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

Extensions aux modèles de mélange non-linéaires

Paul Honeine¹, Cédric Richard^{2,3}, Nguyen Hoang Nguyen²

1. Institut Charles Delaunay (UMR CNRS 6279), équipe LM2S
Université de technologie de Troyes, 12, rue Marie Curie, 10000 Troyes, France
paul.honeine@utt.fr
2. Laboratoire Lagrange (UMR CNRS 7293), Observatoire de la Côte d'Azur
Université de Nice Sophia-Antipolis, Parc Valrose, 06108 Nice, France
cedric.richard@unice.fr,nguyenh@oca.eu
3. Institut Universitaire de France

RÉSUMÉ. De récentes études ont 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. Une extension non-linéaire est proposée, en utilisant des techniques de réduction de dimensionnalité par apprentissage de variétés, illustrée avec les algorithmes MDS, LLE et ISOMAP. Une telle approche permet de maintenir inchangés les algorithmes géométriques d'identification des composants purs et d'estimation de la proportion de ces derniers dans le mélange. La pertinence de cette approche est illustrée par des expérimentations sur des données synthétisées et réelles.

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 by solving an inverse problem. In this paper, we bypass 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 no additional computational complexity. This is illustrated in this paper with the N-Findr, SGA, VCA, OSP, and ICE endmember extraction techniques. A nonlinear extension is also proposed, using non-linear dimension reduction methods such as MDS, LLE and ISOMAP. These strategies maintain the geometric unmixing algorithms unchanged, for endmember extraction as well as abundance fraction estimation. The relevance of the proposed approach is illustrated through experiments on synthesized data and real hyperspectral image.

MOTS-CLÉS : traitement de données hyperspectrales, démixage non-linéaire, approches géométriques, réduction de dimension, distance géodésique

KEYWORDS: hyperspectral data processing, nonlinear unmixing, geometric unmixing methods, abundance estimation, dimensionality reduction techniques, geodesic distance

EXTENDED ABSTRACT

The spectral unmixing problem is a crucial issue in hyperspectral imaging (Keshava, Mustard, 2002). It consists of breaking down a pixel spectrum into a set of spectral signatures of pure components, called endmembers, and estimating the fractional abundances in the mixture. The hyperspectral unmixing methods can be roughly divided into two classes: geometric and statistical methods (Bioucas-Dias *et al.*, 2012). Initially studied in a linear unmixing model, nonlinear models have recently been investigated with success (Heylen, Scheunders, 2012 ; Chen, Richard, Honeine, 2013b ; Nguyen *et al.*, 2013). Most strategies are essentially oriented towards the identification of the endmembers. The estimation of the fractional abundances is often achieved subsequently, by using the least squares solution. The geometric point of view for estimating the fractional abundances has been seldom addressed in the literature. This paper considers the problem of estimating fractional abundances in a geometric framework, carrying on our recent work (Honeine, Richard, 2010 ; 2011a ; 2012) and providing a nonlinear extension. We show that the fractional abundances can be expressed with quantities, in general, already calculated by the endmembers extraction techniques, thus essentially without any increase in the computational cost. We further develop this framework, by providing a nonlinear extension through the dimensionality reduction techniques. Experimental results demonstrate the relevance of the proposed framework.

The unmixing problem consists in decomposing each pixel spectrum of a hyperspectral image into a collection of spectral signatures of pure components and quantifying their fractions in the mixture. The linear mixing model of some spectrum $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$, for $\ell = 1, 2, \dots, N$, is given by $\tilde{\mathbf{x}}_\ell = \sum_{i=1}^n \alpha_{\ell,i} \tilde{\mathbf{x}}_{\omega_i} + \tilde{\epsilon}_\ell$, where one often assumes that the n endmembers $\tilde{\mathbf{x}}_{\omega_1}, \tilde{\mathbf{x}}_{\omega_2}, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_{\omega_n}$ are available in the image, i.e., $\tilde{\mathbf{x}}_{\omega_i} \in \{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_N\}$ for all $i = 1, 2, \dots, n$. Here, $\tilde{\epsilon}_\ell$ is the model error, and $\alpha_{\ell,i}$ is the fraction of the endmember $\tilde{\mathbf{x}}_{\omega_i}$ in the mixture. Assuming that the number n of endmembers is known in advance (see for instance (Chang, Du, 2004)), the unmixing problem consists of identifying the endmembers $\tilde{\mathbf{x}}_{\omega_i}$'s in the whole image scene, and estimating the weights $\alpha_{\ell,i}$'s for each pixel spectrum $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$. The geometric unmixing strategies are essentially based on three stages: reduction of the dimension to $n - 1$, extraction of the endmembers by the geometry, and estimation of their fractional abundances by solving an inverse problem. These three stages are presented next.

The dimensionality reduction is an essential step in the implementation of geometric approaches, although it remains optional for most statistical unmixing algorithms. This is illustrated in FIGURE 1, where each pixel spectrum $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$ is transformed into \mathbf{x}_ℓ , a vector of dimension $n - 1$. A linear transformation is often performed, by considering the principal component analysis (PCA). To this end, the relevant subspace is obtained as the span of the eigenvectors associated to the largest $(n - 1)$ eigenvalues of the covariance matrix of the data, which yields the linear map given in (4). This leads to the unmixing model $\mathbf{x}_\ell = \mathbf{X}_\Omega \boldsymbol{\alpha}_\ell + \boldsymbol{\epsilon}_\ell$, where $\mathbf{X}_\Omega = [\mathbf{x}_{\omega_1} \ \mathbf{x}_{\omega_2} \ \dots \ \mathbf{x}_{\omega_n}]$ and $\boldsymbol{\alpha}_\ell = [\alpha_{\ell,1} \ \alpha_{\ell,2} \ \dots \ \alpha_{\ell,n}]^\top$, with $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$. To provide a physical interpretation, the fractional abundances need to satisfy two constraints: the sum-to-one, i.e., $\mathbf{1}_n^\top \boldsymbol{\alpha}_\ell = 1$ where $\mathbf{1}_n$ is a vector of ones; and the non-negativity, i.e., $\boldsymbol{\alpha}_\ell \succeq \mathbf{0}$.

As illustrated in FIGURE 1, these conditions geometrically constrain each sample \mathbf{x}_{ℓ} to lie within the simplex defined by the endmembers $\mathbf{x}_{\omega_1}, \mathbf{x}_{\omega_2}, \dots, \mathbf{x}_{\omega_n}$. The latter are extracted by identifying the simplex enclosing all the data. The most commonly used strategies are: (i) The simplex volume maximization strategy, carried by the N-Findr algorithm (Winter, 1999) as well as the simplex growing algorithm (SGA) (Chang *et al.*, 2006), considers each sample as a candidate to increase the volume of the resulting simplex. For a set of candidate indices $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$ at the ℓ -th iteration, one needs to quantify the $n + 1$ volumes, $|\mathcal{V}_{\Omega}|$ and $|\mathcal{V}_{\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}}|$ for $k = 1, 2, \dots, n$. Here, $\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}$ denotes the set of indices of Ω by substituting ω_k with \mathbf{x}_{ℓ} . The expression of the volume is given in (5). (ii) The height maximization strategy considers the simplex with the most spread vertices, where the spread is measured by the heights of the vertices to the corresponding bases. This is the case of the vertex component analysis (VCA) (Nascimento, Dias, 2004) and the orthogonal subspace projection (OSP) (Harsanyi, Chang, 1994) algorithms. (iii) The distance maximization strategy considers the spread using the sum of the square distances between vertices, as investigated by the iterated constrained endmember algorithm (ICE) (Berman *et al.*, 2004).

We propose to estimate the fractional abundances from geometry, by using information computed within the endmember extraction stage. To this end, we consider the augmented system (10), whose solution is thanks to Cramer's rule: $\alpha_{\ell,k} = \mathcal{V}_{\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}} / \mathcal{V}_{\Omega}$, for $k = 1, 2, \dots, n$. These volumes are often already available from the endmembers extraction stage, as with the N-Findr and SGA algorithms. This expression can be further simplified, since it involves two simplices that share $n - 1$ vertices defining a common face. The volume of this face can be simplified in the above ratio, yielding $\alpha_{\ell,k} = \delta(\mathbf{x}_{\ell}) / \delta(\mathbf{x}_{\omega_k})$, where $\delta(\mathbf{x}_{\ell})$ (resp. $\delta(\mathbf{x}_{\omega_k})$) is the distance from \mathbf{x}_{ℓ} (resp. \mathbf{x}_{ω_k}) to the common face defined by the vertices in $\mathbf{X}_{\Omega \setminus \{\omega_k\}}$. These quantities are available from VCA-like algorithms. The coupling with OSP algorithms is given by the intercept theorem, as illustrated in FIGURE 2 thanks to the decomposition given in (14). Finally, the connection to ICE-like algorithms, where distances between all vertices are computed, is shown in (15) thanks to the Cayley-Menger determinant (also known as Heron's formula in 2D).

The unmixing method discussed so far inherits its linearity from the considered stages. While keeping the above geometrical approach for endmember extraction and fractional abundances estimation, we take advantage of various representations of hyperspectral data by choosing an appropriate dimensionality reduction technique. We examine in detail the following techniques: (i) The multidimensional scaling (MDS) provides a set of techniques for dimensionality reduction, including metric MDS by preserving distances and non-metric MDS by preserving rank order (Cox, Cox, 2000); (ii) The ISOMAP consists of applying the MDS technique on the geodesic distances, which incorporates manifold structure in the resulting embedding (Tenenbaum *et al.*, 2000); (iii) The locally linear embedding (LLE) algorithm which preserves local topology of hyperspectral data (Roweis, Saul, 2000). We show that these techniques are extremely suitable for the hyperspectral unmixing problem. For instance, distances from MDS techniques and geodesic distances can be easily investigated, on the one hand for the endmember identification with ICE-like algorithms, and on the other hand for the fractional abundance estimation thanks to the Cayley-Menger determinant.

