Séparation de spectres de galaxies basée sur la fusion de données de deux ordres de grisme en spectroscopie sans fente

Andréa GUERRERO, Shahram HOSSEINI, Yannick DEVILLE, Thierry CONTINI, Tristan GRÉGOIRE

Université de Toulouse, UPS, CNRS, CNES, IRAP (Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie) 14 av. Edouard Belin, 31400 Toulouse, France

Andrea.Guerrero@irap.omp.eu, Shahram.Hosseini@irap.omp.eu Yannick.Deville@irap.omp.eu, Thierry.Contini@irap.omp.eu, Tristan.Gregoire@irap.omp.eu

Résumé – Ces travaux visent à décontaminer des spectres de galaxies dans le cadre de la mission spatiale EUCLID. Le spectre d'un objet astronomique observé étant contaminé par les spectres des objets voisins spatialement, une méthode de séparation de sources est alors nécessaire. Ici, nous proposons une méthode innovante exploitant les propriétés optiques du modèle instrumental. Le critère résultant est basé sur la fusion de données des spectres de premier et deuxième ordres générés par un grisme. Un algorithme de descente en gradient a été développé pour optimiser ce critère. Des tests réalisés sur des données bruitées réalistes montrent l'efficacité de notre méthode.

Abstract – This work aims at decontaminating galaxy spectra in the context of the EUCLID space mission. Spectra of neighboring astronomical objects are spatially mixed so that a source separation method is needed to separate them. Here, we propose a new method using the optical properties of the EUCLID instruments. A criterion based on the fusion of information between first and second-order spectra generated by a grism is developed. A gradient algorithm is used to optimize it. Tests on noisy realistic data prove that our method leads to good results.

1 Introduction

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre de la mission EU-CLID de l'Agence Spatiale Européenne dont l'envoi du satellite est prévu pour 2022. Elle a pour but de comprendre la nature de l'énergie noire et son rôle dans l'accélération de l'expansion de l'univers. Pour cela, les spectres de plus de 50 millions de galaxies vont être analysés, notamment pour détecter les raies d'émission et estimer le redshift (le décalage vers le rouge) de chaque galaxie. L'observation du ciel par le satellite se fera à travers un spectromètre-photomètre proche infrarouge appelé NISP. Le spectromètre utilise pour cela des grismes, équivalents à des prismes combinés à un réseau de diffraction : cela crée un spectre dispersé de la lumière incidente comme le montre la figure 1. On voit que le réseau de diffraction génère plusieurs ordres du spectre dispersé. Les grismes seront conçus de manière à concentrer le maximum d'énergie dans le spectre de premier ordre, cependant les spectres d'ordre zéro et d'ordre deux resteront non négligeables pour les objets très lumineux. Généralement, la spectroscopie utilise une fente pour diffracter la lumière d'une petite partie du ciel. Cependant, EUCLID utilise la spectroscopie sans fente si bien que les différents ordres de spectres des objets astronomiques proches spatialement peuvent se superposer, et donc se mélanger comme sur la figure 2. Cette problématique, pouvant être considérée comme un problème de séparation de sources, est la cause principale d'erreur d'estimation du redshift [2]. Il est nécessaire de développer un algorithme efficace de déconta-



FIGURE 1 - Ordres de spectre créés par le réseau

mination pour pouvoir analyser les spectres de galaxies observés. Il a été montré dans [7] que le mélange peut être approché par un modèle de mélange linéaire instantané. Une méthode de séparation basée sur la NMF (Non-negative Matrix Factorization) y est proposée, ne considérant que le spectre de premier ordre. Dans nos travaux, nous considérons aussi le spectre de



FIGURE 2 – Spectres mélangés de deux objects astronomiques voisins spatialement, observés à la sortie du grisme

deuxième ordre, qui est lié optiquement au premier ordre. Ce problème peut alors être vu comme un problème de fusion de données, tel que le pan-sharpening en observation de la Terre [4], ou tel que la fusion de données entre les images multispectrales et hyperspectrales [3], [8]. En effet, exploiter le lien entre ces deux ordres peut améliorer l'estimation des spectres décontaminés. Nous proposons dans cet article une méthode de séparation basée sur un critère exploitant la fusion des informations issues des deux ordres, minimisé par un algorithme de descente en gradient.

