

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Фізичний факультет
Кафедра астрономії та космічної інформатики

«Допущено до захисту»
Зав. кафедри астрономії та
космічної інформатики
проф. Юрій ШКУРАТОВ

17.05.2024 р.



Оцінка « відмінно »

Голова ЕК
проф. Віктор ТИШКОВЕЦЬ

24.05.2024 р.



Хариз Аміра Омарівна

**«Визначення характеристичного вектору спектральних ознак мінералів
за набором модельних спектрів Місяця»**

Кваліфікаційна робота на здобуття
освітньо-кваліфікаційного рівня
«Магістр» спеціальність
104 – «фізика та астрономія»
освітньо-наукова програма
«астрономія»

(підпис студента)



Науковий керівник – викладач
кафедри астрономії та космічної
інформатики Сурков Є.С

(підпис керівника)



Харків 2024

АНОТАЦІЯ

Хариз А.О. Визначення характеристичного вектору спектральних ознак мінералів за набором модельних спектрів Місяця

Дипломна робота на здобуття ступеня вищої освіти «Магістр» за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія». – Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, 2024.

Контекст: досліджується залежність різних спектральних характеристик та мінералогічного складу поверхні Місяця.

Цілі: ми прагнемо встановити кореляцію між мінералогічним складом і спектральними даними з урахуванням одночасного впливу всіх модельованих мінералів за допомогою статистичних методів та машинного навчання, використовуючи характеристичний вектор спектральних ознак.

Методи: 1D модель розсіювання світла розглядається для відновлення відсутності лабораторних даних місячних зразків. Цей метод дозволяє виконати процедуру спектрального змішування для основних місячних породоутворюючих мінералів: плагіоклазу, піроксенів, олівіну, шпінелі та аглютинатів. Ми розширили цю методику за допомогою теорії ефективного середовища Максвелла-Гарнетта, щоб врахувати спектральні ефекти космічного вивітрювання. Верифікація результатів виконується шляхом порівняння модельних результатів з наявними лабораторними даними. Методи машинного навчання: PLS-regression (Partial Least Squares, часткова регресія найменших квадратів), MLR-regression (Multiple Linear Regression, багатовимірна лінійна регресія), а також MLP-regressor (Multi-layer Perceptron Regression, багат шаровий перцептронний регресор) – використовуються задля отримання кореляції між мінералогічним складом та спектральними даними.

Результати: Набір синтетичних спектрів, що дозволяє компенсувати брак лабораторних даних. Показано значущі кореляції показників кольору $C(950/750 \text{ нм})$, $C(2250/1550 \text{ нм})$ і $C(1550/750 \text{ нм})$ із піроксенами та ільменітом. Показано значущі кореляції показників кольору $C(950/750 \text{ нм})$, $C(2650/1550 \text{ нм})$ та параметра шпінелі зі шпінелями. Показано значущі кореляції піроксенового, олівінового та олівіно-піроксенового параметрів з піроксенами та олівінами. Встановлено, що значення альbedo при 750 нм $A(750 \text{ нм})$ є відповідним параметром для чисельного визначення співвідношення темної мафічної (залізовмісних порід, таких як ільменіт, піроксен, олівін тощо) компоненти і світлих алюмосилікатів (різних морських і материкових польових шпатів). Можливим фізичним поясненням цього статистичного ефекту є відсутність власних особливостей поглинання мінералів на цій довжині хвилі. Прогнозування поширеності плагіоклазів та аглютинатів є складним через відсутність у їхніх спектрах достатньо виражених особливостей поглинання. Для цього необхідно мати показник кольору $C(2650/750 \text{ нм})$ для характеристики інтенсивності смуг поглинання і кілька альbedo принаймні при 750, 1550 і 2650 нм для опису загальної відбивної здатності цих компонентів (аглютинати - найтемніші породи на Місяці, тоді як плагіоклази - одні з найяскравіших). Порівняння з попередніми роботами та застосованими в них підходами показало, що запропонований в цій роботі метод має кращу точність, завдяки якій можна однозначно визначити якість кореляції у відтвореному місячному реголіті та його спектрів. В цілому, отримані результати оцінки складу добре узгоджуються з експериментальними вимірюваннями та іншими розробленими на сьогодні методами кількісного визначення мінералогічного складу.

Висновки: Запропоновано новий підхід до кількісної оцінки мінералогії місячних реголітів на основі спектральних даних. Визначено мінімальний набір спектральних параметрів і показано його достатність для прогнозування вмісту мінералів з прийнятною точністю. Обговорено

фізичний зміст деяких виявлених залежностей. Верифікація підходу показала хороше узгодження з лабораторними вимірюваннями повернених місячних зразків, а також земних аналогів місячного реголіту.

Ключові слова: одновимірна модель світлорозсіювання, мінералогічний склад, спектральний параметр, машинне навчання, регресія.

ABSTRACT

Hariz A.O. The characteristic vector of the spectral features of the main minerals based on a set of model spectra of the Moon, obtained using a one-dimensional light scattering model

Thesis for the degree of Higher Education "master" in specialty 104 "Physics and astronomy". V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2024.

Context: We investigate a quantitative dependence of different spectral features on the mineralogical composition of the Moon's surface.

Aims: We aim to establish the correlation between the mineralogical composition and spectral data taking into account simultaneous influence of all modeled minerals using statistical and machine learning methods

Method: 1D light scattering model is considered to restore the lack of the laboratory data of lunar samples. This method allows to perform the spectral mixing procedure for the main lunar rock-forming minerals: plagioclase, pyroxenes, olivine, spinel and agglutinates. We extend this technique with the Maxwell-Garnett effective medium theory to consider spectral effects of space weathering processes. The verification of results is performed by comparing modeled results with the existing laboratory data. Machine learning methods such as: PLS-regression(Partial Least Squares), MLR-regression (Multiple Linear Regression), and MLP-regressor (Multi-layer Perceptron regressor) – are used to establish the correlation between the mineralogical composition and spectral data.

Results: The set of synthetic spectra that allows to restore the lack of laboratory data. It shows the meaningful correlations of color ratios $C(950/750 \text{ nm})$, $C(2250/1550 \text{ nm})$ and $C(1550/750 \text{ nm})$ with pyroxenes and ilmenite. It reveals the meaningful correlations of color ratios $C(950/750 \text{ nm})$, $C(2650/1550 \text{ nm})$ and spinel parameter with spinels. It shows the meaningful correlations of pyroxene

ratio, olivine and olivine-pyroxene parameters with olivine and pyroxenes. We identified that the albedo values at 750 nm $A(750 \text{ nm})$ is an appropriate parameter to specify numerically the ratio of darker mafic fraction (Fe-bearing rocks like ilmenite, pyroxenes, olivine, etc.) and bright aluminosilicates (mainly different mare and highland feldspars). Possible physical explanation of this statistical effect is the absence of any own absorption features of minerals at this wavelength. The prediction of plagioclases and agglutinates abundances is challenging due to the lack of the absorption features in their spectra. It demands color ratio $C(2650/750 \text{ nm})$ to characterize the strength of absorption bands and several albedos at least at 750, 1550 and 2650 nm for describing the overall reflectivity of this components (agglutinates are the darkest rocks on the Moon, whereas plagioclases are ones of the brightest). Comparison with previous works and their methods has shown that the method proposed in this paper has better accuracy, which allows us to unambiguously determine the quality of correlation in the reconstructed lunar regolith and its spectra. In general, obtained results of composition assessment are in good agreement with the experimental measurements and other methods of quantitative mineralogic composition retrieving methods developed for today.

Conclusions: We proposed a new approach for the quantitative assessment of the lunar regolith mineralogy using spectral data. We identified a minimal set of spectral parameters and demonstrated its sufficiency to mineral content prediction with acceptable precision. The physical meaning of some revealed dependences is discussed. The approach's verification showed a good agreement with laboratory measurements of returned lunar samples as well as of earth analogs of the lunar regolith.

Keywords: 1D light scattering model, mineralogical composition, spectral features, machine learning, regression.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	8
ВСТУП.....	9
РОЗДІЛ I. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	12
1.1. Мінералогія Місяця.....	12
1.2. Утворення смуг поглинання у Vis-NIR спектральному діапазоні.....	13
1.3. Загальна характеристика спектрів Місяця у Vis-NIR діапазоні.....	13
1.4. Одновимірна модель розсіювання світла реголітоподібним середовищем.....	18
1.5. Визначення та картування мінералогічного складу за спектральними ознаками місячного реголіту	22
РОЗДІЛ II. МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ.....	27
2.1. Відтворення спектрів реголітоподібного середовища з мінералогічним складом подібним до Місяця.....	27
2.2. Методи інверсії спектральних даних.....	29
2.3. Метрики оцінки якості інверсії для неперервних даних.....	32
2.4. Спектральні параметри.....	34
РОЗДІЛ III. РЕЗУЛЬТАТИ.....	36
3.1. Тестування моделей інверсії спектрів	36
3.2. Вплив набору спектральних параметрів на точність моделей	39
3.3. Обґрунтування використання різних наборів спектральних параметрів при дослідженні мінералогічного складу.....	44
ВИСНОВКИ.....	48
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	50

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

M³ – (англ. Moon Mineralogy Mapper) спектрометр NASA на борту космічного апарату Chandrayaan-1 індійського агентства космічних досліджень ISRO;

Vis-NIR – (англ. Visible and Near Infrared spectral range) видимий та ближній інфрачервоний спектральний діапазон;

PLS – (англ. Partial Least Squares Regression) часткова регресія найменших квадратів;

MLR – (англ. Multiple Linear Regression) багатовимірна лінійна регресія;

MLP – (англ. Multi-Layer Perceptron Regressor) багат шаровий перцептрон;

Метрики для вимірювання точності регресії:

exp_var – explained_variance_score;

aes – d2_absolute_error_score;

mae – mean_absolute_error;

mape – mean_absolute_percentage_error.

ВСТУП

Метод спектروفотометрії, а саме дифузні спектри, на сьогоднішній день є одним із найбільш розвинених методів дистанційного зондування Місяця, використаних на основі розроблених статистичних та емпіричних підходів.

Це надає змогу вивчити склад, структуру поверхні Місяця так, як не можна це зробити за допомогою наземних досліджень. Завдяки таким космічним місіям провідних космічних агенцій світу як: NASA (США), ESA (ЄС), ISRO (Індія), JAXA (Японія) та ін. – . Найбільш перспективною на сьогоднішній день для детального вивчення та картування хіміко-мінералогічного складу є місія ISRO Chandrayaan-1 із розробленим у NASA спектрометром M³ (Moon Mineralogy Mapper), який має самий широкий на сьогодні діапазон спектру та високу спектральну роздільну здатність. За допомогою цього приладу були отримані унікальні данні, що відкривають нові можливості для створення детальних мінералогічних карт або уточнення якісного та кількісного складу реголіту, його окремих компонент, які раніше не могли бути задетектовані через відносно невелику розповсюдженість. Також були додатково отримані такі нові параметри спектральних смуг, як глибина, положення, інтегральна глибина, ширина на півглибині, асиметрія та інші. Актуальною на сьогодні залишається задача знаходження та розробки нових методів або вдосконалення існуючих задля надійної обробки цих даних та точного визначення спектральних параметрів для подальшого кількісного і якісного прогнозування мінералогічного складу поверхні Місяця. Якісна обробка даних, точне мінералогічне картування та кількісне визначення того чи іншого компонента реголіту Місяця допоможе у майбутньому сформулювати більш точні цілі як світових, так й українських космічних місій. Для цього необхідно окремо провести роботу з глобального дослідження залежностей тих чи інших спектральних особливостей від мінералогічного складу ґрунту. В цій роботі пропонується використовувати одновимірну модель розсіювання світла, адже лабораторних зразків не

вистачає для глобального статистичного дослідження таких залежностей. Ідея моделювати реголіт Місяця за допомогою цієї моделі вже вдало впроваджувалась раніше (Korokhin et al., 2024, Surkov et al., 2022). Але залишається проблема якісного чисельного аналізу отриманих моделей. В цій роботі пропонується використовувати характеристичний вектор спектральних ознак мінералів, щоб визначити кореляцію між модельними концентраціями і спектрами методами машинного навчання.

Таким чином, *метою дипломної роботи є* встановлення кореляції між мінералогічним складом і спектральними даними з урахуванням одночасного впливу всіх модельованих мінералів за допомогою методів машинного навчання, використовуючи характеристичний вектор спектральних ознак. Для досягнення мети були *поставлені наступні задачі*:

1. Розробити алгоритм для отримання набору синтетичних спектрів симулянтів місячного реголіту;
2. Провести статистичний аналіз та порівняти з сучасними даними про мінералогічний склад реголіту Місяця;
3. Розробити підходи для кількісного визначення концентрацій мінералів;
4. Провести пошук спектральних параметрів задля створення характеристичного вектора і отримання кореляції між цим вектором та мінералогічним складом змодельованого реголіту Місяця методами машинного навчання;
5. Провести аналіз отриманих результатів та порівняти їх з попередніми роботами, використаними в них методиками та отриманими результатами.

Об'єкт дослідження: реголіт Місяця та його синтетичні аналоги у вигляді уявного дискретного середовища, що за структурою та модельним складом відповідає сучасним уявленням про реголіт Місяця.

