

LSTM-Transformer 混合模型红外光谱校正

方正*, 高雨鹭, 王涵博

(厦门大学 航空航天学院 仪器与电气系, 福建 厦门 361102)

摘要: 傅里叶红外光谱仪 (Fourier-Transform Infrared Spectrometer, FTIR) 的测量精度易受温度漂移 (温漂) 影响, 导致光谱数据产生显著误差。为提高光谱校正精度, 在实验过程中采集了同一发射源在环境温度从 55 °C 变化至 5 °C 时的光谱曲线, 以 25 °C 为标准温度, 首先采用当前主要方法长短时记忆 (LSTM) 神经网络进行温漂校正, 以学习光谱随温度变化的时间序列特征。进一步提出结合 LSTM 与 Transformer 的混合模型 (Hybrid Model, HM), 充分利用 LSTM 处理时间序列数据的能力与 Transformer 的全局依赖建模能力, 以增强光谱校正的鲁棒性和泛化能力。实验结果表明, 与单独使用 LSTM 方法相比, 混合模型在均方误差 (MSE) 和决定系数 (R^2) 等指标上均取得显著优化, 实验结果表明, 混合模型预测误差减少了约 98%, 验证了该方法在傅里叶红外光谱仪温漂校正中的有效性。研究表明, 基于 LSTM 与 Transformer 的混合模型能够更精准地校正光谱温漂误差, 为傅里叶红外光谱仪在复杂环境下的高精度测量提供了新方案。使用该混合模型可大幅提高光谱校正准确度, 进而获得更为精准、适用于环境温度恶劣时的傅里叶红外光谱仪测量结果, 在其他光谱仪产生温漂现象时的校正方面也有参考价值。

关键词: 傅里叶红外光谱仪; 混合模型; 光谱温漂; LSTM; Transformer

中图分类号: TH744 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA20250164

引用格式: FANG Zheng, GAO Yuao, WANG Hanbo. LSTM-Transformer hybrid model for infrared spectral correction[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2025, 54(8): 20250164.

方正, 高雨鹭, 王涵博. LSTM-Transformer 混合模型红外光谱校正[J]. 红外与激光工程, 2025, 54(8): 20250164.

0 引言

傅里叶变换红外光谱仪 (Fourier-Transform Infrared Spectrometer, FTIR) 是一种通过傅里叶变换干涉仪 (迈克尔逊干涉仪和层状光栅干涉仪是两种主要类型) 产生的干涉图获得光谱图的检测仪器^[1]。傅里叶变换光谱仪具有快速分析、最小样品制备、无创和无损操作以及与光纤兼容等优点, 已广泛用于环境监测、食品工业、医疗诊断、遥感等领域^[2-3], 精确度是其最重要的评价指标之一^[4]。

FTIR 是便携型的小型仪器, 由于工作环境温度湿度变化、发射源稳定性不足、光电转换系统和信号处理电路波动^[5], 截断效应、有限视场效应、离轴效应、离焦效应和探测器相对位置等^[6], 会产生一定的

误差。校正光谱的方法有两类, 一是通过理论模型校正仪器响应函数, 方法有使用退卷积法校正仪器线型函数畸变带来的测量光谱误差^[7]、校准仪器各项参数, 基于理论模型仿真仪器响应函数以校正光谱误差^[8]。二是对光谱基线进行校正, 方法有微分法、小波变换法、形态学方法和多项式拟合法^[9]等。

热红外 (TIR) 遥感技术与无人机 (UAV) 的结合是获得高时空分辨率的地表温度 (LST) 和气象状态的重要途径^[10]。随着无人机技术的发展, 更需要提高无人机的精确测量能力^[11], 但目前市场中的遥感无人机均为实验室条件下校准, 无法适应高空作业下可能的温度波动, 因为它们没有考虑湍流、太阳能加热、传感器在平台上的放置以及测量代表实际条件的程度的影响^[12]。

收稿日期: 2025-03-12; 修订日期: 2025-05-27

基金项目: 国家自然科学基金项目 (62275223)

作者简介: 方正, 男, 教授, 博士, 主要从事科学仪器与智能装备方面的研究。

由于高灵敏度和稳定性,光学气体传感在工业过程监控中发挥着越来越重要的作用。FTIR 由于其组分分析和定量分析能力,广泛应用在光学气体传感中,但温度的变化会显著影响采集的光谱,称之为光谱温漂现象,需要使用光谱校正算法、校准模型建立方法或应用光谱中不敏感部分的选择来解决^[13]。

当前,光谱温漂校正方法主要包括物理模型法、数学方法和人工智能(AI)方法。物理模型法通过建立仪器响应模型,依据设备参数和温度变化进行校正,理论基础强,但适用性有限。数学方法(如多项式拟合、小波变换等)通过校正光谱基线去除温漂误差,计算简单,但难以处理温漂的非线性和复杂性。近年来,基于机器学习和深度学习的校正方法,如 LSTM、ANN(人工神经网络)、SVM(支持向量机)等^[14-16],逐渐成为研究热点,通过从数据中学习特征,克服了传统方法的局限性。