The relevance of the nonlinear dimension reduction techniques is shown through experiments on synthesized data and real hyperspectral image. The synthesized data consists of the linear mixing of the 3 spectra given in FIGURE 4 with an additive zero-mean Gaussian white noise with a signal-to-noise ratio of 20dB. Table 2 compares the violation of the sum-to-one and non-negativity constraints for results obtained from several unmixing techniques, as well as the computational cost (in seconds). The real hyperspectral image consists of the Cuprite scene given in FIGURE 5. By extracting 3 endmembers using the classical N-Findr algorithm, we illustrate in FIGURE 6 the influence of the dimensionality reduction technique on the structure of the data in the resulting embedding. The resulting abundance maps are given in FIGURE 7, as well as the map illustrating the obtained negative values.

1. Introduction

Le problème du démixage spectral des données est une question récurrente en imagerie hyperspectrale (Keshava, Mustard, 2002). Il consiste à 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 (Bioucas-Dias *et al.*, 2012), avec diverses extensions pour le démixage non-linéaire (Heylen *et al.*, 2011 ; Chen *et al.*, 2011a ; 2011b ; Heylen, Scheunders, 2012 ; Nguyen *et al.*, 2012 ; Chen *et al.*, 2012 ; Chen, Richard, Honeine, 2013b ; 2013a ; Chen *et al.*, accepted, 2013 ; Chen, Richard, Ferrari, Honeine, 2013), voir aussi (Nguyen *et al.*, 2013) avec la résolution du problème de pré-image (Honeine, Richard, 2011b ; 2011c ; 2009). 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 sous exploité. 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 (Honeine, Richard, 2010 ; 2011a ; 2012). On montre pour cela que les fractions d'abondance peuvent s'exprimer, en général, à l'aide de quantités déjà calculées par les techniques d'extraction de composants 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* (Winter, 1999), ou encore incrémentale avec le *Simplex Growing Algorithm* (SGA) (Chang *et al.*, 2006) ;
- la maximisation de la distance entre un sommet et le sous-espace engendré par les autres sommets, avec le *Vertex Component Analysis* (VCA) (Nascimento, Dias, 2004), et le *Orthogonal Subspace Projection* (OSP) (Harsanyi, Chang, 1994) ;
- la maximisation des longueurs des arêtes du simplexe, comme le préconise l'algorithme dénommé *Iterated Constrained Endmembers* (ICE) (Berman *et al.*, 2004).

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. Bien que nous nous concentrons sur ces stratégies, les plus connues dans la littérature, rien n'empêche d'appliquer notre approche à d'autres méthodes de démixage. Citons comme par exemple (Chan *et al.*, 2011) qui se ramène aux schémas *N-Findr* et VCA selon l'algorithme d'optimisation.

Au-delà du modèle de mélange linéaire, on envisage une extension non-linéaire en reprenant l'étape de réduction de dimension utilisée par les techniques d'identification géométrique. La réduction de dimension a souvent été opérée à l'aide de tech-

niques linéaires, la plus connue étant l'Analyse en Composantes Principales (ACP) (Jolliffe, 1986), ou encore *Minimum Noise Fraction* (Green *et al.*, 1988 ; Lee *et al.*, 1990). On montre la pertinence d'autres approches exploitant diverses techniques de représentation des spectres dans un espace de dimension réduite selon les stratégies suivantes :

- la conservation des distances (ou produits scalaires) de toutes les paires de données dans les deux espaces, avec l'approche *Multidimensional Scaling* (MDS) (Cox, Cox, 2000) ;
- la conservation des distances géodésiques estimées à partir d'un voisinage, qui permet une meilleure représentation de la variété, selon la méthode ISOMAP (Tenenbaum *et al.*, 2000) ;
- la conservation des représentations locales des données, avec la méthode *Locally Linear Embedding* (LLE) (Roweis, Saul, 2000).

Toutes ces méthodes se prêtent facilement au démélange de données hyperspectrales. De plus, la non-linéarité induite dans l'étape de réduction de dimension permet de conserver les algorithmes d'identification des composants purs et d'estimation de la proportion de ces derniers dans le mélange. Nous étudions la pertinence de ces méthodes non-linéaires sur une image hyperspectrale du site minier de Cuprite.

La suite de l'article est organisée ainsi. La Section 2 introduit le problème de démélange linéaire de données hyperspectrales, et montre comment les problèmes d'identification des signatures pures et l'estimation des fractions d'abondance ont été traités séparément jusqu'ici. La Section 3 est consacrée à la présentation de techniques d'estimation des fractions d'abondance par la géométrie. La Section 4 présente une extension non-linéaire de l'approche. Cette section est largement dédiée à la présentation de techniques non-linéaires de réduction de dimension. L'article s'achève sur la Section 5, qui vient illustrer la pertinence de l'approche proposée au travers d'expérimentations sur des données synthétisées et une image hyperspectrale réelle.

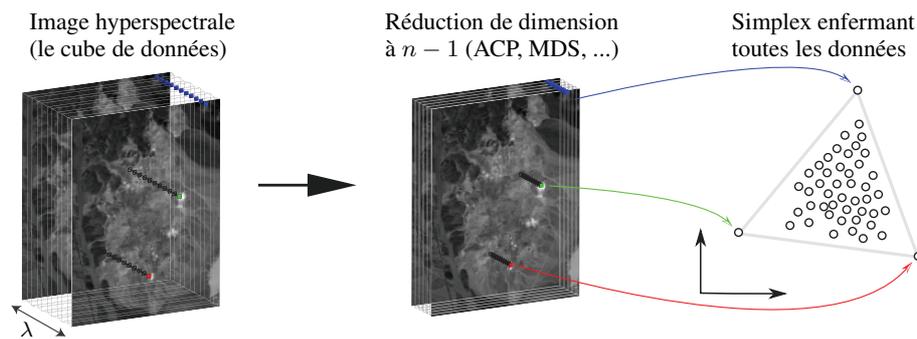


Figure 1. Illustration du démélange de données hyperspectrales, le nombre de composants purs étant fixé a priori, ici n . Suite à une réduction de dimension à $n - 1$, les techniques d'identification de signatures pures (*N-Findr*, *SGA*, *VCA*, ...) permettent de retrouver les composants purs comme étant les sommets du simplexe contenant toutes les données.

2. Méthodes de démixage linéaires

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 $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$, pour $\ell = 1, 2, \dots, N$, vérifie

$$\tilde{\mathbf{x}}_\ell = \sum_{i=1}^n \alpha_{\ell,i} \tilde{\mathbf{z}}_i + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\ell,$$

où $\tilde{\mathbf{z}}_i$ est le i -ème composant pur à estimer, $\alpha_{\ell,i}$ représente sa contribution dans le mélange, et $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\ell$ l'erreur d'approximation. Le nombre n de composants purs est fixé a priori, ou encore estimé. Voir par exemple (Chang, Du, 2004).

Nous supposons que les composants purs sont présents dans l'image étudiée, une hypothèse souvent admise par un grand nombre de méthodes d'identification de composants purs (Winter, 1999; Chang *et al.*, 2006; Nascimento, Dias, 2004; Harsanyi, Chang, 1994; Berman *et al.*, 2004). En d'autres termes, parmi les observations, il existe au moins une instance de chacun des composants purs à identifier, c'est-à-dire

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, n\}, \tilde{\mathbf{z}}_i \in \{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_N\}.$$

En représentant les pixels purs par l'ensemble des indices $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$, le modèle linéaire ci-dessus est équivalent à

$$\tilde{\mathbf{x}}_\ell = \sum_{i=1}^n \alpha_{\ell,i} \tilde{\mathbf{x}}_{\omega_i} + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\ell, \quad (1)$$

où $\{\tilde{\mathbf{x}}_{\omega_1}, \tilde{\mathbf{x}}_{\omega_2}, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_{\omega_n}\}$ désigne la collection de signatures des éléments purs.

La résolution de ce système passe par une technique de réduction de dimension, qui constitue une étape nécessaire préalable à la mise en oeuvre des approches géométriques, bien qu'elle reste facultative pour l'ensemble des algorithmes statistiques de démixage. Comme illustré à la FIGURE 1, la dimension spectrale est alors réduite à $n - 1$, en transformant chaque $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$ en \mathbf{x}_ℓ , aboutissant ainsi au modèle de mélange

$$\mathbf{x}_\ell = \sum_{i=1}^n \alpha_{\ell,i} \mathbf{x}_{\omega_i} + \boldsymbol{\epsilon}_\ell. \quad (2)$$

Sous une forme matricielle, on peut écrire

$$\mathbf{x}_\ell = \mathbf{X}_\Omega \boldsymbol{\alpha}_\ell + \boldsymbol{\epsilon}_\ell, \quad (3)$$

où $\mathbf{X}_\Omega = [\mathbf{x}_{\omega_1} \ \mathbf{x}_{\omega_2} \ \dots \ \mathbf{x}_{\omega_n}]$ et $\boldsymbol{\alpha}_\ell = [\alpha_{\ell,1} \ \alpha_{\ell,2} \ \dots \ \alpha_{\ell,n}]^\top$, avec $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$ l'ensemble des indices déterminé par une technique d'extraction des composants purs. Les fractions d'abondance $\boldsymbol{\alpha}_\ell$ doivent satisfaire deux contraintes, sur lesquelles nous reviendrons par la suite :

– La somme unité, c'est-à-dire $\mathbf{1}_n^\top \boldsymbol{\alpha}_\ell = 1$ où $\mathbf{1}_n$ est le vecteur unité de taille $(n \times 1)$.