Предмет дослідження: мінералогічний склад Місяця, його спектральні властивості та комп'ютерні методи його визначення за спектральними даними.

Методи дослідження: методи комп'ютерного моделювання розсіювання світла реголітоподібним середовищем, методи множинної регресії та машинного навчання для визначення зв'язків між модельованими сумішами та їх спектрами.

РОЗДІЛ І. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Мінералогія Місяця

На сьогодні відомо, що основу реголіту Місяця складають мінерали: плагіоклази, олівін, ільменіт, піроксени, шпінелі, продукти їх перетворення через вплив космічних та геологічних чинників – мінеральне скло та аглютинати (Cloutis et al., 1993). Ці мінерали, в залежності від складу та/або структури кристалічної решітки, діляться ще на підтипи. Наприклад, олівін має хімічну формулу $(\text{Mg, Fe})_2\text{SiO}_4$. Вміст заліза і магнію змінюється між крайніми членами ізоморфного ряду олівіну: форстеритом-Fo — $\text{Mg}_2(\text{SiO}_4)$ і фаялітом-Fa — $\text{Fe}_2(\text{SiO}_4)$. Однак, окрім цих найпоширеніших підвидів олівіну, існують ще кілька мінералів з групи олівіну: тефроїт (Mn_2SiO_4), монтичелліт (CaMgSiO_4), ларніт (Ca_2SiO_4) та кірштеїніт, або монтичелліт залізистий (CaFeSiO_4). Через те, що вони мають різні спектрально-оптичні властивості, сьогодні їх можливо виділити за лабораторними вимірюваннями. Нижче на Рис. 1.1 наведені типові спектри основних мінералів, що розповсюджені на поверхні Місяця. Видно, що спектри одного й того ж мінералу можуть відрізняються від зразка до зразка за рахунок домішок та особливостей кристалічної решітки, але для кожної групи можна визначити загальні особливості.

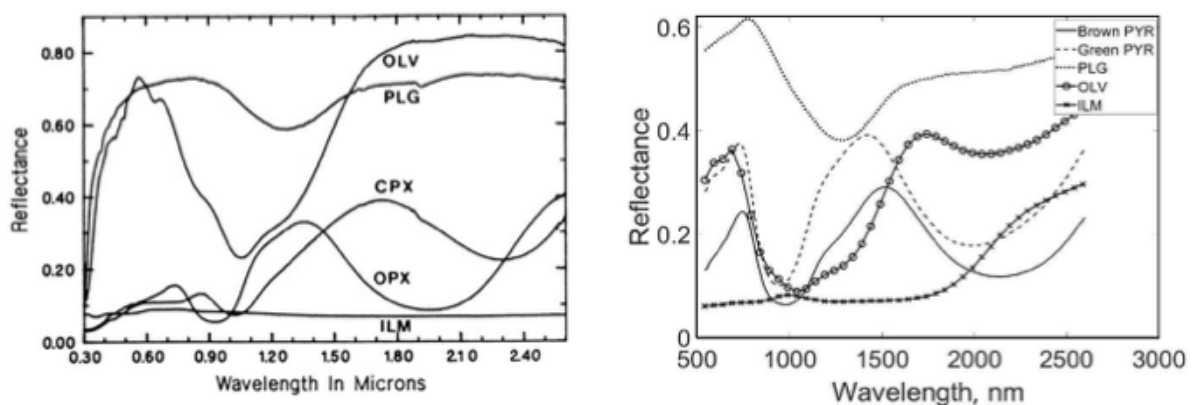


Рисунок 1.1 – На малюнку представлені спектри основних мінералів поверхні Місяця: плагіоклаз (PLG), олівін (OLV), ільменіт (ILM), ортопіроксен (OPX, або Green PYR) та клінопіроксен (CPX, або Brown PYR). Джерело: Cloutis & Gaffey (1993) та Surkov et al. (2020).

1.2. Утворення смуг поглинання у Vis-NIR спектральному діапазоні

Видимий і ближній інфрачервоний спектральний діапазон (Vis-NIR) охоплює світло з видимої області спектру (приблизно від 400 до 700 нм) до ближнього інфрачервоного діапазону (відблизно від 700 до 2500 нм). Коли речовина взаємодіє з випромінюванням у заданому діапазоні, то причиною виникнення смуг поглинання є певні електрони або коливальні процеси. Виділяють три основні механізми утворення смуг поглинання у результаті розподілення електронів (Burns, 1993): переходи кристалічного поля; перенос заряду та перехід між валентною та зоною провідності. Інформація про мінералогічний склад поверхні найінформативніша та, яка була здобута саме завдяки електронним переходам. Існує доволі багато літератури, яка детально описує електронні переходи та їх застосування (наприклад, Rossman, 1988a, Burns, 1993, Gaffey et al., 1993).

1.3. Загальна характеристика спектрів Місяця у Vis-NIR діапазоні

1. Олівінова група

Олівін виділяють з місячного ґрунту, який був доставлений під час космічної програми Аполлон, а також з метеоритів. Ця група мінералів є важливою, адже вони доволі чітко ідентифікуються, що допомагає за ними інтерпретувати спектри відбиття шорстких поверхонь безатмосферних тіл. На Рис. 1.2 можна виділити основні особливості спектрів олівінів: окрім чистих форстеритів, інші мають чітку широку сигнатуру поглинання біля 1 мкм. Біля 1,05 мкм просліджується глибока смуга поглинання, яка була утворена кристалічним полем із вмістом іону Fe^{2+} , знов ж таки, окрім чистого форстериту.

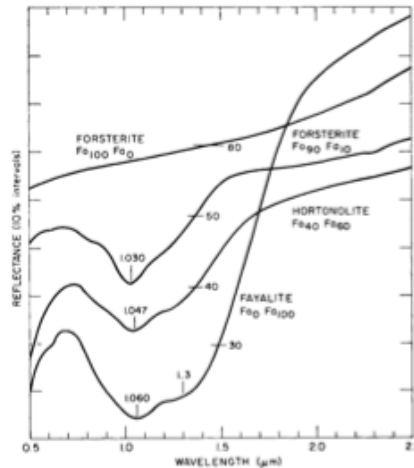


Рисунок 1.2 – Дифузні спектри відбиття олівінових мінералів із різним вмістом форстериту та фаяліту. Джерело: Adams (1975)

Збільшення кількості фаяліту призводить, як видно, до поглиблення смуги поглинання, її невеликого зсуву до червоного боку спектра та прояву смуги поглинання біля 1,3 мкм. Саме остання особливість дозволяє доволі точно виділяти олівін у сумішах, а також у якості включень в місячне скло (наприклад, Dhingra et al., 2015). Бувають випадки, коли подібну картину (смугу поглинання) можуть продукувати деякі типи Са – піроксенів та Fe – вмісного скла, а вміст олівіну, навпаки, недостатній. Тоді необхідно більш ретельно аналізувати усі наявні на досліджуваному проміжку спектральні особливості.

2. Піроксенова група

Ця група мінералів займає важливе місце при дистанційному дослідженні поверхонь тіл завдяки своїй розповсюженості та наявності чітко виражених спектральних особливостей – двох смуг поглинання біля 1 та 2 мкм, положення та форма яких вказують на тип піроксена (Adams, 1974; 1975). Ці смуги формуються електронними переходами між рівнями, які були сформовані взаємодією іонів Fe^{2+} із кристалічним полем. Концентрація цих іонів доволі сильно впливає на глибину та положення смуги. Також на положення смуги впливають: концентрації іонів Са, Mg та ін. (збільшення Са

зміщує смуги від 0,9 мкм до 1,05 мкм, але залишає майже незмінною смугу біля 2 мкм); наявність у складі Al_2O_3 зміщує смугу біля 2 мкм до 1,7 мкм; кристалічна структура (піроксени кристалізуються у моноклінну систему (клінопіроксени) та орторомбічну (ортопіроксени)); мінералогічний склад поверхні. Вплив останніх двох чинників демонструється на кореляційній діаграмі положень мінімумів біля 1 та 2 мкм (Рис.3).

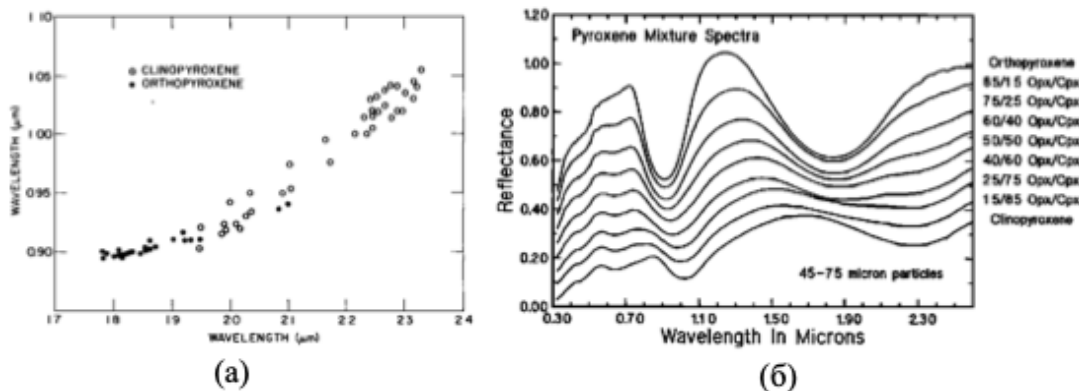


Рисунок 1.3 – (а) – діаграма мінімумів смуг поглинання біля 1 та 2 мкм різних зразків кліно- та ортопіроксенів. (б) – приклади дифузних спектрів відбиття порошокваних сумішей кліно- та ортопіроксенів, концентрації вказано праворуч поряд; Джерело: (а) – Adams (1974) та (б)– Sunshine et al. (1990).

Загальна хімічна формула піроксена має вигляд $XY(Si,Al)_2O_6$. В залежності від того, який іон стоїть на місці X та Y, виділяються типи піроксена: Ca, Fe^{2+} , Na, Mg та рідше Ti, Cr, Fe^{3+} та іншими.

3. Польові шпати: плагіоклази та ортоклази

Порівняно з попередніми мінералами, визначення вмісту та типу плагіоклазів доволі нелегка задача. Вони, як й олівіни, формують твердий розчин альбіту ($NaAlSi_3O_8$) та анориту ($CaAl_2Si_2O_8$). Також до польових шпатів відноситься група алюмосилікатів – ортоклази або калієві польові шпати (Or), що мають формулу $KAlSi_3O_8$. Також утворюють неперервний ізоморфний ряд із альбітом.

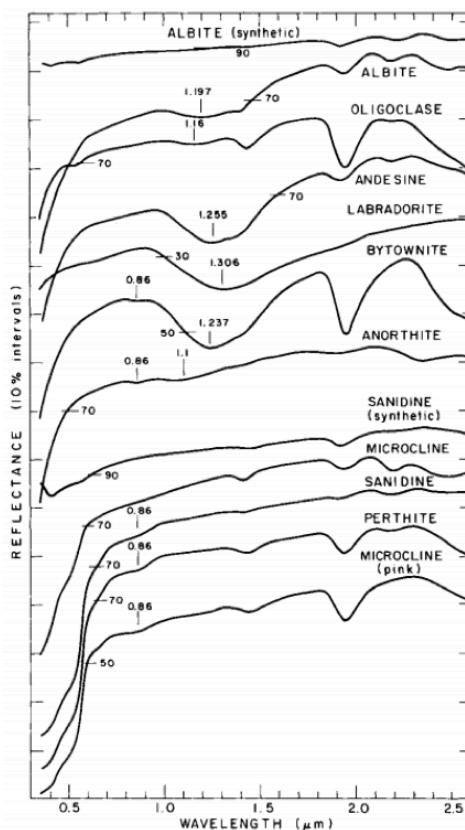


Рисунок 1.4 – Земні лабораторні зразки дифузних спектрів відбиття польових шпатів: плагіоклазів та ортоклазів. Джерело: Adams (1985)

Плагіоклази мають широку смугу поглинання через наявність іонів Fe^{2+} біля 1,3 мкм. У битовінітах та анортитах же смуга поглинання утворена через наявність Fe^{3+} біля 0,85 мкм. Також ця смуга наявна й у ортоклазів, а смуга Fe^{2+} навпаки у них відсутня. Також, ймовірно, Fe^{3+} спричиняє смугу у них біля 0,5 мкм.

4. Оксидні мінерали

Це тип мінералів, що були утворені на суттєвій глибині та опинилися на поверхні Місяця під час великих ударних подій або вулканізму порід. Вони несуть інформацію про будову та склад надр Місяця (Smith et al., 1970; Wood et al., 1970). Хімічна особливість оксидних мінералів полягає у тому, що це сполуки хімічних елементів із киснем. Хоча вони і не є основними компонентами реголіту Місяця, вони відіграють доволі значущу роль при вивченні поверхні.