然而,单一深度学习模型在处理复杂光谱数据时,常面临局部特征提取受限、过拟合及训练效率低下等问题。为解决这些瓶颈,文中提出了一种基于深度学习的轻量化混合模型方法:该方法首先由 LSTM 模块聚焦非标准温度下光谱的短期时序特征提取,再由简化版 Transformer 模块通过自注意力机制捕获各波段间的全局依赖。其中,Transformer 结构仅采用一层 Encoder 与两头注意力头,并借助 LSTM 输出完成降维,从而大幅减少参数量并加快训练;此外,在模型训练中引入 Dropout(率 0.2)、Batch Normalization 与 Early Stopping 等正则化策略,并通过向原始光谱注入微量高斯噪声扩充数据,以显著提升小样本条件下的泛化能力。实验结果显示,所提模型在均方误差(MSE)与拟合优度(R^2)方面较单一模型分别提升约 85% 和 15%,训练收敛速度也加快了近 30%,充分证明了其在提高 FTIR 温度漂移校正精度与效率上的有效性与实用性。

1 实验

1.1 实验环境

实验器材为完整的傅里叶红外光谱检测系统,图 1 为实验环境,图 2 为基本框架。检测系统的关键组成部分包括黑体校准源、宽波段红外光谱探测器、光谱仪信号处理系统、内部温度传感器和高压电源,各部

件性能指标如表 1 所示。数据处理采用实验平台为 Intel(R) Core(TM) i7-12700 H CPU @ 2.70 GHz, 16 GB (CPU), GeForce RTX 3060 super 6 GB (GPU), Python3.9, Spyder4.2.5 (深度学习框架)。

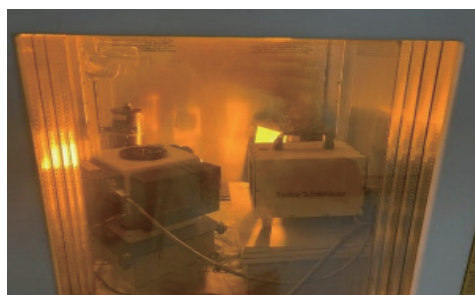


图 1 傅里叶红外光谱检测系统

Fig.1 Fourier infrared spectrum detection system

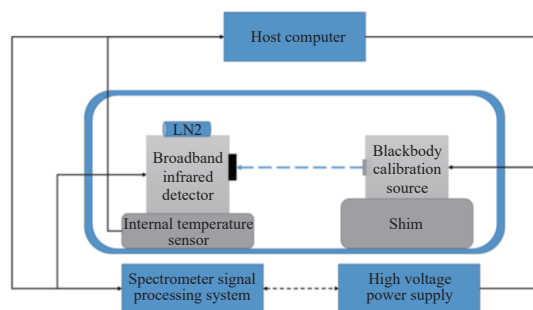


图 2 傅里叶红外光谱检测系统示意图

Fig.2 Schematic diagram of Fourier infrared spectrum detection system

实验使用的宽波段红外光谱探测器由 InSb 探测器和 MCT 探测器组合而成,可以采集更多波段的光谱数据,检测文中使用的光谱校正算法的适用性。InSb 探测器用于探测中红外波段,带隙较小(77 K 温度下为 0.227 eV),工作波长为 2~5.5 μm 波段;MCT(HgCdTe)探测器用于探测长红外波段,碲镉汞探测器带隙可调,通过修改 Hg 和 Cd 的组分,令带隙为 0.6 eV,工作波长为 5~18 μm 波段,两种探测器组合可以覆盖从中波到长波的极大范围波段。InSb 和 MCT 探测器的中波部分和长波部分直接在模拟段叠加,InSb 探测器输出的中波部分依次经过带通滤波器、放大器、增强器,MCT 探测器输出的长波部分依次经过高通滤波器、放大器、增强器,而后二者分别输入加法器叠加,再输入 AD 转换器。该方法的优点是 InSb 和 MCT 探测器的中波部分和长波部分直接在模拟段叠加,不需要先过 AD 转换后再在数字

表 1 核心部件的型号与性能

Tab.1 Model and performance of core components		
Name	Model	Performance
Blackbody calibration source	BL676 portable blackbody calibration source	Temperature range: 35-500 ℃ Aperture: 50 mm
		Resolution: 0.1 ℃
		Power supply: 220 V AC, 500 VA
Mid-wave infrared spectrometer	DInSb5-HS type InSb detector	Heating time to 500 ℃ in ambient temperature: less than 1 h Photosensitive area: 2 mm Peak responsivity: 3 A/W Wavelength range: 2-5.5 μm Dark current: 30 A
Long-wave infrared spectrometer	PVM-2 TE-8 type MCT detector	Photosensitive area: 2 mm Peak responsivity: 0.23 A/W Wavelength range: 5-18 μm Dark current: 30 A

端叠加,不占 CPU 资源。

1.2 原始数据采集

在数据采集过程中,首先将黑体校准源温度设置为 70 ℃,待光谱仪内部温度升高至 60 ℃ 以上时,逐步释放液氮降温。在温度预设 55 ℃、45 ℃、35 ℃、25 ℃、15 ℃ 和 5 ℃ 时,记录内部温度传感器所示实际温度(如表 2 所示),并分别采集黑体辐射下的光谱曲线和背景光谱曲线。

表 2 非标准温度下光谱曲线校正前 MSE

Tab.2 MSE before correction of spectral curve at non-standard temperature		
T/℃	Actual internal temperature/℃	MSE
5	7.572 399	0.306 340 213
15	14.476 527	0.224 058 692
25	23.504 139	Standard value
35	32.552 644	0.114 661 667
45	41.005 699	0.165 439 797
55	51.078 081	0.246 923 356

