

# Méthodes exactes de démixtion spectrale en norme $l_0$ et contraintes de parcimonie structurée à l'aide de MIQP

Ramzi BEN MHENNI



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



Conférence ROADEF  
LORIENT



21 février 2018

avec

**Sébastien BOURGUIGNON**, LS2N, École Centrale de Nantes

**Jordan NININ**, Lab-STICC, ENSTA Bretagne

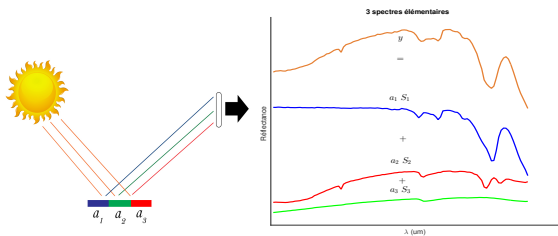
**Frédéric SCHMIDT**, GEOPS, Université Paris-Sud

# Plan

- 1 Introduction : démixage spectral et parcimonie
- 2 Parcimonie et Reformulation en MIQP (Mixed Integer Quadratic Programming)
- 3 Parcimonie structurée et Reformulation en MIQP
- 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.

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

- $\mathbf{y}$  : 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  $\sum_i a_i = 1$

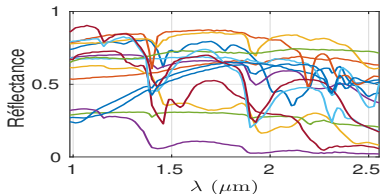
# Démélange supervisé

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"

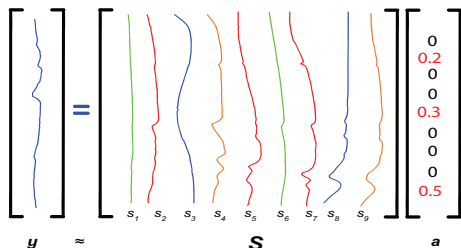
- mesures en laboratoire et/ou spectres synthétiques  
exemple : OMEGA (Mars Express) [Schmidt et al., 2014]



quelques spectres issus du dictionnaire  $\mathbf{S}$

# Contrainte de parcimonie

- **S** : beaucoup de spectres possibles mais peu de minéraux présents dans le mélange



→  $y \approx \mathbf{S}a$ , avec  $a$  **parcimonieux** : beaucoup de coefficients nuls

- Problème d'optimisation:

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

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

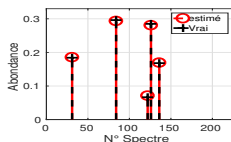
# Prise en compte de la parcimonie : que faire?

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

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

→ La positivité crée de la parcimonie

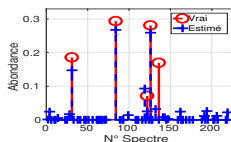
- sans bruit ( $\mathbf{y} = \mathbf{S}\mathbf{a}$ ) : les vraies abondances sont solution de FCLS 😊



- 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  $\tau$  ou  $\lambda$  est celle pour laquelle la norme  $l_1$  vaut 1!

## 3 Méthodes heuristiques gloutonnes

- Algorithmes classiques (OMP, OLS) inadaptés (somme à 1, dictionnaire non normalisé)
- Backward elimination [Greer, 2012]



Conditions d'optimalité très restrictives [Fuchs, 2004, Tropp, 2004, Candès et al., 2006]

# Prise en compte de la parcimonie : que faire?

→ “Vrai” problème en norme  $\ell_0$  :

$$\min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \|\mathbf{a}\|_0 \leq K \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases} \quad (\text{FCLS}_{\ell_0})$$



Formulation MIQP (Mixed Integer Quadratic Programming)

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

→ Ce problème s'y prête bien : taille “raisonnable”,  $a_i \in [0, 1]$

## Premier Objectif :

- le calcul exact de  $\text{FCLS}_{\ell_0}$  est-il possible sur des problèmes de démélange?
- la solution de  $\text{FCLS}_{\ell_0}$  apporte-t-elle quelque chose?



