

Démélange aveugle d'images hyperspectrales à l'aide d'un modèle linéaire étendu tenant compte de la variabilité spectrale

Lucas DRUMETZ^{1a}, Simon HENROT^{1a}, Miguel-Angel VEGANZONES^{1b}, Jocelyn CHANUSSOT^{1c,2} Christian JUTTEN^{1a,2}

¹Gipsa-lab, ^aUniversité Joseph Fourier, ^bCNRS, ^cGrenoble-INP
11 rue des mathématiques, Domaine Universitaire, BP 46, 38402 Saint Martin d'Hères cedex, France

²Institut Universitaire de France
<prénom.nom>@gipsa-lab.grenoble-inp.fr

Résumé – Par simplicité, un modèle de mélange linéaire est souvent utilisé pour démélanger des images hyperspectrales, mais il suppose qu'une unique signature spectrale peut représenter complètement un endmember. Cependant, dans beaucoup de cas, cette hypothèse n'est pas valide car de nombreux facteurs tels que les conditions d'illumination et la variabilité intrinsèque des matériaux ont des conséquences sur les signatures spectrales de ces derniers. Dans cet article, nous proposons un algorithme simple mais flexible pour démélanger des images hyperspectrales en utilisant un modèle linéaire étendu proposé récemment. Ce modèle autorise une variation des spectres des endmembers dans chaque pixel en considérant des variantes mise à l'échelle d'endmembers de référence. Les résultats sur des données synthétiques montrent que la méthode proposée obtient de meilleures performances que d'autres méthodes prenant en compte la variabilité spectrale, et fournit une estimation précise de cette dernière dans la scène observée grâce à l'estimation des facteurs d'échelle, du moment que l'abondance du matériau correspondant est suffisante.

Abstract – The Linear Mixing Model is often used to perform Hyperspectral Unmixing because of its simplicity, but it assumes that a single spectral signature can be completely representative of an endmember. However, in many scenarios, this assumption does not hold since many factors such as illumination conditions and intrinsic variability of the endmembers have consequences on the spectral signatures of the materials. In this paper, we propose a simple yet flexible algorithm to unmix hyperspectral data using a recently proposed Extended Linear Mixing Model. This model allows a pixelwise variation of the endmembers, which leads to consider scaled versions of reference endmembers. The results on synthetic data show that the proposed technique outperforms other methods aimed at tackling spectral variability, and provides an accurate estimation of endmember variability along the observed scene thanks to the scaling factors estimation, provided the abundance of the corresponding material is sufficient.

1 Introduction

Le démélange spectral est un problème inverse en télédétection hyperspectrale visant à retrouver les signatures des matériaux (endmembers) constituant la scène observée, ainsi que leurs proportions (abondances) dans chaque pixel. Pour la plupart des applications, un Modèle de Mélange Linéaire (MML) est utilisé, en considérant que les contributions de chaque endmember s'ajoutent de façon linéaire [1]. Les deux principaux facteurs qui limitent l'efficacité de ce modèle sont les non-linéarités et la variabilité spectrale. En effet, de nombreux processus physiques tels que les interactions multiples et les mélanges intimes peuvent contribuer de façon non-linéaire à la réflectance ou luminance mesurée. La variabilité spectrale est également un facteur important non pris en compte par le MML : chaque endmember est supposé être parfaitement représenté par une unique signature spectrale. Cette hypothèse forte mais implicite n'est souvent pas valable pour des données réelles puisque

la luminance ou réflectance mesurée peut changer significativement, par exemple suivant la géométrie et la topographie de la scène, ou bien en fonction d'effets atmosphériques ou même à cause de la variabilité intrinsèque des matériaux due à la variation d'une variable cachée (par exemple la concentration de chlorophylle dans les végétaux).

Bien que le démélange non-linéaire ait récemment été très étudié dans la communauté, la variabilité spectrale a été moins traitée. Il existe tout de même des articles récents résumant les approches existantes [2, 3]. Dans la suite de cet article, nous présentons un nouvel algorithme de démélange prenant en compte la variabilité spectrale. Il est basé sur le Modèle de Mélange Linéaire Étendu (MMLE) proposé récemment [4], qui permet de prendre en compte la variabilité des endmembers tout en conservant le cadre méthodologique du MML.

Le reste de cet article est organisée de la façon suivante : la section 2 présente quelques modèles et techniques existantes. La méthode proposée est présentée en section 3. Les résultats sont présentés dans la section 4, et une conclusion se trouve dans la section 5.