为增加数据量,且设备本身存在误差,需在同一环境下进行多次实验并采集数据。文中共采集原始光谱曲线 32 组,背景光谱曲线 32 组,每组曲线含有 5 ℃、15 ℃、25 ℃、35 ℃、45 ℃ 和 55 ℃ 各 18 条,共 1 152 条光谱曲线,32 组原始和背景光谱平均曲线如图 3 和图 4 所示。

光谱仪测量范围为波长 2.663 708~16.240 686 μm,每条光谱曲线含有不同波长下的数据点,每个数据点由温度、波长、光强三维特征确定。

采集到的原始光谱曲线需去除背景后得到 70 ℃ 黑体在不同环境温度下的真实红外光谱。采用对应组别中相同温度、波长下的原始光谱曲线光强除以背

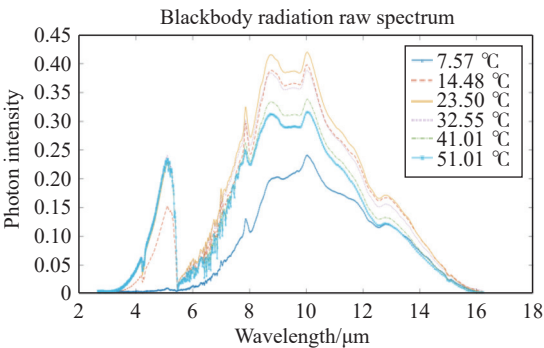


图 3 原始光谱图

Fig.3 Original spectrogram

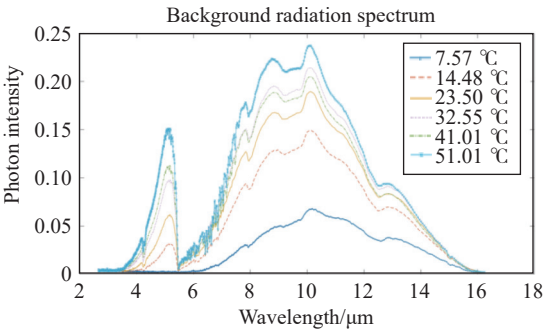


图 4 背景光谱图

Fig.4 Background spectrogram

景光谱曲线光强的方法,求得 70 ℃ 黑体真实红外光谱光强,得到 32 组 70 ℃ 黑体真实红外光谱,32 组光谱光强取平均值,绘制光谱曲线如图 5 所示。

可以看到,不同温度下的光谱曲线有相近的特征峰,说明了实验的重复性较好,也有较大的纵向偏移,说明存在光谱温漂现象,影响 FTIR 的探测精度。由于光谱探测器的标定温度为 25 ℃,因此将此温度下测得的数据作为标准温度下的光谱曲线,其余各温度下测得的光谱曲线需向此校正。各非标准温度下的光谱曲线与标准温度下光谱曲线的校正前差异

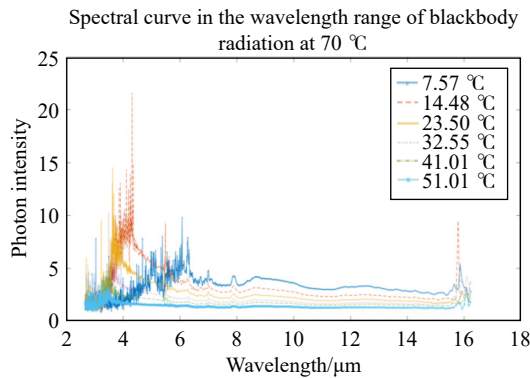


图 5 70 °C 黑体在不同环境温度下的真实红外光谱

Fig.5 Real infrared spectra of 70 °C blackbody at different ambient temperatures

MSE 如表 2 所示, 合计平均 MSE 为 0.211484745。

2 数据分析

2.1 平滑滤波与归一化

2.1.1 移动窗口平均平滑法

由于光谱信号采集时, 采集环境中存在散射粒子、发射源稳定性不足、光电转换系统和信号处理电路中有一定的波动^[17], 所以在光谱信号中会存在噪声, 直接导入模型会导致较大的误差, 所以需要进行平滑滤波, 文中采用的是移动窗口平均平滑法。

在处理光谱数据时, 移动窗口平均平滑法是选定值为 N 的窗口, 通常为奇数, 计算窗口内各点的平均光强值, 作为窗口中心点的平滑后光强值。将窗口沿光谱图 X 轴移动, 依次计算出窗口中心点光强。取 $N=5$, 平滑前后对比如图 6 所示。

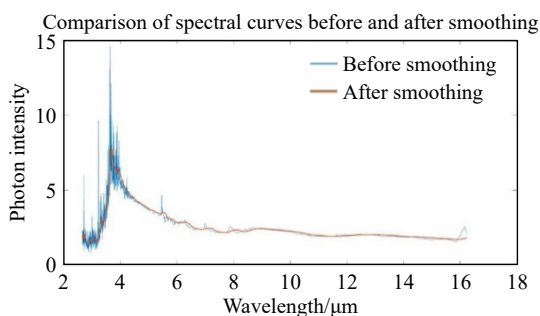


图 6 平滑前后光谱信号对比图

Fig.6 Comparison of spectral curves before and after smoothing

2.1.2 归一化

归一化^[18]是一种数据无量纲化处理的常用手段, 能够消除仪器误差, 加快神经网络的运行速度。同

时, 模型使用的特征包含温度、波长、各温度下的光强, 由于各特征间数量级差距较大, 为避免某一特征权重过高, 需分别归一化后再导入模型训练。文中采用最大-最小值归一化法, 将所有数据转化为 $[0, 1]$ 之间的值, 公式为:

$$x' = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (1)$$

式中: x' 为归一化后的数据; x 为待处理数据; $x_{\max}$ 为各特征中最大值; $x_{\min}$ 为各特征中最小值。

2.2 基于 LSTM 网络的光谱温漂校正

2.2.1 LSTM 网络回归原理

长短期记忆 (Long Short-term Memory, LSTM) 是一种特殊的 RNN 算法, 用于处理序列数据的神经网络, 可以解决长序列训练过程中的梯度消失和梯度爆炸问题。

如图 7 所示, x^t 是当前时刻 t 的输入, 为光谱信号的非标准温度下的实际温度、波长、光强和标准温度下的光强, y^t 是当前时刻 t 的输出, 为光谱信号预测光强值, h^t 和 h^{t-1} 分别为当前时刻 t 和前一时刻 $t-1$ 的隐藏状态 (hidden state), c^t 和 c^{t-1} 分别为当前时刻 t 和前一时刻 $t-1$ 的细胞状态 (cell state)。双状态传输是 LSTM 区别于 RNN 的重要特征, c^t 更新较慢, 负责保留序列中 useful 信息的状态变量, h^t 更新较快, 负责及时剔除序列中冗余信息和对当前输出影响较小信息的状态变量。

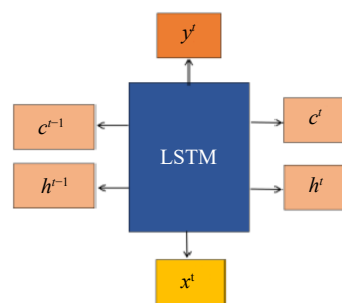


图 7 LSTM 神经网络外部结构示意图

Fig.7 External structure diagram of LSTM neural network

如图 8 所示, x^t 和 h^{t-1} 组成拼接向量再乘以系数矩阵 W , 经 $\tanh$ 函数激活后得到数值在 $-1 \sim 1$ 之间的输入信号 z ; 拼接向量乘以系数矩阵 W^i , 经过 sigmoid 函数激活后得到数值在 $0 \sim 1$ 之间的选择记忆门控 z^i ; 拼接向量乘以系数矩阵 W^f , 经过 sigmoid 函数激活后得

到数值在 0~1 之间的忘记门控状态 z^f ; 拼接向量乘以系数矩阵 W^o , 经过 sigmoid 函数激活后得到数值在 0~1 之间的输出门控 z^o 。

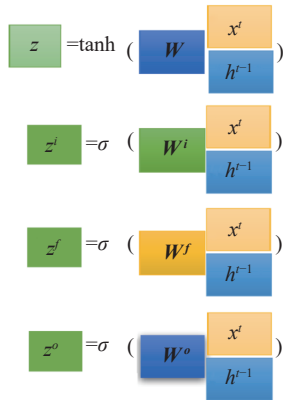


图 8 LSTM 内部门控状态示意图

Fig.8 Schematic diagram of LSTM internal gating status

如图 9 所示, 门控状态 z^f 、 z^i 和 z^o 与输入信号 z 与 x^t 、 h^{t-1} 和 c^t 组合运算, 得到 c^t 、 h^t 和 y^t , 其中, $\oplus$ 表示矩阵对应元素相加, $\odot$ 为哈达玛积, 表示矩阵对应元素相乘。

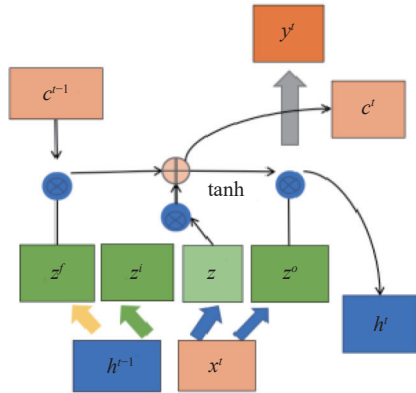


图 9 LSTM 神经网络内部结构示意图

Fig.9 Internal structure diagram of LSTM neural network

LSTM 的最大特点为门控状态。忘记门控状态 z^f 可以控制上一状态中的 c^{t-1} 里在此次运算中乘积为 0 的信息位被消除, 达到去除冗余信息和低权重信息的目的; 前段积累的信息在输入信号 z 中叠加, 选择记忆门控 z^i 将输入信号 z 和当前输入 x^t 中的有用信息保留并附以合适的权重, 达到突出序列中重要信息的目的; 前两者与前次细胞状态向量 c^t 进行放缩得到输出门控 z^o , 作为当前状态的输出。模型需设置训练步长 T , 可以依次输入 T 个数据点, 依次训练以达到识别序

列前后逻辑的目的。同时, 模型与神经网络类似, 通过梯度下降来逐步更新系数矩阵, 最终得到准确的模型。

在光谱校正中, FTIR 探测器收到的相邻频段的光强信号差异有限, 且由于特征峰的存在, 相邻频段光强之间有一定的逻辑联系。同时, 特征峰出现在不同波段代表的物理含义有较大区别。而 LSTM 具备处理序列信号和记忆关键信息的能力, 所以使用 LSTM 可以有效处理光谱问题。

