

UNIVERSITEIT ANTWERPEN

FYSICA

MASTERPROEF

Semilineaire spectraalanalyse met meerdere
eindmembers

Auteur:

Thorvald Dox

Promotor:

Paul Scheunders

Copromotor:

Rob Heylen



Inhoudsopgave

Abstract	3
Inleiding	4
1 Ontmengen	5
1.1 Het begrip spectrum	5
1.2 Het begrip ontmengen	5
1.3 Lineair model	6
2 Multilinear model	8
2.1 Berekening	9
2.2 Atmosferische correctie	9
2.2.1 Schaduw	10
2.3 Afhankelijke kansen	10
2.3.1 Schaduw	12
2.3.2 Onafhankelijke kans	12
2.3.3 Implementatie in matlab	13
3 Spectraalontmenging met meerdere eindmembers	15
3.1 Variabiliteit	15
3.1.1 MESMA	15
3.1.2 Selecteren versus ontmengen, het semilineair model	16
3.2 Juistheid van het semilineair model	17
3.2.1 Theoretische controle	17
3.2.2 Experimentele controle	21
4 vergelijking van verschillende ontmengingsmodellen	24
4.1 andere modellen	25
4.1.1 Hoekminimalisatie	25
4.1.2 Bilineair model	25
4.2 modeleigenschappen	25
4.2.1 mogelijke verklaringen voor negatieve reflectiekans	25
4.3 experimetele vergelijking van verschillende modellen	25
5 toepassen op datasets	27

Appendices	30
Bibliografie	32

Abstract

Inleiding

Hyperspectrale ontmenging heeft toepassingen in voedselveiligheid, farmaceutische processen en kwaliteitscontrole, en andere medische, biomedische, biometrische, industriële en forensische toepassingen². Maar een van de belangrijkste toepassingen is aardobservatie. Aardobservatie hoeft niet altijd op de aarde te slaan, dit kan ook gebruikt worden op andere planeten, maar het vaakst worden deze gebruikt om satellietbeelden van de aarde te interpreteren. Deze kunnen gebruikt worden om effectief gebieden in kaart te brengen, tot in groot detail. Er kan bijvoorbeeld de groei van een invasieve soort plant in kaart worden gebracht, zelfs als die voor ons menselijk oog erg lijkt op een andere inheemse plant. Ook kunnen bijvoorbeeld op het oppervlak van de aarde of andere planeten zoals Mars de verschillende soorten gesteenten in kaart worden gebracht, zonder dat iemand letterlijk in de buurt moet komen van deze gesteenten of een monster moet bestuderen in een laboratorium.

Een van de grote problemen van het interpreteren van data is het omzetten van een beeld, dat spectra bevat, naar een kaart die de materialen weergeeft. Dit is een van de problemen die worden opgelost door het zogenaamde ontmengen.

Voor de werkelijke implementatie van de in dit verslag beschreven algoritmen wordt gebruikt gemaakt van *matlab*⁷. De code kan gevonden worden op <https://github.com/thorvalddox/Hyperspectral>.

² Jose M. Bioucas-dias, Antonio Plaza, Nicolas Dobigeon, Mario Parente, Qian Du, Pual Grader, and Jocelyn Chanussot, *Hyperspectral unmixing overview: Geometrical, statistical and sparse regression based approaches.*, Journal of selected topics in applied earth observation and remote sensing **5** (2012), no. 2, 354–376

⁷ MATLAB, *version 8.5.0 (r2015a)*, The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2015

Hoofdstuk 1

Ontmengen

1.1 Het begrip spectrum

Een spectrum is een eigenschap van licht. Het bevat de intensiteit van een lichtstraal in functie van de golflengte of frequentie. Dit spectrum kan gemeten worden door de zogenaamde hyperspectrale camera's, die dit spectrum voor elke pixel opmeten. Aangezien deze maar op een aantal discrete golflengten meten en niet over het hele oneindige spectrum, is het resultaat in praktijk geen functie, maar gewoon een numerieke vector van data.

