** 矿物红外发射光谱随粒度与发射角的变异是热红外地质遥感中的基础性问题之一, 温度与发射率反演以及矿物信息提取均需要考虑发射光谱的变异。常规实验室矿物发射光谱测量技术难度较大, 限制了对矿物发射光谱变异规律的深入研究。利用 Hapke 岩矿辐射传输模型对石英、白云母和钙长石 3 种矿物的发射光谱进行了模拟, 将模拟结果与实测光谱进行了对比, 总结了矿物发射光谱随粒度、发射角的变异规律, 分析了 Hapke 发射率模型存在的问题。Hapke 模型可较好地模拟矿物发射光谱整体谱形与主要光谱特征及其变异规律, 但在某些光谱细节上与实测光谱仍有一定差异, 其原因可能是模型中矿物介质中多次散射辐射为“各向同性”的假设所致; 随粒度增加, 吸收特征会增强, 且位置可能发生漂移; 随发射角增加, 发射率逐渐减小, 透射特征和吸收特征逐渐增强, 但光谱的整体形状和透射特征、吸收特征、克里斯琴森特征的位置与形态均基本保持不变。

**关键词:** 发射率; 矿物; 红外光谱。

中图分类号: P575

文章编号: 1000-2383(2009)06-0946-09

收稿日期: 2008-12-09

## Variation Law of Mineral Emissivity Spectra with Mineral Granularity and Emission Angle Based on Hapke Model

YAN Bo-kun<sup>1</sup>, CHEN Wei-tao<sup>2</sup>, WANG Run-sheng<sup>1</sup>, YANG Su-ming<sup>1</sup>, SUN Wei-dong<sup>3</sup>, CHEN Jian-ming<sup>3</sup>

1. Laboratory of the Earth Observation Technology, China Aero Geophysical Survey and Remote Sensing Center for Land and Resources Beijing 100083, China

2. Department for Crust Dynamics & Deep Space Exploitation of NRSCC & Key Laboratory of Biogeology and Environmental Geology of Ministry of Education, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China

3. Information Center, Xinjiang Bureau of Exploration & Development of Geology & Mineral Resources, Urumqi 830000, China

**Abstract:** One of basic issues in thermal infrared remote sensing geology is the variation law of mineral emissivity spectra with mineral granularity and emission angle, and the law is required when several kinds of ground information are retrieved such as temperature, emissivity and mineral. However, the law is still unknown because it is difficult to measure the mineral emissivity spectra in the laboratory. In this experiment, emissivity spectra of quartz, muscovite and anorthite are calculated using Hapke radiative transfer model, and the calculation results are compared with measured spectra. Finally, the variation law of mineral emissivity spectra with granularity and emission angle is summarized, and the problem of Hapke emissivity model is analyzed. Research results show that, Hapke radiative transfer model could be used to simulate minerals emissivity spectral and variation, and some fine spectral features are different from measured spectral probably owing to Hapke model hypothesis in which multi-scattering radiation is isotropic. The variation of spectral with granularity is complicated and the variation law is different to different minerals. The common law is that, with the increase of granularity, reststrahlen features strengthen, reststrahlen features and wavelength change, and Christensen features remain stable. With increase of emission angle, emissivity becomes low-

基金项目: 国土资源调查项目(No. 20022014003); 中国地质调查局地质大调查项目(Nos. 1212010660601, 1212010811050-1)。

作者简介: 闫柏琨(1977-), 男, 博士, 高级工程师, 从事热红外遥感、高光谱遥感地学应用。E-mail: yanbokun\_2006@yahoo.com.cn

er, reststrahlen and transparency features become more obvious, and the whole spectral feature and wavelength of some features such as transparency, reststrahlen and Christensen features keep stable.

**Key words:** emissivity; mineral; infrared spectroscopy.

矿物红外发射光谱是矿物晶格振动的外在表征,对矿物成分与结构有很好的指纹效应,可用于提取矿物种类、成分及结构等信息(Lane and Christensen, 1997; Christensen *et al.*, 2000; Hamilton, 2000; Copper *et al.*, 2002). 研究表明,热红外发射光谱对矿物晶格内 Si-O 键振动有显著响应,因而不但可以探测含羟基、碳酸根等所谓“蚀变”矿物,而且可探测几乎所有的造岩矿物信息(Vaughan *et al.*, 2003, 2005),在地质研究中的应用前景较好. 红外光谱已成功应用于海洋沉积物矿物含量信息的定量反演以及古环境恢复中(刘连文等, 2005; 刘志飞等, 2005). 基于红外发射光谱特征提取岩矿信息已成为对地观测及行星探测中一项重要技术手段. 美国火星探测中利用红外发射高光谱数据(TES: Thermal Emission Spectrometer)反演了火星全球 11 种矿物的含量分布(Bandfield *et al.*, 2000; Bandfield, 2002),并且得到了初步验证,在 TES 数据提取的赤铁矿富集区 Meridiani 平原,机遇号火星车发现了赤铁矿与黄钾铁矾(Klingelhöfer *et al.*, 2004).

表征矿物发射光谱特征的参量有吸收特征(RF: reststrahlen features)、透射特征(TF: transparency features)和克里斯琴森特征(CF: Christensen features)(图 1). RF 是表征矿物对电磁波吸收的光谱特征,位于矿物晶格振动吸收波段上,对于硅酸盐矿物,833~1 250  $\text{cm}^{-1}$ 之间的吸收特征是由 Si-O 键伸缩振动所致,400~606  $\text{cm}^{-1}$ 之间的吸收特征是由 O-Si-O 键弯曲振动所致. TF 是介于光谱

吸收特征之间的光谱特征,这些波段上矿物吸收系数很小,透过率较大.当矿物粒度变小时发射率亦随之变小,并在一些波段上出现类似于 RF 特征的光谱特征,这些特征就是 TF 特征. CF 就是发射率最大值所在的波段,在略小于矿物晶格基频振动的波段上,矿物折射率急剧变化并接近矿物周围大气的折射率,这样就导致矿物颗粒的后向散射最小,这一波段上矿物后向散射较小且吸收较小,电磁波辐射大部分穿过样品,这样就导致反射率最小、发射率最大(Cooper *et al.*, 2002). 这些均是鉴别矿物和反演矿物成分信息的重要指示特征(Salisbury and Walter, 1989).