Основні оксидні мінерали Місяця – це ільменіт (FeTiO_3), шпінелі ($[\text{Fe,Mg}][\text{Cr,Al,Ti}]_2\text{O}_4$) та армаколіти ($[\text{Fe,Mg}]\text{Ti}_2\text{O}_4$). Серед них саме ільменіт є найбільш розповсюдженим мінералом цієї групи, і знаходять його, зазвичай, на поверхнях місячних морів (Isaacson et al., 2011). Але, як і плагіоклази, їх доволі складно детектувати через низьке альbedo та слабко виражені широкі смуги поглинання біля 0,54 та 1,5 мкм. Сьогодні кількість ільменіту визначають через його зв'язок із TiO_2 та за припущенням, що ця сполука є лише саме у ільменіті (стехіометрично визначений ільменіт (наприклад, Lemelin et al. 2013)). Варто зазначити, що кількість ільменіту, визначена таким способом, є максимальною, оскільки, окрім ільменіту, TiO_2 може розподілятися між Ti-вмісними аглютинатами та іншими мінералогічними одиницями, такими як ульвошпінелі (Fe_2TiO_4).

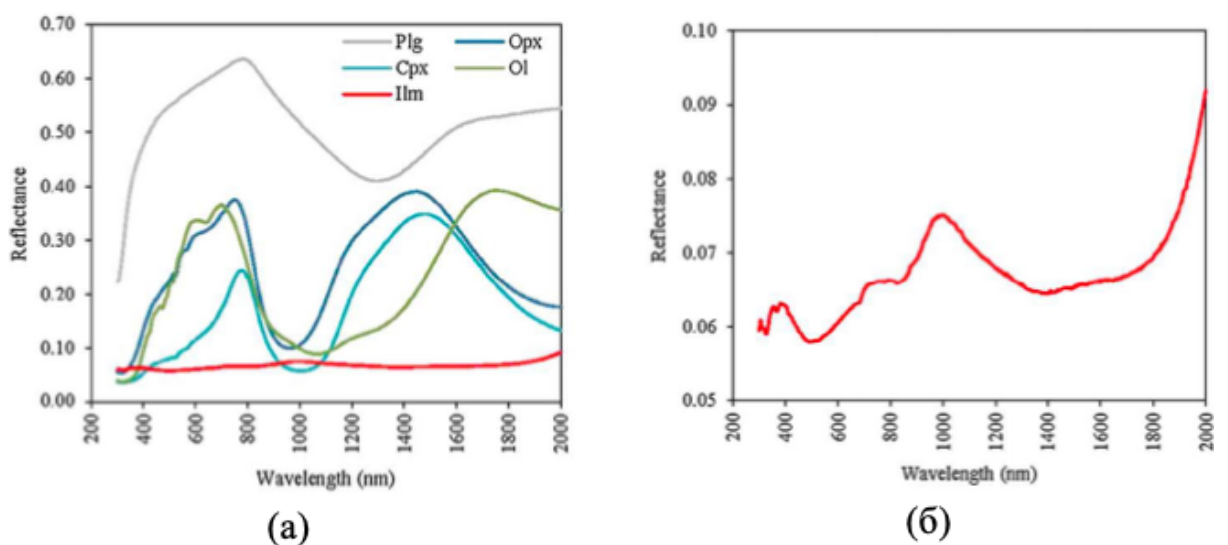


Рисунок 1.5 – (а) Спектри відбиття плагіоклазу (Plg, id: LR-CMP-181), ортопіроксену (Opх, id: LR-CMP-179), клінопіроксену (Срх, id: LR-CMP-179), олівіну (Ol, id: LR-CMP-169) та ільменіту (Ilm, id: LR-CMP-182), в дужках вказано ідентифікатори в базі RELAB. (б) Спектр ільменіту. Джерело: (а,б) – Lemelin et al. (2013)

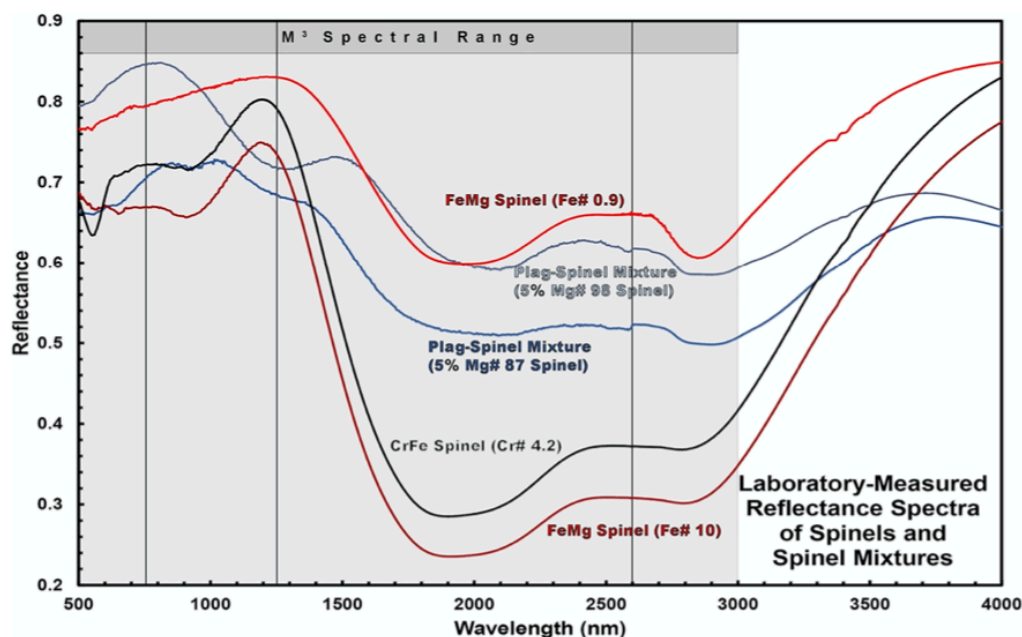


Рисунок 1.6 – Спектри відбиття для різних складів шпінелі та шпінелевмісних сумішей. Спектри були отримані в Лабораторії експериментів з відбивної здатності NASA в Браунському університеті (RELAB). Джерело: Moriarty III et al. (2023)

1.4. Одновимірна модель розсіювання світла реголітоподібним середовищем

Дана модель була розроблена у роботі Shkuratov et al. (1999b). Справа у тому, що спектри залежать, окрім геометрії спостереження, від структурних параметрів середовища, а саме середнього розміру частинок та густини їхнього пакування, розподілу частинок за розміром та формою, тощо, а також, що є доволі важливим моментом, від того факту, що ми отримуємо спектр не від конкретно якогось окремого мінерала, а від суміші, окремі компоненти якої мають різні оптичні властивості. Отже, для моделювання і інтерпретації спектрів дифузного відбиття Місяця використовують значно спрощені наближені моделі розсіювання світла реголітоподібними середовищами.

Основною ідеєю даного методу є використання альbedo однократного розсіяння у напрямку вперед та назад або, як його ще називають, одновимірної індикатриси розсіювання, для опису розсіювання світла кожною окремою частинкою. Суть його полягає у тому, що замінюється шлях променя, який

розсіюється у тривимірному об'ємі реголіту, одномірним розсіюванням у еквівалентній системі пластин.

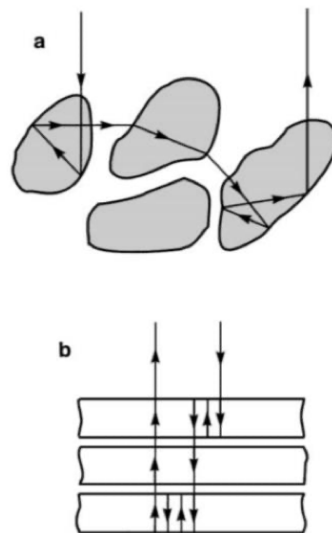


Рисунок 1.7 – Модель розповсюдження світла: (а) крізь випадкове дискретне середовище реголіту; (б) у модельному відображенні. Джерело: Shkuratov et al. (1999).

Для отримання одновимірної індикатриси розсіювання світла частинкою розглядається поверхня напівпрозорої частинки довільної форми. Розсіювання світла в такому середовищі розглядається як розгалужений випадковий процес, де точки розгалуження описуються коефіцієнтами Френеля для відбиття $R(m, \theta)$ та пропускання $T(m, \theta)$, що залежать від комплексного показника заломлення m (де $m = n - ik$, де n і k - показники заломлення і поглинання відповідно) та локального кута падіння θ . Відстань між двома послідовними точками розгалуження характеризується оптичною довжиною $\tau = 4\pi S / \lambda$, де S - середня довжина вільного пробігу, λ - довжина хвилі. Проміжку між частинками реголіту τ і k дорівнюють нулю. Таким чином, середнє значення інтенсивності променя, який пройшов через одну частинку та має m внутрішніх відбиттів, усереднене за локальними кутами падіння та відбиття, виражено наступним чином:

$$\bar{I} = I_o \bar{T}_{in} \bar{T}_{em} \prod_{v=0}^m \bar{R}(\theta_v) \exp\left(\frac{-4\pi k}{\lambda} m S\right) \quad (1.1)$$

де I_0 – інтенсивність падаючого променя, надалі знаки усереднення будуть опускатися. Далі визначається альbedo однієї частинки, що у одновимірному випадку визначається альbedo розсіювання у півсфері вперед та назад r_b (back) та r_f (front). Останні величини представлені у сумі по кратностях внутрішнього розсіювання таким чином (Shkuratov et al., 1999):

$$r_b = R_b + T_e T_i \sum_{m=1}^{\infty} W_m R_i^{m-1} \exp(-m\tau) \quad (1.2)$$

$$r_f = R_f + T_e T_i \sum_{m=1}^{\infty} (1 - W_m) R_i^{m-1} \exp(-m\tau) \quad (1.3)$$

де τ – визначена вище оптична довжина вільного пробігу, W_m – вірогідність розсіювання променя у зворотному напрямку на m -му розсіюванні. А величини R_b та R_f – середні коефіцієнти відбиття, вперед та назад, які задаються виразами:

$$R_b = 2 \int_0^{\pi/4} d\theta R_o(n, \theta) \cdot \cos(\theta) \cdot \sin(\theta) \quad (1.4)$$

$$R_f = 2 \int_{\pi/4}^{\pi/2} d\theta R_o(n, \theta) \cdot \cos(\theta) \cdot \sin(\theta) \quad (1.5)$$

де R_o – коефіцієнт відбиття Френеля. Усереднений коефіцієнт внутрішнього відбиття R_i дорівнює:

$$R_f = \frac{n^2 - 1}{n} + 2 \int_0^{\theta_o} d\theta R_o\left(\frac{1}{n}, \theta\right) \cdot \cos(\theta) \cdot \sin(\theta) \quad (1.6)$$

де $\theta_o = \arcsin(1/n)$ – кут повного внутрішнього відбиття. Середні величини коефіцієнтів проходження T_e та T_i у виразах (1.2-1.3) обчислюють так само.

За умови, що для великих порядків розсіювання обидва напрямки в кожному акті розсіювання рівновірогідні та не залежать від напрямку у попередньому акті розсіювання, можна визначити величину ймовірності

розсіювання вперед та назад W_m . У цьому припущенні для всіх випадків, де $m > 2$, величина $W_m = 1/2$. У випадку $m = 2$ величина $W_2 = 0$, оскільки промінь світла, який пройшов через частинку, не може повернутися у напрямку назад без принаймні одного внутрішнього відбиття. Тоді, ряди для альbedo частинки у 1.2-1.3 являють собою нескінченно спадаючу геометричну прогресію. Тому підсумовуємо та отримуємо:

$$r_b = R_b + \frac{1}{2} T_e T_i e^{-2\tau} / (1 - R_i e^{-\tau}) \quad (1.7)$$

$$r_f = R_f + T_e T_i e^{-\tau} + \frac{1}{2} T_e T_i e^{-2\tau} / (1 - R_i e^{-\tau}) \quad (1.8)$$

Для того, щоб виразити альbedo поверхні, що складається з великої кількості окремих частинок, використовують одновимірну індикатрису однієї частинки. Для цього вводять параметр пакування q . Він визначає об'ємну частку реголіту, що займають частинки певної речовини. Тоді, маємо:

$$\rho_b = q \cdot r_b \quad (1.9)$$

$$\rho_f = q \cdot r_f + 1 - q \quad (1.10)$$

Альbedo A напівнескінченної стопки таких шарів задається рядом по ступеням розсіювання між окремими шарами:

$$A = \rho_b + \rho_f^2 A + \rho_f^2 \rho_b A^2 + \dots = \rho_b + \rho_f^2 A / (1 - \rho_b A) \quad (1.11)$$

Розв'язуючи отримане співвідношення відносно A , дістанемо вираз, який задає альbedo поверхні, вкритої реголітом, параметрами якого є n , k , S та q :

$$A = \frac{1 + \rho_b^2 - \rho_f^2}{2\rho_b} - \sqrt{\left(\frac{1 + \rho_b^2 - \rho_f^2}{2\rho_b}\right)^2 - 1} \quad (1.11)$$

Основні переваги використання цієї моделі:

- модель достатньо точно описує широкий спектр ефектів розсіяння світла як у однорідних реголітоподібних середовищах, так і в середовищах, складених з частинок з різними оптичними характеристиками, як на якісному, так і на кількісному рівні;
- обмежена кількість вільних параметрів, для яких можна вибрати реалістичні значення;
- ця модель дозволяє отримати альbedo поверхні за заданих значень параметрів окремої частинки, а також отримати характеристики частинок, такі як показник поглинання.