1.2 Het begrip ontmengen

Als een hyperspectrale camera een afbeelding neemt van bijvoorbeeld het aardoppervlak, beschrijft een enkele pixel een gebied waarin zich meerdere materialen bevinden. Dit is altijd het geval, onafhankelijk van de resolutie van de camera². Neem bijvoorbeeld een bos. Als de pixels groter zijn dan een vierkante meter staan verschillende soorten bomen op eenzelfde pixel. Als de pixels kleiner worden kunnen we deze wel onderscheiden, maar dan kunnen de takken nog niet van de bladeren onderscheiden worden. Zelfs als we elk blad afzonderlijk kunnen onderscheiden, de nerven van het blad hebben een ander spectrum dan het bladmoes. Zelf als we verder inzoomen, de cellen van het blad bestaan nog altijd uit verschillende materialen. Bijvoorbeeld bij een gesteente, dat bestaat uit verschillende mineralen, maakt het niet uit hoe ver er ingezoomd wordt, de mineralen blijven vermengd tot op atomair niveau.

Hierom is het belangrijk een manier te vinden om de verschillende materialen uit een pixel te “ontmengen”. Dit wil zeggen dat uit een spectrum van de volledige pixel de “hoeveelheden” en de spectra van de verschillende materialen afgeleid kan worden. Dit proces heet ontmengen.

Het is belangrijk om in te zien dat een materiaal ofwel eindmember genoemd niet per definitie een enkele moleculair zuivere stof moet zijn. In het bovenstaande voorbeeld zullen

² Jose M. Bioucas-dias, Antonio Plaza, Nicolas Dobigeon, Mario Parente, Qian Du, Pual Grader, and Jocelyn Chanussot, *Hyperspectral unmixing overview: Geometrical, statistical and sparse regression based approaches.*, Journal of selected topics in applied earth observation and remote sensing **5** (2012), no. 2, 354-376

waarschijnlijk de verschillende bladeren van eenzelfde boom -of zelfs de hele boom of, wat meestal gebruikt wordt, alle bomen - als een enkele eindmember beschouwd worden.

1.3 Lineair model

In het lineaire model gaan we ervan uit dat het gemeten spectrum een lineaire combinatie is van de spectra van de verschillende eindmembers. De voorfactoren geven de “hoeveelheid” weer van een materiaal dat zich bevindt in het spectrum, deze voorfactoren noemen we abundanties. De spectra in dit model kunnen ontmengd worden door gebruik te maken van onder andere “sum-to-one constrained least square unmixing”⁶, wat in dit verslag gebruikt wordt. Dit zoekt de set van abundancies met de laagste Gaussische reconstructie-error. De reconstructie-error is de kwadratische norm van het verschil van het werkelijke spectrum, en het spectrum dat ontstaat door het model te mengen met de set gevonden eindmembers en parameters. In het lineaire model kan het minimum gevonden worden door het gemeten spectrum te projecteren op het hypervlak, opgespannen door de eindmembers.

Noemen we de reflectiespectra van de verschillende eindmembers \mathbf{e}_i , de respectievelijke abundanties a_i en de ruis η , dan is het totale reflectiespectrum gelijk aan⁶:

$$\mathbf{x} = \sum_i a_i \mathbf{e}_i + \eta \quad (1.1)$$

In een experiment zijn \mathbf{x} en \mathbf{e}_i gekend, maar a_i en η niet. Sterker nog, aangezien de ruis klein is, is men geïnteresseerd in de abundanties waarvoor de ruis het kleinst is, of specifieker, waar de kwadratische norm van de ruis het kleinst is. Dit komt overeen met de minimale Gaussische afstand te zoeken tot het hypervlak, opgespannen door de eindmembers. Dit is equivalent met het systeem projecteren op het hypervlak.

$$\operatorname{argmin}_{a_1 \dots a_p} \left\| \mathbf{x} - \sum_{i=1}^p a_i \mathbf{e}_i \right\|^2 \quad (1.2)$$

Hierbij is p het totaal aantal eindmembers.

