

# Approches géométriques pour l'estimation des fractions d'abondance en traitement de données hyperspectrales

Paul HONEINE<sup>1</sup>, Cédric RICHARD<sup>2,+</sup>

<sup>1</sup>Institut Charles Delaunay (UMR STMR CNRS 6279), équipe LM2S  
Université de technologie de Troyes, 12, rue Marie Curie, 10000 Troyes, France

<sup>2</sup>Laboratoire H. Fizeau (UMR CNRS 6525), Observatoire de la Côte d'Azur  
Université de Nice Sophia-Antipolis, Parc Valrose, 06108 Nice, France

<sup>+</sup>Institut Universitaire de France

paul.honeine@utt.fr, cedric.richard@unice.fr

## Résumé –

De nombreuses études ont récemment montré l'avantage de l'approche géométrique en démixage de données hyperspectrales. Elle permet d'identifier les signatures spectrales des composants purs. Jusqu'ici, l'estimation des fractions d'abondance a toujours été réalisée dans un second temps, par résolution d'un problème inverse généralement. Dans cet article, nous montrons que les techniques géométriques d'extraction des composants purs de la littérature permettent d'estimer conjointement les fractions d'abondance, pour un coût calculatoire supplémentaire négligeable. Pour ce faire, un socle commun d'interprétations géométriques du problème est proposé, que l'on peut décliner pour mieux l'adapter à la technique d'extraction de composants purs retenue. Le caractère géométrique de l'approche proposée lui confère une flexibilité très appréciable dans le cadre de techniques de démixage géométrique, illustrée ici avec N-Findr, SGA, VCA, OSP et ICE.

## Abstract –

In hyperspectral image unmixing, a collection of pure spectra, the so-called endmembers, is identified and their abundance fractions are estimated at each pixel. While endmembers are often extracted using a geometric approach, the abundances are usually estimated using a least-squares approach by solving an inverse problem. In this paper, we tackle the problem of abundance estimation by using a geometric point of view. The proposed framework shows that a large number of endmember extraction techniques can be adapted to jointly estimate the abundance fractions, with essentially no additional computational complexity. This is illustrated in this paper with the N-Findr, SGA, VCA, OSP, and ICE endmember extraction techniques.

## 1 Introduction

Le démixage spectral constitue l'un des problèmes fondamentaux en imagerie hyperspectrale [1]. Il s'agit de décomposer un ensemble de vecteurs spectraux sur une collection de signatures spectrales de composants purs à déterminer, et d'estimer la fraction d'abondance de ces derniers dans le mélange. Les méthodes de démixage hyperspectral existantes sont essentiellement de deux natures : géométrique ou statistique [2]. Au-delà de ces stratégies variées tournées vers l'identification des composants purs, l'estimation des fractions d'abondance est souvent réalisée par résolution d'un problème inverse secondaire. La prise en compte de certaines contraintes physiques nécessite des techniques d'optimisation avancées, au prix d'un coût calculatoire supplémentaire important. Dans tous les cas, le point de vue géométrique pour l'estimation des fractions d'abondance a toujours été inexploité.

Le présent article se propose de traiter le problème d'estimation des fractions d'abondance dans un cadre géométrique, en poursuivant l'étude entamée dans [3]. On montre pour cela que ces dernières peuvent s'exprimer, en général, à l'aide de quantités déjà calculées par les techniques d'extraction de compo-

sants purs. Aussi ce point de vue géométrique original permet-il de coupler aisément l'estimation des fractions aux techniques d'identification géométrique classiques, avec une complexité algorithmique faible. On exploite pour cela la configuration géométrique des données hyperspectrales, contenues dans un simplexe dont les sommets sont les composants purs. Pour identifier ces signatures, essentiellement trois stratégies ont été proposées dans la littérature :

- la maximisation du volume du simplexe, selon une stratégie par substitution avec l'algorithme "N-Findr" [4], ou encore incrémentale avec le "simplex growing algorithm" (SGA) [5] ;
- la maximisation de la distance entre un sommet et le sous-espace engendré par les autres sommets, avec le "vertex component analysis" (VCA) [6] et le "orthogonal subspace projection" (OSP) [7] ;
- la maximisation des longueurs des arêtes du simplexe, comme le préconise l'algorithme dénommé "iterated constrained endmembers" (ICE) [8].

