基于辐射传输模型的铝粘土矿物光谱解混研究及对火星遥感的启示

吴兴[1] 周翔[1,2] 李柯仪[1,2] 刘洋[1,2,3*] 邹永廖[1]

1(中国科学院国家空间科学中心 太阳活动与空间天气全国重点实验室 北京 100190)

2(中国科学院大学 地球与行星科学学院 北京 100049)

3(深空探测全国重点实验室 合肥 230026)

摘 要 火星全球风化剖面中，铝粘土矿物如高岭石与蒙脱石比例的变化反映了化学风化强度与气候条件的差异。因此，准确估算铝粘土矿物的含量对于重建火星古气候与宜居环境具有重要意义。光谱解混作为矿物丰度反演的重要手段，但受限于地面实验验证不足，尤其缺乏对具有相似光谱特征的矿物混合体系的系统评估，解混方法的适用性与反演精度仍不明确。为此，本文使用实验室获取的高岭石-蒙脱石和高岭石-蛋白石两组共 12 条混合光谱，采用行星表面光谱反演最常用的两种辐射传输模型（Hapke 模型与 Shkuratov 模型）开展光谱解混研究。实验结果显示，Shkuratov 模型在 7 条混合光谱中丰度反演误差低于 10%，2 条在 10%~20%；Hapke 模型仅有 3 条丰度反演误差低于 10%，7 条在 10%~20%，表明 Shkuratov 模型整体精度优于 Hapke 模型。本研究为火星铝粘土的光谱定量反演提供了方法验证，也为更复杂的含水矿物混合体系提供了模型参考。

关键词 光谱解混，含水矿物，辐射传输模型，火星

中图分类号 P141.2

Spectral Unmixing of Aluminum-bearing Clay Minerals with Radiative Transfer Models and Its Implications for Martian Remote Sensing

Wu Xing[1] Zhou Xiang[1,2] Li Keyi[1,2] Liu Yang[1,2,3*] Zou Yongliao[1]

1 (State Key Laboratory of Solar Activity and Space Weather, National Space Science Center, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China 100190)

2 (College of Earth and Planetary Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, China 100049)

3 (National Key Laboratory of Deep Space Exploration, Hefei, China 230026)

* 基金项目：国家自然科学基金（编号：42441832，42430210，42241111），中国科协青年人才托举工程(2022QNRC001)

最新录用

Abstract The relative abundances of aluminum-bearing clay minerals such as kaolinite and montmorillonite in Martian weathering profiles reflect variations in chemical weathering intensity and paleoclimatic conditions. Accurate quantification of these minerals is essential for reconstructing early Martian environments and evaluating their potential habitability. Spectral unmixing provides a powerful means to retrieve mineral abundances, yet its accuracy remains uncertain due to limited laboratory validation, particularly for hydrated mineral mixtures with overlapping absorption features. In this study, two sets of laboratory-prepared mixtures (kaolinite–montmorillonite and kaolinite–opal, comprising 12 spectra) were analyzed using two widely applied radiative transfer models for planetary spectroscopy, the Hapke model and the Shkuratov model. The results show that the Shkuratov model achieved abundance errors below 10% in seven samples and between 10–20% in two samples, while the Hapke model produced only three samples below 10% and seven between 10–20%. Overall, the Shkuratov model demonstrated higher inversion accuracy. This work provides an experimental validation framework for quantitative spectral unmixing of Martian aluminum clays and offers methodological guidance for analyzing more complex hydrated mineral mixtures in future study.

Key words Spectral Unmixing, Hydrated Minerals, Radiative Transfer Model, Mars

最新录用

0. 引言

尽管现代火星表面环境极度寒冷干旱，但大量的矿物学证据表明早期火星曾存在稳定的液态水活动 [1]。轨道遥感探测结果显示，在火星古老的地层中分布着多种粘土矿物，它们不仅记录了火星早期水环境条件，也是保存潜在生命标志物的重要载体 [2–5]。在火星全球风化剖面中，铝粘土如高岭石、蒙脱石常位于铁镁质粘土之上，反映由降水淋滤引起的风化成土过程 [6–8]。其中，蒙脱石多形成于季节性干湿交替的气候，而高岭石则常发育于温暖湿润环境，代表更强的化学风化作用 [9,10]。剖面中高岭石与蒙脱石的相对比例变化可指示气候条件和风化强度的差异 [10,11]。因此，厘清铝粘土的类型与含量对于限定火星早期的气候特征和宜居环境具有重要意义。

高光谱遥感是获取火星表面大尺度物质成分的重要手段，可通过诊断性光谱特征确定铝粘土矿物类别 [2]。具体而言，高岭石在 1.39 和 1.41 μm 具有一对狭窄而深的不对称双峰吸收，在 1.92 μm 表现为浅吸收，在 2.16 和 2.21 μm 再

次出现类似的双峰吸收特征；蒙脱石在 1.41 和 2.21 μm 分别呈现较窄吸收带，在 1.91 μm 处则为深而狭窄的吸收 [12]。前人通过可见光及红外矿物制图光谱仪（Observatoire pour la Minéralogie, l'Eau, les Glaces, et l'Activité，OMEGA）和紧凑型侦查成像光谱仪（Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars，CRISM）在火星全球识别了大量铝粘土矿物露头，其中茅尔斯峡谷（Mawrth Vallis）是铝粘土最为集中的区域之一 [4,5,13]。受空间分辨率限制，轨道遥感获取的光谱通常为混合光谱，McKeown 等指出茅尔斯峡谷地区 CRISM 数据呈现的~2.2 μm 吸收带的变化可能是铝粘土矿物混合引起的 [12]。此外，其他在~1.4，~1.9，~2.2 μm 具有相似吸收特征的矿物如蛋白石 [14]混入也可能产生相同的光谱特征，由此带来的“异物同谱”现象 [15]使得准确获取粘土矿物分布信息更加困难。