- La non-négativité, c'est-à-dire $\alpha_\ell \succeq \mathbf{0}$.

Le démélange par la géométrie se base essentiellement sur trois étapes : la réduction de la dimension qui est portée à $n - 1$, l'extraction des composants purs par la géométrie, et l'estimation de leur fraction d'abondance par la résolution d'un problème inverse. La suite de la section est consacrée à la présentation de ces trois étapes.

2.1. Réduction de dimension par l'ACP

On souhaite ramener la dimension spectrale à $n - 1$, où n est le nombre d'éléments purs, en transformant chaque signature spectrale $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$ en $\mathbf{x}_\ell \in \mathbb{R}^{n-1}$. L'ACP (Jolliffe, 1986) vise à représenter les données dans un espace de faible dimension, où leur variance est maximale.

Soit $\tilde{\mathbf{X}} = [\tilde{\mathbf{x}}_1 \tilde{\mathbf{x}}_2 \cdots \tilde{\mathbf{x}}_N]$, et $\tilde{\mathbf{C}}$ la matrice de covariance estimée de ces données. On désigne par \mathbf{v}_i un vecteur de la base orthonormée recherchée. Puisque la variance des données projetées sur \mathbf{v}_i s'écrit $\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{C}} \mathbf{v}_i$, il convient de résoudre

$$\max_{\mathbf{v}_i} \mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{C}} \mathbf{v}_i$$

sous la contrainte $\|\mathbf{v}_i\| = 1$.

En utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange, on aboutit à

$$\tilde{\mathbf{C}} \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i,$$

montrant par là même que \mathbf{v}_i est vecteur propre de $\tilde{\mathbf{C}}$. Le coût valant λ_i^2 , il convient de sélectionner ceux associés aux plus grandes valeurs propres. Ils constituent naturellement une base orthonormée, et la réduction de la dimension spectrale des données s'effectue finalement ainsi :

$$\mathbf{x}_\ell = [\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \cdots \mathbf{v}_{n-1}]^\top \tilde{\mathbf{x}}_\ell. \quad (4)$$

2.2. Identification des composants purs

Le modèle de mélange linéaire (2) suppose que les fractions d'abondance sont positives et satisfont une contrainte de somme unité. Il en résulte que les données hyperspectrales sont contenues dans un simplexe dont les sommets sont les composants purs, comme illustré à la FIGURE 1. Pour extraire ces signatures, il suffit d'identifier le simplexe circonscrivant toutes ces données. Les stratégies les plus utilisées dans la littérature sont les suivantes.

2.2.1. Maximisation du volume du simplexe

Cette stratégie, partagée par les algorithmes N-Findr (Winter, 1999) et SGA (Chang *et al.*, 2006), consiste à identifier le simplexe de plus grand volume, en visitant chaque vecteur spectral de sorte à faire croître ce volume. Pour cela, on

rappelle que l'expression du volume d'un simplexe, dont les sommets sont $\mathbf{X}_\Omega = [\mathbf{x}_{\omega_1} \ \mathbf{x}_{\omega_2} \ \cdots \ \mathbf{x}_{\omega_n}]$, est donnée par $|\mathcal{V}_\Omega|$ avec

$$\mathcal{V}_\Omega = \frac{1}{(n-1)!} \det \begin{bmatrix} \mathbf{1}_n^\top \\ \mathbf{X}_\Omega \end{bmatrix}. \quad (5)$$

L'algorithme N-Findr (Winter, 1999) opère selon une stratégie par substitution. Après une initialisation aléatoire de l'ensemble des sommets candidat avec les indices $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$, l'étape suivante est itérée sur chaque vecteur spectral \mathbf{x}_ℓ . Chaque élément de l'ensemble candidat est remplacé par \mathbf{x}_ℓ , et le volume du simplexe correspondant évalué. En plus du volume initial $|\mathcal{V}_\Omega|$, on obtient alors n volumes,

$$|\mathcal{V}_{\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}}|$$

pour $k = 1, 2, \dots, n$, où $\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}$ désigne l'ensemble des indices obtenu de Ω en remplaçant ω_k par ℓ , c'est-à-dire le sommet \mathbf{x}_{ω_k} par \mathbf{x}_ℓ . L'ensemble correspondant au plus grand volume (en valeur absolue) est alors retenu.

L'algorithme SGA (Chang *et al.*, 2006) est une version incrémentale de l'algorithme N-Findr, où l'on identifie successivement chaque composant pur par une approche gloutonne. Le premier composant pur est identifié, suite à une réduction de la dimension des données à un, en déterminant l'indice ω_1 qui maximise la quantité $|\mathcal{V}_{\{\omega_1, 0\}}|$ où \mathbf{x}_0 désigne un premier élément choisi aléatoirement. Les composants purs sont alors extraits tour à tour. A l'étape i , pour $2 \leq i \leq n$, la dimension ayant été préalablement réduite à $i-1$, le i -ème composant pur est identifié par l'indice ω_i qui maximise $|\mathcal{V}_{\Omega \cup \{\omega_i\}}|$, où Ω correspond à l'ensemble déjà identifié.

2.2.2. Maximisation des distances

Le simplexe à identifier est ici celui dont les hauteurs sont les plus grandes. La maximisation de la distance d'un sommet au sous-espace engendré par les autres est exploitée par les algorithmes VCA (Nascimento, Dias, 2004), et OSP (Harsanyi, Chang, 1994). Cette dernière est également utilisée par l'algorithme *Automatic Target Generation Process* (Ren, Chang, 2003). Principalement, cette approche incrémentale s'intéresse à la distance des données au sous-espace engendré par les composants purs déjà identifiés. Le nouveau composant pur est alors l'élément le plus éloigné. Le lien avec N-Findr est étudié dans (Du *et al.*, 2008).

Une dernière approche consiste à caractériser le plus grand simplexe à partir des longueurs de ses arêtes. C'est le cas de l'algorithme ICE (Berman *et al.*, 2004), qui considère la maximisation de la distance quadratique totale

$$\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n \|\mathbf{x}_{\omega_i} - \mathbf{x}_{\omega_j}\|^2.$$

Cette approche nécessite le calcul des distances de toutes les paires de données.

2.3. Estimation des fractions d'abondance

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 (complétude de la décomposition, additivité des contributions), comme il l'a été évoqué précédemment, les fractions d'abondance doivent satisfaire deux contraintes :

– La somme unité, c'est-à-dire $\mathbf{1}_n^\top \boldsymbol{\alpha}_\ell = 1$ où $\mathbf{1}_n$ est le vecteur unité de taille $(n \times 1)$. Cette contrainte permet d'avoir des coefficients de décomposition invariants par une erreur spectrale additive. En effet, pour une translation \mathbf{x} de tous les vecteurs spectraux, on a l'équivalence

$$\mathbf{x}_\ell + \mathbf{x} = (\mathbf{X}_\Omega + \mathbf{x}\mathbf{1}_n^\top) \boldsymbol{\alpha}_\ell \Leftrightarrow \mathbf{x}_\ell = \mathbf{X}_\Omega \boldsymbol{\alpha}_\ell$$

si et seulement si $\mathbf{1}_n^\top \boldsymbol{\alpha}_\ell = 1$

– La non-négativité des coefficients d'abondance, notée avec $\boldsymbol{\alpha}_\ell \succeq \mathbf{0}$. Cette contrainte implique l'additivité des contributions. Elle est illustrée dans le paragraphe 3.1 par une interprétation géométrique.

En ignorant ces contraintes, la solution optimale au sens des moindres carrés, c'est-à-dire

$$\boldsymbol{\alpha}_\ell^{\text{LS}} = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \|\mathbf{x}_\ell - \mathbf{X}_\Omega \boldsymbol{\alpha}\|^2,$$

est donnée par

$$\boldsymbol{\alpha}_\ell^{\text{LS}} = (\mathbf{X}_\Omega^\top \mathbf{X}_\Omega)^{-1} \mathbf{X}_\Omega^\top \mathbf{x}_\ell. \quad (6)$$

La contrainte de somme unité est la plus simple à imposer, en utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange. On a

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}_\ell^{\text{eqLS}} &= \boldsymbol{\alpha}_\ell^{\text{LS}} \\ &- \frac{1}{\mathbf{1}_n^\top (\mathbf{X}_\Omega^\top \mathbf{X}_\Omega)^{-1} \mathbf{1}_n} (\mathbf{X}_\Omega^\top \mathbf{X}_\Omega)^{-1} \mathbf{1}_n (\mathbf{1}_n^\top \boldsymbol{\alpha}_\ell^{\text{LS}} - 1). \end{aligned} \quad (7)$$

Cette expression peut être simplifiée d'avantage. Pour cela, la somme unité permet de réécrire l'identité (2) sous la forme

$$\sum_{i=1}^n \alpha_{\ell,i} (\mathbf{x}_{\omega_i} - \mathbf{x}_\ell) = \mathbf{0}.$$

En reprenant les deux expressions (6) et (7) dans ce cas, on retrouve

$$\boldsymbol{\alpha}_\ell^{\text{eqLS}} = \frac{\mathbf{K}_\ell^{-1} \mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^\top \mathbf{K}_\ell^{-1} \mathbf{1}_n}, \quad (8)$$

où \mathbf{K}_ℓ désigne la matrice de Gram locale d'élément

$$[\mathbf{K}_\ell]_{ij} = (\mathbf{x}_\ell - \mathbf{x}_{\omega_i})^\top (\mathbf{x}_\ell - \mathbf{x}_{\omega_j}) \quad (9)$$

pour $i, j = 1, 2, \dots, n$. L'estimation des coefficients d'abondance avec contrainte de somme unité nécessite, pour chaque vecteur spectral \mathbf{x}_ℓ , l'inversion de la matrice \mathbf{K}_ℓ

de taille $(n \times n)$ où n désigne le nombre de composants purs. La contrainte de non-négativité ne peut être introduite explicitement dans la solution comme ci-dessus, et nécessite l'usage de méthodes de résolution itératives. Voir par exemple (Lawson, Hanson, 1987 ; Lantéri *et al.*, 2001 ; Heinz, Chang, 2001 ; Honeine, Lantéri, 2013).