矿物发射光谱除与矿物的成分和晶格结构有关外,还受到矿物粒度、发射角等因素的影响. 研究这些因素对发射光谱特征的影响规律有助于在矿物信息提取中有效地剔除这些干扰因素的影响或利用这些变异规律研究矿物的粒度信息(Clark *et al.*, 2002),对于提高矿物信息提取的可靠性与精细程度有重要意义. 对石英的模拟与试验研究(Salisbury and Wald, 1992; Moersch and Christensen, 1995; Wald and Salisbury, 1995; Pitman *et al.*, 2005)表明,矿物发射光谱特征随粒度变化呈规律性变化:粒度变小,矿物吸收特征变弱,其谱形特征不变;克里斯琴森特征不随粒度变化而变化;当粒度减小至 60  $\mu\text{m}$ 时,透射特征开始出现,随粒度进一步变小,透射特征逐渐增强(图 1). 对火星观测中,粒度是矿物信息提取中不可忽视的影响因素. 根据地形地貌特征,火星表面可分为高原基岩区与低洼风沙区,前者主要分布在南半球,后者主要分布于北半球,大量的风成沙,称为“表面灰”. 一些特征很明显的矿物光谱特征有可能在“表面灰”中由于矿物粒度变小、表面粗糙度增大而难以检测出来(Kirkland *et al.*, 2001). 因此,在矿物信息提取中,应充分考虑矿物粒度与发射角对发射光谱的影响.

相对于粒度研究而言,关于发射角对发射光谱影响的研究则要少得多,而这方面的研究同样具有重要意义. 运用温度/发射光谱分离算法提取地表温度与发射光谱时,使用了地物发射光谱最大/最小差与最小发射率的统计关系,该统计关系的建立均取发射角为  $0^\circ$ 时的发射光谱数据,对该统计关系进行

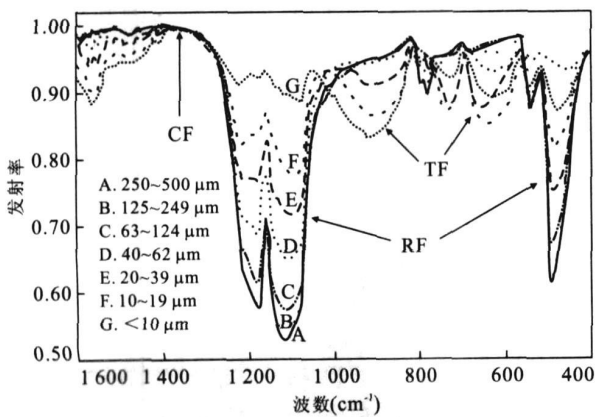


图 1 石英发射光谱特征(据 Melissa and Christensen, 1996 修改)  
Fig. 1 Emissivity features of quartz

粒度与发射角的修正可能是提高算法反演精度的途径之一。地表热辐射方向性机理是热红外遥感基础性研究中的热点(Li *et al.*, 1999), 除地物结构、温度的不均一性是辐射方向性的影响因素之外, 地物发射光谱的不均一性与方向性也是不可忽略的因素。在热红外遥感反演地表温度中, 大气和地表发射光谱是影响反演精度的主要因素(Kahle and Alley, 1992; Reinart and Reinhold, 2008)。Dozier and Warren(1982)的研究表明, 发射光谱随方向的变化可导致高达 3 K 的温度变化。

矿物的发射光谱随粒度与发射角的变异规律是地质遥感中基础性问题, 是遥感信息提取由定性向量化发展的关键问题之一。常规实验室中发射光谱测量技术难度较大, 成本较高, 实测的数据有限, 限制了对发射光谱变异规律的深入研究。数值模拟方法是开展相关研究的一种重要工具, 但目前国内外仅对石英发射光谱随粒度的变化作了一些试验与模拟研究(Salisbury and Wald, 1992; Moersch and Christensen, 1995; Wald and Salisbury, 1995; Pitman *et al.*, 2005)。本文以岩矿辐射传输理论模型为基础, 对石英、白云母和钙长石 3 种矿物在不同粒度与发射角条件下的发射光谱进行了模拟, 初步总结了矿物发射光谱随粒度与发射角的变异规律, 同时对 Hapke 模型存在的问题及改进方向进行了定性分析。

## 1 矿物发射光谱的计算方法

岩矿辐射传输模型(Radiative Transfer Model)是定量描述矿物及岩石光谱形成与变异的物理模型, 可用于定量研究矿物光谱的变异规律, 已成功应用于石英发射光谱特征的模拟研究中(Salisbury and Wald, 1992; Moersch and Christensen, 1995; Wald and Salisbury, 1995; Pitman *et al.*, 2005)。本次研究中采用 Mie/Hapke 复合模型, 首先运用 Mie 散射模型计算单个矿物颗粒的散射特性(单次散射反照率与散射相函数), 在此基础上, 运用 Hapke 模型计算矿物的发射光谱。

### 1.1 Hapke 辐射传输模型

Hapke 模型是应用较广泛的模拟矿物光谱的物理模型(Hapke, 1981, 1984, 1986, 1993a, 1993b, 1999, 2002; Hapke *et al.*, 1998), 模型主要用于 4 个方面: (1)对影像数据进行光源—传感器几何关系