光谱解混是将观测的混合光谱分解为一组纯净的端元和对应丰度的技术 [16]。解混模型从本质上可分为线性和非线性，其中非线性混合模型综合考虑光线在介质之间的多次散射和吸收，更符合行星表面矿物颗粒致密混合的场景 [17–19]。Hapke 模型 [20]和 Shkuratov 模型（简称 SK99 模型） [21]是火星矿物定量反演最常用的两种非线性辐射传输模型。例如，Liu 等使用 Hapke 模型反演了 Gale 撞击坑矿物丰度 [18]；Zastrow 等利用同样的方法评估了 Jezero 撞击坑橄榄石和碳酸盐含量 [19]；Poulet 等基于 SK99 模型分析了“好奇号”四个预选着陆点的矿物组成 [17]。然而由于缺乏地面真值，遥感反演结果的精度难以评价。

前人通过实验室制备的辉石和橄榄石混合物，以及 HED 陨石光谱对 Hapke 模型和 SK99 模型的反演精度进行评估，结果表明丰度反演误差通常在 5~10% [22–24]。但上述研究聚焦的铁镁质矿物光谱吸收特征较少、吸收带较宽，对光谱特征复杂的含水矿物反演精度探讨不足。为此，本文使用实验室已知端元和混合比例的高岭石-蒙脱石，高岭石-蛋白石两组混合物开展光谱解混精度评价，为高光谱遥感矿物定量反演结果提供参考。

1. 研究数据与方法

1.1 混合光谱数据

最新录用

本文选取美国布朗大学反射光谱实验室（Reflectance Experiment Laboratory，RELAB）数据库 [25]中两组混合光谱数据：高岭石-蒙脱石，高岭石-蛋白石混合光谱。高岭石（KGa-1）和蒙脱石（SWy-2）样品来源于国际粘土矿物协会，蛋白石样品采自夏威夷基拉韦厄火山 [12]。所有端元矿物经过研磨过筛，粒径均小于 125 μm，按质量分数配比混合后，在室温条件下开展光谱测量，入射角、出射角和相角分别是 30°，0°，和 30° [12]。考虑到火星轨道探测中对含水矿物的分析主要依赖短波红外波段，本文选取 1.0~2.55 μm 光谱范围进行模型测试。图 1 展示了两组混合反射光谱随高岭石含量的变化趋势，每条光谱上的文字标注分别为 RELAB 光谱编号和高岭石的质量分数。随着高岭石比例的降低，整体反射率下降，原本在~1.40 和~2.20 μm 处明显的不对称双峰特征逐渐退化为蒙脱石或蛋白石主导的单峰吸收，同时在~1.90 μm 附近的吸收深度增加。

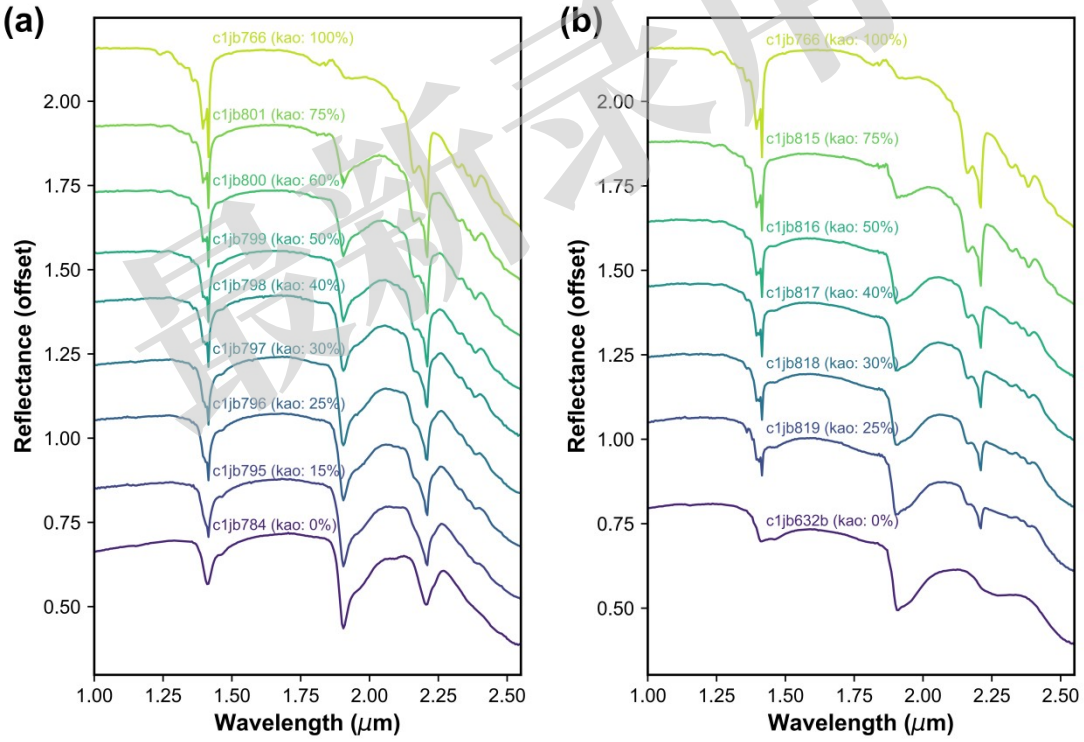


图 1 实验室两端元混合光谱反射率曲线。每条光谱上标注分别为 RELAB 光谱编号和高岭石的质量分数，高岭石含量从上到下依次降低。（a）高岭石-蒙脱石混合光谱；（b）高岭石-蛋白石混合光谱。

Fig. 1. Laboratory reflectance spectra of binary mixtures. Each spectrum is labeled with its

RELAB spectral ID and the mass fraction of kaolinite. The abundance of kaolinite decreases from top to bottom. (a) Kaolinite-montmorillonite mixtures. (b) Kaolinite-opal mixtures.