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

Afin de résoudre le problème de démixage sous la contrainte de somme unité, la contrainte de non-négativité étant étudiée plus loin, on propose de résoudre le système augmenté¹

$$\begin{bmatrix} \mathbf{1}_n^\top \\ \mathbf{X}_\Omega \end{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_\ell = \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x}_\ell \end{bmatrix}. \quad (10)$$

La solution de ce système de n équations à n inconnues est donnée par la règle de Cramer (Strang, 2003), c'est-à-dire

$$\alpha_{\ell,k} = \frac{\det \begin{bmatrix} \mathbf{1}_n^\top \\ \mathbf{X}_{\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}} \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} \mathbf{1}_n^\top \\ \mathbf{X}_\Omega \end{bmatrix}}, \quad (11)$$

où $\mathbf{X}_{\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}}$ désigne la matrice obtenue de \mathbf{X}_Ω en remplaçant sa k -ème colonne \mathbf{x}_{ω_k} par \mathbf{x}_ℓ . Le choix d'une telle approche pour résoudre ce problème réside dans l'interprétation géométrique de l'expression (11). En reprenant l'expression (5) du volume d'un simplexe, on en déduit donc immédiatement que

$$\alpha_{\ell,k} = \frac{\mathcal{V}_{\Omega \setminus \{\omega_k\} \cup \{\ell\}}}{\mathcal{V}_\Omega}, \quad (12)$$

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}_{ω_k} et \mathbf{x}_ℓ . 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 (12) se ramène à

$$\alpha_{\ell,k} = \frac{\delta(\mathbf{x}_\ell)}{\delta(\mathbf{x}_{\omega_k})}, \quad (13)$$

pour tout $k = 1, 2, \dots, n$, où $\delta(\mathbf{x}_\ell)$ est la distance entre le sommet \mathbf{x}_ℓ et la base commune formée par les éléments de l'ensemble \mathbf{X}_Ω privés de \mathbf{x}_{ω_k} , et $\delta(\mathbf{x}_{\omega_k})$ la distance de \mathbf{x}_{ω_k} à cette même base. Cette formulation est particulièrement adaptée aux

1. Le système augmenté proposé ici est utilisé à d'autres fins que celui étudié dans (Heinz, Chang, 2001).

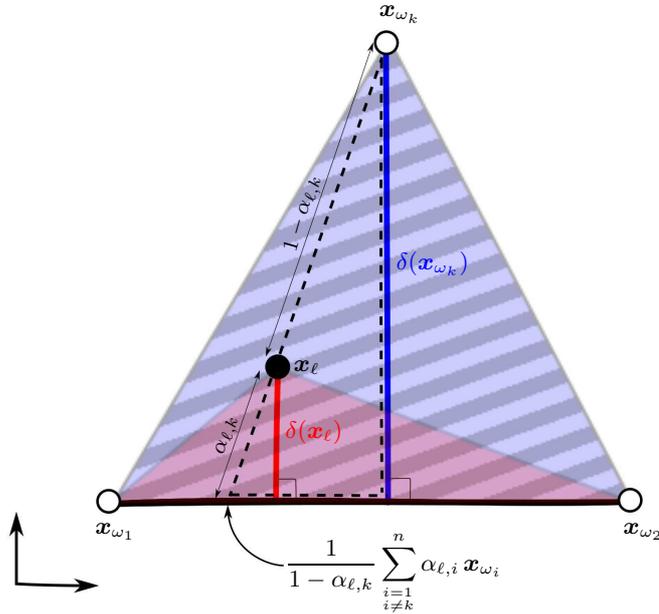


Figure 2. Illustration géométrique de $\alpha_{\ell,k}$, la contribution de \mathbf{x}_{ω_k} dans le mélange \mathbf{x}_ℓ . En 2D, $\alpha_{\ell,k}$ correspond au rapport des aires des deux triangles $\{\mathbf{x}_{\omega_1}, \mathbf{x}_{\omega_2}, \mathbf{x}_\ell\}$ (rouge) et $\{\mathbf{x}_{\omega_1}, \mathbf{x}_{\omega_2}, \mathbf{x}_{\omega_k}\}$ (hachuré-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.

techniques reposant sur la maximisation d'une distance, telles que VCA et OSP, pour identifier les sommets du simplexe. Voir aussi (Luo *et al.*, 2008). Une autre interprétation peut également être obtenue à partir de la décomposition

$$\mathbf{x}_\ell = \alpha_{\ell,k} \mathbf{x}_{\omega_k} + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \alpha_{\ell,i} \mathbf{x}_{\omega_i}.$$

Il suffit pour cela d'écrire

$$\mathbf{x}_\ell = \alpha_{\ell,k} \mathbf{x}_{\omega_k} + (1 - \alpha_{\ell,k}) \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \frac{\alpha_{\ell,i}}{\sum_{j=1, j \neq k}^n \alpha_{\ell,j}} \mathbf{x}_{\omega_i}, \quad (14)$$

après avoir noté que $\sum_{j=1, j \neq k}^n \alpha_{\ell,j} = 1 - \alpha_{\ell,k}$. On exprime ici \mathbf{x}_ℓ comme le mélange de \mathbf{x}_{ω_k} et d'une signature spectrale équivalente aux autres composants purs \mathbf{x}_{ω_i} , $i \neq k$, en proportions $\alpha_{\ell,k}$ et $1 - \alpha_{\ell,k}$. De manière beaucoup plus synthétique, les relations (12)-(14) reprennent le théorème de Thalès illustré par la FIGURE 2, que l'on exprime à partir du sommet équivalent défini ci-dessus par

$$\frac{1}{1 - \alpha_{\ell,k}} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \alpha_{\ell,i} \mathbf{x}_{\omega_i}.$$

Toujours afin de construire le simplexe circonscrivant toutes les données, une troisième stratégie a été considérée dans la littérature en recherchant le simplexe d'arêtes les plus longues. Ainsi les composants purs sont-ils obtenus par maximisation de la distance quadratique totale $\sum_{i,j=1,i \neq j}^n \|\mathbf{x}_{\omega_i} - \mathbf{x}_{\omega_j}\|^2$. 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 (Sommerville, 1958), on a

$$\mathcal{V}_{\Omega}^2 = \frac{(-1)^n}{2^{n-1}((n-1)!)^2} \det \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \delta_{1,2}^2 & \cdots & \delta_{1,n}^2 \\ 1 & \delta_{2,1}^2 & 0 & \cdots & \delta_{2,n}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \delta_{n,1}^2 & \delta_{n,2}^2 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

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 $(\mathcal{V}_{\Omega})^2 = \frac{1}{16}(\delta_{1,2} + \delta_{1,3} + \delta_{2,3})(\delta_{1,2} + \delta_{1,3} - \delta_{2,3})(\delta_{1,2} - \delta_{1,3} + \delta_{2,3})(-\delta_{1,2} + \delta_{1,3} + \delta_{2,3})$. Une fois encore, ces considérations géométriques peuvent être exploitées afin de déterminer directement les fractions d'abondance correspondantes sans développement calculatoire lourd.

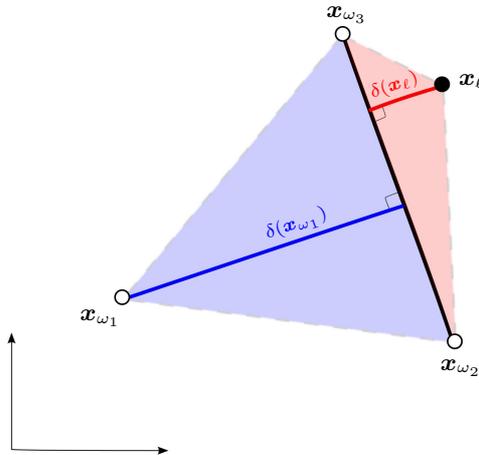


Figure 3. Illustration en 2D de $\alpha_{\ell,1} = \delta(\mathbf{x}_{\ell})/\delta(\mathbf{x}_{\omega_1})$. Comme illustré ici avec $\alpha_{\ell,1} < 0$, on a \mathbf{x}_{ℓ} et \mathbf{x}_{ω_1} des deux côtés de la base définie par $\{\mathbf{x}_{\omega_2}, \mathbf{x}_{\omega_3}\}$.

3.1. 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 \mathbf{x}_{ℓ} est à l'extérieur du simplexe. Ceci témoigne notamment, d'une part de l'inadéquation du modèle de mélange linéaire, et d'autre part des limites de la technique d'identification

des signatures des composés purs. La méthode proposée montre que, dans ce cas, les deux déterminants dans (11) sont de signe opposé. Ceci s'exprime selon (13) par des éléments dans chaque demi-plan défini par la base commune, comme illustré par la FIGURE 3.

