

WU Xing, ZHOU Xiang, LI Keyi, LIU Yang. Principles, Current Status and Prospects of Hydrated Minerals Detection on Mars with Hyperspectral Remote Sensing (in Chinese). *Chinese Journal of Space Science*, 2025, 45(6): 1482–1491. CSTR:32142.14.cjss.2024-0173. DOI:10.11728/cjss2025.06.2024-0173

火星含水矿物高光谱遥感探测算法的原理、现状及展望*

吴 兴¹ 周 翔^{1,2} 李柯仪^{1,2} 刘 洋^{1,2,3}

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 北京 100049)

3(深空探测全国重点实验室 合肥 230026)

摘 要 火星是太阳系中与地球最为相似的类地行星, 因其潜在的宜居性成为深空探测的热点星球. 含水矿物是火星水岩相互作用的产物, 其对研究火星早期水环境、地质演化及宜居性具有重要意义. 高光谱遥感技术通过超高光谱分辨率, 为含水矿物的识别与丰度反演提供了重要工具. 然而火星含水矿物分布零散且丰度极低, 加之光谱混合与噪声影响, 目前探测主要依赖光谱参数法与目视解译, 难以满足海量高光谱数据的处理需求. 近年来, 机器学习在地球高光谱遥感技术中的迅猛发展为火星矿物探测提供了新思路, 但其在火星上的应用研究仍处于初步探索阶段. 本文从定性识别和定量反演两方面系统梳理了火星含水矿物高光谱探测的研究进展, 评估了各种方法的优缺点与适用性, 并结合当前瓶颈提出未来发展方向, 为火星含水矿物探测的发展提供参考.

关键词 火星, 含水矿物, 高光谱遥感, 矿物填图

中图分类号 P141.2

Principles, Current Status and Prospects of Hydrated Minerals Detection on Mars with Hyperspectral Remote Sensing

WU Xing¹ ZHOU Xiang^{1,2} LI Keyi^{1,2} LIU Yang^{1,2,3}

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

2(University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049)

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

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

2024-11-26 收到原稿, 2025-01-15 收到修定稿

©The Author(s) 2025. This is an open access article under the CC-BY 4.0 License
(<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Abstract Mars is the most Earth-like terrestrial planet in the solar system and a primary focus of deep space exploration. Hydrated minerals, formed through water-rock interactions, are crucial for understanding the planet's ancient aqueous environments, geological changes, and capacity to support life. Their study offers vital insights into Mars' climatic evolution and surface processes. Hyperspectral remote sensing, which collects detailed spectral data across hundreds of continuous bands, serves as a powerful tool for detecting and analyzing these minerals. Despite its advantages, hyperspectral detection on Mars faces significant challenges. The sparse distribution and low abundance of hydrated minerals, combined with spectral mixing and noise, diminish the clarity of diagnostic spectral features. Consequently, traditional methods primarily rely on spectral parameter mapping and visual interpretation, which are labor-intensive and struggle to process the vast hyperspectral datasets effectively. Recent advances in machine learning for terrestrial hyperspectral remote sensing offer innovative approaches to Martian mineral mapping, yet their application remains at an early stage. This review first introduces Mars orbital spectral datasets such as the Observatoire pour la Minéralogie, l'Eau, les Glaces et l'Activité (OMEGA) and the Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars (CRISM), and diagnostic spectral features of common hydrated minerals. The current state of Martian hydrated mineral detection is then explored, covering both qualitative identification and quantitative abundance retrieval methods. It evaluates the advantages and limitations of existing approaches and highlights key challenges, such as spectral variability and validation constraints. To advance this field, future work should focus on developing adaptable algorithms, integrating multi-source data, and establishing robust validation frameworks. These efforts will enhance the efficiency and reliability of mineral mapping, providing deeper insights into Mars' aqueous history and its implications for planetary habitability.

Key words Mars, Hydrated minerals, Hyperspectral remote sensing, Mineral mapping

0 引言

火星是太阳系中与地球最为相似的类地行星,因其丰富的水活动历史和潜在的宜居环境,一直是深空探测的重点目标^[1,2]. 与地球不同,火星缺乏持续的板块构造运动,较完整地保留了早期的地质记录,这为研究行星演化和生命起源提供了独特视角^[3]. 含水矿物是火星水岩相互作用的产物,通常指矿物晶体中含有吸附水、结晶水或结构水的矿物. 其对限定火星早期的水环境、温度压力、氧化还原条件,以及揭示火星不同圈层间的相互作用具有重要意义^[4-7]. 因此,研究火星含水矿物的类型、含量和时空分布特征是理解火星液态水活动和宜居环境的重要基础,对于探测地外生命也具有重要价值^[8].

高光谱遥感是获取火星表面大尺度物质成分最重要的手段. 随着成像光谱技术的发展,光谱仪能够在可见到红外谱段同时获取数百个连续波段的数据,超高的光谱分辨率极大促进了其对含水矿物的识别能力,为理解火星早期水环境和地质演化提供了关键线索^[9,10]. 然而最新研究表明火星含水矿物露头仅覆

盖全球约 0.9% 的面积^[8], Mustard 等^[11] 将从海量火星光谱数据中检测含水矿物形容为“大海捞针”. 目前绝大多数火星矿物填图仍依赖专家知识和目视解译,难以应对大规模高光谱数据的处理需求.

近年来,机器学习在地球高光谱遥感中的突破为火星矿物光谱分析带来了新思路^[12,13],并在火星矿物填图中展现出巨大的应用潜力,但相关研究仍处于初步探索阶段^[14,15]. 究其原因主要有以下几个方面:其一,火星含水矿物分布零散、含量较低,且多以弱信号小目标形式出现,混合光谱进一步降低了诊断性吸收特征的辨识度,增加了其识别和丰度反演难度^[16];其二,由于遥感数据与实验室光谱的观测条件不同、矿物结晶度和成分的差异等引起的光谱变异性对矿物自动识别的可靠性提出了严峻挑战;其三,机器学习算法的运行结果通常依赖超参数设置,而这些参数在火星环境中往往难以获取或难以优化,算法使用门槛较高^[15];其四,由于缺乏地面验证数据,算法精度难以评估,新的探测结果仍需要人工判读.

