

# Une méthode géométrique de démixage pour des images hyperspectrales à pixels purs et somme d'abondances non contrainte

Axel BOULAIS, Yannick DEVILLE, Olivier BERNÉ

Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie (IRAP)

14 avenue Edouard Belin, 31400 Toulouse, France

{axel.boulais, yannick.deville, olivier.berne}@irap.omp.eu

**Résumé** – Cet article présente une méthode géométrique pour résoudre le problème de démixage d'images hyperspectrales en astrophysique. La méthode est fondée sur une hypothèse de parcimonie : pour chaque source, il doit exister au moins un pixel observé où seule cette source est non-nulle. La méthode ne requiert pas la contrainte de somme à un par pixel des cartes d'abondances. En considérant chaque spectre de pixel comme un élément d'un espace vectoriel, l'ensemble des spectres de l'image forme un cône simplicial. L'identification des arêtes de ce cône simplicial, en recherchant successivement les vecteurs les plus éloignés au sens angulaire, donne une estimation des coefficients de mélange à des facteurs d'échelle près. Les sources sont enfin reconstruites par un algorithme de moindres carrés non-négatifs. Des tests sur des données synthétiques montrent les bonnes performances de cette approche.

**Abstract** – This paper presents a geometrical method for solving the hyperspectral unmixing problem in astrophysics. The method is based on a weak sparsity condition: for each source, there should exist at least one observed vector where only this source is non-zero. The method does not require the sum-to-one constraint per pixel for the abundance maps. Considering each observed vector as an element of a vector space, the scatter plot of these vectors yields a simplicial cone. The identification of the edges of this simplicial cone, by successively searching the vectors which are furthest apart in the angular sense, provides an estimate of the scaled mixing coefficients. The sources are finally reconstructed with a non-negative least squares algorithm. Various tests with synthetic data show the good performance of this approach.

## 1 Introduction

En astrophysique, les images hyperspectrales sont devenues un outil privilégié dans l'étude de la physique de certaines régions du ciel. Pour de telles données, chaque pixel est associé à un spectre résultant, dans le cas d'observation à très haute résolution spectrale, du mélange (que l'on supposera linéaire instantané) de différentes composantes le long de la ligne de visée de l'instrument [1]. L'étude des régions observées passe donc par la décomposition du cube en un ensemble de spectres élémentaires et de cartes d'abondance associées. Le démixage hyperspectral correspond à un problème typique de Séparation Aveugle de Source (SAS) où les spectres observés, les spectres élémentaires et leur cartes d'abondance associées sont respectivement nommés suivant la terminologie de la SAS, observations, coefficients de mélange et sources.

On dispose d'une image contenant  $M$  pixels, où chaque vecteur observé est un spectre de  $N$  échantillons résultant du mélange de  $L$  sources. Le modèle de mélange linéaire instantané du problème de SAS s'écrit alors :

$$X = AS \quad (1)$$

où  $X$  est la matrice  $N \times M$  des observations (chaque colonne est un spectre observé),  $A$  est la matrice  $N \times L$  de mélange (chaque colonne est un spectre élémentaire) et  $S$  est la matrice  $L \times M$  des sources (chaque colonne contient les coefficients d'abondance d'un pixel). Notons  $x_m$ ,  $a_\ell$  et  $s_m$  les colonnes des

matrices non-négatives  $X$ ,  $A$  et  $S$ . Pour les besoins de notre méthode, nous considérons uniquement le cas d'un mélange (sur)déterminé (c.-à-d.  $N \geq L$ ) où les colonnes de  $A$  sont linéairement indépendantes.

Dans notre contexte astrophysique, le modèle de données vérifie certaines propriétés additionnelles. Les spectres élémentaires sont corrélés, et contrairement au cadre de l'observation de la Terre [2], la matrice des sources ne vérifie pas la propriété de somme à 1 de ses coefficients par pixel. Par ailleurs, la structure des régions observées suggère la présence de quelques pixels contigus non-mélangés. Afin d'exploiter cette propriété, une méthode d'analyse en composantes parcimonieuses appelée SpaceCorr est disponible dans la littérature [3]. Cette méthode requiert la présence de "petites zones" de l'image (zones contenant quelques pixels adjacents) où une seule source est active (c.-à-d. a une puissance moyenne non nulle). Ces zones sont appelées zones mono-sources. Un grand nombre de sources ou un faible nombre de pixels dans l'image peut compromettre la présence de zones mono-sources pour chaque source. Il est donc nécessaire de relâcher cette contrainte de parcimonie. Dans cet article, nous suggérons de réduire la taille des zones mono-sources au minimum, c.-à-d. nous supposons qu'il existe au moins un pixel observé mono-source par source dans les données. Cette hypothèse de présence de pixels purs est abondamment utilisée par les méthodes géométriques en observation de la Terre [2]. Pour ce type de données, la propriété supplé-

