Un nouveau paradigme pour le démélange non-linéaire des images hyperspectrales

Jie CHEN^(1,2), Cédric RICHARD⁽¹⁺⁾, Paul HONEINE⁽²⁾

⁽¹⁾Université de Nice Sophia-Antipolis, UMR Fizeau, CNRS, Observatoire de la Côte d'Azur ⁺Institut Universitaire de France

⁽²⁾Institut Charles Delaunay - LM2S, Université de Technologie de Troyes (UTT), UMR STMR, CNRS

chenjieg@sina.com, cedric.richard@unice.fr, paul.honeine@utt.fr

Résumé – En imagerie hyperspectrale, dans un contexte supervisé, chaque vecteur-pixel résulte d'un mélange de spectres de composants purs dont on voudrait estimer les proportions. Récemment, afin de résoudre ce problème en palliant les limitations des modèles linéaires, des méthodes de démélange non-linéaires des données hyperspectrales ont été proposées dans la littérature. Ce problème est ici considéré dans le cadre méthodologique offert par les espaces de Hilbert à noyau reproduisant. L'image de chaque bande spectrale est implicitement calculée dans un tel espace afin de traduire la complexité des phénomènes physiques mis en jeu, puis un algorithme d'inversion adapté à l'estimation des proportions dans l'espace direct appliqué. Des résultats sur des données synthétiques et réelles viennent illustrer l'efficacité de l'approche.

Abstract – In hyperspectral images, pixels are mixtures of spectral components associated to pure materials, called endmembers. Recently, to overcome the limitations of linear models, nonlinear unimixing techniques have been proposed in the literature. In this paper, nonlinear hyperspectral unmixing problem is studied through kernel-based learning theory. Endmember components at each spectral band are mapped implicitly into a high-dimensional feature space, in order to address nonlinear interactions of photons. Experiment results with both synthetic and real images illustrate the effectiveness of the proposed scheme.

1 Introduction

L'imagerie hyperspectrale consiste à acquérir des images dans des centaines de bandes spectrales contigües et identiquement géo-référencées, avec une résolution suffisante pour résoudre la variabilité naturelle d'une scène. Le démélange spectral constitue l'un des problèmes importants dans ce domaine. Il s'agit de décomposer un ensemble de vecteurs spectraux sur une collection de signatures spectrales de composants purs, supposés connus dans un cadre supervisé, et d'estimer la fraction d'abondance de ces derniers dans le mélange [1]. Selon l'échelle d'observation adoptée, les modèles de mélange considérés peuvent être soit linéaire, soit non-linéaire. Les premiers sont propre à des considérations macroscopiques au sens où ils néglige les interactions entre composants purs. Plus réaliste, les seconds visent à traduire la complexité des phénomènes physiques mis en jeu. On y distingue essentiellement le modèle bilinéaire, qui complète le modèle linéaire avec des termes d'interaction éponymes [2], et le modèle intimate reposant sur des considérations physiques avancées [3].

La littérature rapporte de nombreux travaux ayant trait aux modèles de mélange non-linéaires en imagerie hyperspectrale. Dans [4], un réseau de neurones à fonction radiale de base est employé pour le traitement de mélanges *intimate*. Dans [5], les auteurs considèrent un perceptron multi-couches couplé à un réseau de Hopfield. Ces deux approches souffrent malheureusement des inconvénients inhérents aux approches connexionnistes, leur caractère boite noire et une optimisation rendue délicate par une fonction coût non-convexe. Une approche Bayésienne est proposée dans [6], performante, mais souffrant d'une charge calculatoire conséquente et dédiée uniquement au modèle bilinéaire. Enfin, dans [7], les auteurs complètent la collection des signatures spectrales des éléments purs avec un ensemble de spectres hybrides supposés reproduire les interactions entre matériaux. Le nombre et la composition de ces éléments demeurent toutefois des questions délicates, aux conséquences importantes sur les résultats.