# Approximation parcimonieuse exacte en norme $\ell_0$

$$\min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \|\mathbf{a}\|_0 \leq K \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases} \quad (\text{FCLS}_{\ell_0})$$

**Reformulation de la norme  $\ell_0$**  (voir par exemple [Bourguignon et al., 2016])

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

## Reformulation du problème en MIQP (Mixed Integer Programming)

$$(\text{FCLS}_{\ell_0}) \Leftrightarrow \min_{\mathbf{a} \in [0,1]^N, \mathbf{b} \in \{0,1\}^N} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \quad \text{t. q.} \quad \begin{cases} \mathbf{0} \leq \mathbf{a} \leq \mathbf{b} \\ \sum_{i=1}^N b_i \leq K \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases}$$

Résolution : principe *Branch-and-Bound* [Land and Doig, 1960]

# Formulation MIQP : autres contraintes

Variables binaires  $b_i$  telles que  $b_i = 0 \Leftrightarrow a_i = 0$  (variables de décision).

→ cadre souple pour modéliser des contraintes plus complexes :

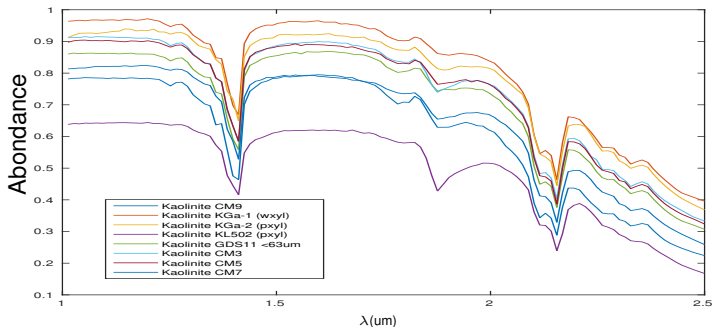
- Parcimonie structurée
- Valeurs minimales imposées aux abondances non nulles

## Deuxième Objectif :

- Prise en compte de ces contraintes possible sur des problèmes de démixage?
- Ces contraintes apportent-elles quelque chose? (Solution, coût de calcul)

# Contraintes avancées et reformulation MIQP

## Contrainte d'exclusivité (GE, group exclusivity)



Spectres du minéral Kaolinite issus du dictionnaire **S** (base USGS [Clark et al., 2003] )

- Plusieurs variantes d'un même minéral dans le dictionnaire
- Mais au plus une composante présente dans le mélange

# Contraintes avancées et Reformulation MIQP

## Contrainte d'exclusivité de groupe (GE)

$$\min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \|\mathbf{a}^{(j)}\|_0 \leq 1, j = 1, \dots, J \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases} \quad (\text{FCLS}_{\text{GE}})$$

## Reformulation de la contrainte d'exclusivité

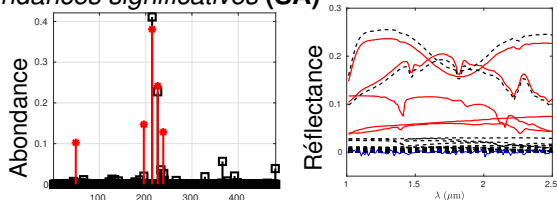
- Variables binaires  $b_i$  telles que  $b_i = 0 \Leftrightarrow a_i = 0$ . D'où  
 $\|\mathbf{a}^{(j)}\|_0 \leq 1, j = 1, \dots, J \Leftrightarrow \sum_{i \in G_j} b_i \leq 1, j = 1, \dots, J$

## Reformulation du problème en MIQP (Mixed Integer Programming)

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

# Contraintes avancées et Reformulation MIQP

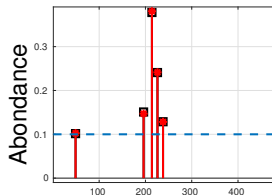
## Contrainte des *abondances significatives* (SA)



Données simulées (rouge) et estimation par FCLS (noir) en présence de bruit : beaucoup de faibles valeurs.