La violation de la contrainte de non-négativité, c'est-à-dire la présence de données à l'extérieur du simplexe, est essentiellement liée à la distribution des données après réduction de dimension. Dans la suite, on étudie une possibilité pour remédier éventuellement à cet inconvénient, en considérant diverses techniques non-linéaires de réduction de dimension.

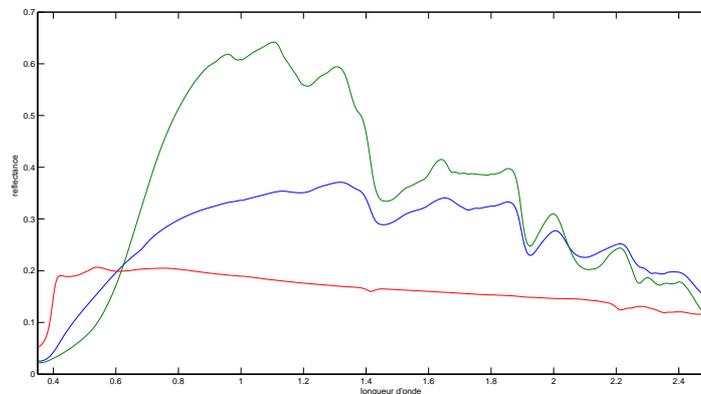


Figure 4. Les signatures spectrales (reflectance en fonction de la longueur d'onde en μm) des trois composants purs : “herbe dorée”, “cèdre” et “asphalte”

4. Du linéaire au non-linéaire

La méthode de démelange étudiée ci-dessus hérite de la propriété de linéarité des différentes étapes considérées. Tout en gardant la même approche géométrique présentée dans la Section 3, on peut exploiter diverses représentations des données hyperspectrales par un choix approprié de la technique de réduction de dimension. Dans ce qui suit, on présente les approches MDS classique, linéaire localement (LLE), et non-linéaire (ISOMAP), pour transformer chaque signature spectrale \tilde{x}_ℓ en $x_\ell \in \mathbb{R}^{n-1}$.

4.1. Les méthodes de type MDS

L'approche MDS (Cox, Cox, 2000), très proche de l'ACP, représente les données dans un espace de dimension réduite, fixée a priori, à partir des distances (ou dissimilarités) entre elles. Les méthodes MDS se divisent en deux catégories : métriques, où les distances inter-données sont utilisées, et non-métriques, où l'on n'utilise que leurs rangs. L'approche *MDS classique*, la plus ancienne, établie par Torgerson (Torgerson, 1952), repose sur la conservation au mieux des produits scalaires des données dans les

Tableau 1. Les fonctions coûts (métriques) les plus connues de l'approche MDS

MDS Classique	$\frac{1}{\sum_{i,j} (\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_j)^2} \sum_{i,j} (\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_j - \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j)^2$
Projection non-linéaire de Sammon	$\frac{1}{\sum_{i,j} \tilde{\delta}_{i,j}} \sum_{i,j} \frac{1}{\tilde{\delta}_{i,j}} (\tilde{\delta}_{i,j} - \delta_{i,j})^2$
Distance MDS	$\frac{1}{\sum_{i,j} (\tilde{\delta}_{i,j})^2} \sum_{i,j} (\tilde{\delta}_{i,j} - \delta_{i,j})^2$
Fonction de stress quadratique	$\frac{1}{\sum_{i,j} (\tilde{\delta}_{i,j})^4} \left(\sum_{i,j} (\tilde{\delta}_{i,j} - \delta_{i,j})^2 \right)^2$

deux espaces. L'approche *Distance MDS*, la plus connue, développée initialement par Kruskal (Kruskal, 1964a ; 1964b), considère les distances.

Avec la méthode MDS classique,² le coût à minimiser repose sur l'écart entre les produits scalaires dans chaque espace

$$\sum_{i,j} (\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_j - \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j)^2$$

L'algorithme MDS classique se résume aux étapes suivantes :

1. Soit $\mathbf{D}^{(2)}$ la matrice de terme général $\tilde{\delta}_{i,j}^2 = \|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j\|^2$, pour $i, j = 1, 2, \dots, N$.

2. La matrice des produits scalaires, comprenant $\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_j$, est alors obtenue à partir de $\mathbf{D}^{(2)}$ puisque

$$\|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j\|^2 = \|\tilde{\mathbf{x}}_i\|^2 + \|\tilde{\mathbf{x}}_j\|^2 - 2\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_j.$$

3. Par diagonalisation de la matrice des produits scalaires, on obtient les vecteurs propres normés $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{n-1}$ associés aux plus grandes valeurs propres $\lambda'_1, \dots, \lambda'_{n-1}$, où n est le nombre de composants purs.

4. Les coordonnées des données dans l'espace de dimension $n - 1$ sont alors

$$[\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_N] = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda'_1} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\lambda'_{n-1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{n-1}^\top \end{bmatrix}$$

On utilise en pratique des fonctions coûts normalisées, ce qui rend les expressions moins simples. Le Tableau 1 présente les critères les plus utilisées dans la littérature,

2. La méthode MDS classique a donné les meilleurs résultats dans les expérimentations, parmi toutes les méthodes MDS testées. Voir section 5.

où $\tilde{\delta}_{i,j} = \|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j\|$ désigne la distance entre les spectres, et $\delta_{i,j} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$ la distance dans l'espace de dimension réduite. Les fonctions coûts non-métriques consistent à remplacer $\tilde{\delta}_{i,j}$ par une fonction monotone de celle-ci.

4.2. ISOMAP : une approche de type géodésique

Les méthodes MDS reposent essentiellement sur une métrique euclidienne, perdant ainsi la notion de variété. L'approche ISOMAP (Tenenbaum *et al.*, 2000) consiste à appliquer la technique MDS à des distances géodésiques. La distance géodésique est la distance entre deux points mesurée sur la variété. Ces distances sont estimées à partir de l'information sur le voisinage des données. L'approche ISOMAP peut se résumer en trois étapes :

1. Le voisinage de chaque observation est identifié. L'ensemble des voisinages est représenté sous forme d'un graphe. Il contient l'arête $\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_j$ si et seulement si $\tilde{\mathbf{x}}_i$ est l'un des m plus proches voisins de $\tilde{\mathbf{x}}_j$. Chaque arête du graphe est pondérée par la distance $\tilde{\delta}_{i,j}$.

2. A partir du graphe de voisinage, on détermine le plus court chemin entre tous les couples d'observations. Le plus court chemin est déterminé par l'algorithme de Dijkstra ou de Floyd. Ce dernier consiste à remplacer, en parcourant tous les sommets avec $k = 1, 2, \dots, N$, toutes les valeurs $\tilde{\delta}_{i,j}$ par $\min\{\tilde{\delta}_{i,j}, \tilde{\delta}_{i,k} + \tilde{\delta}_{k,j}\}$. Cette procédure permet de converger vers la matrice des plus courts chemins entre tous les sommets du graphe.

3. La matrice des plus courts chemins permet de retrouver la structure des données sur la variété. Cette matrice, constituant ainsi une matrice de distances géodésiques, est alors utilisée avec la technique MDS afin de construire un sous-espace euclidien.

L'usage de distances géodésiques s'adapte facilement, d'une part à l'identification de composants purs avec la méthode ICE, et d'autre part à l'estimation des volumes des simplexes, à partir du déterminant de Cayley-Menger (Nguyen *et al.*, 2012). Il est à noter que cette facilité à incorporer les distances géodésiques pour le démélange de données hyperspectrales a été aussi mise en évidence très récemment dans (Heylen *et al.*, 2011 ; Heylen, Scheunders, 2012).

4.3. LLE : une approche localement linéaire

Les approches linéaires telles que l'ACP ne conservent pas nécessairement le voisinage des données dans l'espace de dimension réduite, au risque de produire des distorsions aussi bien locales que globales. Une telle perte dans la géométrie des données peut se traduire par des éléments rejetés à l'extérieur du simplexe, voire une modification de ses sommets. La méthode LLE (Roweis, Saul, 2000) permet de surmonter cette difficulté, en s'intéressant localement à la géométrie des données. Pour cela, chaque élément est représenté par une combinaison linéaire de ses voisins, le nombre de voisins étant fixé au préalable. Les coefficients de cette approximation sont utilisés pour la reconstruction dans l'espace de faible dimension.

Pour être plus précis, l'algorithme opère en trois étapes :

1. Le voisinage de chaque élément est déterminé. Soit m le nombre de voisins retenus, avec $m \geq n$.

2. Chaque vecteur spectral $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$ est représenté par une combinaison linéaire de ses voisins, selon le modèle

$$\tilde{\mathbf{x}}_\ell = \sum_{i=1}^m w_{\ell,i} \tilde{\mathbf{x}}_{\ell_i} + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\ell \quad (16)$$

où $\{\tilde{\mathbf{x}}_{\ell_1}, \tilde{\mathbf{x}}_{\ell_2}, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_{\ell_m}\}$ désigne la collection des m voisins de $\tilde{\mathbf{x}}_\ell$ et $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\ell$ l'erreur résiduelle due au modèle. En incluant la contrainte de somme unité, et par analogie avec le modèle linéaire défini dans la Section 2, les coefficients sont obtenus selon l'expression (8), avec

$$\mathbf{w}_\ell = \frac{\mathbf{K}_\ell^{-1} \mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^\top \mathbf{K}_\ell^{-1} \mathbf{1}_n},$$

où \mathbf{K}_ℓ est la matrice de Gram locale de taille $(m \times m)$ et dont l'élément (i, j) est $(\tilde{\mathbf{x}}_\ell - \tilde{\mathbf{x}}_{\ell_i})^\top (\tilde{\mathbf{x}}_\ell - \tilde{\mathbf{x}}_{\ell_j})$.