1.2 研究方法

1.2.1 Hapke 模型

在 Hapke 模型中，反射率可表示为观测角度与单次散射反照率的函数：

$$R(i,e,g)=\frac{\omega_{ave}}{4(\mu_0+\mu)}\{[1+B(g)]P(g)+H(\mu_0)H(\mu)-1\} \quad (1)$$

式中 R 为反射率；i，e，g 分别为入射角、出射角和相位角；$\mu_0=\cos(i)$，$\mu=\cos(e)$；后向散射函数 $B(g)=\frac{1}{1+(1/h)\tan(g/2)}$，其中角宽度参数 $h=-\frac{3}{8}\ln(1-\Phi)$，本文$\Phi$取 0.6 [23]；相函数 $P(g)=1+b\cos(g)+c(1.5\cos^2(g)-0.5)$，其中参数 b 描述了单颗粒的前向或后向散射程度，参数 c 表示侧向散射的程度，本文 b 和 c 分别取 -0.4 和 0.25 [22]；多次散射函数 $H(\mu)=\{1-\omega\mu[r_0+\frac{1-2r_0\mu}{2}\ln(\frac{1+\mu}{\mu})]\}^{-1}$，其中 $r_0=(1-\sqrt{1-\omega})/(1+\sqrt{1-\omega})$；$\omega_{ave}$为平均单次散射反照率，

$$\omega_{ave}=\sum_i \frac{M_i\omega_i}{\rho_i d_i}/\sum_i \frac{M_i}{\rho_i d_i} \quad (2)$$

式中M_i，ω_i，ρ_i，d_i分别为第 i 个矿物端元的质量分数、单次散射反照率、密度和粒径。当端元粒径相同时，公式（2）可化简为 $\omega_{ave}=\sum_{i=1}^{N} F_i\omega_i$，$F_i$为第 i 个矿物端元的体积分数 [26]。矿物的单次散射反照率取决于其光学常数（折射系数实部 n 和虚部 k）和粒径：

$$\omega=S_e+(1-S_e)\frac{(1-S_i)\Theta}{1-S_i\Theta} \quad (3)$$

最新录用

式中外部入射光菲涅尔反射率$S_e=\frac{(n-1)^2+k^2}{(n+1)^2+k^2}+0.05$；内部入射光菲涅尔反射率

$S_i=1.014-\frac{4}{n(n+1)}$；$\Theta$是矿物颗粒的内部传输系数，可表示为

$$\Theta=e^{-\alpha s} \tag{4}$$

式中端元矿物吸收系数$\alpha=4\pi k/\lambda$，λ为波长；假设所有颗粒都为不规则形状，则光程$s=0.2d$ [23]。

1.2.2 Shkuratov 模型

在 SK99 模型中，反射率可表示为矿物光学常数（*n* 和 *k*）、光程（*s*）和波长（λ）的函数，而与观测角度无关：

$$R(n,k,s,\lambda)=\frac{1+\rho_b^2-\rho_f^2}{2\rho_b}-\sqrt{\left(\frac{1+\rho_b^2-\rho_f^2}{2\rho_b}\right)^2-1} \tag{5}$$

式中后向散射$\rho_b=q\times r_b$，前向散射$\rho_f=q\times r_f+1-q$，其中q为颗粒填充体积分数，本文取 0.6 [23]；r_b和r_f可分别表示为：

$$r_b=R_b+\frac{1}{2}T_eT_iR_ie^{-2\tau}/(1-R_ie^{-\tau}) \tag{6}$$

$$r_f=R_f+T_eT_ie^{-\tau}+\frac{1}{2}T_eT_iR_ie^{-2\tau}/(1-R_ie^{-\tau}) \tag{7}$$

其中$R_e\approx\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2+0.05$，$R_b\approx(0.28n-0.2)R_e$，$R_i\approx1.04-1/n^2$，$T_e=1-R_e$，$T_i=1-R_i$，$\tau=4\pi ks/\lambda$。

1.2.3 光谱解混

端元的折射系数（*n* 和 *k*）是两种辐射传输模型的重要输入 [27,28]，其中实部 *n* 描述光在介质中传播速度的下降程度，在可见光到短波红外范围随波长变化极小，可认为是常数。矿物 *n* 值和密度可从全球矿物数据库 Mindat.org 获取（https://www.mindat.org/），本文高岭石，蒙脱石，蛋白石三种端元 *n* 值分别取 1.54，1.52，和 1.45，密度分别为 2.65，2.35，2.20 g/cm^3。虚部 *k* 表示光在介质中传播时的吸收程度，在可见光到短波红外范围随波长变化较大。精确获

最新录用

取矿物 k 值通常依赖于晶体透射实验，其对样品要求较高，测量成本较大，目前仅有少数矿物 k 值公布 [23]。Roush 等研究表明，通过反射光谱结合辐射传输模型求解 k 值与基于透射实验测量结果吻合较好 [29]，因此，本文分别采用 Hapke 模型和 SK99 模型计算各端元的 k 值。