Imposer une valeur minimale aux abondances non nulles



Abondances significatives

$$a_n \neq 0 \Rightarrow a_n \geq \tau$$

# Contraintes avancées et Reformulation MIQP

## Contrainte des *abondances significatives* (SA)

$$\min_{0 \leq \mathbf{a} \leq 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{S}\mathbf{a}\|^2 \text{ avec } \begin{cases} a_n \neq 0 \Rightarrow a_n \geq \tau \forall n \\ \sum_{i=1}^N a_i = 1 \end{cases} \quad (\text{FCLS}_{\text{SA}})$$

## Reformulation de la contrainte du *abondances significatives* (SA)

- Variables binaires  $b_i$  telles que  $b_i = 0 \Leftrightarrow a_i = 0$ . D'où  
 $a_n \neq 0 \Rightarrow a_n \geq \tau \forall n \Leftrightarrow \tau b_n \leq a_n \leq b_n, \forall n$

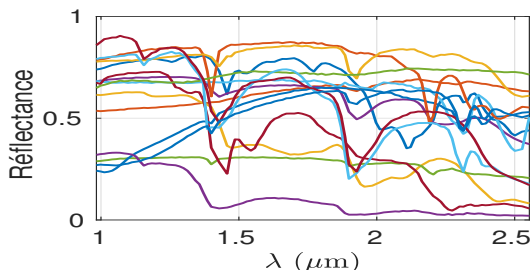
## Reformulation du problème en MIQP (Mixed Integer Programming)

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

# Résultats de simulations

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

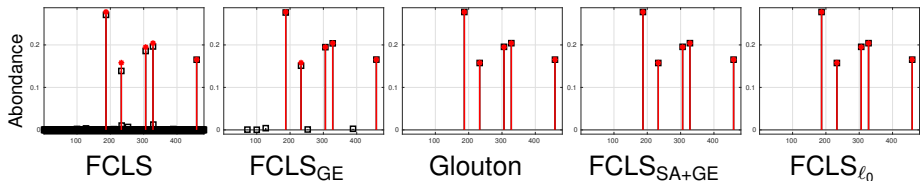
- Catalogue de  $N = 481$  spectres
- $J = 85$  groupes (entre 1 et 18 éléments par groupe)
- 113 longueurs d'ondes de 1 à 2.5 microns
- Solveur MIQP CPLEX



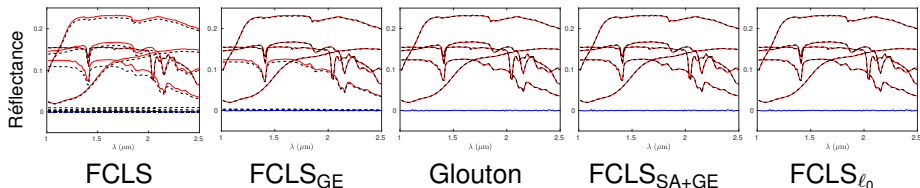
quelques spectres issus du dictionnaire  $\mathbf{S}$

Spectres corrélés  $\rightarrow$  Problème compliqué

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



Abondances vraies (rouge) et estimées (noir).

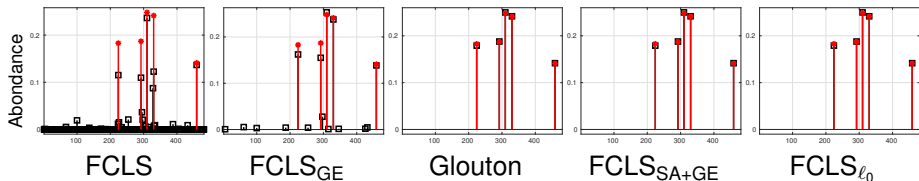


Composantes du vrai mélange (rouge) et du mélange estimé (noir).

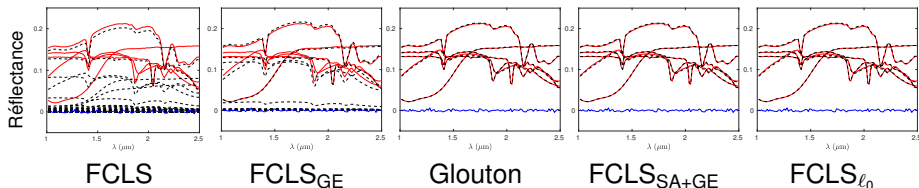
En bleu, le bruit.



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



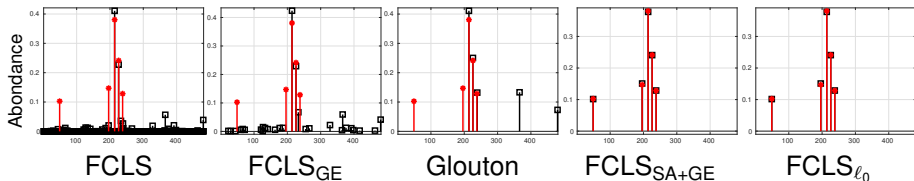
Abondances vraies (rouge) et estimées (noir).