校正, 以便对多景影像数据进行对比研究(Simonelli *et al.*, 1996; Hudson and Ostro, 1999); (2)用于估算混合矿物含量, 基本方法为利用 Hapke 模型对矿物混合光谱进行线性变换之后, 利用线性分解法计算各端元矿物的含量(Cruikshank *et al.*, 2001; Poulet *et al.*, 2002); (3)反演矿物岩石表面粗糙度、粒度与孔隙度等物理特性(Mallama *et al.*, 2002; Buratti *et al.*, 2004; Shepard and Helfenstein, 2007); (4)计算矿物发射光谱随粒度与发射角的变化规律(Salisbury and Wald, 1992; Moersch and Christensen, 1995; Wald and Salisbury, 1995; Pitman *et al.*, 2005)。Hapke 模型矿物表面方向发射光谱(directional emissivity)的计算公式为(Hapke, 1993b):

$$\epsilon_d(e) = \gamma \frac{1+2\mu}{1+2\gamma\mu}, \quad (1)$$

式(1)中,  $\gamma = \sqrt{1-\omega}$  为反照率因子;  $\omega = Q_{\text{ext}}/Q_{\text{scat}}$ , 为单次散射反照率;  $Q_{\text{ext}}$  为粒子的消光效率(extinction efficiencies);  $Q_{\text{scat}}$  为粒子的散射效率(scattering efficiencies);  $\mu = \cos e$ ,  $e$  为传感器天顶角。

### 1.2 Mie 散射模型

Hapke 模型的计算需要单颗粒矿物单次散射反照率与单次散射相函数两个参数。这两个参数的计算采用 Mie 散射模型。Mie 模型是麦克斯韦方程的精确数学解, 是描述平面电磁波与任意大小的球形颗粒散射特性的理论(McGuire and Hapke, 1995)。严格来讲, Mie 模型是关于分散、球形颗粒散射特性的数学模型, 只能计算球形颗粒物质的单次散射特性, 包括单次散射反照率(single scattering albedo)与单次散射相函数(single scattering phase function)。尽管如此, Mie 模型已成功应用于非球形密集颗粒的情况(Conel *et al.*, 1969; Moersch and Christensen, 1995)。一般而言, 对于矿物这样非球形散射粒子的情况, Mie 模型同样适用。已有研究(Hansen and Travis, 1974)表明, 对于群粒子组成的散射体, 当粒子群的取向分布为随机分布时, 散射特性可用等效球形粒子群来近似。

### 1.3 矿物光学常数(Optical Constant)的计算

利用 Mie 模型计算单颗粒矿物的散射特性需要输入矿物光学常数。光学常数是用于表征矿物光学性质的物理量, 由折射率  $n$  与消光系数  $k$  构成, 折射率  $n$  与消光系数  $k$  均为波长的函数。光学常数只与矿物的成分与结构有关, 与矿物粒度、形状等物理参数无关。矿物的光学常数可通过晶格分散度参数

表 1 石英的分散度参数

Table 1 Dispersion parameters of quartz

晶格振荡子 序号	振荡子波数 ( $\text{cm}^{-1}$ )	振荡子强度 ( $\rho_j$ )	振荡子宽度 ( $\gamma_j$ )	晶格振荡子 序号	振荡子波数 ( $\text{cm}^{-1}$ )	振荡子强度 ( $\rho_j$ )	振荡子宽度 ( $\gamma_j$ )
垂直 $a$ 轴, $\epsilon_0 = 2.356 \pm 0.02$				平行 $a$ 轴, $\epsilon_0 = 2.383 \pm 0.02$			
1	1 227	0.009 ± 0.002	0.11 ± 0.04	1	1 220	0.011 ± 0.001	0.15 ± 0.02
2	1 163	0.01 ± 0.002	0.006 ± 0.002	2	1 080	0.67 ± 0.01	0.006 9 ± 0.000 3
3	1 072	0.67 ± 0.02	0.007 1 ± 0.000 3	3	778	0.10 ± 0.01	0.01 ± 0.001
4	797	0.11 ± 0.01	0.009 ± 0.001	4	539	0.006 ± 0.001	0.04 ± 0.01
5	697	0.018 ± 0.002	0.012 ± 0.004	5	509	0.05 ± 0.02	0.014 ± 0.003
6	450	0.82 ± 0.02	0.009 ± 0.000 5	6	495	0.66 ± 0.02	0.009 ± 0.000 3
7	394	0.33 ± 0.02	0.007 ± 0.001	7	364	0.368 ± 0.02	0.014 ± 0.000 4

注: 数据引自 Spitzer and Kleinman(1961).

(dispersion parameter)计算(Spitzer and Kleinman, 1961; Aronson *et al.*, 1975).限于篇幅, 表 1 仅列出石英的数据. 矿物光学常数计算方程组为(Spitzer and Kleinman, 1961):

$$n^2 - k^2 = \epsilon_0 + \sum_j 4\pi \rho_j \nu_j^2 \frac{\nu_j^2 - \nu^2}{(\nu_j^2 - \nu^2)^2 + \gamma_j^2 \nu^2 \nu_j^2}, \quad (2)$$

$$nk = \sum_j 2\pi \rho_j \nu_j^2 \frac{\gamma_j \nu \nu_j}{(\nu_j^2 - \nu^2)^2 + \gamma_j^2 \nu^2 \nu_j^2}. \quad (3)$$

方程中,  $\rho_j$ 、 $\gamma_j$ 、 $\nu_j$  分别是晶格振荡子 (lattice oscillators) 的强度、宽度与频率. 联解方程(2)和(3)可将各矿物的分散度参数转换为矿物的光学常数. 对于非等轴晶系矿物, 不同的结晶方位晶格分散度参数与光学常数也不同. 例如, 石英和钙长石一般随机分布, 不会出现定向排列, 模型计算中光学常数采用各光轴常数的平均值; 白云母为片状矿物, 会出现定向排列, 计算中采用了平行  $a$  轴与平行  $b$  轴的光学常数, 采用  $c$  轴的光学常数计算光谱与实测光谱相差较大.

