

Démélange parcimonieux exact dans une approche supervisée en imagerie hyperspectrale

Ramzi BEN MHENNI

Laboratoire des Sciences du Numérique de
Nantes (LS2N), Ecole Centrale de Nantes



Colloque GRETSI
JUAN-LES-PINS



6 septembre 2017

avec

Sébastien BOURGUIGNON, *LS2N, École Centrale de Nantes*

Jordan NININ, *Lab-STICC, ENSTA Bretagne*

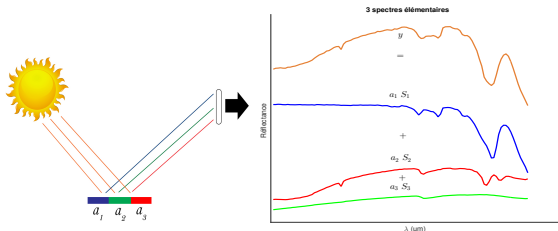
Frédéric SCHMIDT, *GEOPS, Université Paris-Sud*

Plan

- 1 Introduction : démélange spectral et parcimonie
- 2 Prise en compte de la contrainte de parcimonie
- 3 Reformulation en MIP (Mixed Integer Programming)
- 4 Résultats de simulations
- 5 Conclusion

Démélange en imagerie hyperspectrale

● Démélange de spectres [Singer and McCord, 1979]



Mélange linéaire. La réflectance mesurée est une moyenne pondérée des rayonnements des minéraux présents.

$$\mathbf{y} = \mathbf{S}\mathbf{a} \quad (+ \text{erreurs})$$

- \mathbf{y} : Le spectre mélangé
- \mathbf{S} : Dictionnaire composé de spectres en réflectance de minéraux
- \mathbf{a} : Coefficients de mélange (abondances)
 \Rightarrow représentent des pourcentages : $a_i \in [0, 1]$ et $\sum_i a_i = 1$

Démélange supervisé

On suppose que le dictionnaire \mathbf{S} est connu et on cherche \mathbf{a}

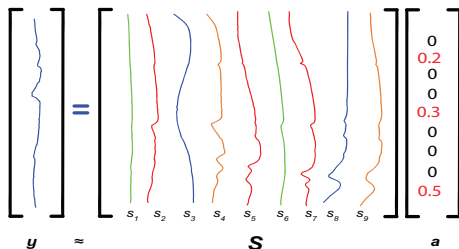
$$\mathbf{y} = \mathbf{S}\mathbf{a} \text{ (+ erreurs)}$$

\mathbf{S} = ensemble de spectres de minéraux "candidats"

- mesures en laboratoire et/ou spectres synthétiques
exemple : OMEGA (Mars Express) [Schmidt et al., 2014]
- approche non supervisée : \mathbf{S} fixé $\Rightarrow \mathbf{a}$, \mathbf{a} fixé $\Rightarrow \mathbf{S}$, ...

Contrainte de parcimonie

- **S**: beaucoup de spectres mais peu de minéraux présents dans chaque spectre observé



- Mélange parcimonieux: $\mathbf{y} \approx \mathbf{S}\mathbf{a}$, on cherche \mathbf{a} parcimonieux
- Problème d'optimisation:

$$\min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|_2^2 \text{ avec } \begin{cases} \|\mathbf{a}\|_0 = \text{Card}(i | a_i \neq 0) \leq K_{\max} \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases}$$

- Problème essentiellement combinatoire (NP-difficile) [Natarajan, 1995]
→ comment gérer cette contrainte?

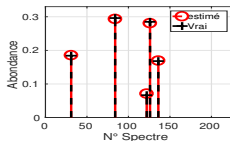
Prise en compte de la parcimonie : que faire?