Des méthodes à noyau, dont les performances font référence en reconnaissance des formes, ont été mises en œuvre pour la classification de données hyperspectrales [8, 9]. Récemment, on y a également eu recours pour des questions de démélange non-linéaire [10, 11]. Les noyaux sont toutefois appliqués à la signature spectrale de chacun des composants purs, dans leur globalité et indépendamment des interactions entre matériaux, opérant ainsi à la façon d'une fonction de distorsion nonlinéaire. Il n'existe par ailleurs pas de formule de reconstruction de l'image pour cette approche, l'ensemble des calculs étant effectué dans l'espace de Hilbert à noyau reproduisant.

Dans l'article proposé, nous formulons un nouveau paradigme où chaque noyau est appliqué selon une longueur d'onde qui lui est propre, y combinant ainsi les contributions de chaque composant selon une règle de mélange non-linéaire. Un choix approprié de noyau permet alors d'exhiber les abondances. Le problème correspondant peut être résolu par régression à noyau sous contrainte. Des tests effectués sur des données artificielles et réelles illustrent l'efficacité de l'approche.

2 Modèles de mélange non-linéaires

Soit $\boldsymbol{r} = [r_1, r_2, ..., r_p]^{\top}$ un vecteur-pixel hyperspectral, avec p le nombre de longueurs d'onde considérées. On suppose que \boldsymbol{r} résulte du mélange de ℓ composants purs, corrompu par un bruit. On note \boldsymbol{M} la matrice de taille $p \times \ell$ regroupant l'ensemble des signatures spectrales des composants purs, qui constituent donc chacune une colonne $\boldsymbol{m}_{\bullet j}$ de la matrice \boldsymbol{M} . Aussi chaque ligne $\boldsymbol{m}_{i\bullet}$ de \boldsymbol{M} est-elle associée à une longueur d'onde donnée. Enfin, on note $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_\ell]^{\top}$ le vecteur des abondances associé au pixel \boldsymbol{r} .

Il existe schématiquement deux scénarios justifiant l'usage de modèles de mélange non-linéaires pour décrire la complexité des interactions matériaux/lumière. Le premier implique des réflexions successives de la lumière sur différents composants purs. Le modèle de mélange bilinéaire tente de rendre compte de ce phénomène en introduisant des termes d'interaction dans le modèle linéaire sous la forme suivante [6]

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{\alpha} + \sum_{i=1}^{\ell-1} \sum_{j=i+1}^{\ell} \gamma_{ij} \, \alpha_i \, \alpha_j \, \boldsymbol{m}_{\bullet i} \odot \boldsymbol{m}_{\bullet j} + \boldsymbol{n} \quad (1)$$

où n désigne un bruit additif que l'on pourra supposé Gaussien, et \odot le produit d'Hadamard, avec les contraintes suivantes sur les paramètres

$$\alpha_i \ge 0 \qquad \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i = 1 \qquad 0 \le \gamma_{ij} \le 1.$$
 (2)

Pour le second scénario, le matériau réfléchissant est un modèle *intimate* de composants purs à la manière de grains de sable de compositions différentes. Le modèle correspondant, dit *intimate* et introduit dans [3], considère que la réflectance à une longueur d'onde donnée est approximativement donnée par

$$\boldsymbol{r} \approx \frac{\boldsymbol{w}}{4(\mu_0 + \mu_s)} H(\boldsymbol{w}, \mu_0) H(\boldsymbol{w}, \mu_s)$$
(3)

avec w l'albédo moyen, μ_0 le cosinus de l'angle de réflexion, μ_s celui de l'angle d'incidence, et H la fonction de Chandrasekhar. L'albédo moyen w pour une surface homogène composée de particules sphériques s'exprime sous la forme

$$w = \sum_{i=1}^{\ell} w_i \frac{G_i / (\rho_i D_i)}{\sum_{j=1}^{\ell} G_j / (\rho_j D_j)}$$
(4)

où G_i est la fraction de masse du composant i, D_i le diamètre des particules par composant, ρ_i leur densité, et w_i l'albédo du composant. Aussi apparait-il que les abondances peuvent être associées aux quantités en facteur de w_i dans (4), qui vérifient les contraintes de positivité et de somme à un. La suite de la présentation est consacrée à la description d'une méthode de démélange non-linéaire opérationnelle dans de tels contextes.