Ce travail a été financé en partie par le programme European Research Council (ERC AdG-2012-320684 CHESS et ERC AdG-2013-320594 DECODA).

2 La variabilité spectrale

Notons $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ une image hyperspectrale et $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{P \times N}$ la matrice d'abondances associée, où L est le nombre de bandes spectrales, N est le nombre de pixels dans l'image, et P est le nombre d'endmembers. Les différentes matrices d'endmembers que nous utiliserons seront notées $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{L \times P}$, éventuellement indicées par k si elles varient spatialement. $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ est un bruit additif. Avec ces notations le MML s'écrit, pour un pixel $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^L$ dont le vecteur d'abondances est $\mathbf{a}_k \in \mathbb{R}^P$:

$$\mathbf{x}_k = \sum_{p=1}^P a_{kp} \mathbf{s}_p + \mathbf{e}_k = \mathbf{S} \mathbf{a}_k + \mathbf{e}_k \quad (1)$$

soumis à la Contrainte de Positivité sur les Abondances (CPA) $a_{kp} \geq 0$ puisque toutes les quantités physiques en jeu sont positives, et éventuellement à la Contrainte de Somme à un sur les Abondances (CSA) $\sum_{p=1}^P a_{kp} = 1, \forall k$, qui signifie que chaque pixel est complètement expliqué par les contributions des différents endmembers. \mathbf{s}_p est la $p^{\text{ème}}$ colonne de \mathbf{S} . Dans la suite, nous présentons quelques approches de démixage prenant en compte la variabilité spectrale.

2.1 Classes d'endmembers

Les classes d'endmembers [5] sont un moyen simple de prendre en compte la variabilité spectrale en construisant un dictionnaire d'endmembers potentiels. Une possibilité est de lancer plusieurs fois n'importe quel Algorithme d'Extraction d'Endmembers (AEE) [1] sur des sous-ensembles de l'image choisis aléatoirement. A chaque fois que l'AEE est lancé, de nouvelles variations de chaque endmember sont extraites. Comme ces sources ont un problème de permutation (les endmembers ne sont pas alignés d'un sous-ensemble à l'autre), une étape de clustering est nécessaire pour regrouper les endmembers en classes. Ensuite, les abondances peuvent être récupérées de plusieurs façons, par exemple en effectuant une régression parcimonieuse non-négative des données sur le dictionnaire, par exemple en utilisant l'algorithme SuNSAL [6]. Pour obtenir des abondances globales, il suffit de sommer les contributions de tous les candidats dans chaque classe. Une autre option est de retrouver les abondances une fois que les classes ont été extraites avec des méthodes à base d'analyse discriminante, comme dans [7]. Cette technique recherche une projection des données sur un espace de faible dimension, pour que la variabilité intraclasse des classes d'endmembers soit minimisée et que leur variabilité interclasse soit maximisée. Pour finir, il suffit de démixer les données projetées en utilisant l'approche classique Fully Constrained Least Squares Unmixing (FCLSU), imposant la CPA et la CSA (cela suppose que les données vivent dans un simplexe engendré par les endmembers), en utilisant les centroïdes des classes comme endmembers.

2.2 Modèle de Mélange Linéaire Etendu

Idealement, nous aimerions faire varier les endmembers dans chaque pixel de l'image, tout en conservant le MML. Dans [4], un Modèle de Mélange Linéaire Etendu (MMLE) est présenté pour autoriser une variation spatiale de chaque endmember :

$$\mathbf{x}_k = \sum_{p=1}^P a_{kp} f_{kp}(\mathbf{s}_p) + \mathbf{e}_k \quad (2)$$

avec des applications $f_{kp} : \mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}^L$. Les classes d'endmembers peuvent également être considérées comme un cas particulier de ce modèle, où la fonction f_{kp} est implicitement modélisée par quelques valeurs qu'elle prend qui sont les entrées du dictionnaire. Si nous supposons que $f_{kp}(\mathbf{s}_p) = \psi_{kp} \mathbf{s}_p$, c'est-à-dire que la variabilité spectrale se résume à des mises à l'échelle d'endmembers de référence rassemblés dans la matrice $\mathbf{S}_0 \in \mathbb{R}^{L \times P}$, (2) se réécrit :