3. La dernière étape consiste à estimer les coordonnées des données dans l'espace transformé de dimension $n - 1$, en utilisant les coefficients déjà calculés. Pour cela, on considère le problème d'optimisation

$$\min_{\substack{\mathbf{x}_\ell \in \mathbb{R}^{n-1} \\ \ell=1,2,\dots}} \sum_{\ell} \left\| \mathbf{x}_\ell - \sum_{i=1}^m w_{\ell,i} \mathbf{x}_{\ell_i} \right\|^2,$$

en y incluant la contrainte $\sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i = \mathbf{0}$ qui permet d'annihiler l'invariance par translation, ainsi qu'une contrainte sur l'échelle en imposant une matrice de covariance identité. En considérant ces contraintes qui rendent le problème bien-posé, le problème d'optimisation ci-dessus est équivalent au problème d'estimation des vecteurs propres associés aux valeurs propres les plus faibles de la matrice $(\mathbf{I} - \mathbf{W})^\top (\mathbf{I} - \mathbf{W})$ où \mathbf{W} désigne la matrice de taille $(N \times N)$ qui contient les coefficients $w_{\ell,i}$ et \mathbf{I} désigne la matrice identité de même taille. Voir (Roweis, Saul, 2000) pour plus de détails.

Tableau 2. Nombre de données, sur 4 096 en total, avec des fractions d'abondance estimées qui ne vérifient pas les contraintes de non-négativité et/ou somme unité. La dernière colonne donne à titre indicatif le temps de calcul (en seconde) nécessaire pour chaque méthode, l'identification des signatures pures étant déterminée par la méthode N-Findr

	$\exists i: \alpha_i < 0$	$\sum_{i=1}^n \alpha_i \neq 1$	temps de calcul
Moindres carrés (6)	2 (0.05%)	4 034 (98%)	0.847
- avec somme unité (7)	203 (4.95%)	0	5.151
- avec non-négativité (Lawson, Hanson, 1987)	0	4 034 (98%)	5.164
- avec contraintes totales (Heinz, Chang, 2001)	0	0	1.542
Méthode proposée dans cet article	90 (2.19%)	0	0.173

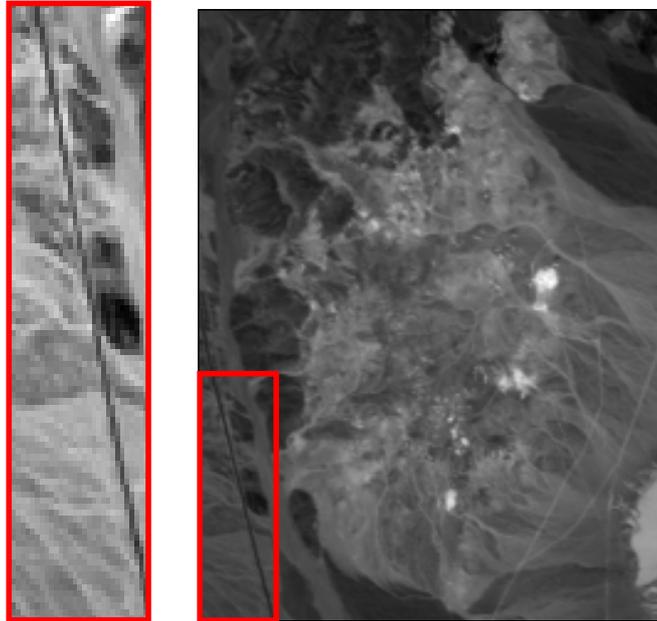


Figure 5. Site Cuprite (droite) et région étudiée (gauche)

5. Expérimentations

Dans une première expérimentation, nous nous intéressons au problème de dé-mélange de données hyperspectrales, synthétisées à partir de trois composants purs : “herbe dorée”, “cèdre” et “asphalte” du USGS Library (Clark, Geological Survey (U.S.), 2007), définis par GDS480, GDS357 et GDS368, respectivement. Leurs signatures spectrales sont illustrées à la FIGURE 4, avec 2 151 bandes couvrant les longueurs d’onde de 0.35 à 2.5 μm . Une image hyperspectrale de taille 64 \times 64 a été générée, selon le modèle

$$\tilde{\mathbf{x}}_\ell = \sum_{i=1}^3 \alpha_{\ell,i} \tilde{\mathbf{x}}_{\omega_i} + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\ell,$$

pour $\ell = 1, 2, \dots, 4096$, et $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\ell$ un bruit blanc Gaussien de moyenne nulle et de variance $2.5 \cdot 10^{-3}$. La variance du bruit est choisie pour avoir un rapport signal sur bruit de 20dB en moyenne. Les coefficients d’abondance ont été générés selon une loi uniforme sur le simplexe. Pour cela, il suffit de les générer selon la loi de Dirichlet de paramètres égaux à l’unité, puis de les normaliser pour vérifier la contrainte de somme unité. Les signatures des composants purs ont été estimées à partir de l’image générée selon le modèle ci-dessus.

Suite à une réduction de dimension par une 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 (12), à différentes méthodes de moindres carrés pour l’estimation des fractions

d'abondance. Le Tableau 2 compare la violation des contraintes de non-négativité et de somme unité, pour les différentes techniques. A ces violations, s'ajoutent des valeurs des fractions d'abondance supérieures à l'unité pour les deux algorithmes de moindres carrés : avec contrainte de somme unité ou avec contrainte de non-négativité. Précisons pour finir que l'approche proposée nécessite nettement moins de ressources que les autres techniques, avec 3×4096 divisions arithmétiques seulement, l'algorithme étant couplé à N-Findr. Les autres techniques ont nécessité au mieux une inversion matricielle.

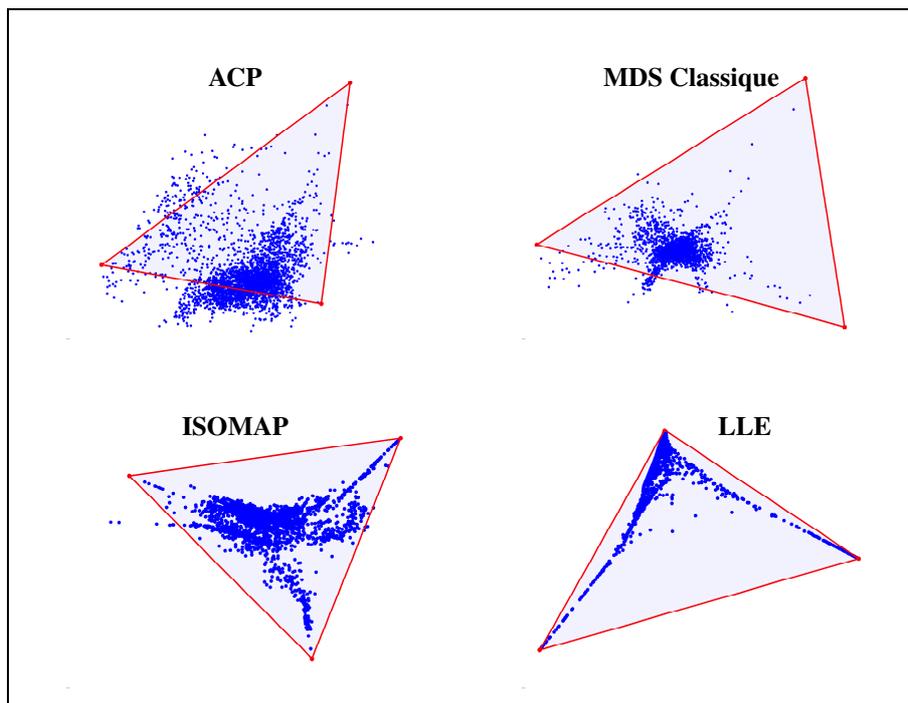


Figure 6. Représentation des données en 2D, après réduction de dimension par les algorithmes ACP, MDS Classique, ISOMAP et LLE. Les composantes purs, obtenus par l'algorithme N-Findr, sont illustrés en rouges, ainsi que le triangle qui en résulte.

Dans une seconde expérimentation, nous avons considéré la scène du site minier de Cuprite, au Nevada (Etats Unis), qui a suscité de nombreuses études. L'image, extraite de la base AVIRIS, est décrite en détail dans la référence (Nascimento, Dias, 2004). Celle-ci correspond à 224 canaux spectraux de résolution 10 nm, couvrant les longueurs d'ondes de 400 à 2 500 nm. La résolution spatiale est de 20 m. Afin de corriger l'absorption eau-vapeur ainsi que le faible rapport signal-bruit, les bandes spectrales 1-2, 104-113, 148-167, et 221-224 ont été supprimées. On obtient alors 188 bandes spectrales. La FIGURE 5 illustre la portion de l'image étudiée, avec 30 lignes verticales et 100 échantillons par ligne.