2 Modèle de mélange

Chaque objet astronomique émet de la lumière qui est étalée spatialement par sa convolution avec la PSF (Point Spread Function) de l'instrument, puis dispersée par le grisme comme expliqué dans [7]. Dans [7], seul le spectre de premier ordre était considéré à la sortie du grisme. Il a été alors montré que pour un spectre de premier ordre d'un objet d'intérêt contaminé par les spectres de premier ordre de K - 1 objets, et des approximations réalistes, le modèle de mélange pouvait être écrit comme :

$$X = AE + C + B \tag{1}$$

où X est la matrice d'observation de taille $M \times N$ contenant les données observées, i.e. les pixels correspondant à la lumière dispersée de l'objet d'intérêt contaminé par les objets voisins. A est la matrice de mélange de taille $M \times K$ contenant les coefficients, i.e. le facteur d'échelle associé à chaque objet dans les pixels observés. E est la matrice source de taille $K \times N$ contenant le spectre de chaque objet dans chaque ligne, à certaines indéterminations près [7]. Ici nous souhaitons décontaminer un objet à la fois : le spectre de cet objet d'intérêt est contenu dans la première ligne de E. Les lignes suivantes correspondent aux spectres des objets contaminants. C est le fond de ciel supposé connu et supprimé en pré-traitement de l'étape de séparation. B est la matrice de bruit.

Comme dit précédemment, le grisme disperse le spectre d'un objet en plusieurs ordres. Or, pour les objets les plus brillants, l'ordre zéro et l'ordre deux ne sont pas négligeables. L'ordre zéro n'étant quasiment pas dispersé et ne contenant pas d'information spectrale intéressante, il n'est pas considéré ici. Cependant, l'ordre deux contient de l'information et a une meilleure résolution spectrale que le premier ordre, la fusion des informations du premier et deuxième ordres devrait alors donner une meilleure estimation du spectre de l'objet d'intérêt. Dans un grisme, c'est le réseau de diffraction qui diffracte la lumière, le prisme servant principalement à compenser la déviation qui accompagne cette diffraction [5]. On peut alors calculer la dispersion angulaire de chaque ordre suivant :

$$\frac{d\theta}{d\lambda} = \frac{m}{a\cos\theta} \tag{2}$$

avec *m* l'ordre, λ la longueur d'onde, θ l'angle de dispersion et *a* le pas du réseau. La figure 3 montre la géométrie optique résultante du réseau qui nous permet d'écrire $l = Fo tan(\theta)$, avec *Fo* la distance entre le plan focal et le réseau du grisme



FIGURE 3 – La dispersion à travers un réseau de diffraction

et *l* la largeur de diffraction sur le plan focal. On s'intéresse ici à la diffraction selon la longueur d'onde, avec un angle θ petit, ce qui permet d'écrire la relation suivante :

$$\frac{dl}{d\lambda} \simeq \frac{Fo}{a}m \quad \Rightarrow \quad l = \frac{Fo}{a}m\lambda + c. \tag{3}$$

Si on considère une petite variation $\Delta \lambda$ de λ , (3) devient :

$$\Delta l_1 = \frac{Fo}{a} \Delta \lambda \qquad m = 1$$

$$\Delta l_2 = \frac{Fo}{a} 2\Delta \lambda = 2\Delta l_1 \qquad m = 2$$
(4)

pour les spectres de premier et deuxième ordres. L'équation (4) montre qu'il existe une forte relation entre ces derniers. Le spectre de deuxième ordre est deux fois plus dispersé dans le plan focal, et donc deux fois mieux résolu, que le spectre de premier ordre :

$$s_1(\lambda) = s_2(2\lambda) \tag{5}$$

avec s_m les spectres d'ordre m. L'égalité (5) peut être exploitée pour améliorer l'estimation du spectre de l'objet d'intérêt. En pratique, les spectres mesurés sont discrétisés, le modèle suivant peut alors être utilisé pour lier les deux ordres de spectre :