## 2 矿物发射光谱计算

### 2.1 石英发射光谱

自然界石英一般不会出现定向排列现象, 因而计算中石英的光学常数取垂直  $a$  轴与平行  $a$  轴两组光学常数的平均值. 运用 Mie 散射模型计算出石英单次散射反照率. Mie 理论考虑了矿物颗粒的衍射效应对散射的贡献, 而对于密集矿物颗粒, 衍射对散射的贡献为 0, 而 Mie 理论计算的单次散射反照率中包含了衍射效应的贡献, 因而计算的单次散射反照率应进行衍射校正(Wald and Salisbury, 1995)

$$W_{\text{dif}} = 2W_{\text{mie}} - 1, \quad (4)$$

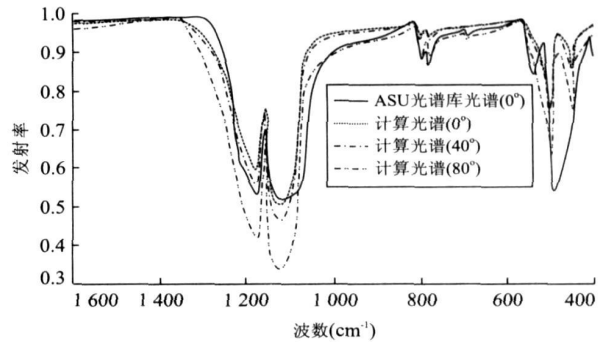


图 2 石英计算光谱与 ASU 光谱库中实测光谱的对比  
Fig. 2 Comparison of calculated quartz emissivity and ASU emissivity

式(4)中  $W_{\text{mie}}$  为用 Mie 模型计算的矿物颗粒的单次散射反照率,  $W_{\text{dif}}$  为经过衍射校正之后的单次散射反照率.

将计算的发射光谱与 ASU 光谱库中的实测光谱对比(图 2)发现, 两者的总体特征一致, 仅在局部光谱区间内两者发射率值有较明显的差异, 1 360 ~ 1 600  $\text{cm}^{-1}$  区间内, 两者光谱都近似于变化梯度很缓的直线, 计算的发射光谱稍强, 变化梯度更缓; 820 ~ 1 360  $\text{cm}^{-1}$  区间内, 出现两个光谱吸收特征, 两者位置基本一致, 左侧吸收特征左翼计算光谱下降梯度更大, 吸收特征更强; 右侧吸收特征的右翼计算光谱的强度相对于实测光谱明显降低, 致使吸收特征的右翼向右侧偏移, 宽度增大, 底部较为平缓; 600 ~ 800  $\text{cm}^{-1}$  之间, 出现两个较弱的吸收特征, 最小值位于 800  $\text{cm}^{-1}$  附近, 两者谱形一致, 但计算光谱相对于实测光谱较弱; 400 ~ 600  $\text{cm}^{-1}$  之间, 计算光谱与实测光谱在谱形与强度上均有较大差异. 整体而言, 计算光谱较好地反映了石英的真实光谱特征.

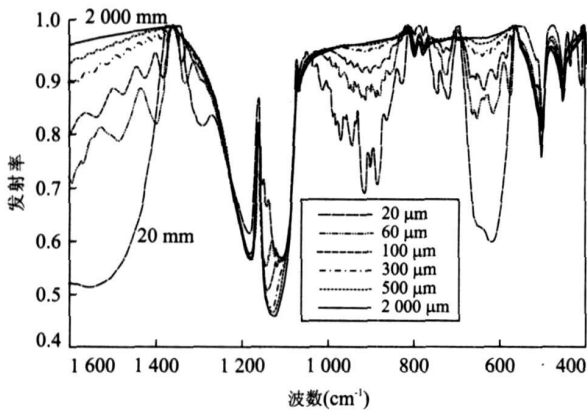


图 3 计算的不同粒度石英的发射光谱

Fig. 3 Calculated quartz emissivity of different granularities

为分析矿物粒度对发射光谱特征造成的影响, 计算了发射角为  $0^\circ$ , 石英粒度分别为 20、60、100、300、500、2000  $\mu\text{m}$  时的发射光谱. 计算(图 3)与实测光谱(图 1)均表现出同样的变化规律: 随粒度变小, 光谱 RF 变弱, CF 不变, 当粒度减小至大约 100  $\mu\text{m}$  时, 开始出现明显的 TF 特征, 并且随粒度变小, TF 变强. 计算光谱与实测光谱的差异仅在于光谱特征随粒度变化的幅度有所差异.

分别计算了石英粒度为 855  $\mu\text{m}$  时不同发射角的发射光谱(图 2). 随发射角的增加, 发射光谱整体变小, 但在不同的波段, 变化速率不同. 发射率越大, 变化速率越小; 在 RF、TF 处变化速率较大, 发射率随发射角的增加下降明显, 但特征的位置和形态基本保持不变.

### 2.2 白云母发射光谱

白云母为片状矿物, 在岩石中往往呈不同程度的定向排列. 应用 3 个光轴的光学常数谱计算发射

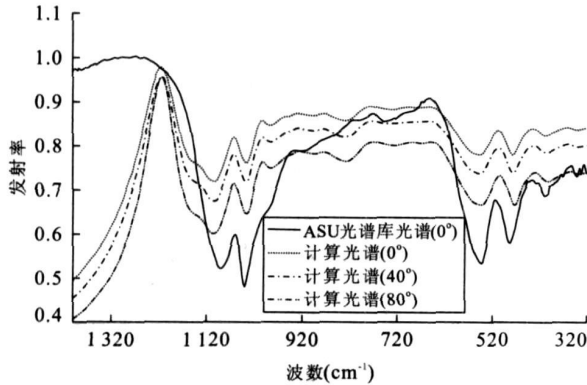


图 4 白云母计算光谱与 ASU 光谱库中实测光谱对比

Fig. 4 Comparison of calculated muscovite emissivity and ASU emissivity

光谱的结果表明, 平行  $a$  轴的计算结果与平行  $b$  轴的计算结果相近并与光谱库中实测光谱较吻合, 而利用垂直  $a$  轴与  $b$  轴的光学常数计算的光谱与实测光谱差别较大. 因此, 计算中采用平行  $a$  轴与平行  $b$  轴光学常数的平均值作为模型的光学常数输入值.