1 Fully Constrained Least-Squares (FCLS) [Heinz and Chein-I-Chang, 2001]

$$\min_{0 \leq a_i \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|_2^2 \text{ avec } \sum_i a_i = 1$$

→ La positivité crée de la parcimonie

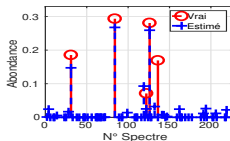
- sans bruit ($\mathbf{y} = \mathbf{S}\mathbf{a}$) : les vraies abondances sont solution de FCLS ☺



- avec bruit: les vraies abondances \neq solution de FCLS ☹

→ détections erronées

→ non-détections



⇒ seuillage de la solution FCLS : ☹

Prise en compte de la parcimonie : que faire?

2 Relaxation continue convexe de la norme ℓ_0 (norme ℓ_1 : $\|\mathbf{a}\|_1 = \sum_i |a_i|$)

$$\min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|y - \mathbf{S}\mathbf{a}\|_2^2 \text{ avec } \|\mathbf{a}\|_1 \leq \tau \quad \text{ou} \quad \min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|y - \mathbf{S}\mathbf{a}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{a}\|_1$$

Beaucoup d'algorithmes spécifiques [Tropp and Wright, 2009]

☹️ **Inadaptée car $\|\mathbf{a}\|_1 = 1 \Rightarrow$ ne crée pas plus de parcimonie**

→ La bonne valeur de τ et λ est celle pour laquelle la norme ℓ_1 vaut 1

3 Méthodes heuristiques gloutonnes : sélection successive des spectres

- Beaucoup d'algorithmes : (Orthogonal) Matching Pursuit, Orthogonal Least Squares . . . [Pati et al., 1993, Chen et al., 1989]

☹️ **inappropriés pour gérer la contrainte de $\sum_i \mathbf{a}_i = 1$**

☹️ **inappropriés pour un dictionnaire non normalisé**

Prise en compte de la parcimonie : que faire?

→ Pourquoi pas du vrai ℓ_0 ?

$$\min_{0 \leq a_i \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \|\mathbf{a}\|_0 \leq K \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases} \quad (P_0)$$



Formulation MIP (Mixed Integer Programming) s'y prête bien!

→ Résolution possible dans une certaine mesure [Bourguignon et al., 2016]

Objectifs ici :

- le calcul exact de (P_0) est-il possible sur des problèmes de démixage?
- la solution de (P_0) apporte-t-elle quelque chose?

Approximation parcimonieuse exacte

$$\min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \|\mathbf{a}\|_0 \leq K \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases} \quad (P_0)$$

Reformulation de la norme ℓ_0 (voir par exemple [Bourguignon et al., 2016])

- Variables binaires b_i (variables de décision) telles que $b_i = 0 \Leftrightarrow a_i = 0$. D'où $\|\mathbf{a}\|_0 = \sum_{i=1}^N b_i$

Reformulation du problème en MIP (Mixed Integer Programming)

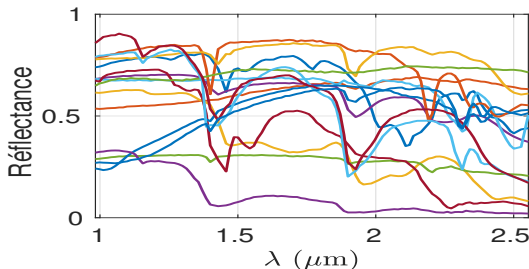
$$(P_0) \Leftrightarrow \min_{\mathbf{a} \in [0,1]^N, \mathbf{b} \in \{0,1\}^N} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \quad \text{t. q.} \quad \begin{cases} 0 \leq \mathbf{a} \leq \mathbf{b} \\ \sum_{i=1}^N b_i \leq K \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases}$$

Éléments de résolution : Branch and Bound [Land and Doig, 1960]

Résultats de simulations

Base de données du *United States Geological Survey* [Clark et al., 2003]

- Catalogue réduit à un spectre par classe de minéraux
⇒ $N = 225$ spectres
- 106 longueurs d'ondes de 1 à 2.5 microns
- Solveur MIP CPLEX