Afin de représenter les données en 2D, nous nous sommes intéressés à l'extraction de $n = 3$ composants purs à titre d'exemple. La FIGURE 6 illustre l'influence de la

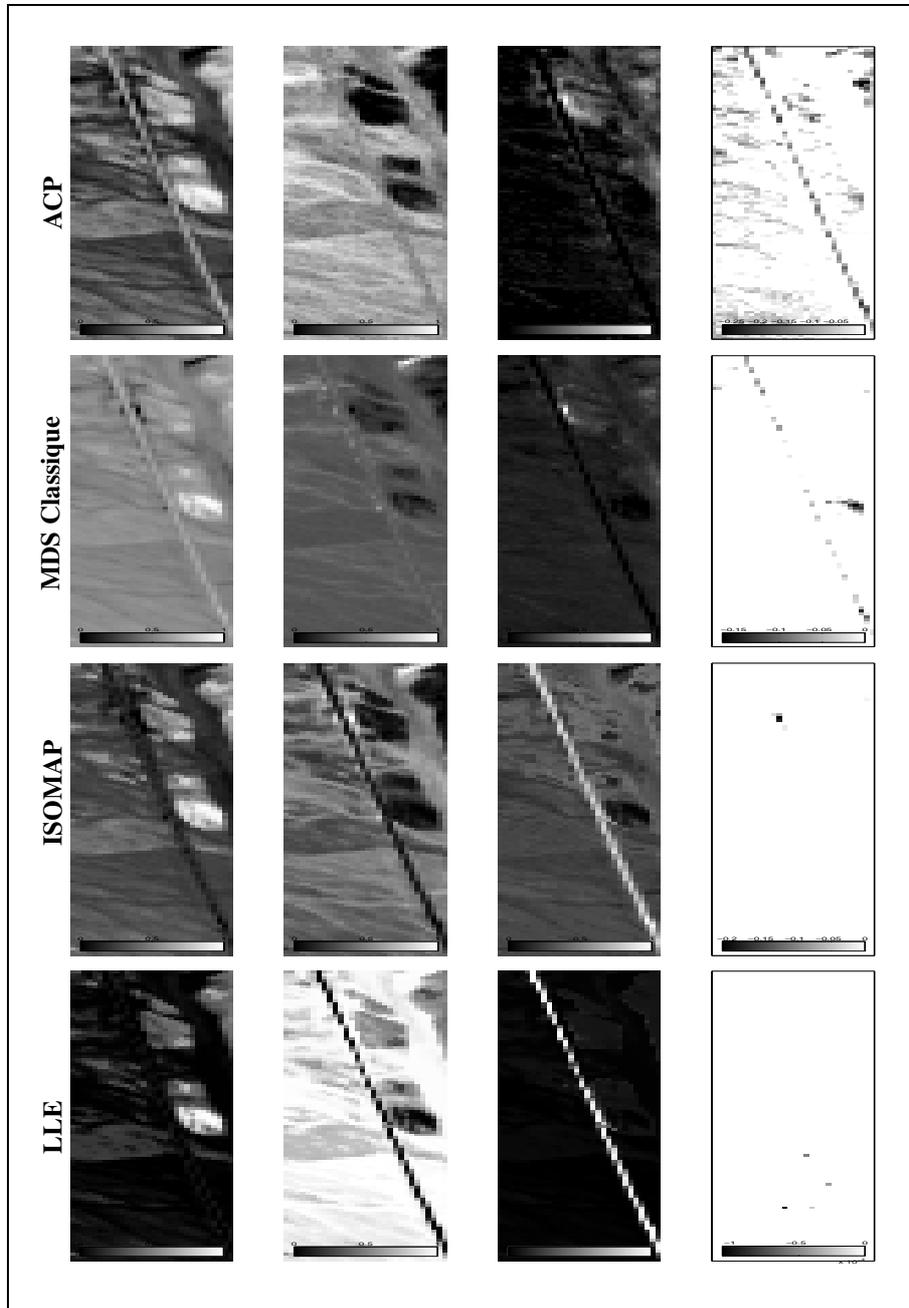


Figure 7. Comparaison des résultats obtenus à partir de différentes méthodes de réduction de dimension : ACP, MDS Classique, ISOMAP et LLE. Pour chaque méthode, les trois cartes d'abondance sont associées aux trois composants purs. La quatrième carte correspond à la distribution spatiale des valeurs négatives des fractions d'abondance.

méthode de réduction de dimension sur la géométrie des données dans l'espace de dimension réduite, à $n - 1 = 2$. Pour cela, nous avons étudié les algorithmes ACP, MDS Classique, ISOMAP et LLE. Pour les deux derniers algorithmes, le nombre de voisins a été fixé à $m = 7$, des valeurs plus grandes ayant conduit à des résultats très proches. Les composants purs ont été extraits par l'algorithme N-Findr, identifiant ainsi le triangle (2D simplexe) renfermant la plupart des données. Il est clair que l'ACP, la méthode la plus utilisée dans la littérature, donne les moins bons résultats en terme de données circonscrites dans le simplexe.

Nous avons déterminé les cartes d'abondance de ces composants purs, en estimant conjointement les fractions d'abondance avec N-Findr comme décrit dans la Section 3. La FIGURE 7 présente, pour chacune des techniques de réduction de dimension, les trois cartes d'abondance, ainsi que la carte de présence de valeurs négatives des fractions d'abondance. Cette dernière montre la pertinence de l'algorithme LLE pour l'image étudiée, avec des valeurs d'abondance $\alpha_i > -10^{-4} \forall i$, ainsi que l'algorithme ISOMAP avec $\alpha_i > -0.2 \forall i$. Une comparaison plus détaillée de la violation de la contrainte de non-négativité est donnée dans le Tableau 3, en y incluant aussi différentes techniques de MDS.

Une comparaison du coût calculatoire des trois étapes (réduction de dimension, identification des composants purs et des fractions d'abondance) est donnée dans le Tableau 3 en terme de temps de calcul. Ces valeurs ont été déterminées à partir d'une implémentation sous Matlab 7.9 sur un ordinateur portable Macbook Pro Intel Core 2 Duo 2.53 GHz, avec 4 GB de mémoire.

Tableau 3. Nombre de données, sur les 3000 en total, se trouvant à l'extérieur du simplexe construit par l'algorithme N-Findr, pour les différentes méthodes de réduction de dimension. La dernière colonne illustre le temps de calcul (en minutes:secondes) pour l'étape de réduction de dimension, l'extraction des composants purs et l'estimation des fractions d'abondance

	$\exists i: \alpha_i < 0$		temps mm:ss
	nombre	%	
ACP : Analyse en Composante Principales	976	32.5	00:01
MDS : MDS Classique	79	2.6	1:45
MDS : Projection non-linéaire de Sammon	134	4.5	10:53
MDS : Distance MDS	207	6.9	2:51
MDS : Fonction de <i>stress</i> quadratique	1212	40.4	17:23
MDS : Stress non-métrique	422	14.1	23:00
MDS : Stress quadratique non-métrique	346	11.5	42:28
ISOMAP : $m = 7$ voisins	10	0.3	15:03
LLE : $m = 7$ voisins	6	0.2	00:05

6. Conclusion et perspectives

Dans cet article, nous avons proposé un schéma géométrique pour l'estimation des fractions d'abondance, avec une extension à des modèles non-linéaires. 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. Nous avons aussi proposé une extension de cette approche à des modèles de mélange non-linéaire, en substituant l'ACP pour la réduction de dimension, par les techniques MDS, ISOMAP et LLE. 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.

Remerciements

Ce travail est soutenu par l'ANR dans le cadre du Projet ANR-12-BS03-0003 "HY-PANEMA" ("Algorithmes de démelange non linéaire pour l'analyse de données hyperspectrales").

Bibliographie

- Berman M., Kiiveri H., Lagerstrom R., Ernst A., Dunne R., Huntington J. F. (2004). ICE: a statistical approach to identifying endmembers in hyperspectral images. *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 42, n° 10, p. 2085–2095.
- Bioucas-Dias J. M., Plaza A., Dobigeon N., Parente M., Du Q., Gader P. *et al.* (2012, April). *Hyperspectral unmixing overview: Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches*. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observations and Remote Sens.*, vol. 5, n° 2, p. 354–379.
- Chan T.-H., Ma W.-K., Ambikapathi A.-M., Chi C.-Y. (2011). *A simplex volume maximization framework for hyperspectral endmember extraction*. *IEEE Transactions Geoscience and Remote Sensing*, vol. 49, n° 11, p. 4177-4193.
- Chang C., Du Q. (2004, March). *Estimation of number of spectrally distinct signal sources in hyperspectral imagery*. *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 42, n° 3, p. 608-619.
- Chang C., Wuand C.-C., Liu W.-M., Quyang Y.-C. (2006, October). *A new growing method for simplex-based endmember extraction algorithm*. *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, vol. 44, n° 10, p. 2804-2819.
- Chen J., Richard C., Ferrari A., Honeine P. (2013, May). *Nonlinear unmixing of hyperspectral data with partially linear least-squares support vector regression*. In Proc. 38th IEEE international conference on acoustics, speech and signal processing. *Vancouver, Canada*.
- Chen J., Richard C., Honeine P. (2011a, 6–9 November). *A novel kernel-based nonlinear unmixing scheme of hyperspectral images*. In Proc. 45th asilomar conference on signals, systems, and computers, p. 1898-1902. *Pacific Grove (CA), USA*.
- Chen J., Richard C., Honeine P. (2011b, September). *Un nouveau paradigme pour le démelange non-linéaire des images hyperspectrales*. In Actes du 23-ème colloque gretsi sur le traitement du signal et des images. *Bordeaux, France*.
- Chen J., Richard C., Honeine P. (2012, 4 - 7 June). *Nonlinear unmixing of hyperspectral images based on multi-kernel learning*. In Proc. IEEE workshop on hyperspectral image and signal processing : Evolution in remote sensing. *Shanghai, China*.
- Chen J., Richard C., Honeine P. (2013a, 25 - 28 June). *Estimating abundance fractions of materials in hyperspectral images by fitting a post-nonlinear mixing model*. In Proc. IEEE workshop on hyperspectral image and signal processing : Evolution in remote sensing. *Gainesville, Florida, USA*.