$$\mathbf{x}_k = \sum_{p=1}^P a_{kp} \psi_{kp} \mathbf{s}_0 p + \mathbf{e}_k = \mathbf{S}_0 \boldsymbol{\psi}_k \mathbf{a}_k + \mathbf{e}_k \quad (3)$$

avec $\psi_i \in \mathbb{R}^{P \times P}$ une matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont les ψ_{kp} . Avec ces définitions, une observation est une combinaison linéaire des endmembers de référence (se trouvant dans un cône engendré par les endmembers de référence), chacun étant multiplié par un scalaire qui dépend de l'endmember et du pixel considérés. Ce cas particulier du modèle est déjà apparu implicitement dans la littérature [8, 9] pour expliquer la variabilité due à la géométrie et aux conditions d'éclairage de la scène. De plus, [4] montre que utiliser des moindres carrés non-négatifs (CLSU) peut s'interpréter comme une variante de ce modèle dans laquelle le facteur d'échelle est le même pour chaque endmember et où la CSA est imposée. Ainsi, il est possible de récupérer le facteur d'échelle (et donc les abondances) dans un pixel par $\psi_k = \sum_{p=1}^P \hat{\phi}_k^p = \sum_{p=1}^P a_{kp} \psi_k$, où $\hat{\phi}_k^p$ est la quantité estimée par CLSU dans le pixel k pour l'endmember p . Cette version mise à l'échelle de CLSU sera notée S-CLSU (Scaled-CLSU) dans la suite. Cependant, à notre connaissance, il n'existe aucun algorithme spécifiquement conçu pour démixer des données hyperspectrales à l'aide du MMLE.

3 Méthode proposée

Nous définissons le problème d'optimisation suivant pour effectuer le démixage à l'aide du MMLE (nous notons $\boldsymbol{\psi}$ les facteurs d'échelle réarrangés dans une matrice de taille $\mathbb{R}^{P \times N}$) :

$$\mathcal{J}(\mathbf{A}, \underline{\mathbf{S}}, \boldsymbol{\psi}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (\|\mathbf{x}_k - \mathbf{S}_k \mathbf{a}_k\|_F^2 + \lambda_S \|\mathbf{S}_k - \mathbf{S}_0 \boldsymbol{\psi}_k\|_F^2) \quad (4)$$

Une matrice d'endmembers de référence \mathbf{S}_0 est nécessaire et peut être extraite par n'importe quel AEE. Toutes les quantités qui interviennent sont positives, et les abondances doivent en plus respecter la CSA. Puisque nous estimons les véritables abondances et pas leur produit avec les facteurs d'échelle (comme le fait CLSU), la contrainte CSA à une signification physique claire. Elle intervient aussi comme calibration des facteurs d'échelle, puisque sans elle, il resterait une ambiguïté sur les abondances et les facteurs d'échelle : dans un pixel, multiplier l'un et diviser l'autre par la même constante donne le même produit). Par rapport à l'Eq. (3), une faible perturbation par rapport au modèle est autorisée, selon la valeur de λ_S . Puisque le problème que nous voulons résoudre n'est pas convexe en toutes

les variables simultanément, mais convexe en chacune d'elles, nous proposons de trouver un point stationnaire en optimisant le critère avec un algorithme de moindres carrés non-négatifs alternés (ANLS pour Alternating Nonnegative Least Squares). Les itérations se terminent lorsque les variations relatives (mesurées par une norme de Frobenius) entre deux itérations consécutives de \mathbf{A} et $\mathbf{S} = \{\mathbf{S}_k\}$ deviennent plus faibles que ϵ_A et ϵ_S , respectivement. Dans les expériences, nous prendrons $\epsilon_A = \epsilon_S = 10^{-4}$.

3.1 Optimisation par rapport à \mathbf{S}

En réécrivant les termes de l'Eq. (4) qui ne dépendent que de \mathbf{S} , nous constatons qu'il faut résoudre :

$$\hat{\mathbf{S}} = \arg \min_{\mathbf{S} \geq \mathbf{0}} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (\|\mathbf{x}_k - \mathbf{S}_k \mathbf{a}_k\|_F^2 + \lambda_S \|\mathbf{S}_k - \mathbf{S}_0 \psi_k\|_F^2) \quad (5)$$

Ce problème est entièrement séparable pour chaque pixel, donc la solution peut être calculée séparément pour chacun d'entre eux :

$$\hat{\mathbf{S}}_k \leftarrow (\mathbf{x}_k \mathbf{a}_k^\top + \lambda_S \mathbf{S}_0 \psi_k) (\mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^\top + \lambda_S \mathbf{I}_P)^{-1} \quad (6)$$

où \mathbf{I}_P est la matrice identité de taille $P \times P$. La solution $\hat{\mathbf{S}}_k$ est ensuite projetée sur l'orthant positif $\mathbb{R}_+^{L \times P}$ en ramenant les valeurs négatives à 0.