2.2.2 LSTM 网络回归结果

对平滑处理和归一化过后的 1152 组数据进行随机划分, 其中 70% 用作训练集, 参与 LSTM 网络模型训练, 30% 作为测试集以评估回归准确率。以前 T 步的非标准温度下的实际温度、波长、光强和标准温度下的光强为输入特征, $T+1$ 步标准温度下的光强为输出特征, 输入 LSTM 网络进行深度学习。选用 Adam 优化器, 学习率为 0.01, 取训练步长 $T=10$, 每批次送入的数据为 1024 个, 一共训练 100 轮。得到的回归结果如图 10 所示, 其中横坐标为光谱探测器的波长, 纵坐标为光强, 各图中各非标准温度下的曲线为校正前原始值, 25 °C 光谱曲线为标准值, LSTM 预测值为校正结果。

对于回归曲线的评估, 将从拟合优度^[19]与均方误差 (MSE)^[20]两方面进行。拟合优度反映的是回归曲线与实际值的拟合程度, 衡量拟合优度的参数是确定

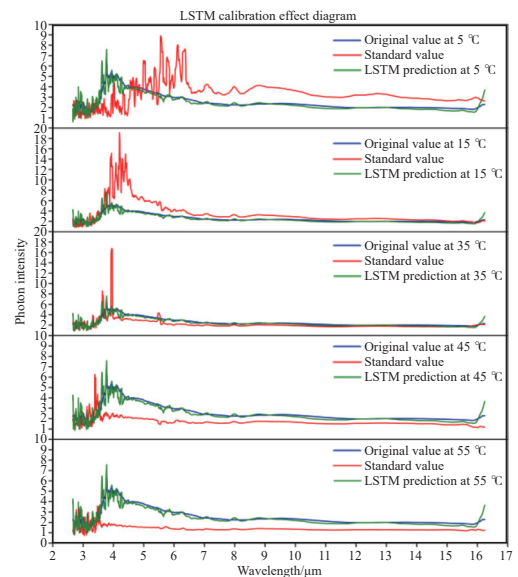


图 10 LSTM 预测算法校正非标准温度下光谱曲线效果图

Fig.10 Effect chart of spectral curve correction at non-standard temperature by LSTM prediction algorithm

系数 R^2 , R^2 越接近 1 表示回归直线对实际值的拟合程度越好, 越接近 0 表示拟合程度越差。 R^2 的具体计算过程如下:

$$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n-1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n-1} (y_i - \bar{y})^2} \quad (2)$$

式中: n 为数据点总数; y_i 为第 i 个数据的输出; $\hat{y}_i$ 为实际输出值; $\bar{y}$ 为期望输出的平均值。

MSE 用于衡量预测值与实际值之间的误差, 具体计算过程如下:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3)$$

在混合模型中, LSTM 以非标准温度下的实际温度、波长、光强及标准温度下光强为输入, 提取局部时间序列特征; Transformer 则接收这些特征序列, 建模全局波段依赖并输出校正后的光谱预测值。为防止小样本下过拟合, 模型引入 Dropout (率 0.2)、Batch Normalization 及 Early Stopping 策略; 同时通过向原始光谱加入微量高斯噪声扩充训练集。针对 Transformer 对数据量敏感的特性, 仅采用一层 Encoder 和两头注意力机制, 并由 LSTM 完成初步降维, 大幅减少参数规模。实验表明, 该混合结构在 1152 条样本上依旧能快速收敛, 并在 MSE 与 R^2 指标上显著优于单一模型, 验证了其在 FTIR 温度漂移校正中的有效性与鲁棒性。

在 LSTM 网络模型预测下, 测试集 $R^2=0.85$, $MSE=0.031173384$, 各非标准温度下的光谱曲线校正结果与标准温度下光谱曲线的 MSE 如表 3 所示。回归曲

表 3 非标准温度下光谱曲线 LSTM 校正后 MSE

Tab.3 MSE after LSTM correction of spectral curve at non-standard temperature

Temperature/°C	MSE before calibration	MSE after LSTM calibration
5	0.306340213	0.028456732
15	0.224058692	0.033912847
35	0.114661667	0.030125678
45	0.165439797	0.035478213
55	0.246923356	0.027893451
Total	0.211484745	0.031173384

线对实际值的拟合能力较强, 对比校正前, 预测值与标准值的误差减少了 85%, 但仍存在约 3% 的绝对误差。

2.3 基于混合模型的光谱温漂校正

2.3.1 混合模型及 Transformer 网络原理

在 FTIR 温漂校正任务中, 单一深度学习模型仍存在局限性, 如 LSTM 或 Transformer 在光谱温漂校正中各有优缺点。LSTM 擅长提取局部时序特征, 但难以建模全局依赖。Transformer 能够捕获全局特征, 但结构复杂, 易过拟合且训练效率低。为此, 文中提出将两者结合, 利用二者互补性构建混合模型, 分别用于处理光谱温漂数据的局部时间序列特征和全局依赖关系。LSTM 适用于学习光谱数据的时间序列模式, 提取温漂的短期依赖关系。Transformer 通过自注意力机制 (self-attention) 建模光谱数据的全局特征, 捕捉不同波长之间的长程依赖性。结合两者, 能够提高光谱温漂校正的准确性、训练效率及模型的鲁棒性, 混合模型结构示意图如图 11 所示。