- Chen J., Richard C., Honeine P. (2013b, January 15). *Nonlinear unmixing of hyperspectral data based on a linear-mixture/nonlinear-fluctuation model*. IEEE Transactions on Signal Processing, vol. 61, n° 2, p. 480–492.
- Chen J., Richard C., Honeine P. (accepted, 2013). *Nonlinear estimation of material abundances of hyperspectral images with ℓ_1 -norm spatial regularization*. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing.
- Clark R. N., Geological Survey (U.S.). (2007). USGS digital spectral library splib06a [electronic resource] Book, Online. U.S. Geological Survey, Denver, CO, US.
- Cox T. F., Cox M. A. A. (2000). *Multidimensional scaling (2nd Edition éd.)*. London, Chapman and Hall / CRC.
- Du Q., Raksuntorn N., Younan N. H., King R. L. (2008). *Variants of n-findr algorithm for endmember extraction*. In Proc. SPIE - image and signal processing for remote sensing XIV.
- Green A. A., Berman M., Switzer P., Craig M. D. (1988, janvier). *A transformation for ordering multispectral data in terms of image quality with implications for noise removal*. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, vol. 26, n° 1, p. 65–74. Consulté sur <http://dx.doi.org/10.1109/36.3001>
- Harsanyi J. C., Chang C.-I. (1994). *Hyperspectral image classification and dimensionality reduction: an orthogonal subspace projection approach*. IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing, vol. 32, n° 4, p. 779–785.
- Heinz D., Chang C. (2001, March). *Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery*. IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing, vol. 39, n° 3, p. 529–545.
- Heylen R., Burazerovic D., Scheunders P. (2011). *Nonlinear spectral unmixing by geodesic simplex volume maximization*. IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing, vol. 5, n° 3, p. 534–542.
- Heylen R., Scheunders P. (2012). *Calculation of geodesic distances in non-linear mixing models: demonstration on the generalized bilinear model*. IEEE Geoscience and Remote Sensing letters, vol. 9, n° 4, p. 644–648.
- Honeine P., Lantéri H. (2013, 25 - 28 June). *Constrained reflect-then-combine methods for unmixing hyperspectral data*. In Proc. IEEE workshop on hyperspectral image and signal processing : Evolution in remote sensing. Gainesville, Florida, USA.
- Honeine P., Richard C. (2009, September). *Solving the pre-image problem in kernel machines: a direct method*. In Proc. 19th IEEE workshop on machine learning for signal processing. Grenoble, France. (- best paper award -)
- Honeine P., Richard C. (2010, 25 - 30 July). *A simple scheme for unmixing hyperspectral data based on the geometry of the n-dimensional simplex*. In Proc. IEEE international geoscience and remote sensing symposium. Honolulu (Hawaii), USA.
- Honeine P., Richard C. (2011a, September). *Approches géométriques pour l'estimation des fractions d'abondance en traitement de données hyperspectrales*. In Actes du 23-ème colloque gretsi sur le traitement du signal et des images. Bordeaux, France.
- Honeine P., Richard C. (2011b, December). *A closed-form solution for the pre-image problem in kernel-based machines*. Journal of Signal Processing Systems, vol. 65, n° 3, p. 289–299.
- Honeine P., Richard C. (2011c). *Preimage problem in kernel-based machine learning*. IEEE Signal Processing Magazine, vol. 28, n° 2, p. 77–88.

- Honeine P., Richard C. (2012, June). *Geometric unmixing of large hyperspectral images: a barycentric coordinate approach*. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, vol. 50, n° 6, p. 2185–2195.
- Jolliffe I. (1986). *Principal component analysis*. Springer, New York, NY.
- Keshava N., Mustard J. F. (2002). *Spectral unmixing*. IEEE Signal Processing Magazine, vol. 19, n° 1, p. 44–57.
- Kruskal J. (1964a). *Multidimensional scaling by optimizing goodness of fit to a nonmetric hypothesis*. Psychometrika, vol. 29, n° 1, p. 1–27.
- Kruskal J. (1964b). *Nonmetric multidimensional scaling: A numerical method*. Psychometrika, vol. 29, n° 2, p. 115–129.
- Lantéri H., Roche M., Cuevas O., Aime C. (2001, May). *A general method to devise maximum-likelihood signal restoration multiplicative algorithms with non-negativity constraints*. Signal Processing, vol. 81, p. 945–974.
- Lawson C. L., Hanson R. J. (1987). *Solving least squares problems (classics in applied mathematics)*. Society for Industrial Mathematics.
- Lee J., Woodyatt A., Berman M. (1990, May). *Enhancement of high spectral resolution remote sensing data by a noise-adjusted principal components transform*. IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing, vol. 28, p. 295–304.
- Luo W., Zhong L., Zhang B. (2008). *Null subspace analysis for spectral unmixing in hyperspectral remote sensing*. In Proc. congress on image and signal processing, vol. 4, p. 763–767. Washington, DC, USA, IEEE Computer Society.
- Nascimento J. M. P., Dias J. M. B. (2004). *Vertex component analysis: A fast algorithm to unmix hyperspectral data*. IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing, vol. 43, n° 4, p. 898–910.
- Nguyen N. H., Chen J., Richard C., Honeine P., Theys C. (2013). *Supervised nonlinear unmixing of hyperspectral images using a pre-image method*. In New concepts in imaging: Optical and statistical models, in Eds. D. Mary, C. Theys, and C. Aime, vol. 59, p. 417–437. EDP Sciences. Consulté sur <http://dx.doi.org/10.1051/eas/1359019>
- Nguyen N. H., Richard C., Honeine P., Theys C. (2012, 22 - 27 July). *Hyperspectral image unmixing using manifold learning: methods derivations and comparative tests*. In Proc. IEEE international geoscience and remote sensing symposium, p. 3086–3089. Munich, Germany.
- Ren H., Chang C.-I. (2003, octobre). *Automatic spectral target recognition in hyperspectral imagery*. IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems, vol. 39, n° 4, p. 1232–1249.
- Roweis S. T., Saul L. K. (2000). *Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding*. SCIENCE, vol. 290, p. 2323–2326.
- Sommerville D. M. Y. (1958). *An introduction to the geometry of N dimensions*. New York, Dover.
- Strang G. (2003). *Introduction to Linear Algebra (3rd éd.)*. Wellesly-Cambridge Press.
- Tenenbaum J. B., Silva V., Langford J. C. (2000, 22 December). *A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction*. Science, vol. 290, n° 5500, p. 2319–2323.
- Torgerson W. S. (1952). *Multidimensional scaling: I. theory and method*. Psychometrika, vol. 17, p. 401–419.

Winter M. (1999). *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, n° 10.

Paul Honeine. *Paul Honeine. Né en 1977 à Beyrouth, Liban, il est Maître de Conférences à l'Institut Charles Delaunay (UMR CNRS 6279, équipe LM2S) de l'Université de Technologie de Troyes. Ingénieur en mécanique (Université Libanaise, Liban, 2002), il est docteur en Optimisation et Sécurité des Systèmes (Université de Technologie de Troyes, 2007). Ses domaines d'intérêt incluent l'analyse de signaux nonstationnaires, les méthodes à noyau en reconnaissance des formes, et les réseaux de capteurs. Il a reçu (avec Cédric Richard) le prix du meilleur papier au IEEE MLSP workshop, en 2009.*

Cédric Richard. *Cédric Richard est né en 1970. Il a été nommé Maître de Conférence en 1999, et Professeur en 2003, à l'Université de Technologie de Troyes. De 2006 à 2009, il y a dirigé le laboratoire LM2S de cette université. Depuis 2009, il est Professeur à l'Université de Nice Sophia-Antipolis, et membre du laboratoire Lagrange de l'Observatoire de la Côte d'Azur. Ses centres d'intérêt concernent le traitement statistique des signaux et la reconnaissance des formes. Cédric Richard est membre de l'Institut Universitaire de France, et auteur de plus de 200 articles dans des revues et conférences de référence. Il a été Président du 21e colloque GRETSI, en 2007 à Troyes, et du workshop IEEE SSP, en 2011 à Nice. Il est Senior Member de l'IEEE, et membre élu des comités techniques internationaux « Signal Processing : Theory and Methods » et « Machine Learning for Signal Processing » de l'IEEE Signal Processing Society. Cédric Richard a été éditeur associé de la revue IEEE Transactions on Signal Processing de 2006 à 2010, et actuellement de la revue Signal Processing depuis 2009.*

Nguyen Hoang Nguyen. *Hoang Nguyen NGUYEN est né à Dalat, Vietnam, en 1986. Il a obtenu le diplôme d'ingénieur en Télécommunication et Electronique à l'institut polytechnique de Ho Chi Minh Ville en 2009. Il a suivi ses études approfondies à l'Université Nice-Sophia-Antipolis et a obtenu le diplôme Master 2 Télécommunications et systèmes microélectroniques en 2010. Il est actuellement doctorant en 3eme année sous la direction de Prof. Cédric Richard au laboratoire Lagrange, Observatoire de Nice Côte d'Azur. Ses études concernent les problèmes de démixage non-linéaires d'image hyperspectrale.*