3.2 Optimisation par rapport à ψ

Ici, la minimisation de l'Eq. (4) par rapport à ψ se réécrit :

$$\hat{\psi} = \arg \min_{\psi \geq \mathbf{0}} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \lambda_S \|\mathbf{S}_k - \mathbf{S}_0 \psi_k\|_F^2 \quad (7)$$

Rappelons que pour chaque k , ψ_k est une matrice diagonale, donc nous devons uniquement mettre à jour ses éléments diagonaux ψ_k^p (le facteur d'échelle associé à l'endmember p dans le pixel k) :

$$\hat{\psi}_k^p \leftarrow \frac{\mathbf{s}_0^{p\top} \mathbf{s}_k^p}{\mathbf{s}_0^{p\top} \mathbf{s}_0^p} \quad (8)$$

où \mathbf{s}_0^p et \mathbf{s}_k^p sont les $p^{\text{èmes}}$ colonnes de la matrice des sources de référence et de la matrice de sources pour le pixel k . Avec cette règle de mise à jour, les coefficients $\hat{\psi}_k^p$ sont toujours positifs puisque toute les quantités utilisées pour les calculer le sont.

3.3 Optimisation par rapport à \mathbf{A}

Si nous voulons minimiser l'Eq. (4) par rapport à \mathbf{A} , il faut résoudre :

$$\hat{\mathbf{A}} = \arg \min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}, \mathbb{1}_{1 \times P} \mathbf{A} = \mathbb{1}_{1 \times N}} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{x}_k - \mathbf{S}_k \mathbf{a}_k\|_F^2 \quad (9)$$

$\mathbb{1}_{(\cdot)}$ est une matrice contenant uniquement des 1 et dont la taille est donnée en indice. Ce problème peut se résoudre facilement dans chaque pixel en utilisant FCLSU.

4 Résultats

Nous avons généré une image hyperspectrale simulée de taille $200 \times 200 \times 224$ en y incorporant de la variabilité spectrale à l'aide du MMLE. Des cartes d'abondances pour trois endmembers (choisis aléatoirement dans une bibliothèque) ont été créées en utilisant des régions circulaires qui s'intersectent pour définir

les différents mélanges. Des cartes pour les facteurs d'échelle représentant la variabilité spectrale ont été générées à l'aide de mélanges de Gaussiennes (les facteurs sont compris entre 1 et 1.5 et choisis de façon à éviter que la reflectance des sources devienne supérieure à 1). Afin de s'éloigner du modèle, une faible perturbation non-linéaire dépendant de la longueur d'onde (proportionnelle au carré de la reflectance pour la longueur d'onde et le pixel considérés) a été ajoutée à chaque endmember, pour chaque pixel (la rapport entre cette perturbation et le signal a été fixé à 50dB). Une fois le mélange effectué, un bruit blanc gaussien à 30dB a également été ajouté. Un représentation RVB des données se trouve en Fig. 1. Dans la suite, nous comparons les performances de démélanges de 6 algorithmes (FLCSU, CLSU, S-CLSU, l'approche par classe d'endmembers (bundles en anglais) combinée avec SuNSAL et FDN, et notre méthode), en utilisant une erreur quadratique moyenne globale (EQM) sur les abondances :

$$EQM = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \sqrt{\frac{1}{P} \sum_{p=1}^P (a_{kp} - \hat{a}_{kp})^2} \quad (10)$$

Les classes d'endmembers utilisées ont été générées en utilisant l'algorithme Vertex Component Analysis (VCA) [9] sur 100 sous-ensemble de l'image contenant 1% des pixels de l'image choisis aléatoirement. Les signatures extraites ont été regroupées en classes à l'aide d'un k-means en utilisant l'angle spectral comme mesure de similarité (cette mesure n'est pas sensible à des mises à l'échelle des vecteurs et est donc adaptée aux données). Le paramètre de régularisation de SuNSAL a été fixé à $5 \cdot 10^{-4}$. Pour la méthode proposée, deux stratégies d'initialisation ont été utilisées. Dans la première, les endmembers de référence ont été initialisés avec VCA, les abondances avec les résultats de FCLSU, et les facteurs d'échelle ont été initialisés à 1. La méthode proposée avec cette initialisation est notée PA-FCLSU. Dans la deuxième stratégie, les abondances et facteurs d'échelles ont été initialisés avec les résultats de S-CLSU (approche notée PA-S-CLSU). Dans les deux cas, nous avons fixé empiriquement $\lambda_S = 6.25 \cdot 10^{-1}$. Les résultats sont montrés dans les figures 2 et 3, et dans le Tableau 1.