Le caractère géométrique de l'approche proposée pour l'estimation des fractions d'abondance lui confère une flexibilité pouvant s'adapter à ces différentes stratégies.

## 2 Le modèle de mélange linéaire

Le problème de démixage consiste à décomposer chaque pixel (vecteur spectral) d'une image hyperspectrale sur une collection de signatures spectrales de composants purs, et à estimer la proportion de ces derniers dans le mélange. Selon le modèle de mélange linéaire, chaque vecteur spectral  $\mathbf{x}_\ell$  vérifie

$$\mathbf{x}_\ell = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_{\omega_i},$$

où  $\{\mathbf{x}_{\omega_1}, \mathbf{x}_{\omega_2}, \dots, \mathbf{x}_{\omega_n}\}$  désigne la collection de signatures des éléments purs, et  $\alpha_i$  représente la contribution de  $\mathbf{x}_{\omega_i}$  dans le mélange. Sous une forme matricielle, on peut écrire

$$\mathbf{x}_\ell = \mathbf{X}\boldsymbol{\alpha},$$

où  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_{\omega_1} \ \mathbf{x}_{\omega_2} \ \dots \ \mathbf{x}_{\omega_n}]$  et  $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_1 \ \alpha_2 \ \dots \ \alpha_n]^\top$ . En supposant que les signatures pures ont été identifiées, on s'intéresse à l'estimation des fractions d'abondance.

Afin que le résultat se prête à une interprétation physique, les fractions d'abondance doivent satisfaire deux contraintes, la somme unité et la non-négativité, c'est-à-dire  $\mathbf{1}^\top \boldsymbol{\alpha} = 1$  et  $\boldsymbol{\alpha} \geq 0$  respectivement, où  $\mathbf{1}$  est le vecteur unité de taille  $(n \times 1)$ . En ignorant ces contraintes, la solution optimale au sens des moindres carrés est donnée par

$$\boldsymbol{\alpha}_{\text{LS}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{x}_\ell. \quad (1)$$

La contrainte d'égalité est la plus simple à imposer, en utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange, avec

$$\boldsymbol{\alpha}_{\text{eqLS}} = \boldsymbol{\alpha}_{\text{LS}} - \frac{1}{\mathbf{1}^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{1}} (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{1} (\mathbf{1}^\top \boldsymbol{\alpha}_{\text{LS}} - 1). \quad (2)$$

La contrainte de non-négativité est plus difficile à satisfaire, et nécessite des outils dédiés. Voir par exemple [9, 10, 11]. Comme illustré par les équations ci-dessus, il est clair que la résolution de ce problème passe par la résolution d'un problème inverse.

## 3 Techniques d'estimation des fractions d'abondance par la géométrie

Afin de résoudre le problème de démixage avec la contrainte de somme unité, la contrainte de non-négativité étant étudiée plus loin, on propose de résoudre le système augmenté<sup>1</sup>

$$\begin{bmatrix} \mathbf{1}^\top \\ \mathbf{X} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x}_\ell \end{bmatrix}.$$

La solution de ce système de  $n$  équations à  $n$  inconnues est donnée par la règle de Cramer [12], c'est-à-dire

$$\alpha_k = \frac{\det \begin{bmatrix} \mathbf{1}^\top \\ \mathbf{X}_k \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} \mathbf{1}^\top \\ \mathbf{X} \end{bmatrix}}, \quad (3)$$

<sup>1</sup>. Le système augmenté proposé ici est utilisé à d'autres fins que celui étudié dans [11].