⁶ Rob Heylen, Alina Zare, Paul Gader, and Paul Scheunders, *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*

⁶ Rob Heylen, Alina Zare, Paul Gader, and Paul Scheunders, *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*

Sommeer tot een

Als extra voorwaarde wordt opgelegd dat de som van de verschillende abundanties gelijk aan een is. Dit kan gedaan worden als hierna beschreven.

De volledige hyperruimte wordt getranslateerd volgens een van de eindmembers, \mathbf{e}_1 . Hierdoor is de hyperruimte opgespannen door de eindmembers een deelruimte, en kan er dus op geprojecteerd worden door middel van Penrose- inversen⁶. De waarde van het totale spectrum en de eindmembers worden in de nieuwe hyperruimte respectievelijk $\mathbf{x} - \mathbf{e}_1$ en $\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_1$. Als J de matrix is gedefinieerd door de vectoren $\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_1$ voor i van 2 tot p als kolommen aan elkaar te rijgen, dan geldt:

$$\hat{\mathbf{a}} = (J^T J)^{-1} J^T \mathbf{x} \quad (1.3)$$

met $\hat{\mathbf{a}}$ de kolommatrix met de abundanties. Deze bevat nog niet de abundantie van \mathbf{e}_1 , maar deze kan gevonden worden dankzij de voorwaarde dat de som een is, zodat $a_1 = 1 - \sum_{i=2}^p a_i$.

Niet-negativiteitsvoorwaarde

Een andere extra voorwaarde is dat de abundanties niet negatief mogen zijn. Dit kan verwezenlijkt worden door in plaats van Penrose-Inversie een niet-negativiteitsalgoritme te gebruiken, maar later in deze thesis zal dit verwezenlijkt worden op een andere manier.

⁶ Rob Heylen, Alina Zare, Paul Gader, and Paul Scheunders, *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*

Hoofdstuk 2

Multilinear model

Het multilineair model⁵ is een model dat oneindig veel ordes meeneemt, door de interactie van licht met de materialen op het monster te modelleren als een discreet Markov-proces. Deze bevat de volgende stappen, zoals beschreven in *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*⁵.

1. De inkomende straal interageert met minstens één materiaal in de bron.
2. Na deze interactie heeft het materiaal een kans P om een nieuwe interactie aan te gaan, en een kans $(1 - P)$ om dat niet te doen.
3. De kans om een nieuwe interactie aan te gaan met elk nieuw materiaal is evenredig met de abundantie van dat materiaal. Merk op dat aangezien de som van de abundanties één is, de waarde van de kans gelijk is aan de abundantie.
4. Wanneer een lichtstraal interageert met een materiaal wordt zijn spectrum gewijzigd, afhankelijk van het albedo van dit materiaal.

De interactie van dit materiaal verloopt als volgt:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{w} \odot \mathbf{x} \quad (2.1)$$

waarbij \mathbf{x}' de uitgaande straal is, \mathbf{w} het albedo is, \mathbf{x} de inkomende straal en \odot het Hadamard product, ofwel elementgewijs product wat gedefinieerd is als volgt:

$$(\mathbf{x} \odot \mathbf{y})_i = x_i \cdot y_i \quad (2.2)$$

⁵ Rob Heylen and Paul Scheunders, *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*

⁵ Rob Heylen and Paul Scheunders, *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*

2.1 Berekening

In deze sectie gaan we uit van een homogene lichtbron. In sectie 2.2 wordt deze eis versoepeld.

De kans dat een welbepaald pad gevolgd wordt, wordt als volgt genoteerd:

$$\mathcal{P}(i_1, i_2, i_3, \dots, i_R) \quad (2.3)$$

Bovenstaande uitdrukking geeft de kans dat een lichtstraal respectievelijk reflecteert op materiaal i_1, i_2, i_3 en zo voort. R is hier het totale aantal materialen waarop gereflecteerd wordt.