3 Exposé de la méthode

Afin d'alléger les notations, à partir de maintenant, soit m_i le vecteur colonne dont les termes correspondent à la *i*-ème ligne de la matrice M. Ainsi m_i représente-t-il le contenu spectral à la longueur d'onde *i* de l'ensemble des composants purs. On rappelle que le modèle de mélange linéaire s'exprime sous la forme $r = M\alpha + n$ avec n un bruit additif supposé Gaussien par soucis de simplicité, que l'on peut inverser en minimisant le coût quadratique

$$\boldsymbol{\alpha}^* = \arg\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^\ell} \sum_{i=1}^p (r_i - \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{m}_i)^2$$
(5)

sous contraintes de non-négativité des abondances α_i^* et de leur somme unité $\sum_{j=1}^{p} \alpha_j^* = 1$. Le schéma ci-dessus suppose une relation linéaire entre r_i et le contenu spectral m_i des composants purs à la longueur d'onde *i*. Toutefois, comme exprimé dans la section précédente, la lumière pourrait clairement interagir avec plusieurs de ces composants selon un mécanisme non-linéaire $r = \mathbf{F}(\alpha, M)$. Aussi suggère-t-on de s'intéresser au problème plus général suivant

$$\psi^* = \arg\min_{\psi \in \mathcal{H}_{\psi}} \sum_{i=1}^p (r_i - \psi(\boldsymbol{m}_i))^2$$
(6)

sous des contraintes fixées ultérieurement. Afin d'exhiber des abondances α_i , on choisit de poser $\psi(\boldsymbol{m}_i) = \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{m}_i + \varphi(\boldsymbol{m}_i)$ avec φ un élément d'un espace fonctionnel \mathcal{H}_φ à définir. Pour des facilités de mise en œuvre, soit \mathcal{H}_{φ} un espace de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS) de fonctions à valeurs réelles sur un compact \mathcal{M} , et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ son produit scalaire. On désigne par $\kappa_{\varphi} : \mathcal{M} \times \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ le noyau de cet espace, vérifiant ainsi la propriété reproduisante $\varphi(\boldsymbol{m})=\langle\varphi(\cdot),\kappa_\varphi(\cdot,\boldsymbol{m})\rangle$ pour toute fonction φ de \mathcal{H}_{φ} et pour tout m de \mathcal{M} . Clairement, il en résulte que l'espace \mathcal{H}_{ψ} dans (6) est également un RKHS de noyau $\kappa_{\psi}(\boldsymbol{m},\boldsymbol{m}') = \boldsymbol{m}^{\top}\boldsymbol{m}' + \kappa_{\varphi}(\boldsymbol{m},\boldsymbol{m}')$. Le Théorème de Représentation [12] établit que la solution du problème (6) peut être recherchée dans l'espace engendré par les p fonctions noyau $\kappa(\cdot, m_i)$ reposant sur les données d'apprentissage disponibles, ce qui permet d'écrire $\psi(\cdot) = \sum_{j=1}^{p} \beta_j \kappa_{\psi}(\cdot, \boldsymbol{m}_j)$. En replaçant cette expression dans l'équation (6), on aboutit finalement à un problème linéaire par rapport aux paramètres à estimer

$$\boldsymbol{\beta}^* = \arg\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\psi}} \boldsymbol{\beta}\|^2$$
(7)

sous des contraintes fixées ci-après, où K_{ψ} est la matrice de Gram de taille $p \times p$ définie par $K_{\psi}(i, j) = \kappa_{\psi}(m_i, m_j)$. Il est fondamental de noter que

$$\boldsymbol{K}_{\psi} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^{\top} + \boldsymbol{K}_{\varphi} \tag{8}$$

où K_{φ} est la matrice de Gram associée à la transformation non-linéaire φ . Aussi a-t-on

$$\boldsymbol{r}^* = \boldsymbol{K}_{\psi} \boldsymbol{\beta}^* = \boldsymbol{M} (\boldsymbol{M}^{\top} \boldsymbol{\beta}^*) + \boldsymbol{K}_{\varphi} \boldsymbol{\beta}^*$$
(9)

ce qui permet d'identifier les abondances $\alpha^* = M^{\top}\beta^*$. Comme celles-ci doivent satisfaire à des contraintes de nonnégativité et de somme unité, on propose finalement de résoudre le problème d'optimisation suivant