mentaire de somme à 1 des abondances ( $\sum_{l=1}^L S(l, m) = 1$ ) contraint les observations à être contenues dans un simplexe. Les méthodes géométriques de SAS alors employées dans ce contexte nécessitent une étape d'identification de ce simplexe [2]. Dans notre cas, l'absence de somme à 1 contraint les observations à être contenues dans un cône simplicial rendant les méthodes basées sur l'identification de simplexes inutilisables. Par ailleurs, une méthode géométrique de SAS nommée SC-SA-UNS [4] ne requiert pas cette contrainte de somme à 1. Elle est fondée sur l'identification du cône simplicial d'ouverture minimale contenant les observations. Cependant, cet algorithme est itératif et doit être initialisé. De plus, la recherche du cône simplicial peut aboutir à des solutions non-optimales requérant l'utilisation de matrices de rotation adéquates afin de "débloquer" l'algorithme et continuer la minimisation.

Cet article présente une méthode géométrique appelée MASS (Maximum Angle Source Separation en anglais), pour résoudre le problème de SAS linéaire. Elle requiert la non-négativité des données, la présence de pixels purs et l'indépendance linéaire des colonnes de la matrice de mélange. Contrairement à la plupart des méthodes géométriques, elle ne requiert pas la contrainte de somme à 1 des coefficients de mélange par pixel.

## 2 Géométrie des données

Pour fournir un cadre géométrique au problème de SAS, chaque spectre observé est représenté comme un élément de l'espace vectoriel  $\mathbb{R}^N$ . Nous introduisons les définitions suivantes issues de [4] (les auteurs considèrent des matrices carrées cependant ces définitions restent valables pour des matrices rectangulaires).

### Définition 1 : Cône simplicial

Soit  $U$  une matrice non-négative de dimensions  $I \times J$  et de rang de colonne plein (notons  $u_j$  la  $j^e$  colonne de  $U$ ). Le sous-ensemble de  $\mathbb{R}_+^I$  engendré par les combinaisons linéaires non-négatives des  $J$  vecteurs colonnes  $u_j$  est un cône simplicial noté  $\mathcal{C}(U)$  :

$$\mathcal{C}(U) = \{c \mid c = Uv, v \in \mathbb{R}_+^J\}. \quad (2)$$

### Définition 2 : Arêtes d'un cône simplicial

$\mathcal{C}(U)$  possède  $J$  ensembles de vecteurs arêtes que l'on note  $\mathcal{E}_j(U)$ , avec  $j \in \{1, \dots, J\}$ . Ils sont colinéaires aux colonnes de  $U$  :

$$\mathcal{E}_j(U) = \{c \mid c = \alpha u_j, \alpha \in \mathbb{R}_+\}. \quad (3)$$

A partir de ces deux définitions, nous déduisons les propriétés suivantes. La preuve des trois premières propriétés est immédiate en partant des définitions, celle de la dernière sera donnée dans un futur article.

**Propriété 1 :** La matrice  $U$  et le vecteur  $v$  étant non-négatifs, le cône simplicial  $\mathcal{C}(U)$  est inclus dans l'orthant positif  $\mathbb{R}_+^I$ .

**Propriété 2 :** Selon le modèle (1), le nuage de points associé aux vecteurs observés  $x_m$  est contenu dans  $\mathcal{C}(A)$ , le cône simplicial engendré par les colonnes de la matrice de mélange :

$$\{x_m, 1 \leq m \leq M\} \subseteq \mathcal{C}(A). \quad (4)$$

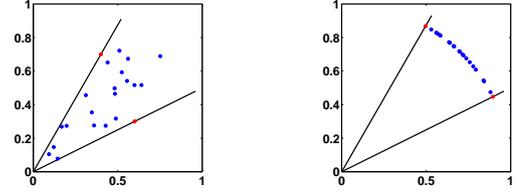


FIGURE 1 – Nuage de points de données mélangés et arêtes  $\mathcal{E}_j(X)$  du cône simplicial en deux dimensions.