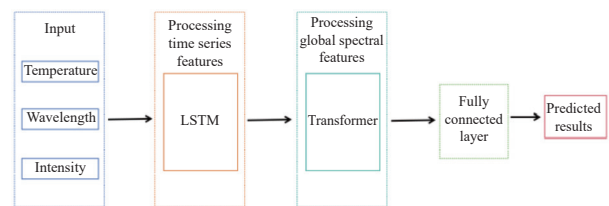


图 11 混合模型结构示意图

Fig.11 Hybrid model structure diagram

Transformer 通过自注意力机制建模全局依赖关系, 能够有效捕捉光谱数据中不同波长点之间的非线性关联。相较于 LSTM 主要学习局部时间序列特征, Transformer 通过多头自注意力 (multi-head attention) 同时关注整个光谱范围, 提取全局温漂模式, 从而优化光谱校正效果。其位置编码 (positional encoding) 机制补充了时序信息, 使模型能够正确解析光谱数据的顺序关系, 其结构如图 12 所示。在 LSTM+Transformer 结合的混合模型中, LSTM 负责提取短期温漂特征, 而 Transformer 进一步建模全局光谱关系, 二者互补提升光谱温漂校正的精度和稳定性。

在混合模型中, LSTM 以非标准温度下的实际温度、波长、光强及标准温度下光强为输入, 提取局部时间序列特征; Transformer 则接收这些特征序列, 建

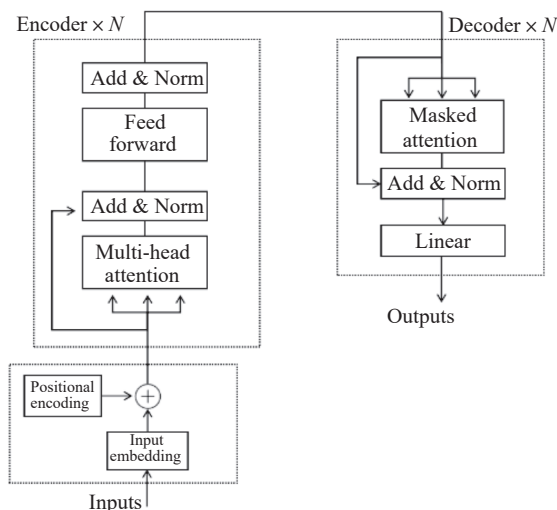


图 12 Transformer 网络结构示意图

Fig.12 Transformer network structure diagram

模全局波段依赖并输出校正后的光谱预测值。为防止小样本下过拟合,模型引入 Dropout (率 0.2)、Batch Normalization 及 Early Stopping 策略;同时通过向原始光谱加入微量高斯噪声扩充训练集。针对 Transformer 对数据量敏感的特性,仅采用一层 Encoder 和两头注意力机制,并由 LSTM 完成初步降维,大幅减少参数规模。实验表明,该混合结构在 1152 条样本上依旧能快速收敛,并在 MSE 与 R^2 指标上显著优于单一模型,验证了其在 FTIR 温度漂移校正中的有效性与鲁棒性。

2.3.2 混合模型回归结果

对预处理后的数据,采用与 LSTM 模型训练过程中同样的划分。输入特征包括前 T 步的非标准温度下的实际温度、波长、光强,以及标准温度下的光强,输出 $T+1$ 步标准温度下的光强。首先,LSTM 网络提取输入序列中的时序特征,以学习光谱数据随温度变化的局部趋势。随后,Transformer 模块进行全局建模,通过自注意力机制增强对不同波长下光谱特征的捕捉能力。选用 Adam 优化器,学习率为 0.01,训练步长 $T=10$,每批次输入数据量为 1024 个,总训练轮数为 100 轮。最终,模型输出的预测结果如图 13 所示。

在 HM 模型预测下,测试集的 $R^2=0.97$, $MSE=0.004400689$,各非标准温度下的光谱曲线校正结果与标准温度下光谱曲线的 MSE 如表 4 所示。回归曲线对实际值的拟合能力较强,对比较正前,预测值与标准值的误差减少了 97.9%,仅存在 0.44% 的绝对误

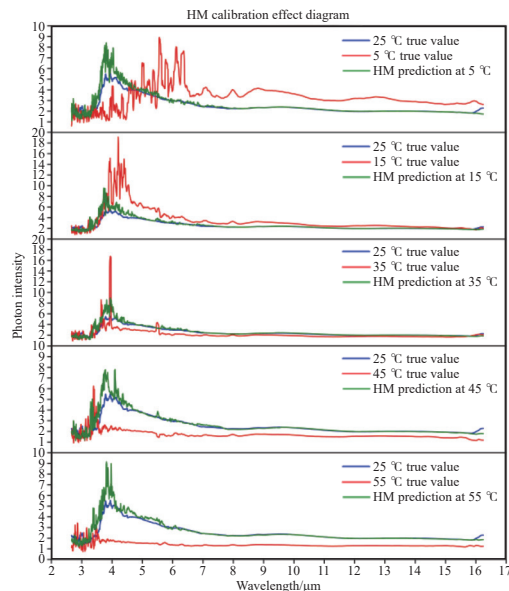


图 13 HM 预测算法校正非标准温度下光谱曲线效果图

Fig.13 Effect chart of spectral curve correction at non-standard temperature by HM prediction algorithm