$$s_1(i) = \frac{s_2(2i-1) + s_2(2i)}{2} \tag{6}$$

où *i* est l'indice des longueurs d'onde discrétisées. Les fonctions de sensibilité du grisme dépendent de la longueur d'onde λ . Elles interviennent dans l'écriture des spectres observés non contaminés de premier et deuxième ordres de l'objet d'intérêt :

$$e_1(\lambda) = s_1(\lambda)f_1(\lambda)$$
 $e_2(\lambda) = s_2(\lambda)f_2(\lambda)$ (7)

avec f_m la fonction de sensibilité de l'ordre m. Les données contaminées observées peuvent s'écrire comme le modèle (1) pour chaque ordre de spectre :

$$X_1 = A_1 E_1 + C + B_1 \qquad X_2 = A_2 E_2 + C + B_2 \tag{8}$$

où les premières lignes de E_1 et E_2 sont respectivement les vecteurs lignes e_1 et e_2 définis dans (7) liés à l'objet d'intérêt que l'on veut décontaminer, les autres lignes correspondent aux spectres des contaminants (peu importe l'ordre). Il est à noter que le vecteur e_2 de taille N_2 est deux fois plus grand que le vecteur e_1 de taille N_1 . Avec (5) et (7), le lien entre les deux ordres peut s'écrire :

$$\frac{e_1(\lambda)}{f_1(\lambda)} = \frac{e_2(2\lambda)}{f_2(2\lambda)}.$$
(9)

Afin de construire un critère de séparation, on écrit (9) sous forme matricielle en appliquant la formule (6). On a :

$$C_2 e_1^T = C_1 e_2^T \tag{10}$$

où C_1 et C_2 sont les matrices de transformation de tailles respectives $N_1 \times N_1$ et $N_1 \times N_2$ dont les éléments (i, j) sont :

$$C_1(i,j) = \begin{cases} \frac{f_1(i)}{2} & i \le j \le i+1\\ 0 & sinon \end{cases}$$
(11)

$$C_2(i,j) = \begin{cases} \frac{f_2(2i-1) + f_2(2i)}{2} & i = j\\ 0 & i \neq j \end{cases}$$
(12)

Ces matrices C_m permettent de prendre en compte à la fois le lien entre les deux ordres décrit dans (6), mais aussi les fonctions de sensibilité f_m selon le lien établi dans (9). La relation entre les spectres de premier et deuxième ordres étant établie, nous pouvons construire un critère afin de décontaminer le spectre de l'objet d'intérêt.

3 Méthode de séparation basée sur la fusion de données des deux ordres

Nous proposons de minimiser le critère des moindres carrés régularisé suivant :

$$J = ||X_1 - A_1 E_1||^2 + \alpha ||X_2 - A_2 E_2||^2 + \beta ||C_2 e_1^T - C_1 e_2^T||^2$$
(13)

où E_m sont les matrices sources à estimer, et α et β des coefficients réels à fixer empiriquement. Ce critère (13) peut être minimisé par rapport aux matrices E_1 (incluant le vecteur e_1 dans sa première ligne), E_2 (incluant le vecteur e_2 dans sa première ligne), A_1 et A_2 . Cela peut être fait par une méthode basée sur la NMF régularisée adaptée à notre critère, mais cela ne garantirait pas l'unicité de la solution en partant de matrices initialisées aléatoirement. Notre approche est plus pertinente : A_1 et A_2 sont d'abord estimées à partir des images directes optiques, puis nous minimisons le critère par rapport à E_1 et E_2 grâce à un algorithme de descente en gradient.¹ Comme expliqué dans [7], les éléments des matrices de mélange sont issus de la convolution entre le profil lumineux spatial de l'objet et la PSF de l'instrument dans la direction de dispersion. Or, en plus du spectromètre, l'instrument NISP sera équipé d'un photomètre tri-bandes qui fournira des images optiques directes. Ces images permettront d'estimer les positions et formes des objets, pour ensuite estimer A_1 et A_2 d'après les équations vues dans [7]. Dans nos travaux, nous utilisons le simulateur TIPS [1], développé par le consortium EUCLID, qui modélise l'instrument. En mettant l'image optique d'un objet associé à un spectre constant à son entrée, la sortie de TIPS peut être utilisée pour estimer les colonnes de A_1 et A_2 relatives à cet objet.