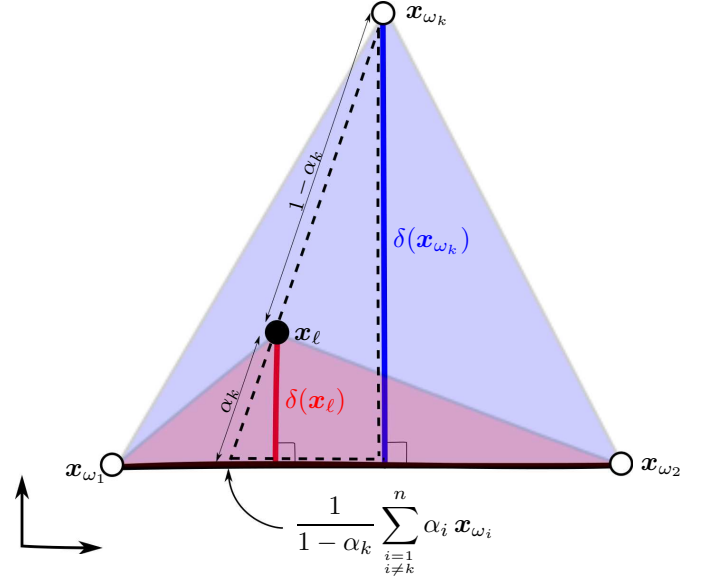


FIGURE 1 – Illustration géométrique de  $\alpha_k$ , la contribution de  $\mathbf{x}_{\omega_k}$  dans le mélange  $\mathbf{x}_\ell$ . En 2D,  $\alpha_k$  correspond au rapport des aires des triangles rouge et bleu, ou encore au rapport des distances à la base commune  $\delta(\mathbf{x}_\ell)/\delta(\mathbf{x}_{\omega_k})$ . Cette relation est également donnée par le théorème de Thalès appliqué au triangle en trait discontinu.

où  $\mathbf{X}_k$  désigne la matrice obtenue de  $\mathbf{X}$  en remplaçant sa  $k$ -ème colonne  $\mathbf{x}_{\omega_k}$  par  $\mathbf{x}_\ell$ . Le choix d'une telle approche pour résoudre ce problème réside dans l'interprétation géométrique de l'expression (3). Pour cela, on rappelle l'expression du volume d'un simplexe de sommets  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_{\omega_1} \ \mathbf{x}_{\omega_2} \ \dots \ \mathbf{x}_{\omega_n}]$ , donnée par

$$\mathcal{V}_{\mathbf{X}} = \frac{1}{(n-1)!} \det \begin{bmatrix} \mathbf{1}^\top \\ \mathbf{X} \end{bmatrix}.$$

On en déduit donc immédiatement que

$$\alpha_k = \frac{\mathcal{V}_{\mathbf{X}_k}}{\mathcal{V}_{\mathbf{X}}}, \quad (4)$$

pour tout  $k = 1, 2, \dots, n$ . Ces volumes sont souvent déjà calculés par les techniques d'identification de composants purs, comme avec les algorithmes N-Findr et SGA. Ceci permet d'estimer les fractions d'abondance sans coût calculatoire supplémentaire.

L'expression précédente se prête à une simplification puisqu'elle implique deux simplexes qui partagent  $n-1$  sommets définissant une base commune, et diffèrent par l'un de leurs sommets, ici  $\mathbf{x}_{\omega_k}$  et  $\mathbf{x}_\ell$ . Or, le volume d'un simplexe est proportionnel au produit d'une hauteur (distance entre un sommet et la base associée, définie par le sous-espace engendré par les autres sommets) et le volume de la base correspondante (volume du simplexe engendré par les autres sommets). Au jour de cette définition, l'expression (4) se ramène à

$$\alpha_k = \frac{\delta(\mathbf{x}_\ell)}{\delta(\mathbf{x}_{\omega_k})}, \quad (5)$$

pour tout  $k = 1, 2, \dots, n$ , où  $\delta(\mathbf{x}_\ell)$  est la distance entre le sommet  $\mathbf{x}_\ell$  et la base commune formée par les éléments de  $\mathbf{X}$  privés de  $\mathbf{x}_{\omega_k}$ , et  $\delta(\mathbf{x}_{\omega_k})$  la distance de  $\mathbf{x}_{\omega_k}$  à cette même base. Cette formulation est particulièrement adaptée aux techniques qui se basent sur la maximisation d'une distance, telles que VCA et