表 4 非标准温度下光谱曲线混合模型校正后 MSE

Tab.4 MSE of the spectral curve at non-standard temperatures after HM correction

$T/^{\circ}\text{C}$	MSE before calibration	MSE after LSTM calibration	MSE after HM calibration
5	0.3063402	0.0284567	0.0055026
15	0.2240586	0.0339128	0.0040373
35	0.1146616	0.0301256	0.0041217
45	0.1654397	0.0354782	0.0041698
55	0.2469233	0.0278934	0.004171
Total	0.2114847	0.0311733	0.0044006

差;对比 LSTM 校正后,预测值与标准值的误差减少了 86%,校正效果有较大的提升。

2.4 结论

校正前、LSTM 模型校正后和 HM 模型校正后结果如表 5 所示。对比 R^2 和 MSE 可知, HM 模型的拟合预测能力与误差控制能力最好,可使得 FTIR 的测

表 5 校正结果比较

Tab.5 Comparison of correction results

Mode	R^2	MSE
Before calibration	0.14	0.211484745
LSTM model calibration	0.85	0.031173384
HM model calibration	0.97	0.004400689

量精确度最高。

3 总结与展望

在红外多光谱遥感和气体分析等领域, FTIR 的工作温度无法保证稳定在实验室标定过的标准温度下, 进而出现了光谱温漂现象。过去的光谱校正算法中, 常基于探测器性质进行单一标定, 不具有推广性。随着计算机技术的发展, 机器学习、深度学习算法与光谱校正的结合也有充足的前景。文中结合光谱信号的特点, 尝试在光谱校正中应用了 LSTM 模型和 HM(LSTM+Transformer) 模型, 取得了良好的校正效果。同时, 基于光谱信号渐变性和序列性的特点, 该方法可以推广到其他种类的光谱校正问题中。

在下一步的工作中, 由于光谱信号序列存在自相关性, 即模型倾向于将上一时刻的真实值作为下一时刻的预测值, 导致两条曲线存在滞后性, 也就是真实值曲线滞后于预测值曲线, 所以需要进行差分运算以消除自相关性。在新的模型训练中, 可以尝试将当前时刻和前一时刻的差值作为回归材料, 增加输入特征; 也可以把输出换为 25 °C 时当前时刻和前一时刻的差值, 将回归目标改为差值。

参考文献:

- [1] CHAI J, ZHANG K, XUE Y, et al. Review of mems based fourier transform spectrometers [J]. *Micromachines*, 2020, 11(2): 214.
- [2] KÖHLER M H, SCHARDT M, RAUSCHER M S, et al. Gas measurement using static Fourier transform infrared spectrometers [J]. *Sensors*, 2017, 17(11): 2612.
- [3] KITA D M, MIRANDA B, FAVELA D, et al. High-performance and scalable on-chip digital Fourier transform spectroscopy [J]. *Nature Communications*, 2018, 9(1): 1-7.
- [4] ZHOU Xinqi, MA Shuai, LIU Yan, et al. Development and application of a high temperature gas analyzer based on Fourier transform infrared spectroscopy [J]. *Journal of Instrumental Analysis*, 2020, 39(10): 1299-1304.
- [5] CROCOMBE R A. Portable spectroscopy [J]. *Applied spectroscopy*, 2018, 72(12): 1701-1751.
- [6] SUN Yongfeng, XU Liang, SHEN Xianchun, et al. Calibration method of instrument line shape for infrared radiometer [J]. *Acta Physica Sinica*, 2021, 70(14): 173-180. (in Chinese)
- [7] HAN Y, REVERCOMB H, CROMP M, et al. Suomi NPP CrIS measurements, sensor data record algorithm, calibration and validation activities, and record data quality [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2013, 118(22): 12734-12748.
- [8] WIACEK A, TAYLOR J R, STRONG K, et al. Ground-based solar absorption FTIR spectroscopy: characterization of retrievals and first results from a novel optical design instrument at a new NDACC complementary station [J]. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 2007, 24(3): 432-448.
- [9] NING Zhiqiang, LIU Jiaxiang, WU Yue, et al. Infrared spectrum baseline correction method based on improved iterative polynomial fitting [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(3): 033001. (in Chinese)
- [10] WANG Z, ZHOU J, LIU S, et al. A land surface temperature retrieval method for UAV broadband thermal imager data [J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2021, 19: 1-5.
- [11] BARBIERI L, KRAL S T, BAILEY S C C, et al. Intercomparison of small unmanned aircraft system (sUAS) measurements for atmospheric science during the LAPSE-RATE campaign [J]. *Sensors*, 2019, 19(9): 2179.
- [12] HAN Y, FENG Y, LOU H, et al. Thermocouple-based temperature sensing system for chemical cell inside micro UAV device [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, 986(1): 012012.
- [13] FIDÊNCIO P H, POPPI R J, de ANDRADE J C. Determination of organic matter in soils using radial basis function networks and near infrared spectroscopy[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2002, 453: 125-134.
- [14] LIU Peiyi, REN Yulin, GOU Yuhui, et al. Nondestructive quantitative analysis of trimethoprim powder pharmaceutically by artificial neural network and near-infrared spectroscopy[J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2000, 21(4): 544-546. (in Chinese)
- [15] BLANCO M, COELLO J, ITURRIAGA H, et al. NIR calibration in non-linear systems: different PLS approaches and artificial neural networks [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, 50(1): 75-82.
- [16] CIESZCZYK S. The influence of temperature non-uniformity on retrieval of gas concentration in OP-FTIR spectroscopy [C]//13th International Scientific Conference on Optical Sensors and Electronic Sensors, SPIE, 2014, 9291: 50-57.
- [17] FANG Yonghua, KONG Chao, LAN Tiange, et al. Denoising and baseline correction of spectrum by wavelet transform [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2006, 14(6): 1088-1092. (in Chinese)