本文根据常用的火星轨道光谱数据,以含水矿物反射光谱机理为切入点,分别从定性识别和定量丰度

反演两个角度系统分析当前应用于火星含水矿物高光谱遥感探测算法的原理及其优缺点, 探讨了未来算法优化的潜在方向, 以期为火星含水矿物探测提供理论和技术支持.

1 火星轨道光谱数据

火星矿物遥感探测的新发现与光谱仪的发展是密不可分的. 国际上火星轨道器携带的矿物成分调查载荷主要有热辐射光谱仪 (Thermal Emission Spectrometer, TES)、热发射成像系统 (Thermal Emission Imaging System, THEMIS)、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). TES 工作波长范围为 $6\sim 50\ \mu\text{m}$, 空间分辨率为 $3\sim 6\ \text{km}$ ^[17]; THEMIS 波长范围为 $6.7\sim 14.8\ \mu\text{m}$, 空间分辨率提升至 $100\ \text{m}$ ^[18]; OMEGA 波长覆盖 $0.36\sim 5.1\ \mu\text{m}$, 空间分辨率为 $0.3\sim 4.8\ \text{km}$ ^[9]; CRISM 波长范围为 $0.4\sim 4.0\ \mu\text{m}$, 空间分辨率为 $18\sim 200\ \text{m}$ ^[5]. 中国天问一号搭载的火星矿物光谱仪 (Mars Mineralogy Spectrometer, MMS) 波长范围为 $0.45\sim 3.4\ \mu\text{m}$, 空间分辨率为 $0.13\sim 2.1\ \text{km}$ ^[19]. 图 1 给出了火星常用轨道光谱数据在光谱 (波段数) 与空间分辨率之间的制约关系. 光谱仪通常难以同时兼顾光谱分辨率、空间分辨率和幅宽, 例如 OMEGA 数据幅宽较大, 能够实现全球覆盖, 适合大尺度矿物填图, 但因空间分辨率较低, 混合像元效应明显, 削弱了含水矿物的吸收特征; CRISM 目标模式数据幅宽较窄, 仅覆盖全球约 2% 的范围^[20], 但其高空间分辨率有利于小尺度的矿物露头分析; CRISM 多光谱模式数据则在保持一定光谱特征识别能力的同时以较低的空间分辨率实现了全球约 86% 区域的覆盖^[20]. 不同分辨率的光谱观测共同为火星矿物学研究提供了宝贵的数据资源.

2 火星含水矿物反射光谱机理

在可见到近红外 (Visible and Near Infrared, VNIR) 范围, 矿物的特征吸收谱段主要由电子过程 (例如晶体场效应、电荷转移、导带与色心) 决定; 在短波红外 (Shortwave Infrared, SWIR) 谱段, 反射光

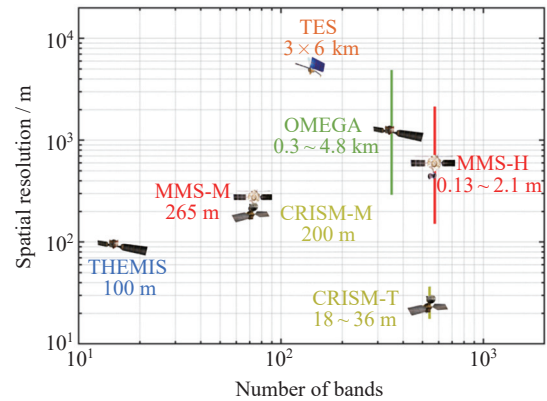


图 1 火星轨道光谱数据空间分辨率与波段数 (光谱分辨率) 的关系. CRISM-M 和 CRISM-T 分别代表多光谱模式和目标模式观测数据, MMS-M 和 MMS-H 分别代表多光谱模式和高光谱模式观测数据

Fig. 1 Relationship between spatial and spectral resolution of Mars orbital spectral data. CRISM-M and CRISM-T represent target mode and multispectral mode, respectively; whereas MMS-M and MMS-H denote multispectral mode and hyperspectral mode, respectively

谱主要由矿物中的分子振动过程控制^[21-23]. 由于火星含水矿物的识别主要利用短波红外谱段, 因此这里重点分析振动过程引起的诊断性吸收特征.

分子或晶格中的化学键可视为带有重物的弹簧, 这些键的振动频率主要取决于键的强度和构成原子的质量. 分子内的振动包括伸缩振动和弯曲振动, 且每个基频振动可以产生倍频和合频. 虽然倍频和合频振动的强度与基频相比较弱, 但在反射光谱中易于测量^[22]. 含水矿物通常在 $1.4\ \mu\text{m}$ 和 $1.9\ \mu\text{m}$ 附近具有吸收特征, 除此之外, 当羟基与不同金属键组合时会产生特定的吸收特征^[24]. 目前火星上含水矿物识别正是依靠诊断性吸收特征进行不同矿物的指认, 例如绿脱石 (铁蒙脱石) 的吸收位置在 $2.28\ \mu\text{m}$ 和 $2.39\ \mu\text{m}$ 处, 随着镁替换铁 (例如皂石) 吸收位置向长波方向移动; 铝层状硅酸盐蒙脱土的吸收位置在 $2.21\ \mu\text{m}$, 高岭石在 $2.16\ \mu\text{m}$ 和 $2.21\ \mu\text{m}$ 处具有不对称的双峰吸收特征; 单水硫酸盐吸收中心在 $1.6, 2.1, 2.4\ \mu\text{m}$ 处, 多水硫酸盐吸收位置在 $1.4, 1.9, 2.4\ \mu\text{m}$ 处; 碳酸盐吸收特征通常位于 $2.3\ \mu\text{m}$ 和 $2.5\ \mu\text{m}$ ^[24]. 为剔除基底信号的干扰, 通常使用连续统去除 (Continuum Removal, CR) 突出矿物细微的吸收特征^[25]. 图 2 给出了火星常