1.5. Визначення та картування мінералогічного складу за спектральними ознаками місячного реголіту

У статті Surkov et al. (2023) був запропоновано метод ідентифікації та надійного картування Mg-шпінелі за даними M^3 , суть якого полягала у використанні багатовимірної лінійної регресії для дистанційного зондування Mg-шпінелі. Було отримано наступні результати:

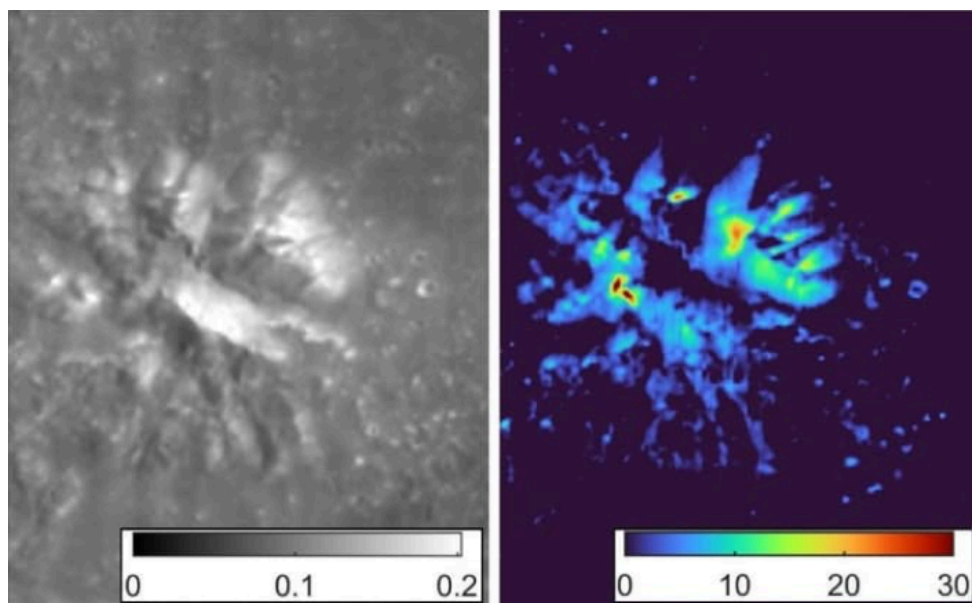


Рисунок 1.8 – Зображення альbedo (ліворуч) та розподіл поширеності шпінелі у вагових частках (праворуч). Джерело: Surkov et al. (2023)

На правій частині малюнку зображені результати картування розповсюдження шпінелі. Середнє значення поширеності шпінелі виявилось 6,5 wt. %. Однак, цей мінерал має значні варіації по поверхні піків. Умовно можна поділити шпінельні ділянки на три типи: вершини піків, схили піків і осади. Вершини піків продемонстрували найбільшу поширеність шпінелі. Центральний пік складається з надрового матеріалу, який притерпів змін під впливом температури і тиску під час підняття в результаті ударного процесу. Отже, отримані результати підтвердили гіпотезу про походження Mg-шпінелі як видобутого матеріалу плутона, збагаченого магнієм, або частини місячної Mg-чохла.

На даних LROC NAC з високою роздільною здатністю було ідентифіковано кілька ділянок (Рис. 1.8). Хоча основні родовища Mg-шпінелі розташовані на вершинах і гребенях кратерного пікового масиву, інші багаті на шпінель ділянки - це падіння валунів з крутих гірських схилів, що також пов'язано зі зміщенням реголіту. Розкидані дрібні відклади шпінелю навколо кратера, в основному, не співпадають з кратерами. Основною спільною характеристикою всіх родовищ шпінелі є їхня близькість до візуально яскравих плям з нерівними дифузними краями.

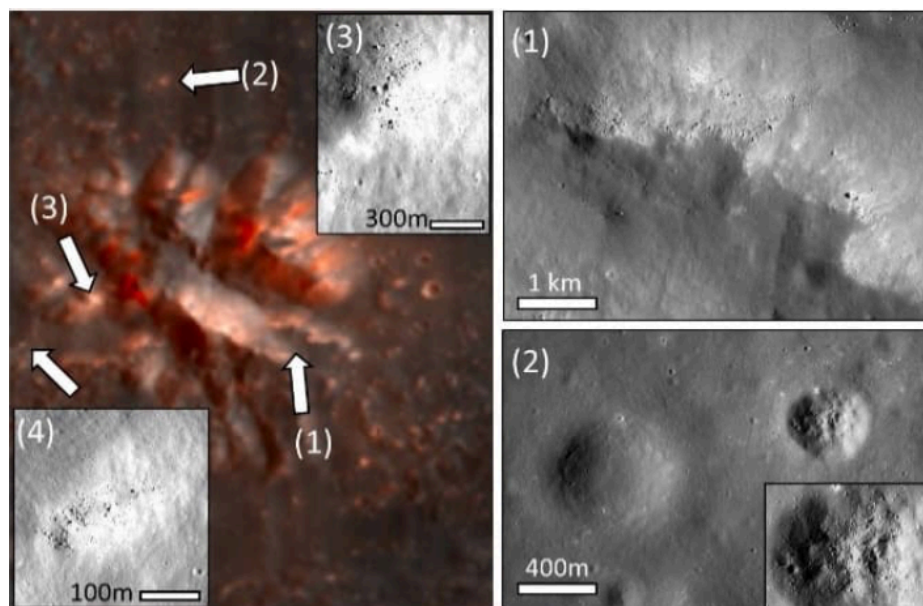


Рисунок 1.9 – Вивчення родовищ шпінелі з високою роздільною здатністю. Джерело: Surkov et al. (2023)

Розміри ділянок варіюються від десятків метрів до кількох кілометрів. Крім більш високого альбедо, всі ці ділянки також мають масивні купи каміння та валунів різного розміру - від кількох до десятків метрів. Область (1) є гребенем між двома головними частинами піку (див. Рис. 8). Спектральна сигнатура шпінелі ідентифікується строго по схилу, вкритому валунами. На ділянці (2) видно два віддалені кратери: один з них має візуально гладку поверхню, а інший - складну морфологію внутрішньої частини, вкритої валунами. У другому кратері помітна чітка спектральна особливість шпінелі. Области (3) і (4) представляють собою дрібні відкладення шпінелю на одній з невеликих вершин і біля підніжжя вершини Theophilus відповідно. Ці ділянки були представлені задля того, щоб показати, що спостереженні ефекти не можуть бути обумовлені складною топографією, оскільки вони знаходяться на горизонтальній поверхні. Подальший аналіз походження цих валунів може пролити світло на походження поверхневих відкладень Mg-шпінелі. Завдяки використанню лінійної комбінації показників кольору $C(0,95/0,75 \text{ мкм})$ і $C(2,65/1,55 \text{ мкм})$ отримані оцінки поширеності Mg-шпінелі добре узгоджуються з результатами попередніх досліджень (Dhingra et al., 2011, Lal et al., 2012).

В статті Surkov et al. (2022) була виконана оцінка вмісту реголіту, використовуючи моделювання спектральних індексів олівіну, а саме спектральний індекс олівіну як відношення інтегральних глибин смуг поглинання 1 і 2 мкм у місячних спектрах. Він є одним з найпростіших і найпоширеніших. Була розроблена модель спектрального змішування для побудови набору даних з 1 000 000 синтетичних спектрів. Ці спектри представляють спектральні суміші 5 основних мінералів місячного реголіту: плагіоклазу (PLG), піроксенів (PYR), олівіну (OLV), ільменіту (ILM) та аглютинатів (AGL). Всі мінеральні компоненти були взяті в певних пропорціях.

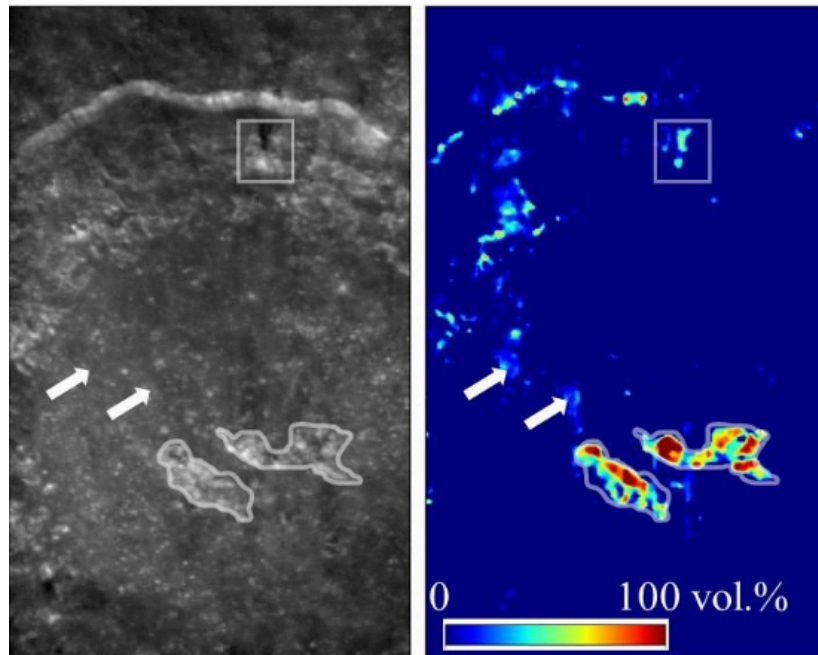


Рисунок 1.10 – Альbedo $M^3 A(750 \text{ нм})$ (ліворуч) та карта поширеності олівіну (праворуч) в кратері Коперник. Джерело: Surkov et al. (2022)

Було використано частину гіперспектрального зображення M3G20090610T030313 для кратера Коперник. Запропонований метод показав високу чутливість до вмісту олівіну. Отримані результати добре узгоджуються з Dhingra et al. (2015) та підтвердили три основні типи олівіноносних областей у кратері Коперник: (1) обидві центральні вершини (40-100 vol.%); (2) окремі відкладення олівіну на дні кратера (15 vol.%); (3) низькоальбедні плями і потоки на нижній частині північної стінки (до 30 vol.%).

Висновок: ознайомившись з літературою, статтями, сучасними дослідженнями за темою дипломної роботи, можна зробити висновок, що необхідно окремо провести роботу з глобального дослідження залежностей тих чи інших спектральних особливостей від мінералогічного складу. Одновимірна модель світлорозсіювання успішно використовується для отримання моделей місячного реголіту та його спектрів. Також для ідентифікації мінералів активно використовуються методи машинного навчання. Але актуальним залишається питання, як якісно перевірити

кореляцію в даних модельних реголітів. Для цього в дипломній роботі планується використовувати одновимірну модель розсіювання, адже, як було зазначено вище, лабораторних зразків не вистачає для глобального статистичного дослідження, а також пропонується використати новий метод, який передбачає використання характеристичного вектора спектральних ознак і методів машинного навчання, щоб оцінити якість отриманої моделі місячного реголіту.

РОЗДІЛ II. МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ

2.1. Відтворення спектрів реголітоподібного середовища з мінералогічним складом подібним до місячного

Задача дипломної роботи полягає у тому, щоб визначити статистичну кореляцію між складом лабораторних зразків та певними спектральними параметрами, використовуючи машинне навчання. Для цього використовувався Google Colab. Colab — це розміщена служба для ноутбуків Jupyter, яка не потребує налаштування, але забезпечує повний функціональний доступ до обчислювальних ресурсів, включаючи графічні процесори. Colab дозволяє писати і довільний код на Python через браузер, що далі виконується на віддаленій цифровій хмарі та повертає результат, і особливо добре підходить для машинного навчання та аналізу даних. Для початку була напрацьована спектральна бібліотека синтетичних спектрів мінералогічних сумішей аналогів місячного реголіту. Для цього був розроблений код для моделювання спектрів відбиття поверхнею безатмосферних тіл Сонячної системи, а також код для спектрального змішування за допомогою одновимірної моделі світлорозсіювання. Результати відтворення місячного реголіту, а також співвідношення модельних концентрацій компонент у складі показано на Рис. 2.1 та Рис. 2.2.