Les résultats montrent que l'approche que nous proposons obtient de meilleurs performances que toutes les autres en termes d'estimation des abondances. FCLSU obtient logiquement les moins bons résultats puisqu'il ne prend pas en compte la variabilité spectrale (les endmembers sont fixes). Les classes d'endmembers obtiennent de meilleurs résultats, mais ils ne peuvent pas estimer directement les facteurs d'échelle, et il reste des erreurs repérables visuellement dans les cartes d'abondances. Ces

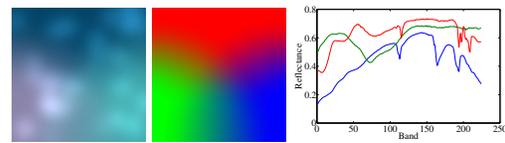


FIGURE 1 – Les données synthétiques (fausses couleurs). On distingue facilement les zones fortement affectées par variabilité spectrale (gauche). Les abondances représentées en couleur (centre). Les endmembers utilisés (droite).

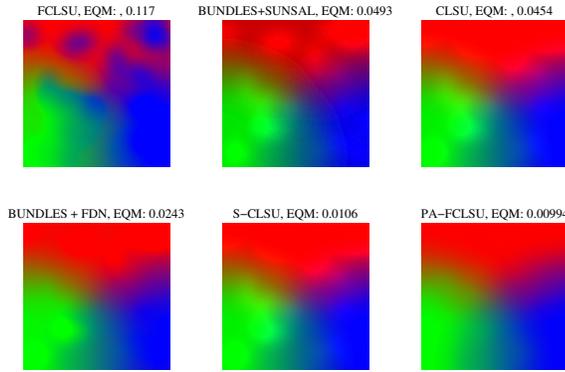


FIGURE 2 – Les abondances estimées par plusieurs algorithmes.

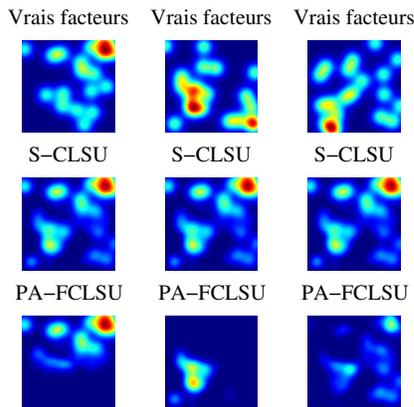


FIGURE 3 – Les facteurs d’échelles estimés par S-CLSU et PA-FCLSU. L’échelle va de 1 (bleu) à 1.5 (rouge).

méthodes requièrent des classes équilibrées et bien regroupées, ce qui n’est pas toujours le cas. CLSU obtient des résultats comparables, mais pas parfaits puisqu’il n’estime pas les abondances réelles, mais leur produit avec les facteurs d’échelle. L’algorithme S-CLSU obtient de bien meilleurs résultats, bien que les facteurs d’échelle soient identiques pour tous les endmembers. Ce n’est en fait pas un problème tant que l’abondance d’un matériau est suffisamment majoritaire. Dans ce cas, les facteurs estimés correspondent à ce matériau. La méthode proposée est capable de séparer les facteurs en des cartes individuelles pour chaque matériau. Dans le cas où la contribution d’un endmember est trop faible, le facteur d’échelle ne peut être retrouvé, et reste proche de 1. Remarquons qu’il n’est pas simple de comparer quantitativement les facteurs estimés aux facteurs réels car la matrice d’endmembers utilisée n’est pas la même (puisque pour S-CLSU et l’approche proposée est extraite depuis les données). D’après le Tableau 1, nous consta-