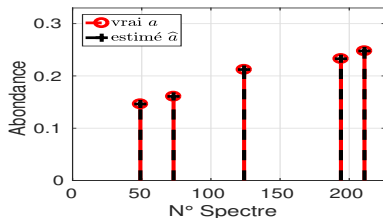
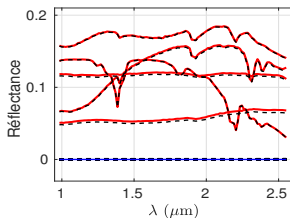
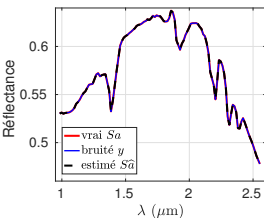


quelques spectres issus du dictionnaire S

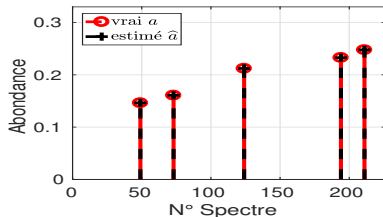
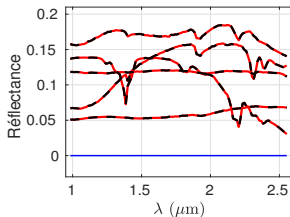
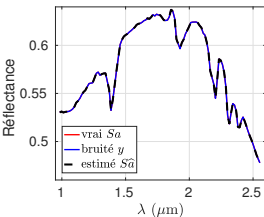
Spectres corrélés → Problème compliqué

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 100 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



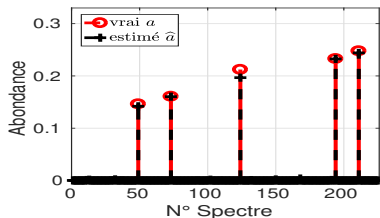
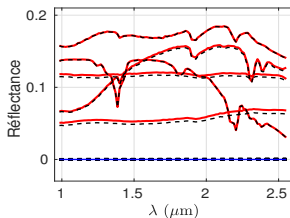
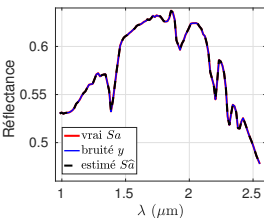
Données et reconstruction

Composantes et bruit

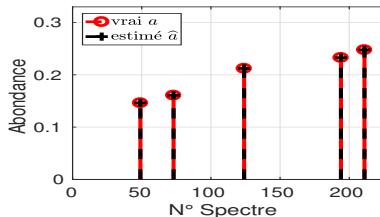
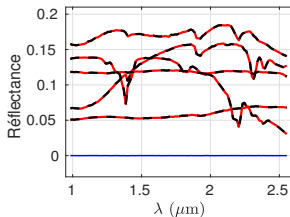
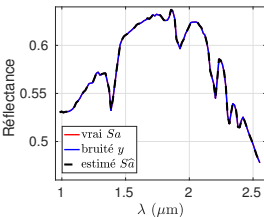
Abondances

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 80 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



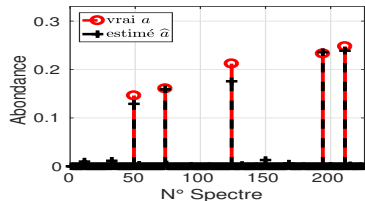
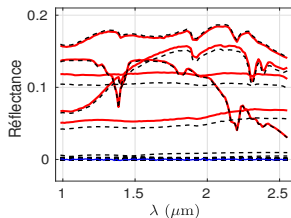
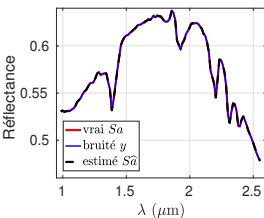
Données et reconstruction