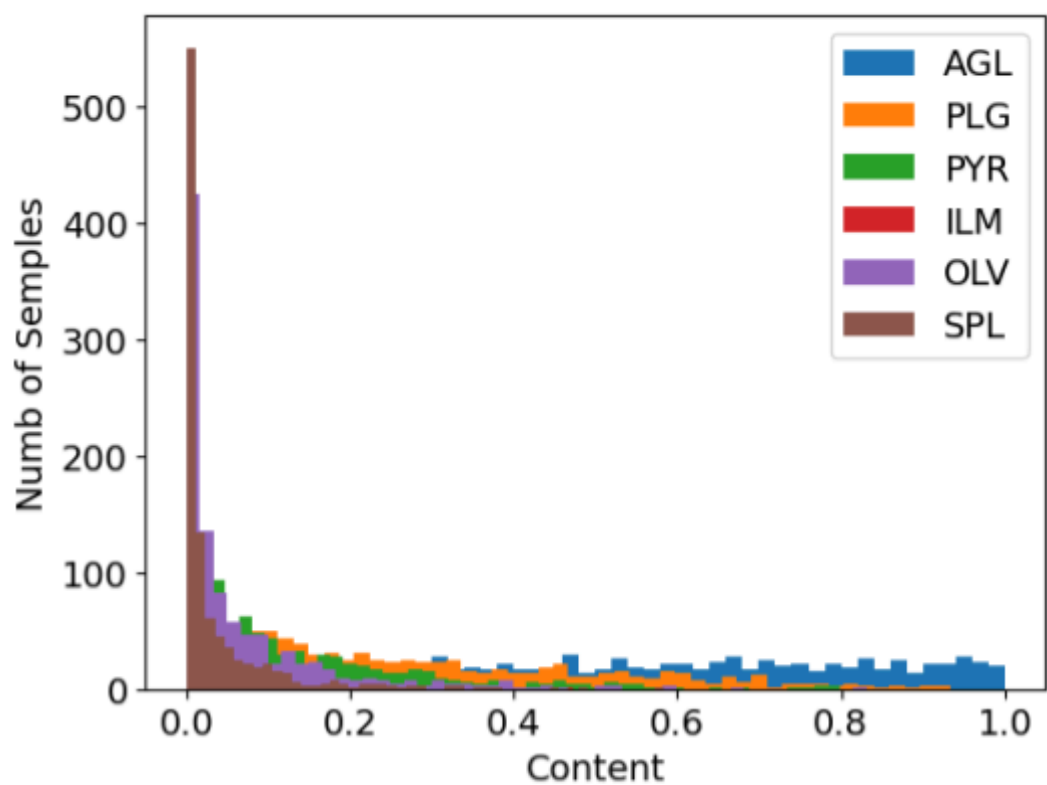


Рисунок 2.1 – Розподіл за складом у модельному об'ємі.

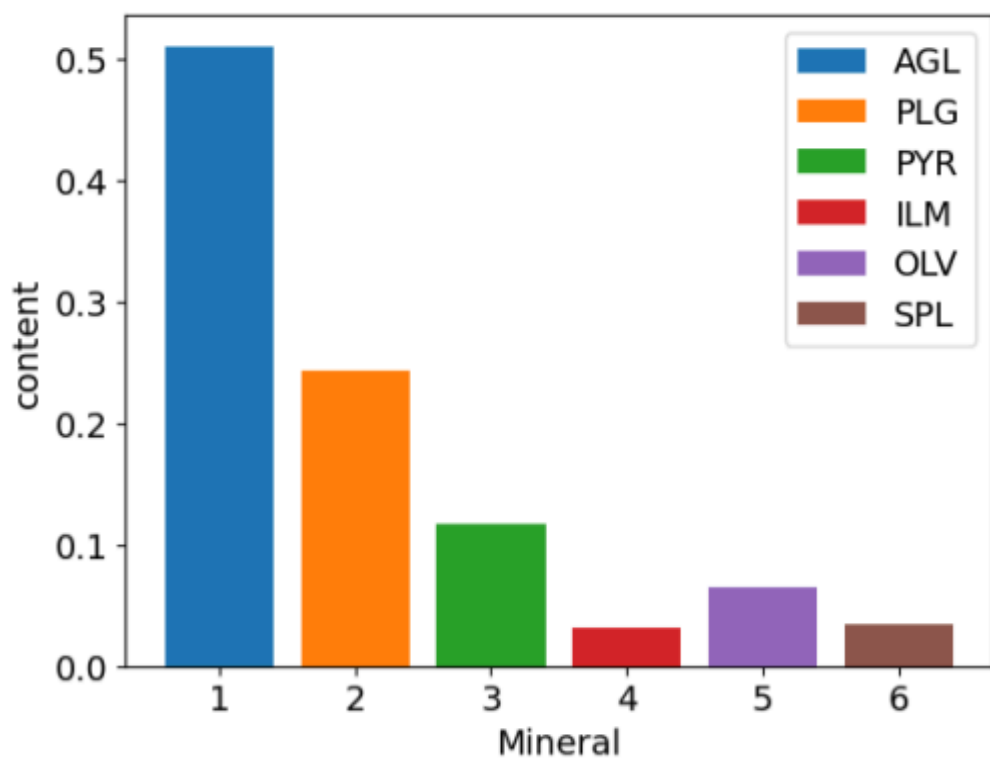


Рисунок 2.2 – Співвідношення концентрацій компонентів для відтвореного місячного реголіту.

2.2. Методи інверсії спектральних даних

Щоб отримати кореляцію між мінералогічним складом і спектральними даними з урахуванням одночасного впливу всіх модельованих мінералів, була використана часткова регресія найменших квадратів (PLS-regression), багатовимірна лінійна регресія (MLR-regression) та багатосаровий перцептрон (MLP-regressor).

Регресія – це статистичний метод, який використовується для прогнозування постійних результатів, а також для вивчення зв'язків у заданому наборі даних.

PLS (Partial Least Squares) регресія - це метод, який використовується для моделювання взаємозв'язку між набором незалежних змінних (пояснюючих змінних) та залежною змінною. Цей метод корисний у випадках, коли вхідні дані мають високу просторову розмірність або коли присутня велика кількість корельованих змінних. Робота цього методу полягає у тому, що він намагається знайти нові змінні, які є комбінацією або лінійною комбінацією початкових змінних. Ці "нові" змінні (або так звані "латентні змінні") будуть відображати максимальну дисперсію в початкових змінних та максимально корелювати з залежною змінною. PLS регресія використовується для розв'язання завдань прогнозування та моделювання складних взаємозв'язків у даних.

Переваги цього методу:

- PLS регресія не передбачає обов'язковості застосування певних теоретичних моделей, що робить її гнучкою;
- Даний метод працює ефективно в умовах мультиколінеарності, коли змінні сильно корелюють між собою;
- Цей метод ефективний в умовах великої кількості початкових змінних;
- PLS регресія може успішно впоратися з багатовимірними даними;
- Вона дозволяє зменшити вплив мультиколінеарності на результати моделювання;

Однак, є також **недоліки**, які слід брати до уваги:

- Однією з найбільших критик PLS регресії є те, що створені латентні змінні не завжди легко інтерпретовані;

- Як і інші методи, PLS може бути чутливим до наявності шуму у вхідних даних, що може призвести до менш точних прогнозів;

Але, все ж таки PLS регресія залишається потужним інструментом для аналізу даних у випадках, коли інші методи, наприклад, регресія з використанням методу найменших квадратів (Ordinary Least Squares) або гребенева регресія (Ridge Regression), можуть не бути настільки ефективними.

Також розглядається багатовимірна лінійна регресія або MLR (Multiple Linear Regression). Цей статистичний метод, який використовується для вивчення зв'язку між однією залежною змінною і двома або більше незалежними змінними. Вона базується на ідеї побудови лінійної моделі, яка описує цю взаємодію та дозволяє прогнозувати значення залежної змінної на основі значень незалежних змінних. Так, у випадку MLR з двома незалежними змінними, модель може бути представлена так:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \varepsilon$$

де Y - залежна змінна, X_1, X_2 - незалежні змінні, $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ - коефіцієнти, які визначають форму лінії, що найкраще підходить до даних, а ε - помилка моделі.

MLR передбачає лінійну залежність між змінними. Вона будує лінію (для двовимірної задачі; у тривимірному випадку будується поверхня, у загальному випадку - гіперповерхні), що найкраще підходить до даних. Також цей метод дозволяє врахувати вплив багатьох незалежних змінних на залежну змінну та дає можливість оцінювати важливість кожної незалежної змінної та її внесок у прогнозування.

Отже, обидві методи є корисними статистичними інструментами для аналізу та прогнозування, але вони мають істотні відмінності. Наприклад, кількість розглядаючих змінних. MLR використовується, коли є одна залежна

змінна та дві або більше незалежних змінних. Модель MLR шукає лінійну залежність між цими змінними. PLS також працює з однією залежною змінною, але може враховувати багато незалежних змінних, у тому числі й ті, що корелюють між собою. Також, однією із головних відмінностей є те, що MLR не припускає кореляції між незалежними змінними. Вона передбачає, що ці змінні є незалежними одна від одної. Тоді коли як було зазначено раніше, PLS враховує кореляцію між незалежними змінними. Цей метод розглядає латентні фактори або компоненти, які є комбінацією початкових змінних та їх взаємодії з залежною змінною. З цього випливає наступна відмінність: MLR може бути обмеженим у роботі з багатовимірними даними через проблему мультиколінеарності, а PLS ефективно працює з багатовимірними даними та може уникнути проблеми мультиколінеарності, оскільки, знов ж таки, враховує кореляцію між змінними.

Багатошаровий перцептрон MLP (Multi-Layer Perceptron) – це нейронна мережа прямого зв'язку (тобто дані передаються лише в одному напрямку). MLP-Regressor доволі потужний інструмент для вирішення задач нелінійної регресії. Мережа штучних нейронів складається з декількох шарів: вхідного, прихованого(их) та вихідного. Суть роботи такої мережі полягає у тому, щоб обробити вхідні сигнали кожного нейрону за допомогою чисельних вагів та активаційних функцій та передати їх наступному шару. Процес навчання MLP-Regressor полягає в тому, щоб оптимізувати ваги мережі так, щоб вона найкращим чином відображала залежності між вхідними та вихідними даними. Цей процес зазвичай включає ітеративне оновлення ваг шляхом зменшення функції втрати між прогнозованими та справжніми значеннями. Активаційна функція визначає вид залежності між вихідним та вхідним сигналом. MLP-Regressor має 4 вбудовані види активаційних функцій: identity – це безопераційна активація, повертає $f(x) = x$; logistic – логістична сигмоїдна функція, повертає $f(x) = 1 / (1 + \exp(-x))$; tanh – тангенс гіперболічний, повертає $f(x) = \tanh(x)$; relu – випрямлена лінійна одинична функція, повертає $f(x) = \max(0, x)$. В цій роботі використовується активаційна функція tanh.

MLP Regressor, завдяки своїй гнучкості та здатності до навчання, має здатність адаптуватися до різних типів даних та зв'язків між ними, у тому числі складні нелінійні зв'язки. Більш того, обчислювальні ресурси дозволяють використовувати MLP Regressor для аналізу великих наборів даних. Однак з цього витікає недолік, час навчання нейромережі може тривати доволі довгий час, особливо якщо мережа велика. Також при роботі з MLP Regressor можна часто зустрітись із перенавчанням нейромережі, що призводить до погіршення її універсальності. Про це докладніше розповідається в Розділі III.

2.3. Метрики оцінки якості інверсії для неперервних даних

Метрики в машинному навчанні використовуються для перевірки точностей моделей. З урахуванням набору даних, що використовуються в цій роботі, були обрані наступні метрики:

- score – найпростіша метрика, яка визначає частку правильних прогнозів. Це відношення правильних прогнозів до загальної кількості фактичних значень. Приймає значення від 0 до 1. Найкраще - це 1. Це означає, що модель правильно передбачає 100% значень ;
- r2_score – коефіцієнт детермінації. Це статистичний показник, який використовується для визначення частки дисперсії залежної змінної, яку можна передбачити або пояснити незалежною змінною. Іншими словами, R^2 показує, наскільки добре регресійна модель прогнозує результати спостережуваних даних. Формула для обчислення r2_score:

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

де y_i - фактичні значення, \hat{y}_i - прогнозовані, \bar{y} - середнє від фактичних значень, n – кількість фактичних значень. R^2 приймає значення від 0

до 1. Якщо 0, то модель не передбачає ніякий зв'язок між залежною і незалежною змінною; 1 - передбачає 100% зв'язку; від'ємне значення говорить про те, що зв'язок побудований неправильно.

- `explained_variance_score` – вимірює різницю між дисперсією цільової змінної та середнім квадратичним відхиленням прогнозованих значень від цільових. Формула:

$$1 - \frac{\sigma(y_i - \hat{y}_i)}{\sigma(y_i)}$$

де y_i - фактичні значення, \hat{y}_i - прогнозовані. Приймає значення від 0 до 1. Значення 1 означає ідеальну відповідність між фактичними значеннями та прогнозованими.

- `d2_absolute_error_score` є узагальненням R^2 , де замість квадратів відхилень використовується абсолютні значення відхилень: $|y_i - \hat{y}_i|$.

Також приймає значення від 0 до 1, де 1 – найкраще узгодження між фактичними та прогнозованими значеннями.

- `mean_absolute_error` визначає середню абсолютну похибку. Іншими словами – це метрика ризику, що відповідає очікуваному значенню абсолютної втрати від помилки. Обчислюється за формулою:

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|$$

Чим менше це значення, тим краще. Найкраще, коли $\text{mae}=0,0$.

- `mean_absolute_percentage_error` – вимірює відсоткову середню абсолютну помилку між фактичними і прогнозованими значеннями.

Формула:

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \times 100\%$$

Чим менше це значення, тим краще. Найкраще, коли $\text{tare}=0,0$. Однак, в Python результат не є відсотком у діапазоні $[0, 100]$, а значення 100 означає не 100%, а просто 10^2 . Тобто значення, яке нам видає код, необхідно буде помножити ще на 100.