针对 Hapke 模型，在已知端元反射率、观测几何、实部 n 及粒径等参数条件下，可依据公式（1）-（4）反解各端元 k 值；同样地，针对 SK99 模型，可通过公式（5）-（7）进行计算。获得端元光学常数后，分别代入对应的辐射传输模型构建目标函数，即最小化模型预测混合光谱与实测光谱之间的残差，并采用内点法（interior-point method）实现优化求解 [30]，从而反演混合光谱中各端元的丰度与粒径。在优化过程中，为确保结果的物理合理性，丰度范围设置为 0~1，粒径范围设置为 0~125 μm。考虑到 Hapke 与 SK99 模型在物理假设上的差异，为保持自洽性，仅使用 Hapke 模型求得的 k 值代入 Hapke 模型进行光谱解混，SK99 模型亦同理 [23]。最后分别从丰度、粒径和光谱重构残差三个方面对反演精度进行评价，其中光谱重构残差指重构光谱（各端元光谱按反演丰度加权求和）与实测混合光谱之间的均方根误差（RMSE）：

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{1}{\mathrm{L}}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{L}}(\mathrm{R_i}-\overline{\mathrm{R_i}})^2} \tag{8}$$

式中 R 和 $\overline{\mathrm{R}}$ 分别为实测与重构反射光谱，L 为波段数。

2. 实验结果

2.1 折射系数虚部

基于辐射传输模型解算的端元矿物折射系数虚部如图 2 所示，高岭石 k 值在 10^{-7}~10^{-3} 之间，蒙脱石和蛋白石 k 值在 10^{-5}~10^{-3} 之间。k 值越高代表在该波长吸收越强，则反射率越低。针对每种矿物，k 值在~1.40，~1.90 和~2.20 μm 的局部最大值所在波长与该矿物的诊断性吸收位置对应。此外，Hapke 模型（红色虚线）和 SK99 模型（蓝色实线）反演的 k 值随波长的变化趋势一致，但是前者获得的 k 值总是低于后者，该现象与前人研究结果一致 [23,31]，可能与两种模型在颗粒散射特性处理方式等方面不同有关。

最新录用

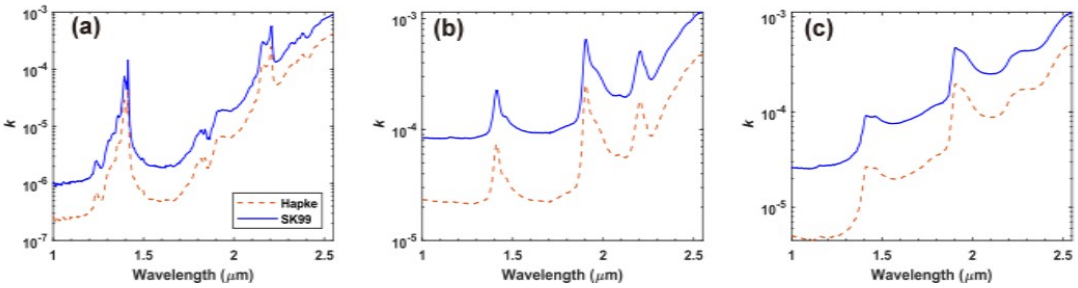


图 2 矿物折射系数虚部。红色虚线和蓝色实线分别代表 Hapke 模型和 SK99 模型反演结果。（a）高岭石；（b）蒙脱石；（c）蛋白石。

Figure 2. Imaginary part of the refractive index of minerals. The red solid lines and blue dashed lines represent the inversion results obtained using the Hapke model and the SK99 model, respectively. (a) Kaolinite; (b) Montmorillonite; (c) Opal.

2.2 解混结果

2.2.1 丰度反演结果

由于每组混合实验仅包含两种端元矿物，且其丰度之和为 1，故结果中仅展示高岭石的反演丰度。图 3 对比了两种模型的高岭石丰度反演结果，横轴为实测值，纵轴为模型解混获取的含量。图中黑色实线为 1:1 线，与之平行的虚线和点线分别表示 10%和 20%误差范围。在高岭石-蒙脱石混合实验中（图 3a），当高岭石含量低于 15%时，两种模型均明显高估其含量，误差超过 20%，且 Hapke 模型偏差更大；此外，Hapke 模型反演结果普遍高于真值，绝大多数位于 10%误差线之上；当高岭石含量在 15%~50%之间，SK99 模型反演误差在 10%以内。除 C1JB795 和 C1JB801 两条混合光谱外，SK99 模型整体误差约 10%。在高岭石-蛋白石混合实验中（图 3b），Hapke 模型解混误差整体在 10%~20%之间；而 SK99 模型在高岭石含量低于 50%时，解混误差不超过 10%。整体而言，当高岭石丰度低于 75%时，SK99 模型在两组实验的反演精度均优于 Hapke 模型。

最新录用

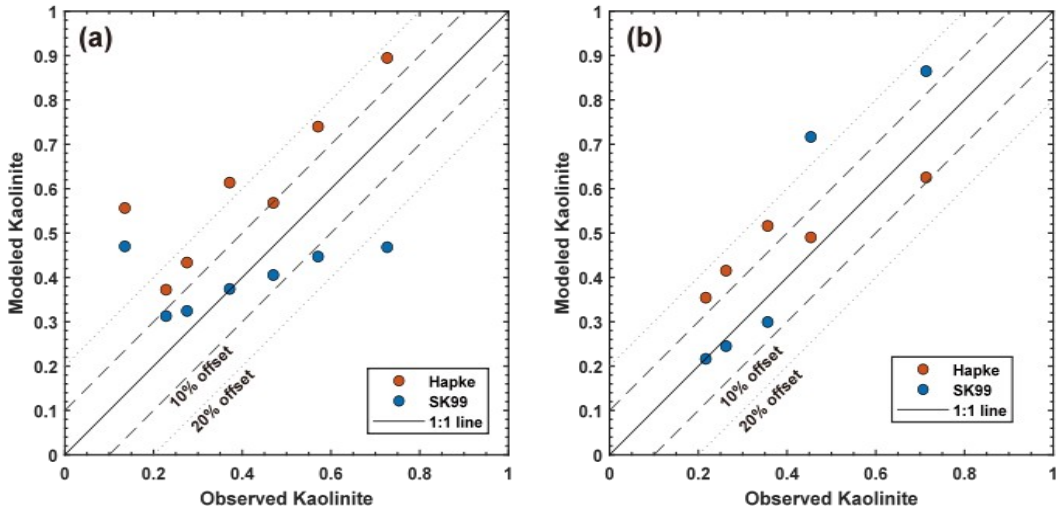


图 3 实测与光谱解混获得的高岭石含量。红色和蓝色点分别为 Hapke 模型和 SK99 模型反演结果，黑色实线和虚线分别为 1:1 线和 10%误差线，灰色点线为 20%误差线。（a）高岭石-蒙脱石混合实验；（b）高岭石-蛋白石混合实验。