**Propriété 3 :** Pour tout  $\alpha \in \mathbb{R}_+$ ,  $\alpha x_m$  est contenu dans  $\mathcal{C}(A)$  (propriété d'invariance d'échelle).

**Propriété 4 :** S'il existe au moins un pixel pur pour chaque source, alors  $\mathcal{C}(A) = \mathcal{C}(X)$ . De plus,  $\mathcal{C}(A)$  est le plus petit cône simplicial contenant les vecteurs observés et il est unique. Pour illustrer ces propriétés, nous générons un nuage de points de données non-négatives en deux dimensions à partir d'un mélange de deux sources (Fig. 1). Sur la figure, les points bleus représentent les données mélangées (c.-à-d. les colonnes de  $X$ ), les points rouges représentent les vecteurs générateurs (c.-à-d. les colonnes de  $A$ ). Comme mentionné par la Propriété 2, les vecteurs observés  $x_m$  sont contenus dans le cône simplicial engendré par les colonnes de  $A$ . Le graphe de droite illustre la propriété d'invariance d'échelle en normalisant les colonnes de  $A$  et  $X$  à une longueur unitaire. On remarque que les vecteurs observés normalisés sont toujours contenus dans le cône simplicial  $\mathcal{C}(A)$ . De plus, si les points rouges sont parmi les vecteurs observés (c.-à-d. présence de pixels purs), le cône simplicial engendré par  $A$  est le même que celui engendré par  $X$  (Propriété 4). A partir de ces propriétés, on déduit ci-dessous une méthode pour estimer les colonnes de la matrice de mélange  $A$  uniquement à partir des données  $X$ .

## 3 La méthode MASS

La méthode de SAS proposée permet de décomposer les données observées en un ensemble de  $L$  spectres élémentaires et leurs cartes d'abondance associées. La méthode est composée de trois étapes successives. La première est l'estimation du nombre de sources à l'aide d'une méthode classique (covariance de  $X$ ). La deuxième étape est l'estimation de la matrice de mélange  $A$  à l'aide d'une méthode non conventionnelle recherchant successivement les vecteurs les plus éloignés au sens angulaire. La troisième étape est la reconstruction de la matrice des sources  $S$  à l'aide d'un algorithme classique de moindres carrés non-négatifs, les matrices  $X$ ,  $A$  et  $S$  étant non-négatives.

L'estimation de  $A$  est réalisée selon la méthode suivante. Supposons que les données  $X$  contiennent au moins un vecteur colonne mono-source (c.-à-d. contenant la contribution d'une unique colonne de  $A$ ) par source. Notons ce vecteur mono-source  $x_p$ ,  $p \in \{1, \dots, M\}$ , dépendant uniquement d'une colonne de  $A$  d'indice  $\ell_0 \in \{1, \dots, L\}$ . L'expression de ce vecteur est alors :

$$x_p = a_{\ell_0} s_{\ell_0 p} \quad (5)$$

où  $a_{\ell_0}$  est la colonne  $\ell_0$  de  $A$ .  $s_{\ell_0 p}$  étant un scalaire non-négatif,  $x_p$  appartient à une arête du cône simplicial  $\mathcal{C}(A)$  (Définition

2). Identifier les colonnes de  $A$  (à un coefficient d'échelle près) est donc équivalent à identifier chaque arête du cône simplicial  $\mathcal{C}(X)$  engendré par  $X$  (Propriété 4). Les vecteurs observés étant non-négatifs, l'identification des arêtes revient à identifier les  $L$  vecteurs observés qui sont les plus éloignés au sens angulaire. La preuve de ce critère d'identification sera donnée dans un futur article. Une méthode similaire d'identification de vecteurs extrêmes (c.-à-d. arêtes) a été proposée dans un contexte de reconnaissance de formes [5]. Les auteurs développent une méthode appelée EVA (pour Extreme Vector Algorithm en anglais) afin d'améliorer l'identification des composantes les plus représentatives d'un ensemble de données, en dehors de l'objectif final de SAS visé ici.