计算的发射光谱与实测光谱在  $320 \sim 1217 \text{ cm}^{-1}$  之间, 两者曲线形状整体相似. 白云母的主要的吸收特征均在计算光谱中得到了反映, 吸收特征的位置吻合较好(图 4), CF 也基本一致. 但发射率值的差异较为明显, 在吸收特征处, 计算光谱的强度相对于实测光谱要大得多, 吸收特征的强度明显小于实测光谱.  $320 \sim 650 \text{ cm}^{-1}$  光谱区间内, 两者光谱谱形一致性非常好;  $650 \sim 1217 \text{ cm}^{-1}$  光谱区间内, 两者的相似性相对要弱一些, 计算光谱吸收特征的位置相对实测光谱向短波方向有微小的位移;  $1217 \text{ cm}^{-1}$  之后, 计算的光谱急剧下降, 出现了虚假吸收特征. 总体上看, 在  $320 \sim 1217 \text{ cm}^{-1}$  之间, 虽然两者光谱的强度有较大差异, 但计算光谱仍较好地反映了白云母的发射光谱特征, 可用于研究发射光谱随粒度与发射角的变化规律.

粒度分别为 20、60、100、200、300、400、500、855、1000、1200、1600、2000  $\mu\text{m}$  时白云母发射光谱的计算结果(图 5, 为了图面清晰, 图中仅仅绘出代表性粒度的光谱)表明, 白云母发射光谱随粒度的变化规律远比石英复杂. 总的变化趋势表现为随粒度的增大, 发射率逐渐变小, 在 RF 与 TF 波段处下降的幅度较大, CF 基本保持稳定; 但 RF 与 TF 在不同的粒度的区间变化规律有所差异, 呈非连续性变化, 致使不同粒度区间, 不仅发射率大小不同, 其谱形也有较大变化. 粒度为  $20 \sim 100 \mu\text{m}$  时, 发射谱

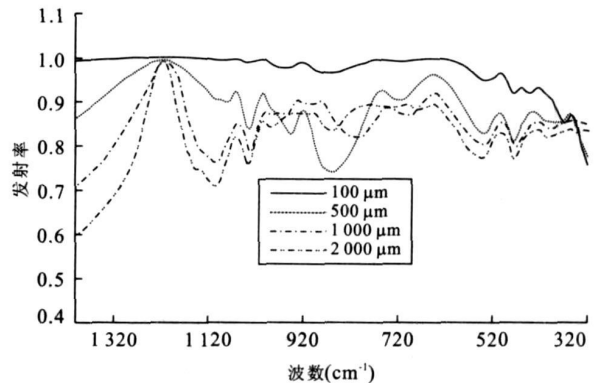


图 5 计算的不同粒度白云母的发射光谱

Fig. 5 Calculated muscovite emissivity of different granularities

形相似, RF 与 TF 均较弱; 粒度为 200~500  $\mu\text{m}$  时, 1120  $\text{cm}^{-1}$  处的吸收特征和 720~920  $\text{cm}^{-1}$  之间的透射特征均随粒度增大而以较快的速度逐渐增强. TF 的增幅要比 RF 大得多, 使该粒度区间内, TF 的强度要明显大于 RF. 粒度为 850 和 1000  $\mu\text{m}$  时, 除 TF 外, 两条曲线已基本吻合, 720~920  $\text{cm}^{-1}$  之间的 TF 特征仍很明显, 但该处的发射率在 1000  $\mu\text{m}$  粒度较 850  $\mu\text{m}$  时不降反升, 特征的强度明显变弱. 粒度为 1200~2000  $\mu\text{m}$  时, TF 特征基本消失, 1120  $\text{cm}^{-1}$ 、520  $\text{cm}^{-1}$  附近的 RF 特征与上一粒级相比稍有增强, 不同粒度引起发射率的变化很小, 1200、1600、2000  $\mu\text{m}$  的 3 条曲线基本重合, 似乎达到了一种稳定饱和状态.

笔者计算了粒度为 2000  $\mu\text{m}$  时发射光谱随发射角的变化(图 4). 不论粒度大小, 发射光谱谱形均保持稳定, 基本不随发射角的变化而改变. 发射光谱强度随发射角的增大而变小. 一般来讲, 发射角越大, 发射率的变化速率也越大; 发射率越小, 变化幅度越大, RF、TF 特征处发射率随发射角增大下降明显, 但特征的位置和形态基本保持不变; CF 特征处发射率随发射角的变化最小.

### 2.3 钙长石发射光谱

钙长石为三斜晶系矿物, 平行 3 个光轴的光学常数各不相同, 同时钙长石与白云母等片状矿物不同, 一般不会发生定向排列, 因而计算发射光谱时光学常数谱应取 3 个光轴的平均值. 但由于目前只有平行  $a$  轴的晶格分散度参数, 只能用平行  $a$  轴的光学常数谱来计算发射光谱. 笔者将计算的粒度为 855  $\mu\text{m}$  的发射光谱与光谱库实测光谱进行对比发现(图 6), 计算光谱与实测光谱谱形整体较为相似,