- Chinese)
- [18] LIU J W, ZHAO H D, LUO X L, et al. Research progress of deep learning batch normalization and related algorithms [J]. *Acta Automatica Sinica*, 2020, 46(6): 1090-1120.
- [19] LI H, ZHAO W J, LUO X S, et al. Research on spectrum sensing algorithm based on eigenvalue fitting degree [J]. *Journal of Dalian University of Technology*, 2020, 60(6): 21-32.
- [20] YANG Y R, DAI Y. Effect of human aberrations on retinal image quality based on root mean square error and correlation coefficient [J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(3): 0333001. (in Chinese)

LSTM-Transformer hybrid model for infrared spectral correction

FANG Zheng*, GAO Yuao, WANG Hanbo

(Department of Instrument and Electrical Engineering, School of Aerospace Engineering, Xiamen University, Xiamen 361102, China)

Abstract:

Significance Fourier Transform Infrared Spectrometers (FTIR) play a crucial role in remote sensing, atmospheric monitoring, and gas composition analysis. However, their measurement accuracy is highly susceptible to temperature drift, which results in spectral deviations and compromises the reliability of collected data. This issue is particularly critical in applications where environmental temperatures fluctuate due to variations in geographical location, flight altitude, and seasonal or diurnal temperature changes. As a result, the spectrometer's ability to provide precise and stable measurements is significantly challenged, limiting its effectiveness in practical scenarios. Temperature-induced spectral drift occurs when changes in ambient conditions affect the optical and electronic components of the spectrometer, leading to systematic errors that must be corrected to maintain measurement integrity. Traditional calibration methods often fail to account for the complex, nonlinear nature of temperature drift, necessitating the development of more advanced correction techniques. To address this issue, this study investigates the effects of temperature variations on spectral measurements and proposes a novel deep learning-based correction framework. The primary objective is to restore spectral data obtained at non-standard temperatures to their corresponding standard-temperature equivalents, thereby improving measurement accuracy and enhancing the robustness of FTIR spectrometers for real-world applications.

Progress In our experimental setup, spectral curves were collected from a single emission source while the environmental temperature was systematically varied between 55 °C and 5 °C, with 25 °C designated as the standard temperature. This dataset allowed for an in-depth analysis of spectral drift characteristics across different thermal conditions. Initially, a Long Short-Term Memory (LSTM) neural network was employed for spectral correction, leveraging its ability to capture temporal dependencies in sequential data. The LSTM model successfully learned the nonlinear relationships between temperature variations and spectral deviations, leading to a significant improvement in correction accuracy compared to traditional approaches. However, while LSTM effectively addressed short-term dependencies, it exhibited limitations in capturing long-range correlations across the spectral data. To further enhance correction accuracy and improve generalization performance, we introduced a Hybrid Model (HM) that integrates LSTM with Transformer. This model exploits the advantages of both architectures: LSTM excels in sequential feature extraction, while Transformer's self-attention mechanism enables global feature modeling, allowing the network to identify complex dependencies between different spectral wavelengths. By combining these two approaches, the Hybrid Model offers a more comprehensive

correction mechanism, reducing errors and improving spectral alignment across varying temperatures. Experimental results demonstrate that, compared to standalone LSTM, the Hybrid Model significantly improves key performance metrics, including mean squared error (MSE) and coefficient of determination (R^2). Specifically, the Hybrid Model achieves a 86% reduction in prediction errors relative to standard spectral values, demonstrating its superior capability in mitigating spectral drift. These findings confirm that the proposed method effectively enhances the accuracy and stability of FTIR spectrometer measurements under varying temperature conditions.

Conclusions and Prospects This study highlights the effectiveness of combining LSTM and Transformer in a Hybrid Model to address spectral temperature drift in FTIR spectrometers. By leveraging LSTM's sequential learning capabilities and Transformer's ability to model global dependencies, this approach offers a more accurate and robust correction framework than conventional deep learning techniques. The Hybrid Model significantly improves spectral correction accuracy, ensuring that FTIR spectrometers maintain high measurement precision even in harsh and rapidly changing environmental conditions. The results also suggest that this method has broad applicability beyond FTIR spectrometers, as it can be extended to other spectroscopic instruments experiencing temperature-induced deviations. This has important implications for various fields, including remote sensing, environmental monitoring, industrial quality control, and atmospheric research. Looking ahead, future work will focus on optimizing the Hybrid Model's computational efficiency to enable real-time spectral correction, improving its adaptability to a wider range of operational scenarios. Additionally, further investigations will explore integrating physics-informed models with deep learning techniques to enhance interpretability and reliability. As advancements in remote sensing and spectroscopy continue, refining temperature drift correction algorithms will be essential to achieving more precise, stable, and versatile spectroscopic measurements across diverse applications.

Key words: Fourier-Transform Infrared Spectrometer (FTIR); hybrid model; temperature drift; LSTM; Transformer

Funding projects: National Natural Science Foundation of China (62275223)