Composantes et bruit

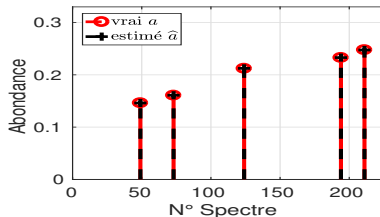
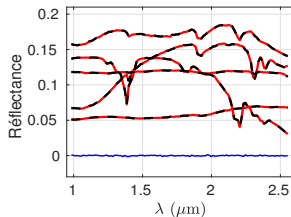
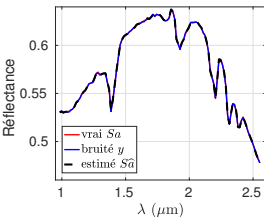
Abondances

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 60 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



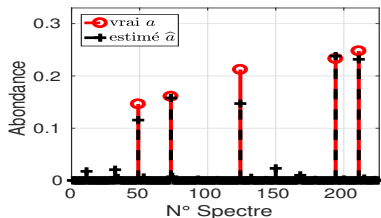
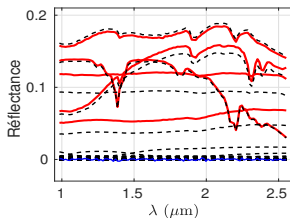
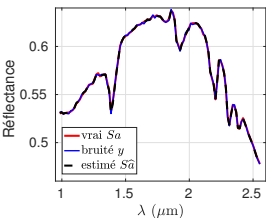
Données et reconstruction

Composantes et **bruit**

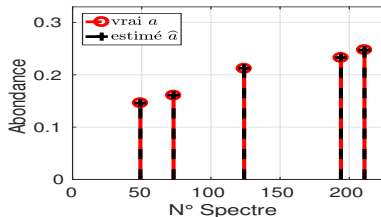
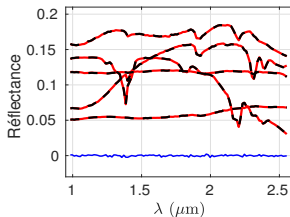
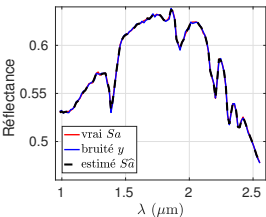
Abondances

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 55 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



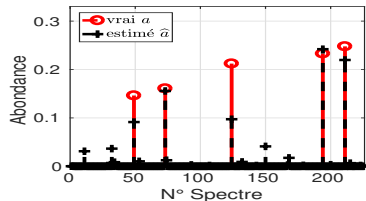
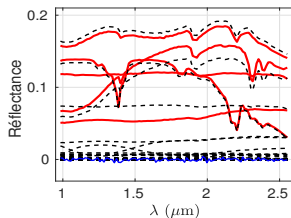
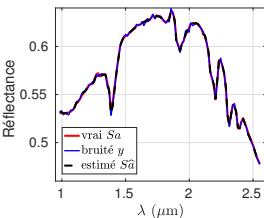
Données et reconstruction

Composantes et bruit

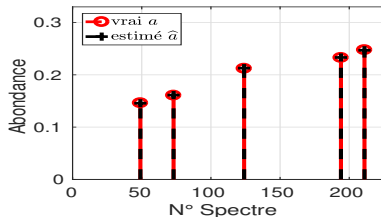
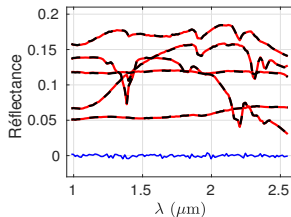
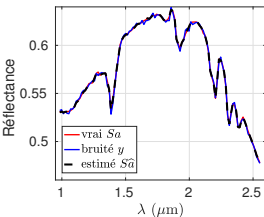
Abondances

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 50 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