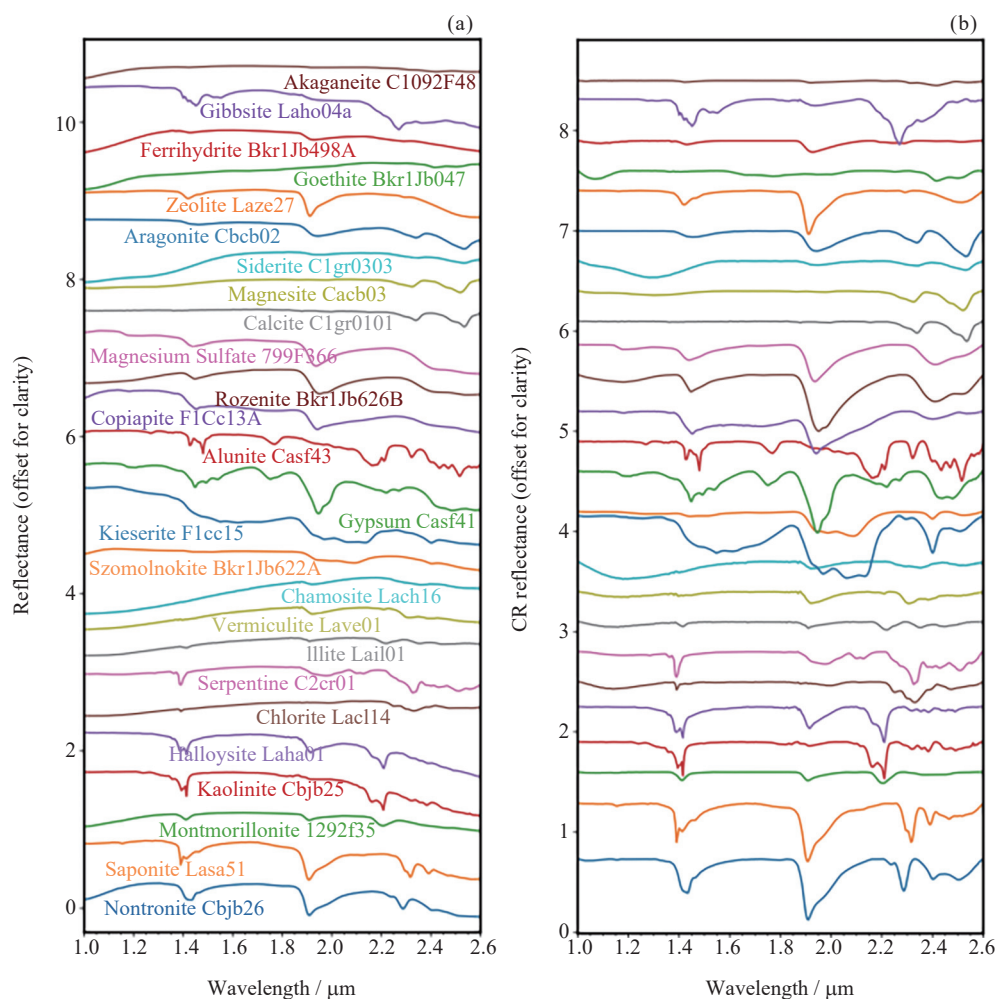


图 2 常见含水矿物的反射率光谱曲线 (a) 和去连续统光谱曲线 (b)

Fig. 2 Reflectance spectra (a) and Continuum-Removed (CR) spectra (b) of common hydrated minerals

见含水矿物的反射光谱和去连续统后光谱曲线, 所有光谱均选自美国布朗大学 RELAB (Reflectance Experiment Laboratory) 光谱库。

3 火星含水矿物识别

3.1 光谱参数

光谱参数可以刻画矿物的吸收特征, 常用的参数包括波段中心和波段深度等^[21]。本文计算了常见含水矿物的光谱参数, 为了直观显示吸收特征随波长的变化, 图 3 中每个矩形代表一个吸收带, 其中绿色垂线表示吸收中心, 矩形颜色表示吸收深度, 矩形宽度代表吸收深度最大值一半对应的宽度。结合火星轨道高光谱数据的波段设置特点, 已有研究基于波段运算设计了一系列光谱参数^[24,26]。通过不同光谱参数假彩色

合成和拉伸处理, 可直观显示高光谱影像中不同矿物的空间分布特征。

为进一步指认具体的含水矿物类别, 还需要将提取的感兴趣区像元平均光谱除以同一列没有明显吸收的中性光谱, 然后与光谱库中端元矿物光谱进行比较^[27]。通过比值光谱处理可有效抑制大气校正残差, 同时突出含水矿物吸收特征。由于光谱参数方法原理简单, 易于操作, 能够快速区分不同类别的含水矿物, 因此光谱参数及其组合是目前火星含水矿物探测最主要的手段, 已被 CRISM 团队集成到 CAT (CRISM Analysis Tool) 插件中实现了标准化处理。然而同一光谱参数可能对应多种矿物, 例如 D2300 常用于指示铁/镁层状硅酸盐, 但碳酸盐在 2.3 μm 附近也存在吸收特征, D2300 也可能指示碳酸盐。因此, 光谱参数方法依赖专家知识和目视解译。此外, 由于轨道光谱对