2.4. Спектральні параметри

Метод перевірки кореляції між концентраціями мінералів та їх спектрами в цій роботі передбачає використання спектральних параметрів. Отже, були обрані наступні параметри: показники кольору $C(950/750 \text{ нм})$, $C(2250/1550 \text{ нм})$ і $C(1550/750 \text{ нм})$ для піроксенів та ільменіту; $C(950/750 \text{ нм})$, $C(2650/1550 \text{ нм})$ та параметр шпінелі для шпінелей; піроксеновий, олівіновий та олівіно-піроксеновий параметр для піроксенів та олівінів. Для визначення співвідношення темних мафітів (залізовмісних порід, таких як ільменіт, піроксен, олівін тощо) і світлих алюмосилікатів (різних морських і материкових польових шпатів) використовується значення альbedo при 750 нм $A(750)$. Через відсутність у спектрах плагіоклазів та аглютинатів особливостей поглинання, їх визначення дещо ускладнено. Тому для цього використовуємо показник кольору $C(2650/750 \text{ нм})$ і кілька альbedo, принаймні, при 750, 1550 і 2650 нм для опису загальної відбивної здатності цих компонентів. Детальний опис деяких параметрів представлений в Розділі III.

Висновки: завдяки одновимірній моделі світлорозсіювання було синтезовано набір спектрів, модельні параметри якого відповідають даним місячних досліджень з аналізу лабораторних даних місячних зразків. Цей метод дозволяє виконати процедуру спектрального змішування для основних місячних породоутворюючих мінералів: плагіоклазу, піроксенів, олівіну, шпінелі, ільмениту та аглютинатів. Ми розширили цю методику за допомогою теорії ефективного середовища Максвелла-Гарнетта, щоб врахувати спектральні ефекти космічного вивітрювання. Перевірка результатів виконується шляхом порівняння модельних результатів з існуючими лабораторними даними. На Рис. 2.1 показано розподіл за складом у модельному об'ємі. За малюнком видно, що отриманий результат відповідає дійсності.

Також було перевірено, чи добре відтворюється середній склад реголіту Місяця. Для цього було отримано середнє співвідношення концентрацій між компонентами. Результати показані на Рис. 2.2. На рисунку бачимо, що середній модельний склад відповідає складу місячного реголіту.

Були визначені необхідні спектральні параметри, які використовуються для перевірки кореляції між модельованим реголітом та його спектрами.

Для того, щоб отримати кореляцію між мінералогічним складом і спектральними даними з урахуванням одночасного впливу всіх модельованих мінералів, було розглянуто декілька методів, а саме: PLS регресія, багатовимірна лінійна регресія MLR та багат шаровий перцептрон MLP-Regressor. Запропоновані методи найкраще підходять для відтворення залежностей в розглядаємому наборі даних. Перевірка точностей моделей відбувається завдяки спеціальним метрикам: `score`, `r2_score`, `explained_variance_score`, `d2_absolute_error_score`, `mean_absolute_error`, `mean_absolute_percentage_error`.

РОЗДІЛ III. РЕЗУЛЬТАТИ

3.1. Тестування моделей інверсії спектрів

При тестуванні інверсії 13 спектральних параметрів методів PLS-regression, MLR та MLP-Regressor були отримані наступні результати, які наведені на рисунках 3.1 – 3.3.

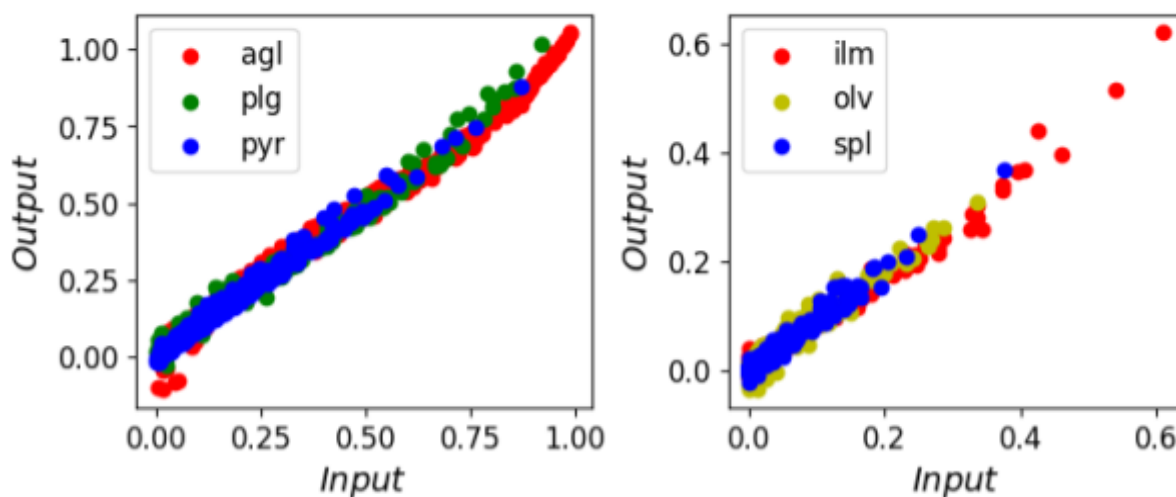


Рисунок 3.1 – Графіки продуктивності для моделі, побудованої PLS-регресією. По віссі O_x (Input)- фактичні значення, по віссі O_y (Output)- прогнозовані.

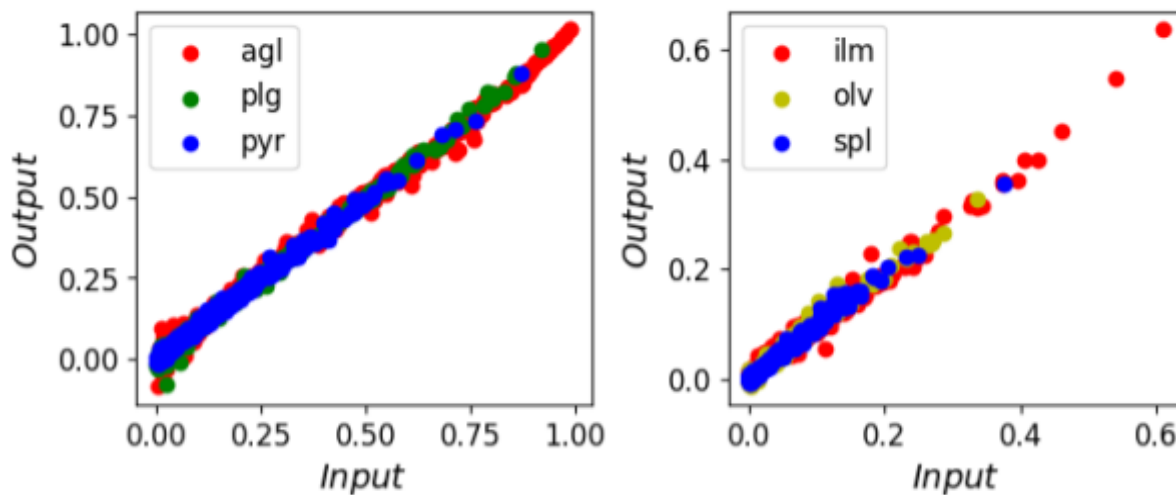


Рисунок 3.2 – Графіки продуктивності для моделі, побудованої MLR-регресією. По віссі O_x (Input)- фактичні значення, по віссі O_y (Output)- прогнозовані

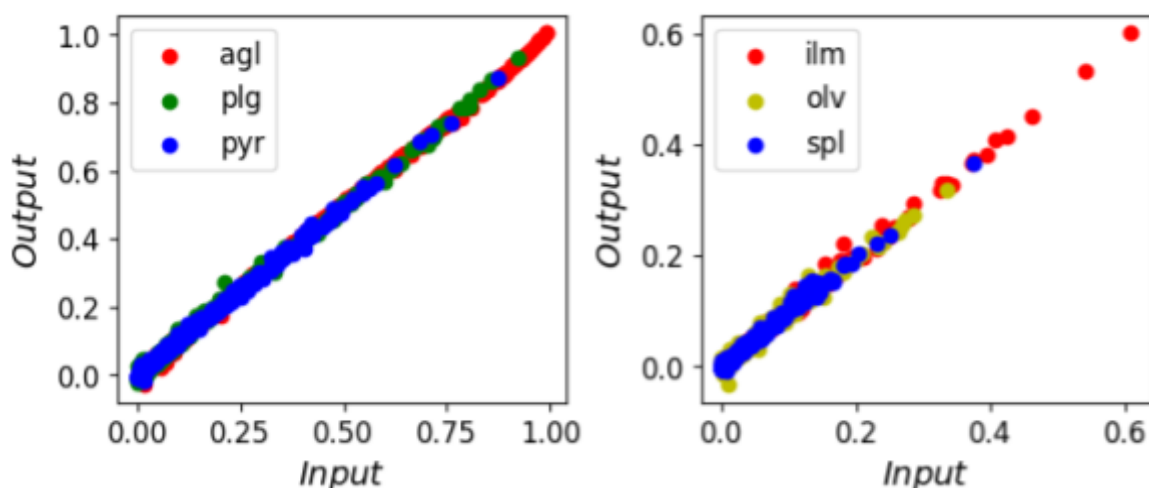


Рисунок 3.3 – Графіки продуктивності для моделі, побудованої MLP-Regressor. По віссі O_x (Input)- фактичні значення, по віссі O_y (Output)- прогнозовані

Всі три моделі показали доволі високу точність, причому для більшості метрик багатошарова нейромережа - найвищу. Метрики кожної моделі наведені в Таблиці 3.1.

Таблиця 3.1 – Метричні розрахунки для всіх моделей (тут червоний– найгірші значення, зелений– найкращі)

	score	score_r2	exp_var	aes	mae	mape
PLS	0.970861278	0.970861278	0.971232267	0.814207470	0.015377566	24.72861747
MLR	0.988975025	0.988975025	0.988979611	0.889977020	0.009264324	8.667955513
MLP	0.993354754	0.993354754	0.993371234	0.918760722	0.005828746	11.91850792

Таблиця 3.2 – Коефіцієнти кореляції фактичних значень і прогнозованих для кожного мінерала

	k_agl	k_plg	k_pyr	k_ilm	k_olv	k_spl
PLS	0.992399	0.994189	0.992697	0.987553	0.977405	0.985409
MLR	0.996778	0.997866	0.996709	0.993263	0.994457	0.993804
MLP	0.999103	0.998662	0.997822	0.997275	0.995872	0.996339

Отже, вдалося встановити, що: мають значущі кореляції показники кольору C(950/750 нм), C(2250/1550 нм) і C(1550/750 нм) із піроксенами та ільменітом відповідно; C(950/750 нм), C(2650/1550 нм) та параметр шпінелі зі

шпінелями; піроксеновий, олівіновий та олівіно-піроксеновий параметри з піроксенами та олівінами. Також встановлено, що значення альbedo $A(750 \text{ нм})$ дійсно є відповідним параметром для чисельного визначення співвідношення темних мафітів і світлих алюмосилікатів. Можливим фізичним поясненням цього статистичного ефекту є відсутність власних особливостей поглинання мінералів на цій довжині хвилі. Плагіоклази та аглютинати також вдалося прогнозувати, а отже показник кольору $C(2650/750 \text{ нм})$ і альbedo при 750, 1550 і 2650 нм для опису загальної відбивної здатності цих компонентів корелюють із відповідними концентраціями плагіоклазів та аглютинатів.

З іншого боку, висока точність у MLP-Regressor може бути пояснена тим, що відбувся так званий *overfitting*. *Overfitting* в теорії машинного навчання це випадок, коли алгоритм занадто близько або навіть точно відповідає своїм навчальним даним, що призводить до того, що модель не може робити точні прогнози чи висновки на основі будь-яких даних, окрім даних навчання. Одна з причин *overfitting* полягає у тому, що модель навчання надто складна в порівнянні з обсягом навчальних даних. Така модель "підлаштовується" під кожен окремий приклад у навчальних даних, включаючи шум або випадкові відхилення, а не відтворює загальні закономірності. Звичайно, бажано, уникати *overfitting*. Існують так звані методи регуляризації, такі як: *lasso regularization* (регуляризація ласо), *ridge regression* (хребтова регресія), *dropout* (відсів) - всі вони спрямовані на виявлення та зменшення шуму в даних.

Інший спосіб усунення *overfitting* полягає у тому, що MLP-Regressor приймає 23 параметри. Тобто більш гнучка, ніж два попередні методи, адже можна налаштовувати ці параметри так, щоб нейромережа спрацювала коректно. Для цього необхідно проводити додаткові дослідження, які виходять за межі даної дипломної роботи.

3.2. Вплив набору спектральних параметрів на точність моделей

При дослідженні роботи наших алгоритмів було виявлено, що кількість параметрів суттєво впливають на точність усіх трьох моделей. Справа у тому, що на початку усі три методи приймали лише вісім спектральних параметрів (значення альbedo при 750 нм, 1550 нм та 2650, показники кольору: C(950/750 нм), C(2250/1550 нм), C(1550/750 нм), C(2650/1550 нм), C(2650/750 нм)). І їхні точності виявилися меншими близько на 20% у порівнянні із тими, що були отримані, коли були додані параметр шпинелі, олівіновий, олівін-піроксеновий та піроксеновий параметри.