Pour effectuer la descente en gradient, on calcule le gradient du critère (13) par rapport aux matrices sources E_1 et E_2 , en utilisant les propriétés vues dans [6] :

$$\frac{\partial J}{\partial E_1} = 2A_1^T A_1 E_1 - 2A_1^T X_1 + \beta \begin{bmatrix} 2(e_1 C_2^T - e_2 C_1^T) C_2 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}$$
(14)

$$\frac{\partial J}{\partial E_2} = 2\alpha A_2^T A_2 E_2 - 2\alpha A_2^T X_2 - \beta \begin{bmatrix} 2(e_1 C_2^T - e_2 C_1^T) C_1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} .$$
(15)

Les matrices sources E_1 et E_2 sont initialisées aléatoirement, et mises à jour à chaque itération jusqu'à convergence, avec la règle suivante :

$$E_m \leftarrow E_m - \mu \frac{dJ}{dE_m} \tag{16}$$

avec μ un pas positif de faible valeur.

4 Tests et résultats

Nous avons simulé des données observées réalistes à l'aide du simulateur TIPS afin de tester notre méthode : on met deux images optiques de deux objets proches spatialement associés à leurs spectres à l'entrée du simulateur, et on obtient le mélange à la sortie. Un de ces objets sera considéré comme objet d'intérêt dont on veut estimer le spectre de deuxième ordre (car mieux résolu que le premier ordre). Le deuxième objet sera le contaminant. L'enjeu est que le deuxième ordre est moins lumineux et donc vite noyé dans le bruit. Pour tester la robustesse de notre méthode, on ajoute du bruit réaliste au mélange afin d'analyser les performances obtenues pour différents Rapports Signal sur Bruit (RSB). Ce dernier est défini par $RSB = 10log_{10}(\frac{P_s}{P_b})$ avec P_s la puissance du vrai spectre d'ordre deux de l'objet d'intérêt et P_b la puissance du bruit. Les



FIGURE 4 – Spectres mélangés sans bruit

spectres observés sans bruit d'ordres 1 et 2 sont fournis en figure 4. Si on s'intéresse au spectre de premier ordre, on observe les deux premières raies d'émission appartenant à l'objet d'intérêt et les deux suivantes appartenant au contaminant. Dans le spectre d'ordre 2, on voit dans la partie gauche la contamination par le continuum du spectre d'ordre 1 de l'objet contaminant. Pour mesurer la qualité d'estimation de notre méthode, on calcule le critère de performance appelé NRMSE, pour Normalized Root-Mean-Square Error, défini comme :

$$NRMSE_m = \sqrt{\frac{norm(s_m - \hat{s}_m)^2}{norm(s_m)^2}}$$
(17)

^{1.} L'initialisation de la NMF avec ces estimations est une extension possible que nous ne considérons pas dans cet article.

TABLE 1 – Évolution du NRMSE en fonction du RSB

RSB (dB)	α	β	$NRMSE_1$	$NRMSE_2$	$NRMSE_2$ terme 2 seul
30	1	1e-3	0.05	0.164	0.166
25	1	1e-3	0.05	0.244	0.255
12	1e-7	5e-5	0.05	0.344	0.889
7	1e-7	1e-4	0.06	0.348	1.117