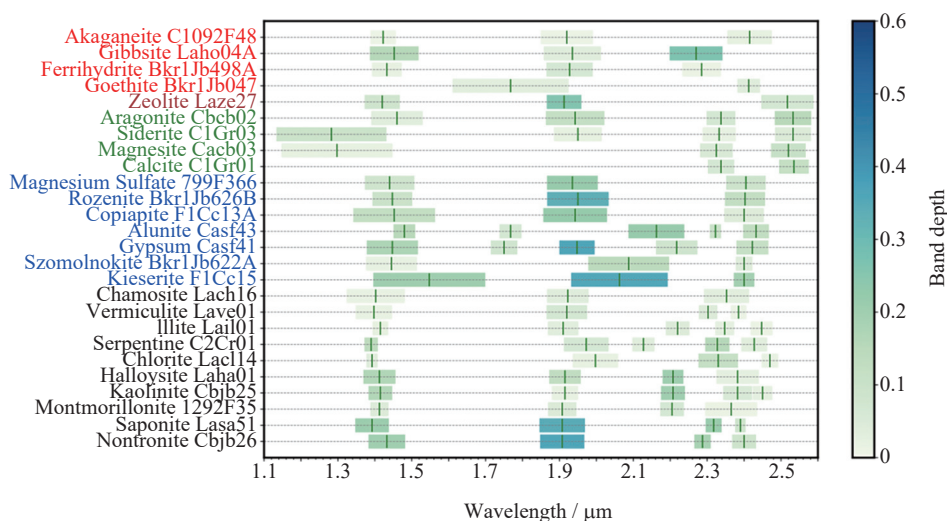


图3 常见含水矿物吸收特征随波长的变化. 矩形代表吸收特征, 绿色垂线表示吸收中心, 矩形颜色表示吸收深度, 矩形宽度代表吸收深度最大值一半对应的宽度. 黑色、蓝色、绿色、棕色和红色字体分别表示层状硅酸盐、硫酸盐、碳酸盐、其他水合硅酸盐和氢氧化物

Fig. 3 Variations of absorption features for hydrated minerals with wavelength. Rectangles represent the absorption features, with the green vertical lines indicating the band center, the color of the rectangles representing the band depth, and the width representing the full width at half maximum. The black, blue, green, brown, and red fonts represent phyllosilicates, sulfates, carbonates, other hydrated silicates, and hydroxides, respectively

比度低、噪声大, 图像中含水矿物光谱吸收特征较弱, 获得理想的比值光谱需要大量试错, 耗时耗力. Pan等^[28]提出光谱去噪算法, 并且优化了比值光谱处理流程, 在Gale撞击坑识别到大量水合硅酸盐^[29].

3.2 曲线拟合

3.2.1 多项式拟合

由于光谱采样间隔较大和光谱噪声的影响, 反射光谱曲线的最小值通常无法准确代表真实的吸收中心. 为精确刻画火星含水矿物吸收特征, Van Ruitenbeek等^[30]使用多项式拟合特定波长范围内的吸收谱段. 首先对高光谱影像2.1~2.4 μm波段范围进行连续统处理, 突出光谱吸收特征; 然后采用二次多项式拟合光谱曲线, 通过插值确定最低反射率位置; 最后将曲线拟合获取的吸收中心和吸收深度信息映射到假彩色图像中, 其中色调代表吸收中心波长, 亮度代表吸收深度. 尽管该方法可直观显示矿物类型和含量的空间变化, 但难以直接确定含水矿物的具体类别. 此外, 该方法仅适用于简单吸收特征, 难以拟合复杂的吸收带.

3.2.2 修正高斯模型

修正高斯模型 (Modified Gaussian Model, MGM)

是研究行星表面由电子跃迁过程引起吸收的光谱分析模型^[31], 其原理是使用多个高斯函数来分解一个重叠的吸收特征, 每个高斯曲线代表一个具体的吸收过程. 采用非线性最小二乘拟合方法来优化每个高斯曲线的参数, 通过调整每个高斯函数的中心波长、宽度和强度, 使得拟合后的曲线尽可能接近实测光谱, 从而获得最佳的参数值. 除高斯函数之外, Brown^[32]提出针对不同形状的吸收特征, 还可选择 Lorentzian 或 Voigt 函数进行曲线拟合. MGM的优势在于无需先验的矿物混合信息, 依靠分解获得的吸收强度可评估辉石和橄榄石的相对含量. 但其分析结果易受模型参数初始化影响, 为此 Clénet等^[33]提出了自适应高斯函数参数初始化策略; 此外, Parente等^[34]改进了非线性曲线拟合流程, 将MGM的适用范围从铁镁质矿物扩展到含水矿物^[35].

3.3 因子分析与目标转换

因子分析与目标转换 (Factor Analysis and Target Transformation, FATT) 方法最早用于火星热红外数据的端元光谱分析^[36], 近年来被应用于 CRISM 数据中特定含水矿物的探测^[37]. 具体而言, 通过计算原始光谱数据协方差矩阵的特征值和特征向量, 选择

前 10 个特征向量来线性拟合光谱库中待测端元光谱, 根据拟合残差判断图像中是否存在目标矿物^[36]. 然而 FATT 仅能判定目标矿物的存在与否, 无法提供其在图像中的具体分布. 此外, 在拟合因子数量的选择和拟合效果的评估上过于依赖主观判断. 为解决上述问题, Lin 等^[38] 提出基于动态窗口的 FATT 算法, 引入多组不同尺寸的滑动窗口约束目标矿物的空间分布, 同时使用端元数量估计算法自动确定特征向量个数, 基于该方法在 Jezero 撞击坑发现水合硅酸盐^[39]. 尽管如此, FATT 仍可能产生大量假阳性和假阴性, 因此最终的填图结果仍需结合比值光谱验证, 以提高填图精度和可靠性^[40].