Таблиця 3.3 – Порівняння метрик всіх моделей з 8 спектральними параметрами (червоний– найгірші значення, зелений– найкращі)

	score	score_r2	exp_var	aes	mae	mape
PLS	0.7872553	0.7872553	0.7874583	0.5291324	0.0280748	36.0486577
MLR	0.7983599	0.7983599	0.7984260	0.5567814	0.0252817	32.2832558
MLP	0.8183739	0.8183739	0.8183824	0.5953705	0.0205451	32.1573795

Таблиця 3.4 – Коефіцієнти кореляції фактичних значень і прогнозованих для кожного мінерала при 8 спектральних параметрах

	k_agl	k_plg	k_pyr	k_ilm	k_olv	k_spl
PLS	0.987970	0.951989	0.974445	0.973149	0.513214	0.746346
MLR	0.993424	0.951140	0.984085	0.974192	0.569559	0.745813
MLP	0.998943	0.979963	0.996246	0.983683	0.786119	0.967176

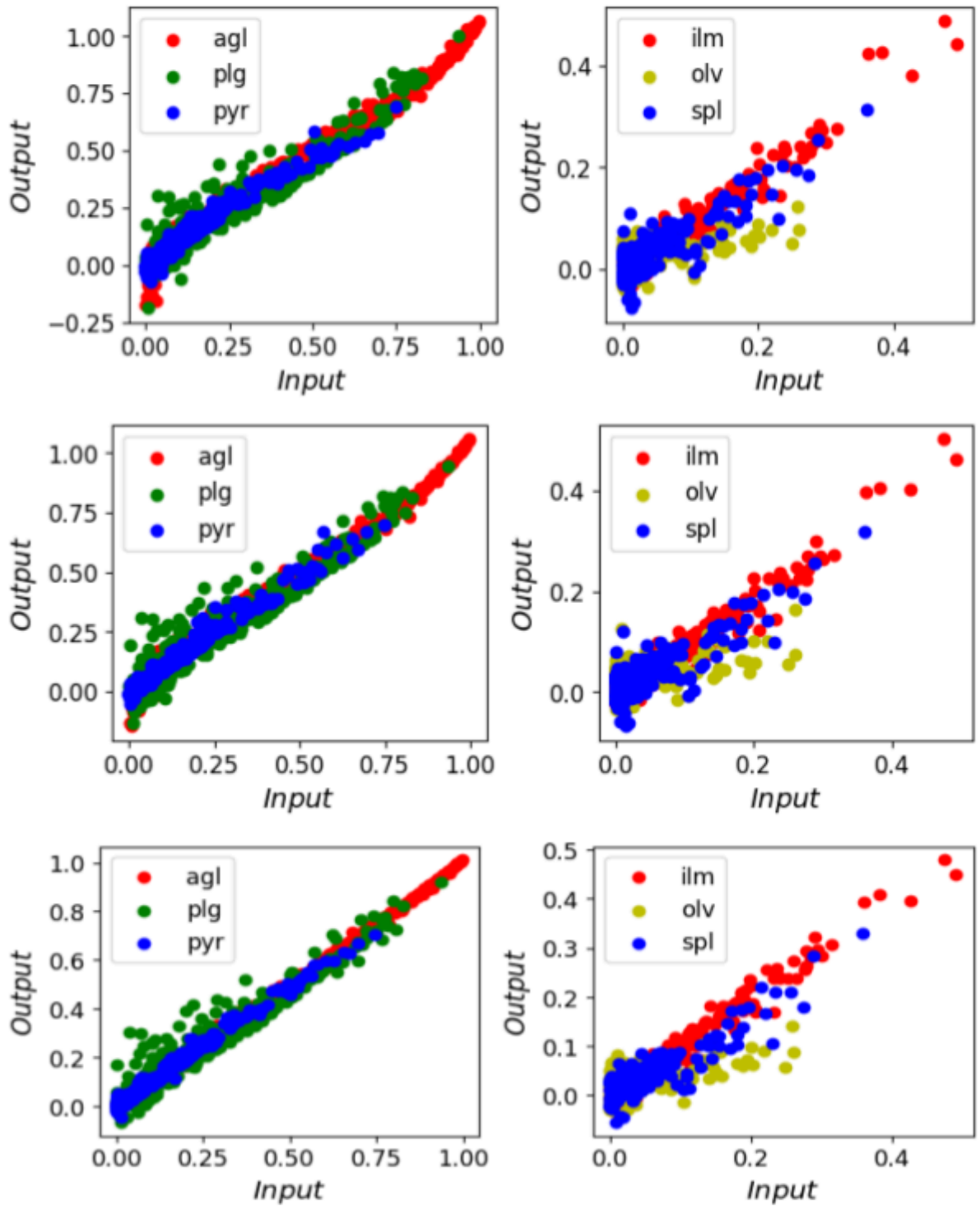


Рисунок 3.4 – Порівняння фактичних значень (Input) з прогнозованими (Output) PLS-, MLR-, MLP- моделей відповідно з використанням 8 спектральних параметрів.

Таке значне підвищення точності із залученням додаткових спектральних параметрів має своє пояснення. Найбільш характерною особливістю шпінелі є широка, глибока смуга поглинання, що охоплює ~1250-3500 нм (Pieters et al., 2014, Moriarty III et al., 2023) (Рис. 1.6). Ця особливість є композицією двох поглинань, що перекриваються, з центрами при ~1900 і ~1850 нм, і спостерігається в діапазоні вмісту Mg, Fe і Cr, і для зручності пропонують цю особливість називати особливістю 2000 нм. Її доволі складно виявити в даних M^3 , тому, зазвичай, використовують відношення сигналів в спектральних каналах у межах і поза межами цієї особливості. Наприклад, Pieters et al. (2014) використовували відношення значення відбиття при 1400 нм до значення при 1750 нм, назване коефіцієнтом шпінелі:

$$\frac{R_{1400}}{R_{1750}} \quad (3.1)$$

Однак цей коефіцієнт має певні обмеження як окремий параметр, оскільки він не може відокремлювати шпінель від піроксенів (особливо піроксенів з низьким вмістом Ca, Fe). Причина цього полягає у тому, що піроксени також мають особливості поглинання біля 2000 нм. Крім того залізовмісні шпінелі демонструють поглинання близько 1000 нм (Рис. 1.6), що буде враховано в коефіцієнті піроксену Pieters et al. (2014). Це означає, що ознаки залізовмісної шпінелі можуть бути ненавмисно класифіковані як піроксен. Інший підхід запропонували Moriarty III et al. (2023). Їхній параметр для шпінелі обчислює співвідношення між екстрапольованим і фактичним значеннями відбиття на 2600 нм, причому екстрапольоване значення обчислюється шляхом розширення спектрального континууму 750-1250 нм:

$$\frac{\left(\frac{R_{1250} - R_{750}}{500}\right) \times 1350 + R_{1250}}{R_{2600}} \quad (3.2)$$

У зв'язку з тим, що 2600 нм знаходиться в межах характеристики шпінелі 2000 нм, за межами характеристики піроксену 2000 нм і піддається відносно меншому тепловому випромінюванню, ніж довші довжини хвиль, воно було спеціально обрано як довжину хвилі для порівняння. Критичні точки 750 і 1250 нм знаходяться за межами звичайних смуг поглинання піроксену (Moriarty III et al., 2023).

Наступний параметр – піроксеновий, запропонований Pieters et al. (2014). Його формула:

$$\frac{R_{700} + R_{1200}}{R_{950}} \quad (3.3)$$

Тут використовуються сума двох довжин хвиль на симетричних крилах смуги для оцінки континіуму, а в знаменнику значення поблизу центру для оцінки інтенсивності поглинання. Отже, ця формула виражає ширину смуги поглинання. Вона допомагає краще відокремлювати плагіоклаз від інших мінералів.

Інші співвідношення: олівіновий і олівіно-піроксеновий параметри. Олівіновий параметр використовуємо для кращого ідентифікування олівіну та його концентрації в матеріалі. Визначається він наступним чином:

$$\frac{(R_{1050} - R_{950})}{(R_{1050} + R_{950})} \quad (3.4)$$

Якщо цей параметр виявляється близький до 0, це означає, що альbedo при 1050 нм приблизно дорівнює альbedo на 950 нм. Це може вказувати на малу кількість олівіну в матеріалі, оскільки олівін має характерні смуги поглинання в цьому діапазоні довжин хвиль, в той час як для піроксенів $A(1050 \text{ нм})$ має бути більше за $A(950 \text{ нм})$. Якщо ж цей параметр від'ємний, це означає, що різниця між коефіцієнтами відбиття при 1040 нм і 950 нм є невеликою, або навіть що мінімум 1 мкм смуги суттєво зміщений в червоний бік спектру, що свідчить про високий вміст олівіну.

Олівіно-піроксеновий параметр дає змогу ще краще відокремлювати олівін і піроксени в суміші. Його формула визначається так:

$$\frac{(R_{1900} - R_{1450})}{(R_{1900} + R_{1450})} \quad (3.5)$$

Тут якщо параметр додатній, то це означає, що коефіцієнт відбиття при 1900 нм більший, ніж при 1450 нм. Це може вказувати на переважання олівіну в матеріалі, оскільки олівін має характерні смуги поглинання в діапазоні більш довгих довжин хвиль. Якщо ж від'ємний, то це може свідчити про переважання піроксену, оскільки коефіцієнт відбиття при 1450 нм виявляється більшим, ніж при 1900 нм. Піроксени мають характерні смуги поглинання при коротших довжинах хвиль.

3.3. Обґрунтування використання різних наборів спектральних параметрів при дослідженні мінералогічного складу

Задача отримання лабораторних сумішей та їх спектрів не нова. Наприклад, у статті Korokhin et al. (2024) був використаний аналогічний алгоритм для відтворення наборів спектрів-симулянтів місячного реголіту. Але відмінність полягає у тому, що автори тієї статті, задля перевірки кореляції між мінералогічним складом і спектральними даними, використовували просто спектри відбиття, які вони подавали як параметр X тієї чи іншої моделі.

Для того, щоб оцінити, чи варто взагалі використовувати саме спектральні параметри, було вирішено перевірити, які точності будуть мати моделі, якщо подати спектри відбиття у якості вхідного параметра. Результати представлені нижче на Рисунку 3.4, у Таблиці 3.5 та у Таблиці 3.6.

Таблиця 3.5 – Порівняння метрик для всіх моделей з використанням чистих спектрів (червоний – найгірші значення, зелений – найкращі)

	score	score_r2	exp_var	aes	mae	map
PLS	0.9184309	0.9184309	0.9187506	0.7194779	0.0211748	22.778544
MLR	0.9404529	0.9404529	0.9405613	0.7663187	0.0171353	15.640946
MLP	0.9812109	0.9812109	0.9812653	0.8821188	0.0062264	6.968001

Таблиця 3.6 – Коефіцієнти кореляції фактичних значень і прогнозованих для кожного мінерала при чистих спектрах

	k_agl	k_plg	k_pyr	k_ilm	k_olv	k_spl
PLS	0.984412	0.986132	0.961702	0.933108	0.894744	0.936353
MLR	0.988271	0.992114	0.973178	0.938295	0.931914	0.943172
MLP	0.999802	0.998228	0.997676	0.994071	0.955032	0.990714