Algorithme	EQM	Temps de calcul (s)
FCLSU	0.12	11
BUNDLES + SUNSAL	0.049	14
BUNDLES + FDN	0.024	10
CLSU	0.045	10
S-CLSU	0.011	11
PA-FCLSU	0.0099	657
PA-S-CLSU	0.0099	24

TABLE 1 – Résultats quantitatifs.

tons que l’amélioration des performances a pour contrepartie un temps de calcul plus long si l’initialisation est faite à l’aide de FCLSU et sans a priori sur les facteurs d’échelle. Même lorsque l’initialisation est très bonne, l’algorithme parvient à améliorer les résultats en peu de temps. Cependant, nous pensons notre méthode est plus robuste que S-CLSU, en particulier dans des scénarios réels, où des nonlinéarités, du bruit et une mauvaise estimation de la dimension des données peuvent se produire.

5 Conclusion

Dans cet article, nous avons présenté un algorithme simple pour faire du démixage hyperspectral en prenant en compte la variabilité spectrale. Cette méthode est basée sur un Modèle de Mélange Linéaire Étendu proposé récemment, qui autorise des variations locales de la matrice des sources en utilisant des facteurs d’échelle dépendant du pixel et des endmembers. Les expériences sur données synthétiques montrent le potentiel du MMLE, qui obtient de meilleurs résultats que d’autres méthodes utilisées pour faire face à la variabilité des endmembers. En revanche, l’approche doit encore être validée sur des données réelles, ce qui sera un de nos futurs axes de recherche. Nous travaillons actuellement à une formulation du problème n’utilisant pas de références et sur l’amélioration de l’algorithme en ajoutant une régularisation spatiale sur les facteurs estimés, de façon à obtenir des cartes plus cohérentes d’un point de vue spatial et pour être capable d’estimer plus précisément les facteurs dans le cas de pixels très mélangés.

Références

- [1] J.M.Bioucas-Dias, A.Plaza, N.Dobigeon, M.Parente, Q.Du, P.Gader, and J.Chanussot, “Hyperspectral unmixing overview : Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches,” *Sel. Top. in App. Earth Obs. and Rem. Sens., IEEE Journal of*, vol.5, no.2, pp.354–379, April 2012.
- [2] B. Somers, G. P. Asner, L. Tits, and P. Coppin, “Endmember variability in spectral mixture analysis : A review,” *Rem. Sens. of Env.*, vol. 115, no. 7, pp. 1603 – 1616, 2011.
- [3] A. Zare and K.C. Ho, “Endmember variability in hyperspectral analysis,” *Sig. Proc. Mag., IEEE*, vol. 31, no. 1, pp. 95–104, Jan 2014.
- [4] M.A. Veganzones, L. Drumetz, R. Marrero, G. Tochon, M. Dalla Mura, A. Plaza, J.M. Bioucas-Dias, and J. Chanussot, “A new extended linear mixing model to address spectral variability,” in *Proc. IEEE Workshop on Hyp. Image and Sig. Proc. : Evolution in Rem. Sens. (WHISPERS)*, 2014.
- [5] B. Somers, M. Zortea, A. Plaza, and G.P. Asner, “Automated extraction of image-based endmember bundles for improved spectral unmixing,” *Sel. Top. in Appl. Earth Obs. and Rem. Sens., IEEE Journal of*, vol. 5, no. 2, pp. 396–408, April 2012.
- [6] J.M. Bioucas-Dias and M.A.T. Figueiredo, “Alternating direction algorithms for constrained sparse regression : Application to hyperspectral unmixing,” in *Proc. IEEE Workshop on Hyp. Im. and Sig. Proc. : Evolution in Rem. Sens. (WHISPERS)*, 2010.
- [7] J. Jin, B. Wang, and L. Zhang, “A novel approach based on fisher discriminant null space for decomposition of mixed pixels in hyperspectral imagery,” *Geosc. and Rem. Sens. Let., IEEE*, vol. 7, no. 4, pp. 699–703, Oct 2010.
- [8] J.M.P. Nascimento and J.M. Bioucas Dias, “Does independent component analysis play a role in unmixing hyperspectral data ?,” *Geosc. and Rem. Sens., IEEE Trans. on*, vol. 43, no. 1, pp. 175–187, Jan 2005.
- [9] J.M.P. Nascimento and J.M. Bioucas Dias, “Vertex component analysis : a fast algorithm to unmix hyperspectral data,” *Geosc. and Rem. Sens., IEEE Trans. on*, vol. 43, no. 4, pp. 898–910, April 2005.