3.4 高光谱分类算法

高光谱分类依靠地物的光谱和空间特性, 根据某种分类准则 (分类器) 为每个像元赋予类别属性^[13,41], 目前在对地遥感中已得到广泛应用, 但其在火星高光谱领域的应用仍处于起步阶段. 光谱匹配是最直接的矿物分类方法, 其核心是通过计算观测光谱与标准光谱的相似性来判断矿物类别, 常用的相似性度量方法有光谱角、光谱信息散度、马氏距离等^[21]. 火星的轨道光谱对比度较低、吸收特征较弱, 加之光谱噪声干扰, 这些因素导致传统基于光谱特征或光谱形状匹配的方法失效.

最近机器学习方法被逐渐引入火星矿物光谱分类领域, 通过从目标区域收集标签数据进行训练, 初步显示了良好的分类效果^[15]. Plebani 等^[42] 人工标注了 Nili Fossae 和 Mawrth Vallis 地区已探明的典型矿物光谱作为训练集, 使用层次贝叶斯模型进行火星矿物填图; Kumari 等^[43] 在 MICA (Minerals Identified through CRISM Analysis) 光谱库基础上使用多种数据增强技术扩充训练样本, 提升了模型分类精度. 由于缺乏地面真值, 火星真实标注数据仍然十分匮乏, 极大限制了监督分类算法的应用. 非监督分类方法则无需标注数据, 如聚类算法基于光谱数据自身模式进行自动分类^[44,45]. 近年来 Saranathan 等^[46] 将对抗神经网络算法引入火星光谱分析, 通过提取高光谱影像高级特征提升矿物制图精度, 该算法在弱光谱特征分类和噪声抑制方面表现出显著优势. 然而火星含水矿物分布零散且含量较低, 其在图像中占比通常很低, 这使得以整体分类精度为优化目标的分类算法容易忽视小样本类别, 导致错分或漏分^[47].

3.5 目标探测

高光谱目标探测本质上是一种二分类问题, 其核心思想是利用感兴趣目标和背景地物在光谱上的细微差异, 将遥感影像中的像元标记为目标或者背景. 传统目标探测算法依靠信号检测理论将像元光谱重投影到新的空间, 然后通过阈值分割将目标从背景中分离出来^[47]. Farrand 等^[48] 使用约束能量最小化算法对勇气号火星车巡视路径的石块光谱进行分析. 传统方法通常需要数据符合特定的统计模式才能取得较好的探测结果, 而基于机器学习的算法展现出更优的探测性能和广泛适用性. Wu 等^[49] 提出多任务学习的稀疏和低秩表示的目标探测算法, 对背景和目标分别施加不同的正则约束项, 然后将探测模型进一步纳入多任务学习框架以降低光谱冗余. 该算法在实验室获取的模拟火壤与含水矿物混合成像光谱数据中成功探测到低丰度 (体积分数 > 5%) 的含水矿物^[50]. 此外, Wu 等^[51] 提出结合 Hapke 模型和自适应稀疏表示的蛇纹石探测算法, 在实验室混合光谱数据和火星 CRISM 数据验证了算法的有效性. 目标探测算法的优势在于能够实现含水矿物精细类别制图, 且无须提前了解复杂的背景信息, 尤其适用于出露少或含量低的弱信号小目标探测. 然而该类算法每次仅能实现单一类别含水矿物识别, 并且其探测结果严重依赖于输入模型的目标光谱质量.

4 火星含水矿物丰度反演

除定性识别含水矿物的类别和分布外, 定量丰度反演对理解火星水环境和气候演化更加重要^[52]. 受空间分辨率限制, 遥感获取的光谱通常为混合光谱, 是像元内不同地物反射信号的综合表征. 光谱解混是指将观测的混合像元光谱分解为一组纯净的端元和对端元丰度, 基本流程包括端元光谱提取和端元丰度求解, 其中丰度通常需要满足“非负性”与“和为 1”的约束^[53]. 解混模型从本质上可分为线性和非线性, 当入射光仅在一种端元内部反射时为线性混合, 当光线在多种端元之间反射时为非线性混合, 如图 4 所示^[12].

4.1 线性混合模型

线性混合模型假设光子只在每种介质表面反射或吸收, 且不发生多次散射. 该假设适用于宏观尺度的混合场景, 混合光谱是每个端元光谱按照其丰度比

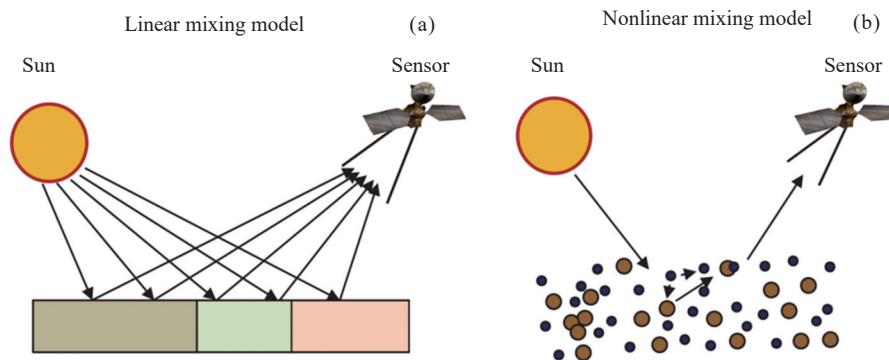


图4 光谱混合模型

Fig. 4 Spectral mixing models

例的线性加权求和, 如图4(a)所示. 由于线性模型原理简单运算效率较高, 有研究使用线性混合模型在火星光谱解混方面进行了系列探索, 例如 Schmidt 等^[54]基于全约束最小二乘算法反演了 Syrtis Major 的矿物含量; Gilmore 等^[55]结合超像素分割和顺序最大角凸锥算法获得了 Ariadnes Chaos 矿物丰度; Gou 等^[56]使用多端元光谱混合分析算法量化了 Mawrth Vallis 含水矿物的蚀变程度. 虽然线性混合模型能够为矿物丰度估算提供参考, 但是在特定情况下线性混合假设会失效并引起显著误差. 实验室混合光谱研究表明, 错误使用线性混合模型获得的矿物含量绝对误差可达到 30%^[57].