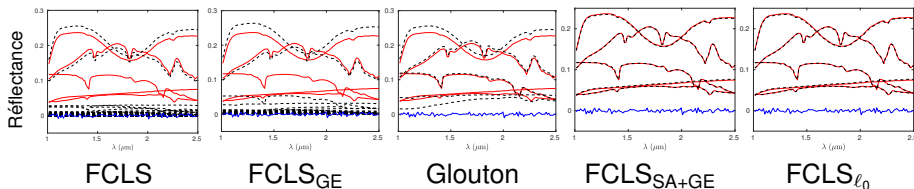
Composantes du vrai mélange (rouge) et du mélange estimé (noir).

En bleu, le bruit.

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



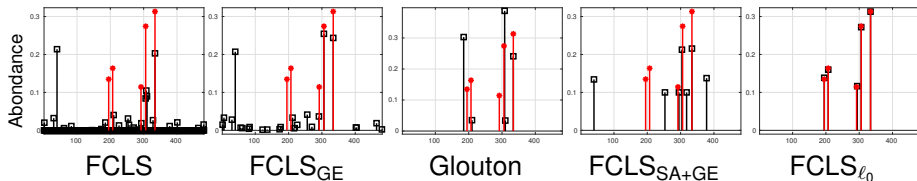
Abondances vraies (rouge) et estimées (noir).



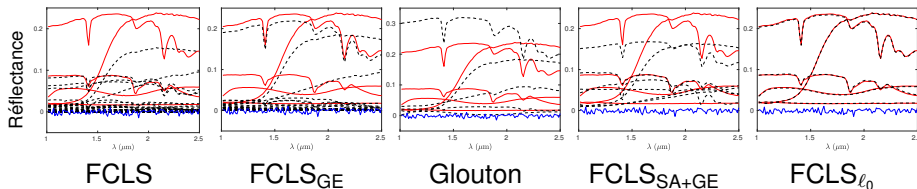
Composantes du vrai mélange (rouge) et du mélange estimé (noir).

En bleu, le bruit.

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



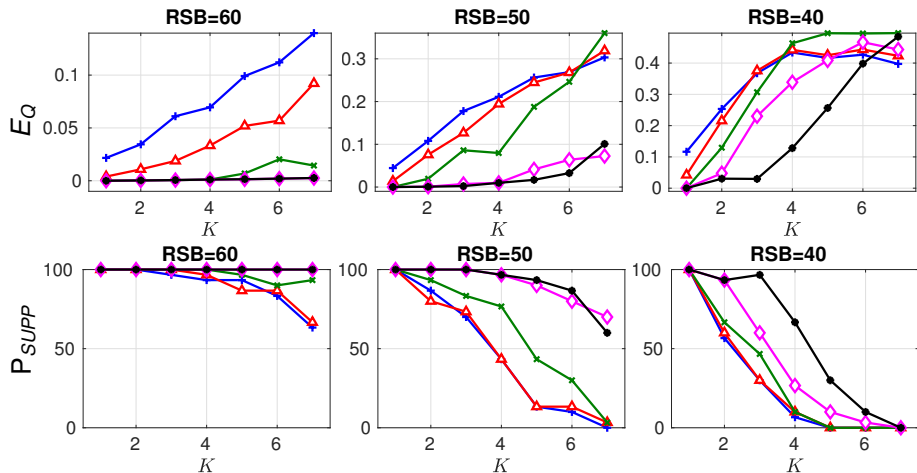
Abondances vraies (rouge) et estimées (noir).



Composantes du vrai mélange (rouge) et du mélange estimé (noir).

En bleu, le bruit.