où s_m est le vrai spectre d'ordre m de l'objet d'intérêt et \hat{s}_m son estimation. Pour assurer la convergence, on a fixé empiriquement la valeur du pas de gradient μ à 0.3. Les paramètres α et β définissent l'importance accordée aux deux derniers termes du critère (13). Leurs valeurs optimales dépendent du RSB. Quand le RSB est fort, le spectre d'ordre 2 du mélange n'est pas très bruité, alors le deuxième terme de (13) suffit presque à bien l'estimer, α doit prendre une forte valeur et β une faible valeur. A contrario, quand le RSB est faible, le spectre d'ordre 2 est très bruité, et c'est le troisième terme de (13) qui va permettre d'estimer le spectre d'ordre 2 de l'objet d'intérêt : le spectre d'ordre 1 étant bien moins bruité, il faut accorder plus d'importance au terme liant les deux ordres donc β doit être plus grand que α . Les NRMSE obtenus pour l'estimation des spectres de premier et deuxième ordres en fonction du RSB d'ordre 2, et les valeurs des paramètres α et β sont fournies dans le tableau 1. Pour évaluer l'efficacité de notre méthode, nous avons aussi testé l'estimation du spectre d'ordre 2 en utilisant seulement les informations du deuxième ordre, i.e. le deuxième terme du critère (13). On voit dans ce tableau que le critère entier donne globalement de meilleurs résultats, notamment pour les RSB faibles où les informations de l'ordre 2 deviennent difficilement exploitables. Le vrai spectre d'ordre 2 est montré en figure 5. Ses estimations dans le cas d'un RSB de 12dB en utilisant tout le critère (13) et en utilisant seulement le deuxième terme sont fournies en figure 6. L'amélioration de l'estimation qu'apporte notre méthode est alors bien visible.



FIGURE 5 – Vrai spectre d'ordre 2

5 Conclusion

Dans ces travaux, nous avons développé une nouvelle méthode de décontamination basée sur la fusion des informations du premier et deuxième ordres d'un grisme, adaptée aux données EUCLID. Nous avons montré qu'ajouter la relation entre les deux ordres dans le critère de séparation permettait d'améliorer l'estimation du spectre d'ordre deux de l'objet à décontaminer. Les matrices de mélange sont estimées grâce aux images optiques fournies par le satellite. Cependant, les positions as-



FIGURE 6 – Spectre d'ordre 2 estimé pour un RSB = 12dBen utilisant tout le critère (gauche), et en utilisant le deuxième terme seulement (droite)

tronomiques des objets ne sont connues qu'à une approximation près, il est donc envisagé dans nos futurs travaux d'autoriser ces matrices de mélange à s'ajuster pendant l'estimation des spectres grâce à un algorithme semi-aveugle. Ici, nous avons utilisé les informations d'un seul grisme, mais le satellite EUCLID sera équipé de 3 grismes orientés différemment. La fusion des informations venant des 3 grismes devrait encore améliorer la décontamination. Enfin, nous avons appliqué cette méthode aux données simulées EUCLID, mais elle pourrait être utilisée dans d'autres applications où le réseau de diffraction est utilisé pour la spectroscopie.

Références

- TIPS simulator. http://projects.lam.fr/ projects/tips/wiki.
- [2] Euclid Definition Study Report. https://arxiv. org/pdf/1110.3193.pdf, 2011.
- [3] M. S. Karoui, Y. Deville, F. Z. Benhalouche, and I. Boukerch. Hypersharpening by joint-criterion nonnegative matrix factorization. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 55(3):1660–1670, March 2017.
- [4] L. Loncan, et al. Hyperspectral pansharpening : a review. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine*, 3 :27–46, Sep 2015.
- [5] J.P. Pérez. Optique Fondements et applications. Dunod, 2004.
- [6] K. B. Petersen and M. S. Pedersen. *The Matrix Cookbook*. Technical University of Denmark, Nov. 2012.
- [7] A. Selloum, S. Hosseini, Y. Deville, and T. Contini. Mixing model in slitless spectroscopy and resulting blind methods for separating galaxy spectra. In *Machine Learning for Signal Processing*, Italy, September 2016.
- [8] N. Yokoya, T. Yairi, and A. Iwasaki. Coupled nonnegative matrix factorization unmixing for hyperspectral and multispectral data fusion. *IEEE Transactions on Geoscience* and Remote Sensing, 50(2):528–537, Feb 2012.