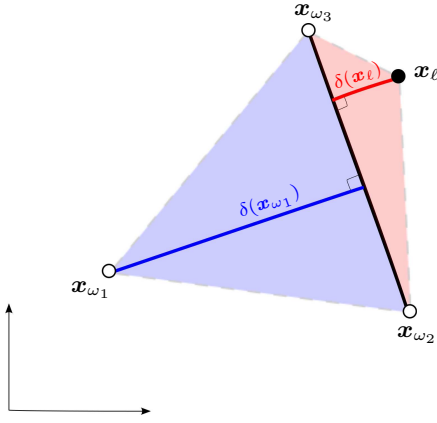


FIGURE 2 – Illustration en 2D de  $\alpha_1 = \delta(x_{\ell})/\delta(x_{\omega_1})$ . Comme illustré ici avec  $\alpha_1 < 0$ , on a  $x_{\ell}$  et  $x_{\omega_1}$  des deux côtés de la base définie par  $\{x_{\omega_2}, x_{\omega_3}\}$ .

OSP, pour identifier les sommets du simplexe. Voir aussi [13]. Une autre interprétation peut également être obtenue à partir de la décomposition  $x_{\ell} = \alpha_k x_{\omega_k} + \sum_{i=1, i \neq k}^n \alpha_i x_{\omega_i}$ . Il suffit pour cela d'écrire

$$x_{\ell} = \alpha_k x_{\omega_k} + (1 - \alpha_k) \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \frac{\alpha_i}{\sum_{j=1, j \neq k}^n \alpha_j} x_{\omega_i}, \quad (6)$$

après avoir noté que  $\sum_{j=1, j \neq k}^n \alpha_j = 1 - \alpha_k$ . On exprime ici  $x_{\ell}$  comme le mélange de  $x_{\omega_k}$  et d'une signature spectrale équivalente aux autres composantes pures  $x_{\omega_i}$ ,  $i \neq k$ , en proportions  $\alpha_k$  et  $1 - \alpha_k$ . De manière plus synthétique, les relations (4)-(6) reprennent le théorème de Thalès illustré par la Figure 1, que l'on exprime à partir du sommet équivalent défini ci-dessus par  $\frac{1}{1-\alpha_k} \sum_{i=1, i \neq k}^n \alpha_i x_{\omega_i}$ .

Toujours afin de construire le simplexe enfermant toutes les données, une troisième stratégie a été considérée dans la littérature en recherchant le simplexe d'arêtes les plus longues. Ainsi les composantes pures sont-elles obtenues par maximisation de la distance quadratique totale  $\sum_{i,j=1, i \neq j}^n \|x_{\omega_i} - x_{\omega_j}\|^2$ . La résolution d'un tel problème, par la méthode ICE par exemple, nécessite le calcul des distances de toutes les paires de données. Celles-ci peuvent alors être aisément utilisées pour déterminer le volume du simplexe correspondant puisque, à partir des déterminants de Cayley-Menger, on a

$$(\mathcal{V}_{\mathbf{X}})^2 = \frac{(-1)^n}{2^{n-1}((n-1)!)^2} \det \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \delta_{1,2}^2 & \cdots & \delta_{1,n}^2 \\ 1 & \delta_{2,1}^2 & 0 & \cdots & \delta_{2,n}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \delta_{n,1}^2 & \delta_{n,2}^2 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

où  $\delta_{i,j}$  désigne la distance entre deux sommets. Cette expression est la généralisation de la formule de Héron pour le calcul de l'aire d'un triangle quelconque avec  $(\mathcal{V}_{\mathbf{X}})^2 = \frac{1}{16}(\delta_{1,2} + \delta_{1,3} + \delta_{2,3})(\delta_{1,2} + \delta_{1,3} - \delta_{2,3})(\delta_{1,2} - \delta_{1,3} + \delta_{2,3})(-\delta_{1,2} + \delta_{1,3} + \delta_{2,3})$ . Une fois encore, ces considérations géométriques peuvent être exploitées afin de déterminer directement les fractions d'abondance correspondantes sans développement calculatoire lourd.