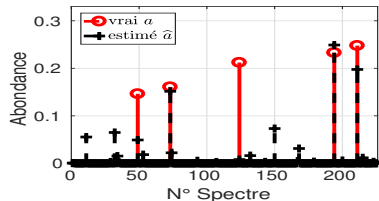
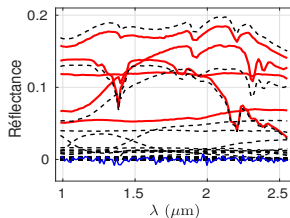
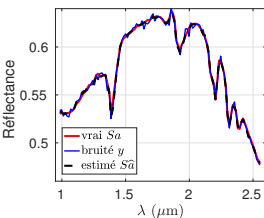
Données et reconstruction

Composantes et bruit

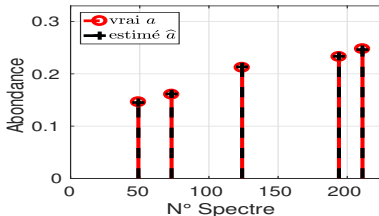
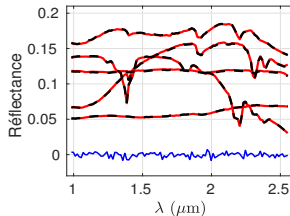
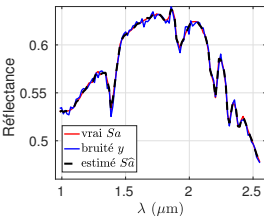
Abondances

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 45 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



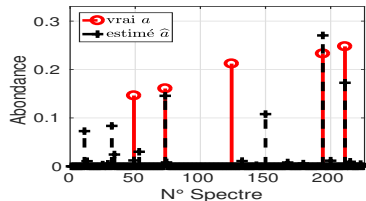
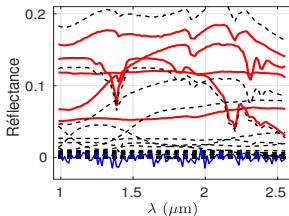
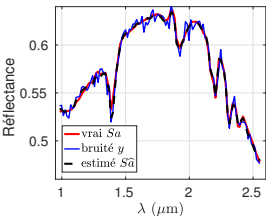
Données et reconstruction

Composantes et bruit

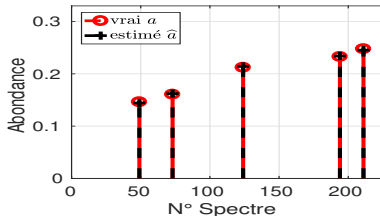
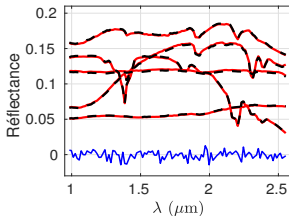
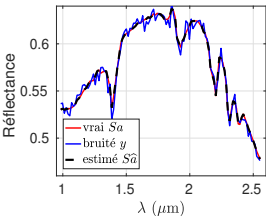
Abondances

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 40 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



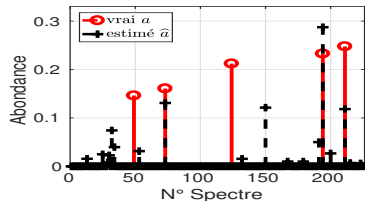
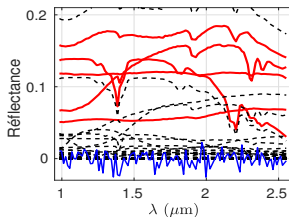
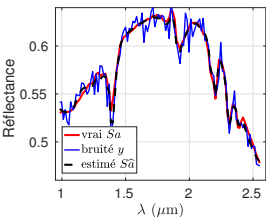
Données et reconstruction

Composantes et bruit

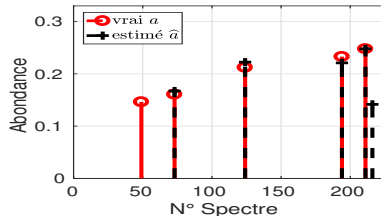
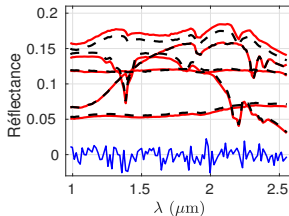
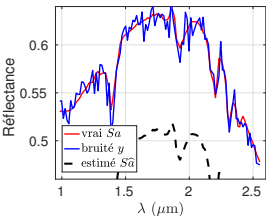
Abondances