4.2 非线性混合模型

非线性混合模型综合考虑光线在多个颗粒之间的多次散射和吸收, 行星表面矿物反演常用的非线性物理模型包括 Hapke 模型^[58]和 Shkuratov 模型^[59], 两者都假设表面颗粒是随机分布的, 并且颗粒的散射特性可以用等效平板模型表示, 但是在相函数处理上却截然不同^[60]. Hapke 模型中相函数是一个自由参数, 通常通过观测数据拟合获得; 而在 Shkuratov 模型中颗粒的散射不对称性由颗粒大小和成分自洽决定. Shkuratov 模型计算复杂度较低, 适合快速解混和大范围的光谱分析; Hapke 模型更适合高精度、复杂散射分析, 两者均已成功应用于火星遥感光谱定量分析^[60]. 已有研究采用 Shkuratov 模型和单纯体最小化算法反演了好奇号四个预选着陆点的矿物丰度^[61]; 基于 Hapke 模型和非负最小二乘算法, 分别对 Melas Chasma 西南部^[62]、Gale 撞击坑^[63]和 Jezero 撞击坑^[64]矿物成分进行定量分析; 使用 Hapke 模型和稀疏解混算法反演了 Gale 撞击坑矿物含量^[65].

然而非线性模型参数设置较为复杂, 且通常需要提前给定端元矿物的粒径分布和光学常数, 这些先验信息大多难以获取^[66]. 此外, 选择不同的端元光谱通常会产生不同的解混结果, 甚至引起截然相反的地质解译^[67]. 实验室混合光谱分析表明, 即使采用相同端元光谱, 反演结果仍存在多解性^[68]. 由于光谱解混结果的误差和不确定性难以评估, 限制了火星含水矿物定量反演的大规模应用.

5 结论与展望

从定性识别和定量丰度反演两个角度出发, 系统分析了火星含水矿物光谱探测算法的原理及其优缺点. 为提高算法适用性和探测精度, 并解决验证数据匮乏等问题, 未来研究可聚焦以下方向.

(1) 光谱变异性的精细化建模. 在实验室环境下开展含水矿物光谱的系统性研究, 例如端元矿物多角度光谱测量, 精细刻画矿物光谱随观测角度、粒径和成分的变化规律, 确保光谱建模能够充分表征可能出现的光谱变异.

(2) 多源数据融合与协同探测. 探索多源遥感数据的协同制图方法, 利用多维约束提升探测结果的准确性与一致性. 结合集成学习策略, 整合多种算法提升矿物识别和丰度反演的精度与可靠性.

(3) 基于真实场景的地面验证体系建设. 利用类火星模拟场 (例如柴达木盆地) 开展地面、无人机与轨道遥感的多尺度光谱观测, 构建全面的地面验证体系, 明确不同算法的适用条件和精度范围.