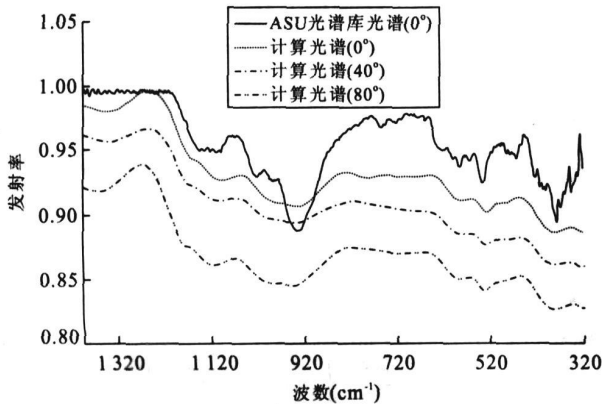


图 6 钙长石计算光谱与 ASU 光谱库中实测光谱对比

Fig. 6 Comparison of calculated anorthite emissivity and ASU spectral emissivity

主要的 RF 特征在计算光谱上均有所反映. 但在发射率大小与光谱细节方面存在较明显差异, 主要表现在两个方面: 首先是模拟的发射光谱强度整体上小于实测光谱, 在 320~900  $\text{cm}^{-1}$  区间内差异比较明显; 其次, 虽然模拟光谱与实测光谱整体较为相似, 但在 RF 特征强度与光谱细节上存在差异, 模拟光谱的 RF 特征较弱, 光谱整体变化较平缓, 曲线比较光滑. 分析其原因, 除了模型本身的误差外, 输入的光学常数谱误差可能也是误差的主要原因之一. 钙长石为三斜晶系矿物, 3 个光轴的光学常数谱不同, 由于未能收集到其 3 个光谱光学常数谱, 计算中将平行  $a$  轴的光学常数谱数据替代其三轴光学常数谱数据, 一定程度上影响了计算结果的精确性. 但考虑到计算光谱与实测光谱整体较为一致, 主要的 RF 特征在模拟光谱上均有所反映, 利用模拟光谱研究钙长石发射光谱的变异规律还是有意义的.

笔者计算了粒度分别为 20、60、100、200、300、500、855、2000  $\mu\text{m}$  钙长石的发射率(图 7, 为了图面清晰, 图中仅仅绘出代表性粒度的光谱). 结果表明, 钙长石发射光谱随颗粒大小的变异不是一个连续过程, 其光谱变化大致可分为 3 个区间: (1) 粒度为 20~100  $\mu\text{m}$  时, 发射光谱整体较强, 随着波数变小, 发射率缓慢下降, 至 500  $\text{cm}^{-1}$  后, 发射率急剧降低, 粒度的增大使发射率变小, 波数较小时发射率下降幅度更大; (2) 颗粒为 200~500  $\mu\text{m}$  时, 光谱谱形相对于上一粒级区间有明显改变, 出现了 3 个较明显的复合 RF 特征, 分别介于 320~445  $\text{cm}^{-1}$ 、445~640  $\text{cm}^{-1}$ 、640~1215  $\text{cm}^{-1}$  波数之间; (3) 粒度为 855~2000  $\mu\text{m}$  时, 发射光谱谱形又有一定变化, 出现了 4 个复合 RF 特征, 分别介于 350~445  $\text{cm}^{-1}$ 、

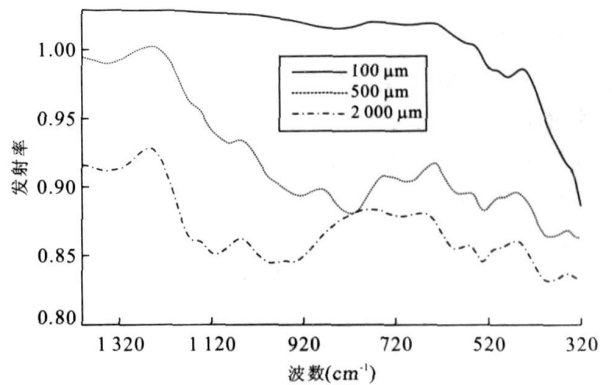


图 7 计算的不同粒度钙长石的发射光谱

Fig. 7 Calculated anorthite emissivity of different granularities

445 ~ 640  $\text{cm}^{-1}$ 、840 ~ 1 255  $\text{cm}^{-1}$ 、1 255 ~ 1 420  $\text{cm}^{-1}$  波数之间. 在各粒度区间内, 都遵循粒度增大、发射光谱变小的规律.

笔者计算了粒度为 855  $\mu\text{m}$  时钙长石发射光谱随发射角的变化(图 6). 由图可见, 钙长石发射光谱随发射角的变化规律遵循与石英和白云母相同的规律, 即不论粒度大小, 发射率都随发射角增大而变小, 但 CF、TF、RF 特征的位置与谱形均保持不变.

### 3 计算结果分析

由石英、钙长石、白云母 3 种矿物发射光谱的模拟试验表明, 利用 Mie/Hapke 模型计算的发射光谱在发射率值以及细微光谱特征上与实测光谱有一定的差别, 甚至在某些谱段上出现计算光谱完全偏离实测光谱的情况, 如白云母在 1 217  $\text{cm}^{-1}$  之后计算光谱急剧下降, 与实测光谱完全不相吻合, 出现了实测光谱中并不存在的虚假光谱特征. 但在光谱总体形态上, 特别是 RF、TF、CF 特征的位置及形态方面与实测光谱具有较高的一致性. 利用 Mie/Hapke 模型模拟矿物的发射光谱, 研究矿物发射光谱特征及其变异规律是可行的.

进行矿物信息提取时, 充分考虑矿物发射光谱的变异规律有助于信息提取的可靠性与准确程度. 例如 CF 特征相对稳定, 随粒度与发射角变化较小, 基于 CF 特征提取  $\text{SiO}_2$  含量时可不考虑粒度与发射角的影响. 基于光谱线性分解提取火星全球矿物含量分布时, 考虑粒度与发射角的影响则可能会提高矿物信息提取的准确度. 另外, 基于光谱特征吸收深度进行矿物信息的提取是常用的方法, 而发射角对光谱特征深度影响较大, 在进行信息提取时应尽可能考虑这一因素.