Exemple de résultat $K = 5$ spectres, RSB= 35 dB

● solution FCLS



● solution du problème ℓ_0



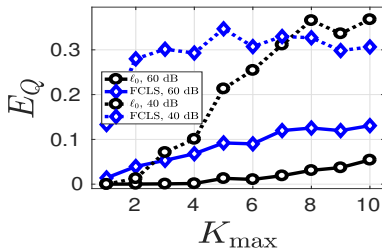
Données et reconstruction

Composantes et bruit

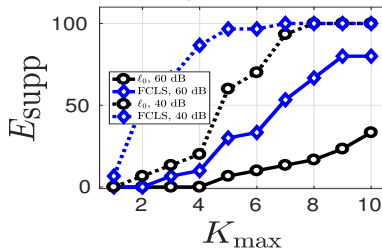
Abondances

Résultats de simulations: Résultats quantitatifs

$$E_Q = \|\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}\|_2^2$$



E_{supp} : détection correcte des K composantes



Performances de **FCLS** et de ℓ_0 -MIP: erreurs moyennes E_Q et E_{supp} sur 30 réalisations des données. RSB = 60 dB (trait plein) et 40 dB (pointillé).

K_{\max} RSB	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
60 dB	0.12	0.19	0.19	0.24	0.28	0.57	1.41	19.91	21.00	66.26⁽¹⁾
50 dB	0.13	0.26	0.28	0.70	3.56	29.19	33.08	503.1⁽⁴⁾	274.5⁽⁴⁾	426.4⁽¹⁰⁾
40 dB	0.16	0.40	0.59	2.13	34.80	612.04⁽²⁾	747.4⁽⁴⁾	573.2⁽¹⁴⁾	582.4⁽¹⁴⁾	670.9⁽¹⁵⁾

Temps de calcul (s) pour (ℓ_0 -MIP) moyennés sur 30 réalisations

Entre (): nombre de réalisations n'ayant pas fourni la solution optimale en 1000 (s).

Conclusion et perspectives

Conclusion

L'optimisation globale en MIP :

- MIP : permet la prise en compte exacte de la contrainte de parcimonie
- améliore les performances de détection par rapport aux approches classiques.
- faisable pour des problèmes dont la complexité est limitée (K / RSB).
→ possible sur des problèmes de taille réaliste

Perspectives

- Evaluation sur données réelles (OMEGA, Mars Express)
- Réglage automatique de K
- Prise en compte de contraintes supplémentaires :
 - Parcimonie structurée
 - Valeurs minimales imposées aux abondances non nulles

MERCI
de votre attention



Ce travail a été partiellement financé par l'Agence Nationale de la Recherche, projet MIMOSA ANR-16-CE33-0005 et le CNRS via le défi Imag'in MultiPlanNet.

Bibliographie I



Bioucas-Dias, J. M., Plaza, A., Dobigeon, N., Parente, M., Du, Q., Gader, P., and Chanussot, J. (2012). Hyperspectral unmixing overview: Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 5(2).



Bixby, R. (2012). A brief history of linear and mixed-integer programming computation. *Optimization Stories*.



Bourguignon, S., Ninin, J., Carfantan, H., and Mongeau, M. (2016). Exact sparse approximation problems via mixed-integer programming: Formulations and computational performance. 64(6).



Chen, S., Billings, S., and Luo, W. (1989). Orthogonal least squares methods and their application to non-linear system identification. *International Journal of Control*, 50(5):1873–1896.



Clark, R., Swayze, G., Wise, R., Livo, K., Hoefen, T., Kokaly, R., and Sutley, S. (2003). USGS digital spectral library splib05a. *US Geological Survey, Digital Data Series*, 231.