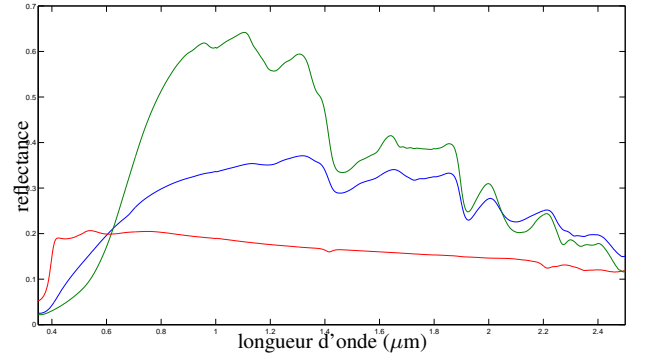


FIGURE 3 – Les signatures spectrales des trois composants purs : “herbe dorée”, “cèdre” et “asphalte”.

## Sur la non-négativité

Il est à noter que la contrainte de non-négativité n'est pas imposée dans l'approche géométrique proposée. En effet, la violation de cette contrainte signifie que  $x_{\ell}$  est à l'extérieur du simplexe. Ceci témoigne alors, d'une part de l'inadéquation du modèle de mélange linéaire, et d'autre part de la déficience de la technique d'identification des signatures des composés purs. La méthode proposée montre que, dans ce cas, les deux déterminants dans (3) sont de signe opposé. Ceci s'exprime selon l'expression (5) par des éléments dans chaque demi-plan défini par la base commune, comme illustré dans la Figure 2.

## 4 Expérimentations

Dans une première expérimentation, nous nous intéressons au problème de démixage de données hyperspectrales, synthétisées à partir de trois composants purs : “herbe dorée”, “cèdre” et “asphalte” du USGS Library [14], définis par GDS480, GDS357 et GDS368, respectivement. Leurs signatures spectrales sont illustrées à la Figure 3, avec 2 151 bandes couvrant les longueurs d'onde de 0.35 à 2.5  $\mu\text{m}$ . Une image hyperspectrale de taille  $64 \times 64$  a été générée, selon le modèle

$$x_{\ell} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i x_{\omega_i} + \epsilon,$$

pour  $\ell = 1, 2, \dots, 4096$ , et  $\epsilon$  un bruit blanc Gaussien de moyenne nulle et de variance  $2.5 \cdot 10^{-3}$ . Les signatures des composants purs ont été estimées à partir de l'image générée selon le modèle ci-dessus, résultant en des versions corrompues des composants initiaux.

Suite à une réduction de dimension avec l'algorithme de l'ACP classique, ces composants purs ont été convenablement retrouvés par la plupart des techniques d'extraction. Nous avons comparé l'une de nos approches, celle consistant à associer N-Findr et la relation (4), à différentes méthodes de moindres carrés pour l'estimation des fractions d'abondance. Le Tableau 1 compare la violation des contraintes de non-négativité et de somme unité, pour les différentes techniques. À ces violations, s'ajoutent des valeurs des fraction d'abondance supérieures à l'unité pour les deux algorithmes de moindres

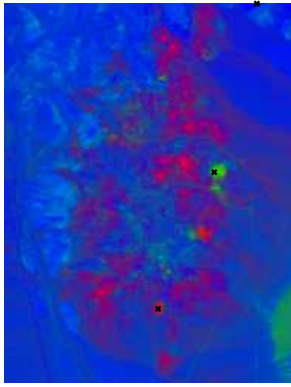


FIGURE 4 – Image à trois canaux du site Cuprite. Les couleurs primaires représentent le premier, deuxième et troisième composés purs. Ces derniers sont indiqués par x. Le modèle de mélange choisi est donné par l’expression (4).