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} \|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{K}_{\psi} \boldsymbol{\beta}\|^{2}$$
s.c. $\boldsymbol{M}^{\top} \boldsymbol{\beta} \ge \boldsymbol{0}$
 $\boldsymbol{1}^{\top} (\boldsymbol{M}^{\top} \boldsymbol{\beta}) = 1$

$$(10)$$

où 1 est un vecteur constitué de 1 de taille $\ell \times 1$. Il est à noter que la matrice K_{ψ} est définie positive par construction. Il s'agit

donc là d'un problème de programmation quadratique, pour lequel un grand nombre de méthodes efficaces a été proposé dans la littérature [13]. Une fois β^* obtenu, il est aisé de retrouver les fractions d'abondance α^* comme précisé précédemment.

Le noyau κ_{φ} , qui fixe la non-linéarité du modèle de mélange adopté, est le seul élément à définir dans cette approche. Ce choix est laissé à la discrétion de l'expérimentateur, qui a pour unique contrainte que κ_{φ} soit un produit scalaire dans un espace de Hilbert donné, sans avoir à exhiber la transformation φ associée. Si les possibilités offertes sont infinies, mais devraient idéalement être pilotées par l'application considérée, on a généralement recours à des familles de noyaux aux capacités d'apprentissage éprouvées. Un exemple commun est le noyau polynomial

$$\kappa(\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2) = (\gamma + \boldsymbol{m}_1^\top \boldsymbol{m}_2)^q$$

de degré q, homogène ($\gamma = 0$) ou non-homogène ($\gamma \neq 0$). Un rapprochement peut être aisément fait entre le noyau polynomial non-homogène de degré 2 et le modèle de mélange bilinéaire considéré dans le domaine de l'hyperspectral [6], aux termes quadratiques $m_i \odot m_i$ complémentaires près. Le noyau polynomial, plus général, ouvre évidemment de nombreuses autres perspectives de couplage, pour un coût calculatoire inchangé puisque seules les valeurs des composantes de K_{ψ} sont affectées par tout changement de noyau. Le noyau gaussien

$$\kappa(\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2) = \exp(-\|\boldsymbol{m}_1 - \boldsymbol{m}_2\|^2 / 2\sigma^2)$$

de largeur de bande σ^2 est également communément employés. Les deux exemples de noyau s'inscrivent dans deux familles distinctes, les noyaux radiaux qui dépendent de la quantité $||m_1 - m_2||$, et les noyaux projectifs qui s'écrivent en fonction de $m_1^T m_2$. Notons qu'il est possible de combiner des noyaux pour obtenir de nouveaux noyaux valides, d'optimiser ces combinaisons pour améliorer les performances, etc. [14]

4 Simulation sur données synthétiques

Dans un premier temps, nous nous intéressons à des données synthétiques générées par le modèle de mélange bilinéaire et le modèle intimate à partir de trois composants purs. Il s'agit des matériaux "alunite", "buddingtonite" et "calcite" de la librairie USGC. Les spectres consistent en 480 longueurs d'onde contiguës entre 0.35 et 2.5 μ m. Voir Figure 1. Deux images composées de N = 2500 pixels ont été générées à partir des deux modèles d'interaction considérés. Les fractions d'abondance choisies uniformément sur [0, 1] ont été normalisées de sorte à vérifier la contrainte de somme unité. Sans perte de généralité, le paramètre γ_{ij} du modèle bilinéaire a été fixé à 1. Les deux images ont été corrompues par un bruit blanc Gaussien centré additif, de rapport signal-à-bruit 20 dB puis 30 dB. Le noyau Gaussien a été utilisé avec l'algorithme proposé, et sa largeur de bande fixée à $\sigma = 2$ au terme d'expériences préliminaires. Les résultats ont été comparés à ceux obtenus avec les trois algorithmes suivants :