Avant tout, les colonnes de  $X$  sont seuillées puis normalisées à une longueur unitaire pour simplifier les équations suivantes. Les deux premières colonnes identifiées de la matrice de mélange  $A$  correspondent à la paire de vecteurs observés qui a le plus grand angle. Notons  $x_{m_1}$  et  $x_{m_2}$  cette paire de vecteurs observés. Nous avons :

$$(m_1, m_2) = \operatorname{argmax}_{i,j} \cos^{-1}(x_i^T x_j) \quad \forall i, j \in \{1, \dots, M\}. \quad (6)$$

De plus, les colonnes de  $X$  étant normalisées et non-négatives, le produit scalaire entre deux colonnes quelconques de  $X$  est dans l'intervalle  $[0, 1]$ . La fonction  $\cos^{-1}$  étant monotone décroissante sur cet intervalle, l'équation (6) peut être simplifiée :

$$(m_1, m_2) = \operatorname{argmin}_{i,j} x_i^T x_j \quad \forall i, j \in \{1, \dots, M\}. \quad (7)$$

Notons  $\tilde{A} = [x_{m_1}, x_{m_2}]$  la matrice formée par ces deux colonnes. L'étape suivante consiste à identifier la colonne qui a le plus grand angle avec  $x_{m_1}$  et  $x_{m_2}$ . Cette colonne est définie comme étant celle qui forme le plus grand angle avec sa projection orthogonale sur le cône simplicial engendré par  $x_{m_1}$  et  $x_{m_2}$ . Soit  $\Pi_{\tilde{A}}(X)$  la projection des colonnes de  $X$  sur le cône simplicial engendré par les colonnes de  $\tilde{A}$  :

$$\Pi_{\tilde{A}}(X) = \tilde{A}(\tilde{A}^T \tilde{A})^{-1} \tilde{A}^T X. \quad (8)$$

Pour trouver la colonne de  $X$  qui est la plus éloignée de sa projection, on procède de la même manière que pour identifier les deux premières colonnes de  $\tilde{A}$ . Notons que  $\Pi_{\tilde{A}}(X)$  est également non-négative (la preuve de cette propriété sera donnée dans un futur article), donc maximiser l'angle entre un vecteur colonne et sa projection revient à minimiser leur produit scalaire. Soit  $m_3$  l'indice de cette colonne :

$$m_3 = \operatorname{argmin}_i x_i^T \pi_i \quad \forall i \in \{1, \dots, M\} \quad (9)$$

où  $\pi_i$  est la  $i^e$  colonne de  $\Pi_{\tilde{A}}(X)$ . La nouvelle estimation de la matrice de mélange est alors  $\hat{A} = [x_{m_1}, x_{m_2}, x_{m_3}]$ . Cette procédure de projection et d'identification est ensuite répétée pour identifier les  $L$  colonnes de la matrice de mélange. Par exemple, l'indice  $m_4$  peut être identifié en trouvant la colonne de  $X$  qui forme le plus grand angle avec sa projection sur le cône simplicial engendré par les colonnes de  $\hat{A} = [x_{m_1}, x_{m_2}, x_{m_3}]$ . Au final, la matrice de mélange est complètement estimée :

$$\hat{A} = [x_{m_1}, \dots, x_{m_L}]. \quad (10)$$

Notons que les colonnes de  $\hat{A}$  sont obtenues dans un ordre arbitraire et l'algorithme ne garantit pas que les colonnes de  $\hat{A}$  et  $A$  aient la même norme (en raison de la normalisation des colonnes de  $X$ ). Ces deux indéterminations sont bien connues en SAS et sont appelées indéterminations d'échelle et de permutation.

Par ailleurs, pour des données réelles, les observations sont contaminées par du bruit. Avec la procédure ci-dessus, l'estimation de la matrice de mélange est très sensible au bruit puisque les colonnes de  $\hat{A}$  sont des vecteurs observés "bruts". Pour rendre l'estimation plus robuste, nous proposons une extension de la méthode précédente en introduisant une marge de tolérance dans la sélection des colonnes. Au lieu de sélectionner la colonne qui a le plus grand angle avec sa projection (ou les deux premières colonnes qui ont le plus grand angle), nous sélectionnons toutes les colonnes qui sont quasiment colinéaires à la colonne identifiée avec la méthode ci-dessus. L'introduction de cette marge de tolérance permet de prendre en compte le cas où plusieurs vecteurs mono-sources, relatifs à la même source, sont présents dans les données observées. Pour chaque colonne  $x_{m_\ell}$  précédemment identifiée selon l'équation (10), on construit l'ensemble  $\mathcal{A}_\ell$  :