(4) 轻量化算法与自动化工具开发. 开发针对火星含水矿物的高效轻量化算法, 降低机器学习方法对

超参数的依赖, 集成专家知识与约束条件, 降低用户的使用门槛, 推动高光谱技术在火星含水矿物探测的普及应用。

参考文献

- [1] PAN Yongxin, WANG Chi. Developing the planetary science research for the sustainable deep space exploration of China[J]. *Bulletin of National Natural Science Foundation of China*, 2021, **35**(2): 181-185 (潘永信, 王赤. 国家深空探测战略可持续发展需求: 行星科学研究 [J]. 中国科学基金, 2021, **35**(2): 181-185)
- [2] WU Weiren, WANG Chi, LIU Yang, *et al.* Frontier scientific questions in deep space exploration[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2023, **68**(6): 606-627 (吴伟仁, 王赤, 刘洋, 等. 深空探测之前沿科学问题探析 [J]. 科学通报, 2023, **68**(6): 606-627)
- [3] EHLMANN B L, ANDERSON F S, ANDREWS-HANNA J, *et al.* The sustainability of habitability on terrestrial planets: insights, questions, and needed measurements from Mars for understanding the evolution of Earth-like worlds[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2016, **121**(10): 1927-1961
- [4] BIBRING J P, LANGEVIN Y, MUSTARD J F, *et al.* Global mineralogical and aqueous Mars history derived from OMEGA/mars express data[J]. *Science*, 2006, **312**(5772): 400-404
- [5] CHEVRIER V, POULET F, BIBRING J P. Early geochemical environment of Mars as determined from thermodynamics of phyllosilicates[J]. *Nature*, 2007, **448**(7149): 60-63
- [6] 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
- [7] GOU Sheng, YUE Zongyu, DI Kaichang *et al.* Advances in aqueous minerals detection on Martian surface[J]. *Journal of Remote Sensing*, 2017, **21**(4): 531-548 (苟盛, 岳宗玉, 邸凯昌, 等. 火星表面含水矿物探测进展 [J]. 遥感学报, 2017, **21**(4): 531-548)
- [8] CARTER J, RIU L, POULET F, *et al.* A Mars Orbital Catalog of Aqueous Alteration Signatures (MOCAAS)[J]. *Icarus*, 2023, **389**: 115164
- [9] BIBRING J P, LANGEVIN Y, GENDRIN A, *et al.* Mars surface diversity as revealed by the OMEGA/Mars express observations[J]. *Science*, 2005, **307**(5715): 1576-1581
- [10] MURCHIE S, ARVIDSON R, BEDINI P, *et al.* Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars (CRISM) on Mars Reconnaissance Orbiter (MRO)[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2007, **112**(E5): E05S03
- [11] MUSTARD J, PARENTE M, DAS E, *et al.* Searching for needles[C]//Proceedings of the GSA Connects 2021. Portland, Oregon: GSA, 2021
- [12] BIOUCAS-DIAS J M, PLAZA A, CAMPS-VALLS G, *et al.* Hyperspectral remote sensing data analysis and future challenges[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine*, 2013, **1**(2): 6-36
- [13] GHAMISI P, YOKOYA N, LI J, *et al.* Advances in hyperspectral image and signal processing: a comprehensive overview of the state of the art[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine*, 2017, **5**(4): 37-78
- [14] KUMARI P, SOOR S, SHETTY A, *et al.* Mineral classification on Martian surface using CRISM hyperspectral data: a survey[J]. *Journal of Applied Remote Sensing*, 2023, **17**(4): 041501
- [15] KE T, ZHONG Y F, SONG M, *et al.* Mineral detection based on hyperspectral remote sensing imagery on Mars: from detection methods to fine mapping[J]. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 2024, **218**: 761-780
- [16] WU Xing. Hyperspectral Target Detection for Hydrous Minerals on Mars[D]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2020 (吴兴. 火星含水矿物高光谱目标探测算法研究 [D]. 北京: 中国科学院大学, 2020)
- [17] CHRISTENSEN P R, BANDFIELD J L, HAMILTON V E, *et al.* Mars Global Surveyor Thermal Emission Spectrometer experiment: investigation description and surface science results[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2001, **106**(E10): 23823-23871
- [18] CHRISTENSEN P R, JAKOSKY B M, KIEFFER H H, *et al.* The Thermal Emission Imaging System (THEMIS) for the Mars 2001 Odyssey Mission[J]. *Space Science Reviews*, 2004, **110**(1): 85-130
- [19] HE Z P, XU R, LI C L, *et al.* Mars Mineralogical Spectrometer (MMS) on the Tianwen-1 mission[J]. *Space Science Reviews*, 2021, **217**(2): 27
- [20] SEELOS F P, SEELOS K D, MURCHIE S L, *et al.* The CRISM investigation in Mars orbit: overview, history, and delivered data products[J]. *Icarus*, 2024, **419**: 115612
- [21] 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)
- [22] CLARK R N, KING T V V, KLEJWA M, *et al.* High spectral resolution reflectance spectroscopy of minerals[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1990, **95**(B8): 12653-12680
- [23] YIN Haoan, TANG Hong, LI Xiongyao, *et al.* Occurrence and infrared absorption spectra of Martian water[J]. *Chinese Journal of Space Science*, 2024, **44**(6): 1086-1105 (尹浩安, 唐红, 李雄耀, 等. 火星水的主要赋存状态及其红外光谱特征 [J]. 空间科学学报, 2024, **44**(6): 1086-1105)
- [24] VIVIANO C E, SEELOS F P, MURCHIE S L, *et al.* Revised CRISM spectral parameters and summary products based on the currently detected mineral diversity on Mars[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2014,