 Fully constrained least square, noté FCLS [15] : il s'agit là d'une méthode itérative permettant d'estimer les coefficients d'un modèle linéaire sujets aux contraintes de positivité et de somme unité;



FIGURE 1 – Spectres des composants purs utilisés pour générer les images synthétiques.

- La méthode présentée dans [7], notée ici NLCT : elle consiste à ajouter explicitement, dans la matrice des spectres des composants purs, des spectres d'interaction. Pour nos expérimentations, nous avons considéré toutes les composantes spectrales $m_i \odot m_j$;
- Kernel FCLS, notée KFCLS [10] : il s'agit de la version non-linéaire à noyau de l'algorithme FCLS.

TABLE 1 - Comparison des REQM

	RSB = 30 dB		RSB = 20 dB	
	bilinéaire	intimate	bilinéaire	intimate
FCLS	0.1218	0.1389	0.1256	0.1421
NLCT	0.0456	0.1356	0.0696	0.1396
KFCLS	0.1608	0.1732	0.1863	0.1800
Proposé	0.0295	0.0711	0.0551	0.0860

La Table 1 présente la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (REQM) entre α_n et $\hat{\alpha}_n$ pour chaque image. Parce que la méthode FCLS est dédiée aux modèles linéaires, elle présente de moins bonnes performances que les autres approches non-linéaires considérées. En intégrant des termes d'interaction quadratiques, la technique NLCT permet de réduire significativement la REQM dans le traitement des images générées par le modèle bilinéaire. Confrontée au mélange intimate, elle n'apporte en revanche pas d'amélioration notable par rapport à FCLS étant donnée l'inadéquation entre les modèles. On note également que la méthode KFCLS associée au noyau Gaussien n'offre pas de progrès par rapport à FCLS, car elle se limite à l'application d'une distorsion aux spectres des éléments purs sans considérer explicitement d'interactions entre eux. Enfin, comparé à ces trois techniques concurrentes, notre algorithme offre très significativement les meilleures performances.

5 Simulation sur une image AVIRIS

L'image considérée est celle de Cuprite (Nevada, USA) acquise par AVIRIS. Une imagette de taille 81×101 de cette scène a été choisie pour évaluer les algorithmes. Afin de quan-



FIGURE 2 - Abondances estimées pour les quatre algorithmes (de bas en haut : FCLS, NLCT, KFCLS, proposé)

tifier les performances, l'angle spectral moyen Θ entre l'image originale r et l'image reconstruite \hat{r} a été évalué :

$$\bar{\Theta} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \theta(\boldsymbol{r}_n, \hat{\boldsymbol{r}}_n) \quad \text{avec} \quad \theta(\boldsymbol{r}, \hat{\boldsymbol{r}}) = \cos^{-1} \left(\frac{\langle \boldsymbol{r}, \hat{\boldsymbol{r}} \rangle}{\|\boldsymbol{r}\| \| \hat{\boldsymbol{r}} \|} \right).$$

L'algorithme VCA [16] a été préalablement utilisé pour extraire les spectres des composants purs, au nombre de p = 3puis p = 5. Les résultats pour FCLS, NLCT et notre approche sont présentés dans la Table 2. Les cartes d'abondance sont présentées pour p = 5 dans la Figure 2. La méthode KFCLS n'a pu être considérée car elle n'offre pas de formule explicite de reconstruction de l'image, et nécessiterait la mise en œuvre d'une technique de pré-image [17]. Clairement, l'algorithme proposé offre à nouveau les meilleures performances.