Fig.3 Observed versus modeled kaolinite abundances. Red and blue dots represent results from the Hapke and SK99 models, respectively. The black solid and dashed lines indicate the 1:1 line and 10% offset line, while the gray dotted line denotes the 20% offset line. (a) Kaolinite-montmorillonite mixtures; (b) Kaolinite-opal mixtures.

2.2.2 粒径反演结果

图 4 展示了每条混合光谱反演得到的最优粒径分布，横轴为光谱编号，纵轴为粒径，浅黄色区域表示端元实际粒径范围。圆形和方形分别代表高岭石和蒙脱石，空心和实心符号分别对应 Hapke 模型与 SK99 模型的反演结果。在高岭石-蒙脱石混合实验中（图 4a），除了 C1JB795（高岭石含量为 15%），两种模型反演的高岭石粒径均大于蒙脱石。其中，SK99 模型反演的高岭石粒径通常达到设置粒径的最大值（125 μm），显著高于 Hapke 模型的反演结果；而对于蒙脱石，SK99 模型反演的粒径略低于 Hapke 模型。在高岭石-蛋白石混合实验中（图 4b），Hapke 模型反演的高岭石粒径始终高于蛋白石。在 SK99 模型中，当高岭石含量不超过 40%时，反演结果显示其粒径大于蛋白石，超过该比例后则相反。实验结果表明，两种模型对折射系数较低的高岭石倾向于反演出更大的粒径。特别是 SK99 模型在多个样本中直接达到输入粒径范围的上限。需要指出的是，由于缺乏矿物粉末的显微成像数据，无法测量各端元矿物真实的粒

最新录用

径频率分布，因此本文反演的粒径结果仅供参考，后续研究仍需结合实测粒径数据进行验证。

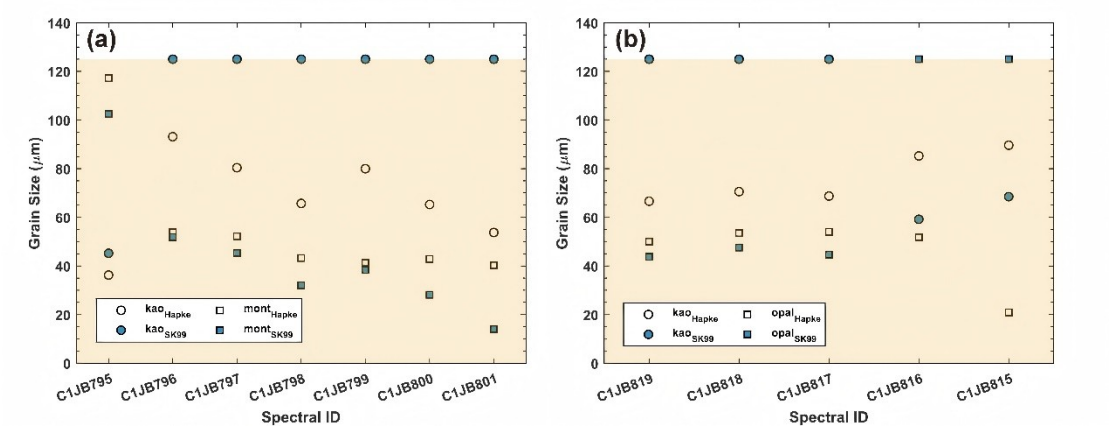


图 4 端元矿物粒径反演结果。圆形和方形分别代表高岭石和蒙脱石，空心和实心符号分别表示 Hapke 和 SK99 模型，黄色矩形表示使用的矿物粒径范围（<125 μm）。（a）高岭石-蒙脱石混合实验；（b）高岭石-蛋白石混合实验。

Figure 4. Derived grain sizes of endmember minerals. Circles and squares represent kaolinite and montmorillonite, respectively, while open and filled symbols correspond to results from the Hapke and SK99 models. The yellow rectangle indicates the particle size range used in the experiments (<125 μm). (a) Kaolinite–montmorillonite mixtures; (b) Kaolinite–opal mixtures.

2.2.3 光谱重构结果

本文比较了 Hapke 模型与 SK99 模型在两组混合实验中的光谱重构效果。如图 5 所示，灰色实线代表 RELAB 实测光谱，红色虚线和蓝色实线分别对应两种模型重构的光谱。总体来看，两种模型的重构光谱在主要吸收带位置与形状上均与实测光谱较为吻合，表明模型能够有效表征矿物混合特征。然而，基于 SK99 模型的重构光谱整体上更接近实测结果，其均方根误差普遍低于 Hapke 模型，进一步表明 SK99 模型在高岭石丰度反演中优于 Hapke 模型。