Hapke 模型计算结果在某些谱段上与实测光谱存在较大差异, 原因可能是 Hapke 模型假设矿物介质中多次散射辐射为“各向同性”所致. Hapke 模型认为矿物介质中单次散射辐射为“各向异性”(Anisotropically), 而多次散射辐射为“各向同性”(Isotropically). 事实上, 矿物介质中电磁波散射从单次散射、二次散射、……、多次散射, 散射特性由“各向异性”逐渐向“各向同性”变化, 散射次数越高, 散射特性越接近于“各向同性”. 通常, 低次散射(二次、三次散射)特性仍为“各向异性”, 尤其对于单次散射具有强烈“各向异性”的矿物, 更为如此. 矿物介

质中多次散射相函数对发射光谱有重要影响. 影响规律为: 当矿物颗粒散射特性为前向散射时, 辐射至矿物的电磁波大部分能量被前向散射与吸收, 后向散射至传感器的能量相对较少, 即反射率较小, 发射率较大. 在这种情况下, “散射各向同性”的假设会使计算光谱小于实测光谱. 相反, 当矿物颗粒散射特性主要为后向散射时, 辐射至矿物的电磁波大部分能量被后向散射至传感器, 被前向散射与吸收的能力相对较少, 即反射率较大, 发射率较小. 在这种情况下, 计算光谱大于实测光谱. 因此, 在研究矿物介质中多次散射相函数的基础上, 对 Hapke 模型发射光谱计算公式做出改进, 可能会提高计算光谱与实测光谱的吻合程度, 计算光谱能更真实地模拟矿物发射光谱的变异规律.

### 4 结论

(1) Hapke 发射光谱计算模型可较好地模拟矿物发射光谱的整体谱形、主要光谱特征及其变异规律, 但在某些光谱细节上与实测光谱仍有一定的差异. 究其原因可能主要是 Hapke 模型将矿物介质中多次散射辐射简化为“各向同性”所致. 研究矿物介质中多次散射辐射的“各向异性”特性以及将之植入于模型可能是提高模型准确程度的重要途径.

(2) 矿物发射光谱随粒度的变化比较复杂, 不仅不同矿物波谱的变化规律有所不同, 而且同种矿物在不同粒度区间上的变化亦有差异. 石英发射光谱随粒度变化呈连续变化, 随着粒度的增大, RF 特征逐渐变强, TF 特征减弱, CF 特征基本保持不变. 白云母与钙长石的变化则相对复杂. 发射光谱随矿物粒度增大的一般变化规律为: 随着粒度的增大, 发射光谱的强度逐渐减弱, 且发射率越小, 随粒度增大的下降幅度越大, CF 特征处的发射率基本保持不变, RF 特征逐渐变强, 深度逐渐加大, 特征的位置也可能发生微小的偏移. 矿物粒度足够小时, TF 特征开始出现. 随着粒度的增大, TF 特征逐渐减弱直至消失. 在矿物识别时, 必须考虑粒度对光谱特征的影响, 另一方面, 也为利用光谱的变异提取矿物的粒度信息提供了物理基础.

(3) 发射角主要影响矿物发射光谱的强度, 即发射率的大小. 3 种矿物都表现出相同的变化规律: 即随发射角的增大, 发射率变小, 而光谱的整体形状和 TF、RF、CF 特征的位置与形态都基本保持不变. 因

而依据这些特征识别矿物种类时可不考虑发射角的影响。但在 RF、TF 特征处, 发射率随发射角增大的下降幅度较大, 致使特征的深度加大, 若根据吸收深度反演矿物丰度时应考虑发射角的影响。

致谢: 中国地质大学(北京)刘少峰教授、中国科学院遥感应用研究所燕守勋研究员以及论文审稿人均对论文提出了宝贵意见, 在此一并表示感谢!

## References

- Aronson, J. G., Strong, P. F., 1975. Optical constants of minerals and rocks. *Applied Optics*, 14(12): 2914—2920.
- Bandfield, J. L., 2002. Global mineral distributions on Mars. *Journal of Geophysical Research*, 107(E6): 5042—5063.
- Bandfield, J. L., Hamilton, V. E., Christensen, P. R., 2000. A global view of Martian surface composition from MGS-TES. *Science* 287(5458): 1626—1630.
- Buratti, B. J., Hicks, M. D., Soderblom, L. A., et al., 2004. Deep space 1 photometry of the nucleus of Comet 19P/Borrelly. *Icarus* 167(1): 16—29.
- Christensen, P. R., Bandfield, J. L., Hamilton, V. E., et al., 2000. A thermal emission spectral library of rock-forming minerals. *Journal of Geophysical Research*, 105(E4): 9735—9739.
- Clark, R. N., Swayzer, G. A., Livo, K. E., et al., 2003. Imaging spectroscopy: Earth and planetary remote sensing with the USGS Tetracorder and expert system. *Journal of Geophysical Research*, 108(E2): 5131.
- Conel, J. E., 1969. Infrared emissivities of silicates: Experimental results and a cloudy atmosphere model of spectral emission from condensed particulate mediums. *Journal of Geophysical Research*, 74(6): 1614—1634.
- Copper, B. L., Salisbury, J. W., Killen, R. M., et al., 2002. Midinfrared spectral features of rocks and their powders. *Journal of Geophysical Research*, 107(E4): 5017.
- Cruikshank, D. P., Dalle-Ore, C. M., Roush, T. L., et al., 2001. Constraints on the composition of Trojan asteroid 624 Hektor. *Icarus* 153(2): 348—360.
- Dozier, J., Warren, S. G., 1982. Effect of viewing angle on infrared brightness temperature of snow. *Water Resources Research*, 18(5): 1424—1434.
- Hamilton, V. E., 2000. Thermal infrared emission spectroscopy of the pyroxene mineral series. *Journal of Geophysical Research*, 105(E4): 9701—9716.
- Hansen, J. E., Travis, L. D., 1974. Light scattering in planetary atmospheres. *Space Science Review*, 16(4): 527—610.
- Hapke, B., 1981. Bidirectional reflectance spectroscopy 1. Theory. *Journal of Geophysical Research*, 86(B4): 3039—3054.
- Hapke, B., 1984. Bidirectional reflectance spectroscopy: 3. Correction for macroscopic roughness. *Icarus* 59(1): 41—59.
- Hapke, B., 1986. Bidirectional reflectance spectroscopy: 4. The extinction coefficient and the opposition effect. *Icarus* 67(2): 264—280.
- Hapke, B., 1993a. Combined theory of reflectance and emittance spectroscopy. In: Remote geochemical analysis: Elemental and mineralogical composition. Cambridge University Press, London, 31—41.
- Hapke, B., 1993b. Theory of reflectance and emittance spectroscopy. Cambridge University Press, London.
- Hapke, B., 1999. Scattering and diffraction of light by particles in planetary regoliths. *Journal of Quantitative Spectroscopy of Radiative and Transfer*, 61(5): 565—581.
- Hapke, B., 2002. Bidirectional reflectance spectroscopy: 5. The coherent backscatter opposition effect and anisotropic scattering. *Icarus* 157(2): 523—534.
- Hapke, B., Nelson, R., Smythe, W., 1998. The opposition effect of the moon: Coherent backscatter and shadow hiding. *Icarus* 133(1): 89—97.
- Hudson, R. S., Ostro, S. J., 1999. Physical model of asteroid 1620 Geographos from radar and optical data. *Icarus* 140(2): 369—378.
- Kahle, A. B., Alley, R. E., 1992. Separation of temperature and emittance in remotely sensed radiance measurements. *Remote Sensing of Environment*, 42(2): 107—111.
- Kirkland L., Herr, K., Keim, E., et al., 2002. First use of an airborne thermal infrared hyperspectral scanner for compositional mapping. *Remote Sensing of Environment*, 80(3): 447—459.
- Klingelhöfer, G., Morris, R. V., Bernhardt, B., et al., 2004. Jarosite and hematite at Meridiani planum from opportunity's Mössbauer spectrometer. *Science*, 306(5702): 1740—1745.
- Lane, M. D., Christensen, P. R., 1997. Thermal infrared emission spectroscopy of anhydrous carbonates. *Journal of Geophysical Research*, 102(E11): 25581—25592.
- Li, X. W., Wang, J. D., Strahler, A. H., 1999. Scale effects of Planck's law over nonisothermal blackbody surface. *Science in China(Series E)*, 42(6): 652—656.
- Liu, L. W., Zheng, H. B., Jian, Z. M., 2005. Visible reflectance