	$\exists i: \alpha_i < 0$	$\sum_{i=1}^n \alpha_i \neq 1$
Moindres carrés (1)	3 (0.7%)	4 043 (99%)
- avec somme unité (2)	45 (1.1%)	0
- avec non-négativité [9]	0	4 043 (99%)
- avec contraintes totales [11]	0	0
Méthode proposée dans cet article	60 (1.4%)	0

TABLE 1 – Nombre de données, sur 4096 en total, avec des fractions abondances estimées qui ne vérifient pas les contraintes non-négativité et/ou somme unité.

carrée : avec contrainte de somme unité, et avec contrainte de non-négativité. Précisons pour finir que l’approche proposée nécessite nettement moins de ressources que les autres techniques, avec seulement  $3 \times 4096$  divisions arithmétiques (algorithme implémenté conjointement avec N-Findr) alors que les autres techniques nécessitent au mieux une inversion matricielle.

Dans une seconde expérimentation, nous avons considéré la scène de Cuprite extraite de la base AVIRIS, décrite en détail dans la référence [6]. La Figure 4 montre le résultat obtenu en combinant l’algorithme N-Findr et la relation (4) pour l’estimation des fractions d’abondance, sans aucun traitement complémentaire. Cette carte s’avère cohérente avec la vérité terrain.

## 5 Conclusion

Dans cet article, nous avons proposé un schéma géométrique pour l’estimation des fractions d’abondance. L’étude menée montre que notre approche permet d’exploiter des quantités déjà calculées par les techniques classiques d’identification de composants purs. Nous avons précisé ce principe avec les techniques N-Findr, SGA, VCA, OSP, et ICE. Les prochaines étapes de nos travaux de recherche seront orientés vers la prise en compte de la contrainte de non-négativité par l’approche géométrique.

## Références

- [1] N. Keshava and J. F. Mustard, “Spectral unmixing,” *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 19, no. 1, pp. 44–57, 2002.
- [2] M. Parente and A. Plaza, “Survey of geometric and statistical unmixing algorithms for hyperspectral images,” in *IEEE GRSS Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS’10)*, Reykjavik, Iceland, 2010.
- [3] P. Honeine and C. Richard, “A simple scheme for unmixing hyperspectral data based on the geometry of the n-dimensional simplex,” in *Proc. 30th IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, Honolulu (Hawaii), USA, 25 - 30 July 2010.
- [4] M. Winter, “N-FINDR : an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data : an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data,” *Proc. of SPIE : Imaging Spectrometry V*, vol. 3753, no. 10, 1999.
- [5] C. Chang, C.-C. Wuand, W.-M. Liu, and Y.-C. Quayang, “A new growing method for simplex-based endmember extraction algorithm,” *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 44, no. 10, pp. 2804–2819, October 2006.
- [6] J. M. P. Nascimento and J. M. B. Dias, “Vertex component analysis : A fast algorithm to unmix hyperspectral data,” *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 43, no. 4, pp. 898–910, 2004.
- [7] J. C. Harsanyi and C.-I. Chang, “Hyperspectral image classification and dimensionality reduction : an orthogonal subspace projection approach,” *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 32, no. 4, pp. 779–785, 1994.
- [8] M. Berman, H. Kiiveri, R. Lagerstrom, A. Ernst, R. Dunne, and J. F. Huntington, “ICE : a statistical approach to identifying end-members in hyperspectral images,” *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 42, no. 10, pp. 2085–2095, 2004.
- [9] C. L. Lawson and R. J. Hanson, *Solving Least Squares Problems (Classics in Applied Mathematics)*. Society for Industrial Mathematics, 1987.
- [10] H. Lantéri, M. Roche, O. Cuevas, and C. Aime, “A general method to devise maximum-likelihood signal restoration multiplicative algorithms with non-negativity constraints,” *Signal Processing*, vol. 81, pp. 945–974, May 2001.
- [11] D. Heinz and C. Chang, “Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery,” *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 39, no. 3, pp. 529–545, March 2001.
- [12] G. Strang, *Introduction to Linear Algebra*, 3rd ed. Wellesly-Cambridge Press, 2003.
- [13] W. Luo, L. Zhong, and B. Zhang, “Null subspace analysis for spectral unmixing in hyperspectral remote sensing,” in *Proc. Congress on Image and Signal Processing*, vol. 4. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, 2008, pp. 763–767.
- [14] R. N. Clark and Geological Survey (U.S.), *USGS digital spectral library splib06a [electronic resource]*. U.S. Geological Survey, Denver, CO, US, September 2007.