TABLE 2 – Comparison des angles spectraux

	p = 3	p = 5
FCLS	0.0594	0.0233
NLCT	0.0591	0.0213
Proposé	0.0281	0.0183

6 Conclusion

Dans cet article, nous avons proposé une nouvelle méthode pour le démélange des données hyperspectrales. Une transformation non-linéaire est appliquée à chaque longueur d'onde, permettant de combiner ainsi les contributions de chaque composant pur selon une règle de mélange non-linéaire. Les expérimentations effectuées ont mis en évidence les très bonnes performances de cette approche par rapport à l'état de l'art lorsque le mode de mélange sous-jacent est non-linéaire. Les travaux futurs incluront une stratégie de sélection de noyau et un algorithme efficace pour résoudre le problème d'optimisation associé.

Références

- N. Keshava and J. F. Mustard, "Spectral unmixing," *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 19, no. 1, pp. 44–57, 2002.
- [2] B. Somers, K. Cools, S. Delalieux, J. Stuckens, D. V. der Zande, W. W. Verstraeten, and P. Coppin, "Nonlinear hyperspectral mixture analysis for tree cover estimates in orchards," *Remote Sensing of Environment*, vol. 113, pp. 1183–1193, 2009.
- [3] B. Hapke, "Bidirectional reflectance spectroscopy, 1, Theory," J. Geophys. Res, vol. 86, pp. 3039–3054, 1981.
- [4] K. J. Guilfoyle, M. L. Althouse, and C.-I. Chang, "A quantitative and comparative analysis of linear and nonlinear spectral mixture models using radial basis function neural networks," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 39, no. 8, pp. 2314–2318, 2001.
- [5] J. Plaza, P. Martínez, R. Pérez, and A. Plaza, "Nonlinear neural network mixture models for fractional abundance estimation in AVIRIS hyperspectral images," in *Proc. XIII JPL Airborne Earth Science Workshop*, Pasadena, CA, 2004.
- [6] A. Halimi, Y. Altman, N. Dobigeon, and J.-Y. Tourneret, "Nonlinear unmixing of hyperspectral images using a generalized bilinear model," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2011.
- [7] N. Raksuntorn and Q. Du, "Nonlinear spectral mixture analysis for hyperspectral imagery in an unknown environment," *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, vol. 7, no. 99, pp. 836–840, 2010.
- [8] G. Camps-Valls and L. Bruzzone, "Kernel-based methods for hyperspectral image classification," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 43, no. 6, pp. 1351–1362, 2005.
- [9] H. Kwon and N. Nasrabadi, "Kernel orthogonal subspace projection for hyperspectral signal classification," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 43, no. 12, pp. 2952–2962, 2005.
- [10] J. Broadwater, R. Chellappa, A. Banerjee, and P. Burlina, "Kernel fully constrained least squares abundance estimates," in *Proc. IEEE IGARSS*'07, 2008, pp. 4041– 4044.
- [11] J. Broadwater and A. Banerjee, "A comparison of kernel functions for intimate mixture models," in *Proc. IEEE WHISPERS'09*, 2009, pp. 1–4.
- [12] B. Schölkopf, R. Herbrich, and R. Williamson, "A generalized representer theorem," NeuroCOLT, Royal Holloway College, University of London, UK, Tech. Rep. NC2-TR-2000-81, 2000.
- [13] D. Luenberger and Y. Ye, *Linear and Nonlinear Programming*. Springer Verlag, 2008.
- [14] R. Herbrich, Learning Kernel Classifiers : Theory and Algorithms. The MIT Press, 2001.
- [15] D. C. Heinz and C.-I. Chang, "Fully constrained least squares linear mixture analysis for material quantification in hyperspectral imagery," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 39, pp. 529–545, 2001.
- [16] J. M. P. Nascimento and J. M. Bioucas-Dias, "Vertex component analysis : A fast algorithm to unmix hyperspectral data," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 43, no. 4, pp. 898–910, April 2005.
- [17] P. Honeine and C. Richard, "Preimage problem in kernel-based machine learning," *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 28, no. 2, pp. 77–88, March 2011.