- 119(6): 1403-1431
- [25] CLARK R N, ROUSH T L. Reflectance spectroscopy: quantitative analysis techniques for remote sensing applications[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1984, **89**(B7): 6329-6340
- [26] PELKEY S, MUSTARD J, MURCHIE S, *et al.* CRISM multispectral summary products: parameterizing mineral diversity on Mars from reflectance[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2007, **112**(E8): E08S14
- [27] MUSTARD J F, MURCHIE S L, PELKEY S M, *et al.* Hydrated silicate minerals on Mars observed by the Mars Reconnaissance Orbiter CRISM instrument[J]. *Nature*, 2008, **454**(7202): 305-309
- [28] PAN L, EHLMANN B L, CARTER J, *et al.* The stratigraphy and history of Mars' northern lowlands through mineralogy of impact craters: a comprehensive survey[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2017, **122**(9): 1824-1854
- [29] KEPP M, PAN L, FRYDENVANG J, *et al.* Orbital identification of widespread hydrated silica deposits in Gale crater[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2024, **648**: 119082
- [30] VAN RUITENBEEK F J A, BAKKER W H, VAN DER WERFF H M A, *et al.* Mapping the wavelength position of deepest absorption features to explore mineral diversity in hyperspectral images[J]. *Planetary and Space Science*, 2014, **101**: 108-117
- [31] SUNSHINE J M, PIETERS C M. Estimating modal abundances from the spectra of natural and laboratory pyroxene mixtures using the modified Gaussian model[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 1993, **98**(E5): 9075-9087
- [32] BROWN A J. Spectral curve fitting for automatic hyperspectral data analysis[J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2006, **44**(6): 1601-1608
- [33] CLÉNET H, PINET P, DAYDOU Y, *et al.* A new systematic approach using the Modified Gaussian Model: insight for the characterization of chemical composition of olivines, pyroxenes and olivine-pyroxene mixtures[J]. *Icarus*, 2011, **213**(1): 404-422
- [34] PARENTE M, MAKAREWICZ H D, BISHOP J L. Decomposition of mineral absorption bands using nonlinear least squares curve fitting: application to Martian meteorites and CRISM data[J]. *Planetary and Space Science*, 2011, **59**(5/6): 423-442
- [35] SERVENTI G, CARLI C, ALTIERI F, *et al.* Spectral classification and MGM-based mineralogical characterization of hydrated phases: the Nili Fossae case, Mars[J]. *Planetary and Space Science*, 2021, **209**: 105361
- [36] BANDFIELD J L, CHRISTENSEN P R, SMITH M D. Spectral data set factor analysis and end-member recovery: application to analysis of Martian atmospheric particulates[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2000, **105**(E4): 9573-9587
- [37] THOMAS N H, BANDFIELD J L. Identification and refinement of martian surface mineralogy using factor analysis and target transformation of near-infrared spectroscopic data[J]. *Icarus*, 2017, **291**: 124-135
- [38] LIN H L, TARNAS J D, MUSTARD J F, *et al.* Dynamic Aperture Factor Analysis/Target Transformation (DAFA/TT) for Mg-serpentine and Mg-carbonate mapping on Mars with CRISM near-infrared data[J]. *Icarus*, 2021, **355**: 114168
- [39] TARNAS J D, MUSTARD J F, LIN H L, *et al.* Orbital identification of hydrated silica in Jezero crater, Mars[J]. *Geophysical Research Letters*, 2019, **46**(22): 12771-12782
- [40] TARNAS J D, MUSTARD J F, WU X, *et al.* Successes and challenges of factor analysis/target transformation application to visible-to-near-infrared hyperspectral data[J]. *Icarus*, 2021, **365**: 114402
- [41] AHMAD M, SHABBIR S, ROY S K, *et al.* Hyperspectral image classification—Traditional to deep models: a survey for future prospects[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 2022, **15**: 968-999
- [42] PLEBANI E, EHLMANN B L, LEASK E K, *et al.* A machine learning toolkit for CRISM image analysis[J]. *Icarus*, 2022, **376**: 114849
- [43] KUMARI P, SOOR S, SHETTY A, *et al.* A fully-automated framework for mineral identification on Martian surface using supervised learning models[J]. *IEEE Access*, 2023, **11**: 13121-13137
- [44] KAMPS O M, HEWSON R D, VAN RUITENBEEK F J A, *et al.* Defining surface types of Mars using global CRISM summary product maps[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2020, **125**(8): e2019JE006337
- [45] ALLENDER E, STEPINSKI T F. Automatic, exploratory mineralogical mapping of CRISM imagery using summary product signatures[J]. *Icarus*, 2017, **281**: 151-161
- [46] SARANATHAN A M, PARENTE M. Adversarial feature learning for improved mineral mapping of CRISM data[J]. *Icarus*, 2021, **355**: 114107
- [47] ZHANG Liangpei. Advance and future challenges in hyperspectral target detection[J]. *Geomatics and Information Science of Wuhan University*, 2014, **39**(12): 1387-1394, 1400 (张良培. 高光谱目标探测的进展与前沿问题 [J]. 武汉大学学报: 信息科学版, 2014, **39**(12): 1387-1394, 1400)
- [48] FARRAND W H, BELL III J F, JOHNSON J R, *et al.* Visible and near-infrared multispectral analysis of rocks at Meridiani Planum, Mars, by the Mars Exploration Rover Opportunity[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2007, **112**(E6): E06S02
- [49] WU X, ZHANG X, CEN Y. Multi-task joint sparse and low-rank representation target detection for hyperspectral image[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2019, **16**(11): 1756-1760

- [50] WU X, MUSTARD J F, TARNAS J D, *et al.* Imaging Mars analog minerals' reflectance spectra and testing mineral detection algorithms[J]. *Icarus*, 2021, **369**: 114644
- [51] WU X, ZHANG X, MUSTARD J, *et al.* Joint Hapke model and spatial adaptive sparse representation with iterative background purification for Martian serpentine detection[J]. *Remote Sensing*, 2021, **13**(3): 500
- [52] POULET F, MANGOLD N, LOIZEAU D, *et al.* Abundance of minerals in the phyllosilicate-rich units on Mars[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 2008, **487**(2): L41-L44
- [53] 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
- [54] SCHMIDT F, LEGENDRE M, LE MOUËLIC S. Minerals detection for hyperspectral images using adapted linear unmixing: LinMin[J]. *Icarus*, 2014, **237**: 61-74
- [55] GILMORE M S, THOMPSON D R, ANDERSON L J, *et al.* Superpixel segmentation for analysis of hyperspectral data sets, with application to Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars data, Moon Mineralogy Mapper data, and Ariadnes Chaos, Mars[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2011, **116**(E7): E07001
- [56] GOU S, YUE Z Y, DI K C, *et al.* Mineral abundances and different levels of alteration around Mawrth Vallis, Mars[J]. *Geoscience Frontiers*, 2015, **6**(5): 741-758
- [57] KESHAVA N, MUSTARD J F. Spectral unmixing[J]. *IEEE Signal Processing Magazine*, 2002, **19**(1): 44-57
- [58] HAPKE B. Bidirectional reflectance spectroscopy: 1. Theory[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1981, **86**(B4): 3039-3054
- [59] 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
- [60] POULET F, CUZZI J N, CRUIKSHANK D P, *et al.* 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
- [61] 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
- [62] LIU Y, GLOTCH T D, SCUDDER N A, *et al.* End-member identification and spectral mixture analysis of CRISM hyperspectral data: a case study on southwest Melas Chasma, Mars[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2016, **121**(10): 2004-2036
- [63] 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
- [64] ZASTROW A M, GLOTCH T D. Distinct carbonate lithologies in Jezero crater, Mars[J]. *Geophysical Research Letters*, 2021, **48**(9): e2020GL092365
- [65] LIN H L, ZHANG X. Retrieving the hydrous minerals on Mars by sparse unmixing and the Hapke model using MRO/CRISM data[J]. *Icarus*, 2017, **288**: 160-171
- [66] 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
- [67] WYATT M B, MCSWEEN H Y JR. Spectral evidence for weathered basalt as an alternative to andesite in the northern lowlands of Mars[J]. *Nature*, 2002, **417**(6886): 263-266
- [68] 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

作者简介



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



刘 洋 (通信作者) 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