$$\mathcal{A}_\ell = \{x_i \mid x_{m_\ell}^T x_i \geq \kappa\} \quad i \in \{1, \dots, M\}, \ell \in \{1, \dots, L\} \quad (11)$$

où  $\kappa$  est un seuil de tolérance d'un produit scalaire (donc inclus dans  $[0, 1]$ ). Il doit être choisi proche de 1 pour éviter de sélectionner des observations mélangées (typiquement  $\kappa = 0.99$ ). La matrice de mélange est obtenue en moyennant les colonnes de chaque ensemble  $\mathcal{A}_\ell$  ce qui réduit l'influence du bruit :

$$\hat{A} = [\bar{\mathcal{A}}_1, \dots, \bar{\mathcal{A}}_L] \quad (12)$$

où  $\bar{\mathcal{A}}_\ell$  est la colonne moyenne de l'ensemble  $\mathcal{A}_\ell$ . Ainsi, nous obtenons une estimation de la matrice de mélange  $A$  à une permutation et des facteurs d'échelle près.

## 4 Résultats expérimentaux

Dans notre contexte, chaque spectre observé résulte du mélange de différentes composantes cinématiques des mêmes espèces chimiques [1]. Grâce à la grande résolution spectrale et au faible intervalle de longueur d'onde observée, les spectres élémentaires contiennent une unique raie d'émission qui peut être grossièrement modélisée par une fonction gaussienne normalisée (c.-à-d. qui s'intègre à 1). Nous générons des cubes de données de  $100 \times 100$  pixels, contenant 4 spectres élémentaires de 300 échantillons (les fonctions gaussiennes ont le même écart-type mais des moyennes différentes). Les cartes d'abondance sont simulées avec des fonctions gaussiennes 2D (*sources*) de même écart-type  $\sigma_m$  pour chaque carte. Pour générer des pixels plus ou moins purs, nous faisons varier la position de chaque *source* pour obtenir plus ou moins de recouvrement entre elles. La distance  $d$  entre le centre de deux *sources* varie de  $3.5\sigma_m$  à  $2\sigma_m$  par pas de  $-0.5\sigma_m$ . On ajoute à chaque cube ainsi généré un bruit blanc gaussien pour avoir un Rapport Signal sur Bruit (RSB) de 10, 15, 20 ou 30 dB.

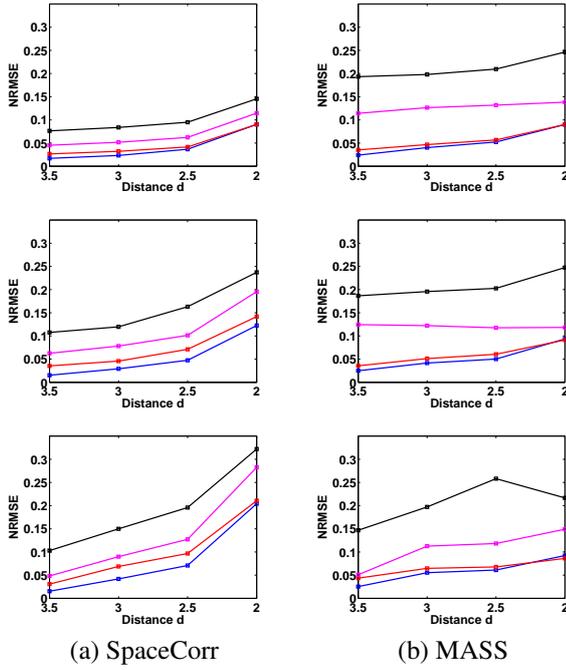


FIGURE 2 – Performances des méthodes. Sur chaque graphe, on représente le NRMSE moyen des spectres selon le RSB (bleu : 30 dB, rouge : 20 dB, magenta : 15 dB et noir : 10 dB). Les lignes correspondent aux différents sous-échantillonnages spatiaux, la première sans sous-échantillonnage, la seconde avec un facteur 4 et la dernière avec un facteur 8.