最新录用

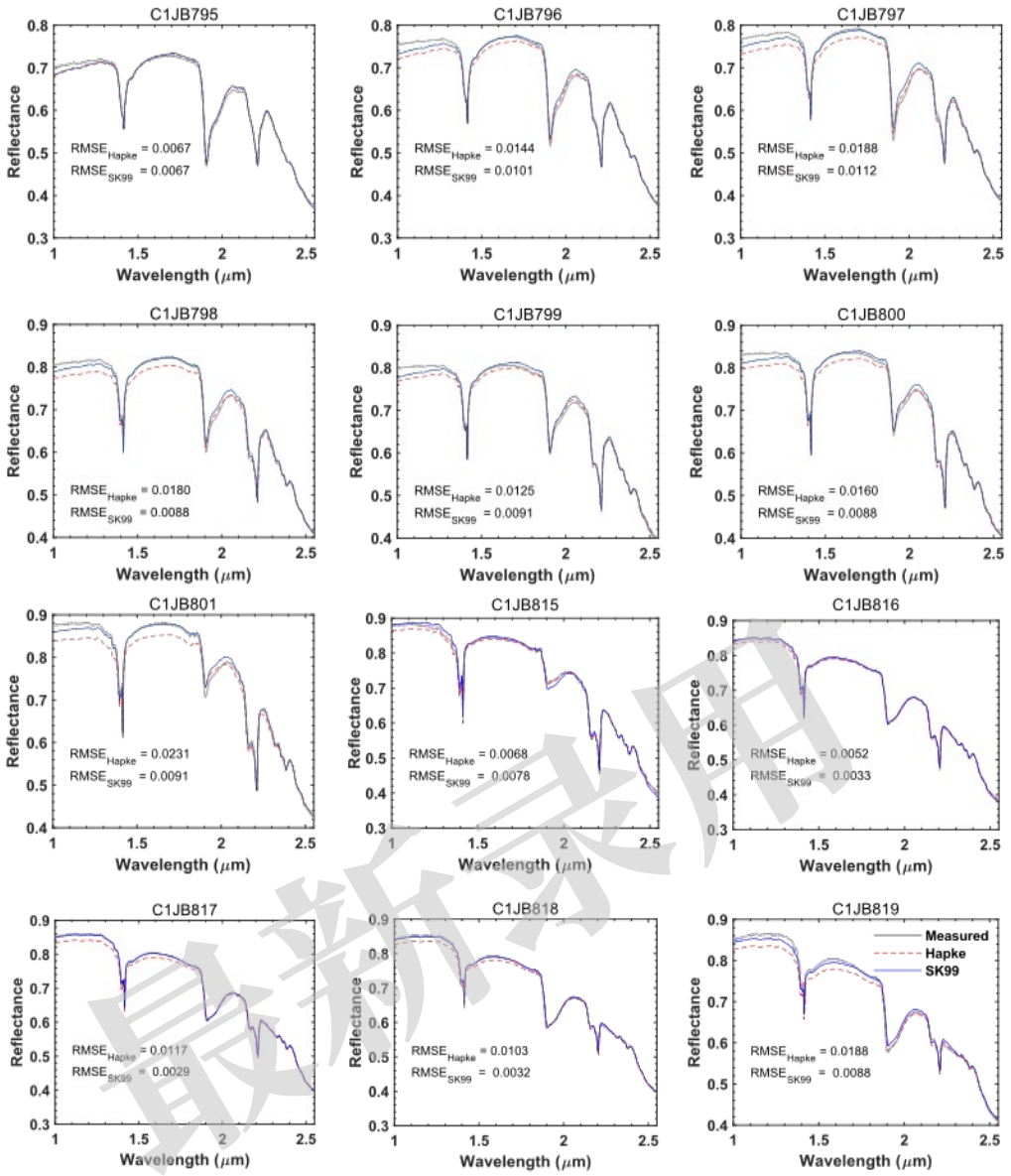


图 5 实测与重构的混合光谱曲线。子图标题为 RELAB 光谱编号，实测光谱用灰色实线表示，Hapke 模型和 SK99 模型的重构光谱分别用红色虚线和蓝色实线表示，重构残差在左下角显示。

Fig.5 Measured and modeled mixture spectra. Each subplot title corresponds to the RELAB spectral ID. The measured spectra are shown as gray solid lines, while the reconstructed spectra from the Hapke and SK99 models are plotted as red dashed and blue solid lines, respectively. The RMSE for each model is shown in the lower left corner of each subplot.

3. 讨论

本研究采用 Hapke 与 SK99 两种辐射传输模型，分别对两组实验室混合光

谱进行矿物丰度与粒径的联合反演。尽管实验设置中端元种类与混合比例均已知，部分样本的丰度反演误差仍超过 20%，本文将从光谱反演误差来源、遥感适用性两个方面展开讨论。

（1）光谱反演误差来源的可能包括：①由于矿物颗粒间往往存在团聚、分层或局部包裹现象，导致光在颗粒间传播路径非均匀分布，实际混合状态与模型假设不完全相符；②模型简化带来的系统性误差。前人指出不同矿物的散射相函数在可见到短波红外波段具有波长依赖性，且受颗粒形态、粗糙度影响[32,33]。而在模型中使用经验参数 [22]难以处理具有复杂吸收特征的矿物；③尽管基于反射光谱反解的 k 值在弱吸收波段与透射实验测量结果高度吻合，但在强吸收波段仍存在差异 [29]，缺乏高精度的端元光学常数也会影响解混精度[34]；④自然样品粒径频率分布可能呈现单峰或多峰，粒径变化会改变光程，进而影响反射率和吸收深度。前人研究指出“大粒径-低丰度”与“小粒径-高丰度”的组合可产生几乎相同的光谱，导致解的不唯一 [34]。已有光谱解混研究通常为简化模型不考虑粒径变化而只聚焦于丰度反演。本研究引入粒径虽可提高模型拟合精度，但由于缺乏粒径分析数据支持，反演的粒径结果只能作为定性趋势参考，对反演结果的物理解释仍需谨慎。