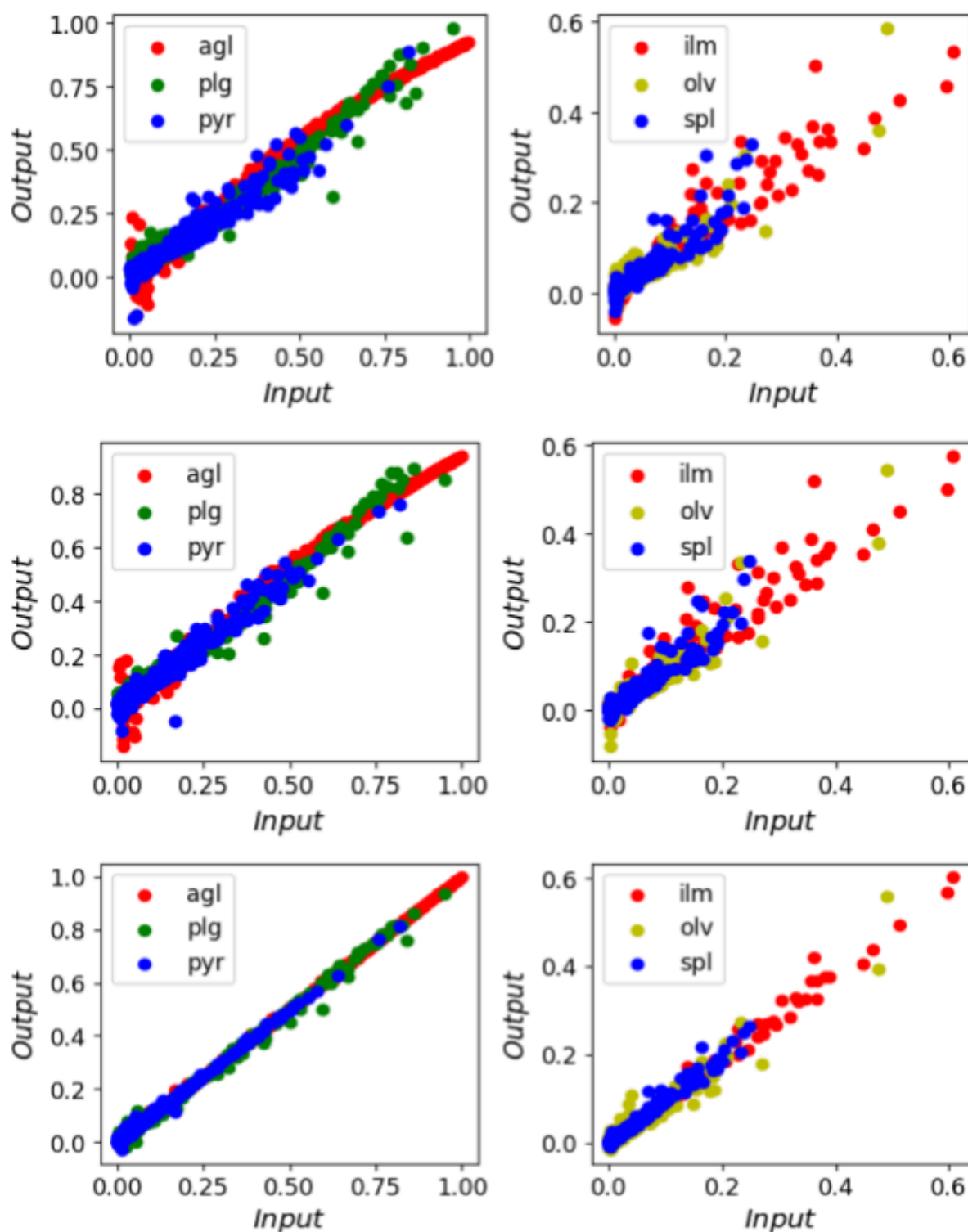


Рисунок 3.4 – Порівняння фактичних значень (Input) з прогнозованими (Output) PLS-, MLR-, MLP- моделей відповідно з використанням чистих спектрів.

Отже, використання лише спектрів відбиття призводить до менш точних моделей. Причому, якщо порівнювати тільки метрики, то виходить, що точності доволі великі, а отже, виходить, що моделі показали гарну кореляцію між змодельованими концентраціями мінералів і їх спектрами. Але якщо роздивляться вже результати, порівнюючи графіки фактичних значень і прогнозованих, то видно, що для окремих мінералів моделі показують набагато гірші результати. Для аглютинатів моделі продовжують давати непогані результати, а от вже, наприклад, для піроксенів, ільменітів тощо, наявне дуже сильне відхилення від діагоналі на графіках, що говорить про достатньо велику кількість “хибних спрацювань”.

Вірогідним чинником гіршої, у порівнянні зі спектральними параметрами, кореляції окремих елементів із спектрами альbedo може бути більш суттєва залежність альbedo від фотометричних умов спостереження, чи точніше, недостатньо якісна фотометрична редукція даних M³ у фотометричну систему RELAB. Наприклад, зменшення альbedo у всьому спектрі відбувається не за рахунок збільшення темної компоненти, як це інтерпретується у нашій моделі, а через недостатню компенсацію перерахунку спектрів, отриманих при суттєвих значеннях фазового кута на кут 30°. Для показників кольору, цей ефект також має місце, але є додатково скомпенсований діленням альbedo у різних довжинах хвиль, але при однакових фотометричних умовах. Таким чином, некомпенсованою залишається лише спектральна залежність фазової функції, якою можна майже знехтувати, якщо обрані довжини хвиль близькі (до кількохсот нанометрів).

Слід зауважити, що смуги поглинання у спектрах Місяця представляють собою незначні депресії – невеликі відхилення (10-15%) від загального середнього нахилу. Таким чином, працюючи зі спектрами треба бути особливо обережним з такою поведінкою нейронної мережі, коли вона в першу чергу визначає комбінацію мінералів, яка найкраще описувала б “середні” параметри спектрів, наприклад, середнє альbedo та нахил, а вже

потім “зважала” б у чисельному плані “незначні” спектральні особливості у вигляді смуг. Одним із шляхів подолання такої поведінки може бути якісна регуляризація та залучення додаткових інструментів, таких як запропонована у Korokhin et al. (2024) концепція *сірої компоненти*.

ВИСНОВКИ

У дипломній роботі було проведено комп'ютерне моделювання синтетичного набору спектрів, які відповідали модельним зразкам місячного реголіту за допомогою одновимірної моделі спектрального змішування. За отриманими наборами та модельними концентраціями було проведено аналіз методів кількісного визначення мінералогічного складу поверхні Місяця за спектральними даними. Окрім різних статистичних підходів до інверсії спектральних даних, було проаналізовано якість отриманих результатів в залежності від набору параметрів, що враховуються при визначенні статистичних зв'язків спектральних даних із мінералогічним складом поверхні.

В дипломній роботі були отримані наступні результати:

- 1) Інверсія синтетичного набору спектрів за допомогою досліджуваних методів показує високу, в цілому, точність для всіх методів за всіма використаними метриками, що свідчить про доцільність інвертування спектральних даних шляхом статистичного аналізу спектральних параметрів, а не прямого моделювання спектрів, та можливості підвищення статистичної значимості бібліотеки спектрів за рахунок синтезування додаткових спектрів з використанням моделей нелінійного спектрального змішування;
- 2) Формально найкращі значення метрик демонструє модель інверсії, в якій для пошуку кореляції використовуються нейронні мережі. Нейронна мережа дає ті самі показники якості при визначенні концентрацій найпоширеніших мінералів, насамперед, аглютинатів, плагіоклазу та піроксенів, що і множинні лінійні регресії, але демонструє значно кращі результати (більш тісну кореляцію модельного та відновленого параметру) при визначенні мінералів із значно меншим поширенням/вмістом, наприклад, олівінів та Mg-шпінелей.

3) Тестування залежності якості відтворення складу від вхідного вектору спектральних даних виявило суттєву залежність від останнього. Так, найкращі результати інверсії були отримані при виборі вектора, що складався із набору специфічних для модельованих мінералів спектральних параметрів. Причому, точність відтворення вища для більшого набору таких параметрів. Тестування інверсії спектрів відбиття нормованих на стандартні умови освітлення виявилася нижчою.

Отримані результати окреслюють перспективні напрямки для подальшої роботи у галузі дистанційного зондування складу поверхні безатмосферних тіл Сонячної системи. В цілому, використання одновимірної моделі може бути розповсюджено на інші планети і малі тіла Сонячної системи, за умови коригування складу та залучення додаткового набору спектрів відбиття для мінералів, які не розповсюджені на Місяці. Процедура інверсії та отримання необхідних коефіцієнтів додаткової корекції не потребує.

Також слід зауважити, що у даній роботі не було окремо проаналізовано поведінку моделей інверсії від структурних характеристик реголіту, насамперед, середнього розміру та розподілу за розміром частинок та густини їхнього пакування. Загалом, структурні особливості відіграють меншу роль саме у формуванні спектрів, але адекватна кількісна оцінка необхідна у майбутньому.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

Adams, J. B. (1974). Visible and near-infrared diffuse reflectance spectra of pyroxenes as applied to remote sensing of solid objects in the solar system. *J. Geophys. Res.*, 79, 4829–4836.

Adams, J. B. (1975). Interpretation of visible and near-infrared diffuse reflectance spectra of pyroxenes and other rock-forming minerals. *Infrared and Raman Spectroscopy of Lunar and Terrestrial Minerals* (ed. C. Karr). New York: Academic Press, 91–116.

Burns, R. (1993). *Mineralogical Applications of Crystal Field Theory*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 459 pp.

Cloutis, E.A., & Gaffey, M.J. (1993). Lunar regolith analogues: spectral reflectance properties of compositional variations. *Icarus*, 102, 203–224.

Dhingra, D., Pieters, C. M., Boardman, J. W., Head, J. W., Isaacson, P. J., Taylor, L. A. (2011). Compositional diversity at Theophilus Crater: Understanding the geological context of Mg-spinel bearing central peaks. *Geophysical Research Letters*, 38, L11201.

Dhingra, D., Pieters, C. M., Head, J. W. (2015). Multiple origins for olivine at Copernicus crater. *Earth and Planet. Sci. Lett.*, 420, 95-101.

Korokhin, V., Surkov, Y., Mall, U., Kaydash, V., Velichko, S., Velikodskya, Y., Shalygina, O. (2024). Applying machine learning to a nonlinear spectral mixing model for mapping lunar soils composition using CHANDRAYAAN-1 M3 data. *Planetary and Space Science*, 244.

Lal, D., Chauhan, P., Shah, R. D., Bhattacharya, S., Ajai, Kiran Kumar, A. S. (2012). Detection of Mg spinel lithologies on central peak of crater Theophilus using Moon Mineralogy Mapper (M³) data from Chandrayaan-1. *J. Earth Syst. Sci.*, 121(3), 847-853.

Lemelin, M., Germain, M., Morisset, C.-E., Hipkin, V., Goïta, K. (2012). Ilmenite Detection on the Moon by Remote Sensing: An Integration of Multisensor Datasets over Mare Australe and Mare Ingenii Regions. 43rd Lunar and Planetary Science Conference, Houston, USA, No 1972.

Lemelin, M., Morisset, C.-E., German, M., Hipkin, V., Goita, K., & Lucey, P.G. (2013). Ilmenite mapping of the lunar regolith over Mare Australe and Mare Ingenii regions: An optimized multisource approach based on Hapke radiative transfer theory. *J. Geophys. Res. Planets*, 118, 2582 – 2593.

Lemelin, M., Lucey, P. G., Camo, A. (2022). Compositional Maps of the Lunar Polar Regions Derived from the Kaguya Spectral Profiler and the Lunar Orbiter Laser Altimeter Data. *The Planetary Science Journal*, 3:63 (14pp). <https://doi.org/10.3847/PSJ/ac532c>

Moriarty, D. P. III, Simon, S. B., Shearer, C. K., Haggerty, S. E., Petro, N., & Li, S. (2023). Orbital characterization of the composition and distribution of spinels across the Crisium region: Insight from Luna 20 samples. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 128, e2022JE007482.

Pieters, C. M., Hanna, K. D., Cheek, L., Dhingra, D., Prissel, T., Jackson, C., Moriarty, D., Parman, S., Taylor, L. A. (2014). The distribution of Mg-spinel across the Moon and constraints on crustal origin. *American Mineralogist*, 99, 1893–1910.

Shkuratov, Y., Starukhina, L., Hoffmann, H., & Arnold, G. (1999b). A model of spectral albedo of particulate surfaces: implication to optical properties of the Moon. *Icarus*, 137(2), 235-246.

Shkuratov, Y., & 20 colleagues (2018c). A twofold mission to the Moon: Objectives and payloads. *Acta Astronautica*, 154, 214-226.

Smith, J.V., Anderson, A.T., Newton, R.C., Olsen, E.J., Wyllie, P.J., Crewe, A.V., Isaacson, M.S., & Johnson, D. (1970). Petrologic history of the Moon inferred from the petrography, mineralogy and pedogenesis of Apollo 11 rocks. *Apollo 11 Lunar Science Conference*, 925–897.

Song, E., Lemelin, M., Lucey, P. G., Greenhagen, B. T. (2014). Lunar Crater Central Peak Mineral Maps — Near- and Thermal-Infrared Spectroscopy. *45th Lunar and Planetary Science Conference*, Houston, USA, No 2486.

Sunshine, J.M., Pieters, C.M., & Pratt, S.F. (1990). Deconvolution of mineral absorption bands: an improved approach. *J. Geophys. Res.*, 95, 6955-6966

Surkov, Y., Shkuratov, Y., Kaydash, V., Korokhin, V., Videen, G. (2020). Lunar ilmenite content as assessed by improved Chandrayaan-1 M³ data. *Icarus*, 341, 113661.

Surkov, Y., Shkuratov, Y., Kaydash, V., Videen, G. (2020). Modelling relationship between color ratio C(321 nm/415 nm) and TiO₂ content. 51st Lunar and Planetary Science Conference, Houston, USA, No 1311.

Surkov, Y., Shkuratov, Y., Kaydash, V., Videen, G., Korokhin, V., Velichko, S. (2022). Olivine abundance assessment using the ratio of 1- and 2- μ m integrated band depths: applications to Chandrayaan-1 M³ data. 53rd Lunar and Planetary Science Conference, Houston, USA, No 1048.

Surkov, Y., Kaydash, V., Shkuratov, Y., Videen, G., Mall, U. (2023). Assessment of abundance of Mg-Spinel using M³. Data: the Theophilus crater. 54th Lunar and Planetary Science Conference, Houston, USA, No 1454.

Tishkovets, V., & Mishchenko, M. (2009). Approximate calculation of coherent backscattering for semi-infinite discrete random media. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 110, 139–145.