Pour ces tests, nous comparons MASS à SpaceCorr [3]. Les données synthétiques sont également sous-échantillonnées spatialement avec différents facteurs pour simuler le cas où elles ne contiennent plus de zones mono-sources. Cependant, il reste des pixels mono-sources dans le mélange. L’objectif est de montrer quand MASS peut réaliser la SAS tandis que SpaceCorr devient inutilisable. Les performances des méthodes sont mesurées par l’erreur quadratique moyenne normalisée pour comparer chaque spectre réel (ou carte d’abondance) à son estimation :

$$\text{NRMSE} = \frac{\|\text{réel} - \text{estimé}\|}{\|\text{réel}\|}. \quad (13)$$

Cependant, avant de réaliser ces mesures, les indéterminations d’échelle doivent être prises en compte. Pour cela, les spectres estimés (colonnes de  $\hat{A}$ ) sont normalisés, de façon à ce qu’ils s’intègrent à 1, avant la reconstruction des sources.

Les résultats des différentes décompositions sont fournis en Fig. 2 et suggèrent trois principaux constats (pour plus de clarté, nous présentons uniquement le NRMSE des spectres mais les courbes pour les cartes sont similaires). Pour simplifier l’interprétation des résultats, nous considérons dans un premier temps uniquement les courbes avec un RSB de 30 dB.

Tout d’abord, on observe que la réduction de la distance entre les sources conduit à la réduction des zones mono-sources et donc à la réduction des performances de SpaceCorr en fonction de  $d$ . Pour une distance de  $d = 3.5\sigma_m$  l’erreur de reconstruction est faible (entre 1.5% et 2.5% pour les deux méthodes) quel que soit l’échantillonnage. A mesure que la distance  $d$  di-

minue, l’erreur de reconstruction augmente (environ 9% pour MASS et entre 9% et 20% pour SpaceCorr avec  $d = 2\sigma_m$ ).

Ensuite, on note une dégradation significative des performances de SpaceCorr quand le facteur de sous-échantillonnage augmente et pour de faibles distances  $d$ . Ce résultat est cohérent puisque nous éliminons les zones mono-sources dans les données. On observe que les performances de MASS sont stables jusqu’à un facteur de sous-échantillonnage de 8. L’erreur de reconstruction reste proche de 9% avec MASS alors qu’elle atteint 20% avec SpaceCorr.

Pour finir, on observe un comportement différent des deux méthodes vis-à-vis du bruit. SpaceCorr est moins sensible que MASS aux hauts niveaux de bruit lorsqu’elle est utilisée dans des conditions propices ( $d \geq 2.5\sigma_m$  et sans sous-échantillonnage). L’erreur de reconstruction est au plus de 9% dans ce cas avec un RSB de 10 dB, tandis qu’elle est de 20% pour MASS. Quel que soit le sous-échantillonnage ou la distance  $d$ , MASS donne de bons résultats et reste stable pour des RSB supérieurs à 20 dB.

## 5 Conclusion

Dans cet article, nous avons proposé une méthode simple de démixage d’images hyperspectrales sans contrainte de somme à 1. Elle est fondée sur la recherche de vecteurs qui sont les plus éloignés au sens angulaire. Notre objectif est de réduire au minimum les contraintes de parcimonie de la méthode SpaceCorr (c.-à-d. réduire les zones mono-sources à des pixels mono-sources isolés) tout en maintenant la même qualité de séparation. Ceci est confirmé pour des niveaux raisonnables de RSB par des tests sur des données synthétiques. Ces résultats nous motivent à continuer ce travail en rendant la méthode plus robuste au bruit. Nous prévoyons également d’apporter la justification théorique de notre méthode d’identification des arêtes du cône simplicial. Des tests sont en cours avec des données astrophysiques réelles.

## Références

- [1] O. Berné, C. Joblin, Deville, *et al.*, “Blind decomposition of Herschel-HIFI spectral maps of the NGC 7023 nebula,” in *SF2A-2012*, pp. 507–512, Dec. 2012.
- [2] J. M. Bioucas-dias, A. Plaza, N. Dobigeon, *et al.*, “Hyperspectral unmixing overview : Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches,” *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, pp. 354–379, 2012.
- [3] G. Naik and W. Wang Eds, *Blind Source Separation : Advances in Theory, Algorithms and Applications. Chapter 6 (pp. 151-196)*. Springer, 2014.
- [4] W. S. B. Ouedraogo, A. Souldoumiac, M. Jaidane, and C. Jutten, “Non-negative blind source separation algorithm based on minimum aperture simplicial cone,” *IEEE Tr. SP*, vol. 62, pp. 376–389, Feb. 2014.
- [5] B. Klasingberg, J. Curry, and A. Dougherty, “Non-negative matrix factorization : Ill-posedness and a geometric algorithm,” *Pattern Recognition*, vol. 42, pp. 918 – 928, 2009.