（2）遥感适用性：本研究基于实验室两端元混合体系的解混验证，为复杂体系的光谱解混提供了参考，未来可从以下方向开展深入研究：①拓展到多端元混合体系。实际火星遥感场景中，观测光谱往往由多种矿物、多粒径混合而成，需进一步评估两种模型在更复杂混合体系中的适用性和稳定性；②端元未知条件下的解混精度。本文基于已知端元光谱开展解混实验，但实际应用中缺乏先验知识，在端元未知条件下如何从高光谱遥感影像中准确提取端元并开展光谱解混分析，构建高精度的反演模型仍需开展大量研究。

4. 结论与展望

本文基于 Hapke 模型与 SK99 模型对高岭石-蒙脱石和高岭石-蛋白石两组实验室混合光谱开展了定量反演研究，系统评估了两种模型在矿物丰度与粒径反演中的性能。主要结论如下：

（1）丰度反演：在两组共 12 条混合光谱中，SK99 模型在 7 个样品中丰度反演误差低于 10%，2 个样品在 10%~20%之间；相比之下，Hapke 模型仅有 3

个样品误差在 10%以内，7 个在 10%~20%之间。结果表明，SK99 模型在大多数混合物中取得了更精确的丰度反演结果；

（2）粒径反演：两种模型均倾向于为高反射率端元如高岭石得出更大的粒径。但由于缺乏矿物粒径实测数据，本研究中粒径反演结果仅作定性趋势参考；

（3）光谱重构：SK99 模型在整个波段范围内的重构光谱与实测光谱更为一致，且重构残差普遍小于 Hapke 模型，进一步证明其在光谱解混的优势。

本研究为后续开展高光谱遥感图像中铝粘土矿物定量反演提供了实验依据与模型参考，未来将从以下方向进一步深入研究：如引入实测粒径数据对反演结果进行约束与验证；拓展模型至更复杂的多端元、多粒径混合体系；结合火星遥感图像与端元提取算法，实现面向真实场景的矿物解混与丰度反演应用。

5. 参考文献

[1] KITE E S. Geologic constraints on early mars climate[J]. *Space Science Reviews*, 2019, **215**(1): 10. DOI: 10.1007/s11214-018-0575-5

[2] EHLMANN B L, MUSTARD J F, FASSETT C I, *et al*. Clay minerals in delta deposits and organic preservation potential on Mars[J]. *Nature Geoscience*, 2008, **1**(6): 355-358. DOI: 10.1038/ngeo207

[3] EHLMANN B L, EDWARDS C S. Mineralogy of the Martian surface[J]. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 2014, **42**: 291-315. DOI: 10.1146/annurev-earth-060313-055024

[4] CARTER J, POULET F, BIBRING J P, *et al*. Hydrous minerals on Mars as seen by the CRISM and OMEGA imaging spectrometers: updated global view[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Planets*, 2013, **118**(4): 831-858. DOI: 10.1029/2012JE004145

[5] CARTER J, RIU L, POULET F, *et al*. A Mars orbital catalog of aqueous alteration signatures (MOCAAS)[J]. *Icarus*, 2023, **389**: 115164. DOI: 10.1016/j.icarus.2022.115164

[6] GAUDIN A, DEHOUCK E, MANGOLD N. Evidence for weathering on early Mars from a comparison with terrestrial weathering profiles[J]. *Icarus*, 2011, **216**(1): 257-268. DOI: 10.1016/j.icarus.2011.09.004

[7] CARTER J, LOIZEAU D, MANGOLD N, *et al*. Widespread surface weathering on early Mars: a case for a warmer and wetter climate[J]. *Icarus*, 2015, **248**: 373-382. DOI: 10.1016/j.icarus.2014.11.011

[8] YE B L, MICHALSKI J R. Chemical weathering over hundreds of millions of years of greenhouse conditions on Mars[J]. *Communications Earth & Environment*, 2022, **3**(1): 266. DOI: 10.1038/s43247-022-00602-7

[9] FANG Qian, HONG Hanlie, ZHAO Lulu, *et al*. Climatic implication of authigenic minerals formed during pedogenic weathering processes[J]. *Earth Science*, 2018, **43**(3): 753-769. DOI: 10.3799/dqkx.2018.905 (方谦, 洪汉烈, 赵璐璐, 等. 风化成土过程中自生矿物的气候指示意义[J]. 地球科学, 2018, **43**(3): 753-769. DOI: 10.3799/dqkx.2018.905)

[10] SHELDON N D, TABOR N J. Quantitative paleoenvironmental and paleoclimatic reconstruction using paleosols[J]. *Earth-Science Reviews*, 2009, **95**(1/2): 1-52. DOI: 10.1016/j.earscirev.2009.03.004

[11] BISHOP J L, LOIZEAU D, MCKEOWN N K, *et al*. What the ancient phyllosilicates at Mawrth Vallis can tell us about possible habitability on early Mars[J]. *Planetary and Space Science*, 2013, **86**: 130-149. DOI:

最新录用

10.1016/j.pss.2013.05.006

[12] MCKEOWN N K, BISHOP J L, CUADROS J, *et al*. Interpretation of reflectance spectra of clay mineral-silica mixtures: implications for Martian clay mineralogy at Mawrth Vallis[J]. *Clays and Clay Minerals*, 2011, **59**(4): 400-415. DOI: 10.1346/CCMN.2011.0590404

[13] EHLMANN B L, BERGER G, MANGOLD N, *et al*. Geochemical consequences of widespread clay mineral formation in mars' ancient crust[J]. *Space Science Reviews*, 2013, **174**(1): 329-364. DOI: 10.1007/s11214-012-9930-0

[14] PAN L, CARTER J, QUANTIN-NATAF C, *et al*. Voluminous silica precipitated from Martian waters during late-stage aqueous alteration[J]. *The Planetary Science Journal*, 2021, **2**(2): 65. DOI: 10.3847/PSJ/abe541