- tance record of South China Sea sediments during the past 220 ka and its implications for East Asian monsoon variation. *Earth Science—Journal of China University of Geosciences*, 30(5): 543–549 (in Chinese with English abstract).
- Liu, Z. F., Christophe, C., Alain, T., 2005. Application of Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy in quantitative mineralogy of the South China Sea: Example of core MD01-2393. *Earth Science—Journal of China University of Geosciences*, 30(1): 25–29 (in Chinese with English abstract).
- Mallama, A., Wand, D., Howard R. A., 2002. Photometry of mercury from SOHU/LASCO and earth: The phase function from 2 to 170°. *Icarus*, 155(2): 253–264.
- McGuire, A. F., Hapke, B. W., 1995. An experimental study of light scattering by large, irregular particles. *Icarus*, 113(1): 134–155.
- Melissa, L. W., Christensen, P. R., 1996. Optical constants of minerals derived from emission spectroscopy: Application to quartz. *Journal of Geophysical Research*, 107(B7): 15921–15931.
- Moersch, J. E., Christensen, P. R., 1995. Thermal emission from particulate surfaces: A comparison of scattering models with measured spectra. *Journal of Geophysical Research*, 100(E4): 7465–7477.
- Pitman, K. M., Wolff, M. J., Clayton, G. C., 2005. Application of modern radiative transfer tools to model laboratory quartz emissivity. *Journal of Geophysical Research*, 110(E08003): 1–15.
- Poulet, F., Cuzzi, J. N., Cruikshank, D. P., et al., 2002. Comparison between the Shkuratov and Hapke scattering theories for solid planetary surfaces: Application to the surface composition of two Centaurs. *Icarus* 160(2): 313–324.
- Reinart, A., Reinhold, M., 2008. Mapping surface temperature in large lakes with MODIS data. *Remote Sensing of Environment*, 112(2): 603–611.
- Salisbury, J. W., Wald, A., 1992. The role of volume scattering in reducing spectral contrast of reststrahlen bands in spectra of powdered minerals. *Icarus* 96(1): 121–128.
- Salisbury, J. W., Walter, L. S., 1989. Thermal infrared (2.5–13.5  $\mu\text{m}$ ) spectroscopic remote sensing of igneous rock types on particulate planetary surfaces. *Journal of Geophysical Research*, 94(B7): 9192–9202.
- Shepard, M. K., Helfenstein, P., 2007. A test of the Hapke photometric model. *Journal of Geophysical Research*, 112(E03001): 1–17.
- Simonelli, D. P., Veverka, J., Thomas P. C., et al., 1996. Ida lightcurves: Consistency with Galileo shape and photometric models. *Icarus*, 120(1): 38–47.
- Spitzer, W. G., Kleinman, D. A., 1961. Infrared lattice bands in quartz. *Physical Review*, 121(5): 1324–1335.
- Vaughan, R. G., Calvin, W. M., Taranik, J. V., 2003. SE-BASS hyperspectral thermal infrared data: Surface emissivity measurement and mineral mapping. *Remote Sensing of Environment*, 85(1): 48–63.
- Vaughan, R. G., Hook, S. J., Calvin, W. M., et al., 2005. Surface mineral mapping at streamboat springs, Nevada, USA with multi-wavelength thermal infrared images. *Remote Sensing of Environment*, 99(1–2): 140–158.
- Wald, A. E., Salisbury, J. W., 1995. Thermal infrared directional emissivity of powdered quartz. *Journal of Geophysical Research*, 100(B12): 24665–24675.

#### 附中文参考文献

- 刘连文, 郑洪波, 翦知湔, 2005. 南海沉积物漫反射光谱反映的 220 ka 以来东亚夏季风变迁. *地球科学——中国地质大学学报*, 30(5): 543–549.
- 刘志飞, Christophe, C., Alain, T., 2005. 傅里叶变换红外光谱(FTIR)方法在南海定量矿物学研究中的应用: 以 MD01-2393 孔为例. *地球科学——中国地质大学学报*, 30(1): 25–29.