# Résultats de simulations: Résultats quantitatifs



**Figure 1:** Performances de FCLS (+), FCLS<sub>GE</sub> (△), FCLS<sub>ℓ<sub>0</sub></sub> (\*), FCLS<sub>GE+SA</sub> (◇) et glouton (×) : erreurs moyennes  $E_Q = \|\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}\|_2^2$  et  $P_{SUPP}$  (pourcentage de détection correcte des  $K$  composantes) sur 30 réalisations des données

# Résultats de simulations: Temps de calcul

	$K$	1	2	3	4	5	6	7
FCLS $\ell_0$	SNR=60dB	0.72	1.22	1.43	1.6	2.5	6	51 <sup>(1)</sup>
	SNR=55dB	0.73	1.34	1.48	2.9	11	124 <sup>(3)</sup>	468 <sup>(9)</sup>
	SNR=50dB	0.86	1.45	2	7	136 <sup>(2)</sup>	410 <sup>(8)</sup>	871 <sup>(24)</sup>
	SNR=45dB	0.89	1.55	4.30	36	335 <sup>(8)</sup>	752 <sup>(20)</sup>	1000 <sup>(30)</sup>
	SNR=40dB	0.95	1.68	9.16	106 <sup>(1)</sup>	574 <sup>(13)</sup>	962 <sup>(27)</sup>	1000 <sup>(30)</sup>
FCLS $\ell_0+GE$	SNR=60dB	0.7	1.3	1.5	1.7	2.5	3.2	24
	SNR=55dB	0.72	1.4	1.5	3.1	7	81 <sup>(1)</sup>	319 <sup>(7)</sup>
	SNR=50dB	0.85	1.4	2.1	6	78 <sup>(1)</sup>	282 <sup>(5)</sup>	772 <sup>(21)</sup>
	SNR=45dB	0.8	1.6	3.7	21	291 <sup>(5)</sup>	705 <sup>(18)</sup>	975 <sup>(28)</sup>
	SNR=40dB	0.9	1.8	8.1	75.4	514 <sup>(11)</sup>	929 <sup>(25)</sup>	982 <sup>(28)</sup>
FCLS SA+GE	SNR=60dB	0.6	1.8	2	2.8	5	6.8	12
	SNR=55dB	0.7	1.9	2.5	11	29	75	264 <sup>(5)</sup>
	SNR=50dB	0.82	3.18	73 <sup>(2)</sup>	70 <sup>(1)</sup>	236 <sup>(5)</sup>	380 <sup>(7)</sup>	660 <sup>(16)</sup>
	SNR=45dB	0.9	7.7	170 <sup>(4)</sup>	248 <sup>(6)</sup>	455 <sup>(7)</sup>	746 <sup>(19)</sup>	962 <sup>(28)</sup>
	SNR=40dB	1.15	49 <sup>(1)</sup>	281 <sup>(6)</sup>	425 <sup>(8)</sup>	746 <sup>(19)</sup>	935 <sup>(26)</sup>	996 <sup>(29)</sup>

Temps de calcul (s) pour ( $\ell_0$ -MIQP) 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 MIQP :

- permet la prise en compte exacte de la contrainte de parcimonie
- permet la prise en compte de contraintes supplémentaires :
  - parcimonie structurée
  - valeurs minimales imposées aux abondances non nulles
- améliore les performances de détection par rapport aux approches classiques.
- reste faisable pour des problèmes dont la complexité est limitée ( $K / RSB$ ).

## Perspectives

- Evaluation sur données réelles (OMEGA, Mars Express)
- Réglage automatique de  $K$
- Autres types de contraintes??
- Algorithme Branch-and-Bound spécifique!

# 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



Bourguignon, S., Ninin, J., Carfantan, H., and Mongeau, M. (2016).

Exact sparse approximation problems via mixed-integer programming: Formulations and computational performance. *IEEE SP*, 64(6).



Candès, E. J., Romberg, J. K., and Tao, T. (2006).

Stable signal recovery from incomplete and inaccurate measurements. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 59(8):1207–1223.



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.



Fuchs, J.-J. (2004).

On sparse representations in arbitrary redundant bases. *IEEE Transactions on Information Theory*, 50(6):1341–1344.



Greer, J. B. (2012).

Sparse demixing of hyperspectral images. *IEEE Transactions on Image Processing*, 21(1):219–228.



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).



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.



# Bibliographie II



Natarajan, B. K. (1995).

Sparse approximate solutions to linear systems.  
*SIAM J. Comput.*, 24(2):227–234.



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. (2004).

Greed is good: Algorithmic results for sparse approximation.  
*IEEE Transactions on Information Theory*, 50(10):2231–2242.



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

Computational methods for sparse solution of linear inverse problems.