[15] TONG Qingxi, ZHANG Bing, ZHENG Lanfen. Hyperspectral Remote Sensing[M]. Beijing: Higher Education Press, 2006 (童庆禧, 张兵, 郑兰芬. 高光谱遥感——原理、技术与应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006)

[16] BIOUCAS-DIAS J M, PLAZA A, DOBIGEON N, *et al*. Hyperspectral unmixing overview: geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 2012, **5**(2): 354-379. DOI: 10.1109/JSTARS.2012.2194696

[17] POULET F, CARTER J, BISHOP J L, *et al*. Mineral abundances at the final four curiosity study sites and implications for their formation[J]. *Icarus*, 2014, **231**: 65-76. DOI: 10.1016/j.icarus.2013.11.023

[18] LIU Y, STACHURSKI F, LIU Z H, *et al*. Quantitative assessment of water content and mineral abundances at Gale crater on Mars with orbital observations[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 2020, **637**: A79. DOI: 10.1051/0004-6361/201937045

[19] ZASTROW A M, GLOTCH T D. Distinct carbonate lithologies in Jezero crater, mars[J]. *Geophysical Research Letters*, 2021, **48**(9): e2020GL092365

[20] HAPKE B. Bidirectional reflectance spectroscopy: 1. Theory[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Solid Earth*, 1981, **86**(B4): 3039-3054. DOI: 10.1029/JB086iB04p03039

[21] SHKURATOV Y, STARUKHINA L, HOFFMANN H, *et al*. A model of spectral albedo of particulate surfaces: implications for optical properties of the moon[J]. *Icarus*, 1999, **137**(2): 235-246. DOI: 10.1006/icar.1998.6035

[22] MUSTARD J F, PIETERS C M. Photometric phase functions of common geologic minerals and applications to quantitative analysis of mineral mixture reflectance spectra[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Solid Earth*, 1989, **94**(B10): 13619-13634. DOI: 10.1029/JB094iB10p13619

[23] LI S, MILLIKEN R E. Estimating the modal mineralogy of eucrite and diogenite meteorites using visible–near infrared reflectance spectroscopy[J]. *Meteoritics & Planetary Science*, 2015, **50**(11): 1821-1850. DOI: 10.1111/maps.12513

[24] LAPOTRE M G A, EHLMANN B L, MINSON S E. A probabilistic approach to remote compositional analysis of planetary surfaces[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Planets*, 2017, **122**(5): 983-1009. DOI: 10.1002/2016JE005248

[25] PIETERS C M. Strength of mineral absorption features in the transmitted component of near-infrared reflected light: first results from RELAB[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Solid Earth*, 1983, **88**(B11): 9534-9544. DOI: 10.1029/JB088iB11p09534

[26] MUSTARD J F, PIETERS C M. Quantitative abundance estimates from bidirectional reflectance measurements[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Solid Earth*, 1987, **92**(B4): E617-E626. DOI: 10.1029/JB092iB04p0E617

[27] POULET F. Comparison between the shkuratov and hapke scattering theories for solid planetary surfaces: application to the surface composition of two centaurs[J]. *Icarus*, 2002, **160**(2): 313-324. DOI:

最新录用

10.1006/icar.2002.6970

[28] POULET F, ERARD S. Nonlinear spectral mixing: quantitative analysis of laboratory mineral mixtures[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Planets*, 2004, **109**(E2): E02009. DOI: 10.1029/2003JE002179

[29] ROUSH T L, ESPOSITO F, ROSSMAN G R, *et al*. Estimated optical constants of gypsum in the regions of weak absorptions: Application of scattering theories and comparisons to independent measurements[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Planets*, 2007, **112**(E10): E10003. DOI: 10.1029/2007JE002920

[30] NEMIROVSKI A S, TODD M J. Interior-point methods for optimization[J]. *Acta Numerica*, 2008, **17**: 191-234. DOI: 10.1017/S0962492906370018

[31] ROBERTSON K M, MILLIKEN R E, LI S. Estimating mineral abundances of clay and gypsum mixtures using radiative transfer models applied to visible-near infrared reflectance spectra[J]. *Icarus*, 2016, **277**: 171-186. DOI: 10.1016/j.icarus.2016.04.034

[32] PILORGET C, FERNANDO J, EHLMANN B L, *et al*. Wavelength dependence of scattering properties in the VIS–NIR and links with grain-scale physical and compositional properties[J]. *Icarus*, 2016, **267**: 296-314. DOI: 10.1016/j.icarus.2015.12.029

[33] YANG Y Z, LI S, MILLIKEN R E, *et al*. Phase functions of typical lunar surface minerals derived for the hapke model and implications for visible to near-infrared spectral unmixing[J]. *Journal of Geophysical Research*: *Planets*, 2019, **124**(1): 31-60. DOI: 10.1029/2018JE005713

[34] PILORGET C, FERNANDO J. Quantifying the minerals abundances on planetary surfaces using VIS–NIR spectroscopy, what uncertainties should we expect? General results and application to the case of phyllosilicates and carbonates on Mars[J]. *Icarus*, 2021, **365**: 114498. DOI: 10.1016/j.icarus.2021.114498

第一作者：吴兴，男，1993 年 11 月出生于陕西省西安市，现为中国科学院国家空间科学中心副研究员，硕士生导师，主要研究方向为火星高光谱遥感。E-mail: wuxing@nssc.ac.cn

通讯作者：刘洋，男，1984 年 1 月出生于山东省泰安市，现为中国科学院国家空间科学中心研究员，博士生导师，主要从事行星科学研究，研究领域包括月球火星物质成分反演、火星宜居环境演化等。E-mail: yangliu@nssc.ac.cn

最新录用