Heinz, D. and Chein-I-Chang (2001). Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 39(3).

Bibliographie II



Herrity, K. K., Gilbert, A. C., and Tropp, J. A. (2006).

Sparse approximation via iterative thresholding.

In 2006 IEEE International Conference on Acoustics Speech and Signal Processing Proceedings, volume 3.



lordache, M., Bioucas-Dias, J., and Plaza, A. (2011).

Sparse unmixing of hyperspectral data.

IEEE Trans. Geosci. Remote Sens., 49(6).



Jokar, S. and Pfetsch, M. (2008).

Exact and approximate sparse solutions of underdetermined linear equations.

31(1).



Keshava, N. and Mustard, J. F. (2002).

Spectral unmixing.

IEEE signal processing magazine, 19(1).



Klein, A., Carfantan, H., Testa, D., Fasoli, A., Snipes, J., and Contributors, J. E. (2008).

A sparsity-based method for the analysis of magnetic fluctuations in unevenly-spaced mirnov coils.

Plasma Physics and Controlled Fusion, 50(12):125005.



Land, A. H. and Doig, A. G. (1960).

An automatic method of solving discrete programming problems.

Econometrica: Journal of the Econometric Society, pages 497–520.



Natarajan, B. K. (1995).

Sparse approximate solutions to linear systems.

SIAM J. Comput., 24(2):227–234.

Bibliographie III



Pati, Y., Rezaifar, R., and Krishnaprasad, P. S. (1993).

Orthogonal matching pursuit: recursive function approximation with applications to wavelet decomposition.
In Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers, pages 40–44 vol.1.



Schmidt, F., Legendre, M., and Mouëlic, S. L. (2014).

Minerals detection for hyperspectral images using adapted linear unmixing: LinMin.
Icarus, 237.



Singer, R. B. and McCord, T. B. (1979).

Mars-large scale mixing of bright and dark surface materials and implications for analysis of spectral reflectance.
In Lunar and Planetary Science Conference Proceedings, volume 10, pages 1835–1848.



Tropp, J. A. and Wright, S. J. (2009).

Computational methods for sparse solution of linear inverse problems.

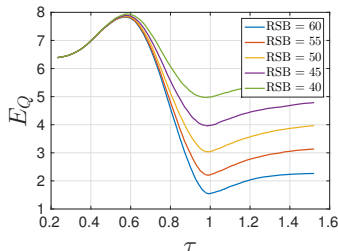


Zala, C. A. (1992).

High-resolution inversion of ultrasonic traces.
IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 39(4):458–463.

Parcimonie : norme ℓ_1

- Soit $\hat{\mathbf{a}} = \min_{\mathbf{a}} \|y - \mathbf{S}\mathbf{a}\|_2^2$ avec $\|\mathbf{a}\|_1 \leq \tau$



Erreur d'estimation du support $E_Q = \|\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}\|_2^2$ pour une approche en norme ℓ_1 ($\|\mathbf{a}\|_1 \leq \tau$) en fonction de τ , pour plusieurs niveaux de bruit

- Le paramètre $\tau^* \in [0.98 \ 1]$
- Les solutions obtenues sont toujours très proches de FCLS

Parcimonie : Méthodes heuristiques gloutonnes

Exemple OMP: Sélection successive des spectres

Itération quelconque:

Sélection du spectre

- Faire $Q \leftarrow Q \cup \{l\}$ où $l \in \operatorname{argmin}_{i \notin Q} \|\mathbf{r} - s_i \mathbf{a}_i\|_2^2$
 $\rightarrow l \in \operatorname{argmax}_{i \notin Q} |\langle \mathbf{r}_Q, \mathbf{s}_i \rangle|$

Calcule du résidu

- $\mathbf{r}_Q = \mathbf{y} - \mathbf{S}_Q \mathbf{a}_Q$

Problème:

- Contrainte de $\sum \mathbf{a} = 1$??
- Inefficaces quand le dictionnaire n'est pas normalisé