Deze kan aan de hand van het voorgaande Markov-proces berekend worden⁵.

$$\mathcal{P}(i_1, i_2, i_3, \dots, i_R) = P^{R-1}(1 - P) \prod_{k=1}^R a_{i_k} \quad (2.4)$$

De uitgaande straal ten gevolge van een specifiek pad is $\odot_{k=1}^R \mathbf{w}_{i_k}$ dus is de kans op de uitgaande straal vermenigvuldigd met het spectrum:

$$\mathbf{x}_{(i_1, i_2, i_3, \dots, i_R)} = P^{R-1}(1 - P) \odot_{k=1}^R (a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \quad (2.5)$$

We noemen dit de amplitudo van dit pad.

Gesommeerd over alle mogelijke paden wordt dit:

$$\mathbf{x} = \sum_{R=1}^{\infty} \left(\sum_{i_1}^p \dots \sum_{i_R}^p \right) P^{R-1}(1 - P) \odot_{k=1}^R (a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \quad (2.6)$$

2.2 Atmosferische correctie

De lichtbron die we gebruiken om ons monster te belichten, is in de meeste gevallen de zon. Bij lineaire ontmenging, waarbij we geïntereiseerd waren in reflectiespectra, gaf deze gewoon een lineaire factor waarmee alle reflectiespectra vermenigvuldigd waren. Als alle eindmembers ook hiermee vermenigvuldigd worden, geeft deze dankzij het lineaire karakter van het systeem het juiste resultaat.

Dit is niet meer het geval bij multilinear ontmenging, aangezien we werken met albedo's in plaats van reflectiespectra. Als we het spectrum van de lichtbron \mathbf{I} noemen, geldt dat

$$\mathbf{x} = \sum_{R=1}^{\infty} \left(\sum_{i_1}^p \dots \sum_{i_R}^p \right) P^{R-1}(1 - P) \mathbf{I} \odot \odot_{k=1}^R (a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \quad (2.7)$$

Er bestaan vele technieken om dit probleem op te lossen, die ook rekening houden met de verschillende effecten van de atmosfeer. De datasets die in deze thesis gebruikt worden zijn al verwerkt door een dergelijk algoritme.

⁵ Rob Heylen and Paul Scheunders, *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*

2.2.1 Schaduw

Een pixel bevat een schaduw wanneer er minder licht invalt. Dit kan niet worden weggewerkt met bovenstaande methode omdat deze aanneemt dat het spectrum van het invallend licht overal gelijk is. In dit geval hebben een aantal pixels een lichtbron met een andere intensiteit. Dit spectrum heeft dezelfde vorm als de oorspronkelijke lichtbron, alleen een kleinere intensiteit. Dit kan dus worden voorgesteld als een extra factor die toegevoegd wordt aan het systeem. We noteren deze l . De vergelijking wordt nu:

$$\mathbf{x} = l \sum_{R=1}^{\infty} \left(\sum_{i_1}^p \dots \sum_{i_R}^p \right) P^{R-1} (1 - P) \mathbf{I} \odot \bigodot_{k=1}^R (a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \quad (2.8)$$

2.3 Afhankelijke kansen

Stel dat de kans dat een lichtstraal nog een keer interageert afhankelijk is van het materiaal. Dit kan voorkomen bij bijvoorbeeld een zandgrond met vegetatie erboven. Een lichtstraal die vertrekt op de grond zal met een grotere waarschijnlijkheid eerst met de vegetatie erboven interageren voor het op de detector terecht komt.

$$\mathcal{P}(i_1, i_2, i_3, \dots, i_R) = \prod_{k=1}^{R-1} P_{i_k} (1 - P_{i_R}) \quad (2.9)$$

$$= \prod_{k=1}^R P_{i_k} \frac{1 - P_{i_R}}{P_{i_R}} \quad (2.10)$$

De amplitudo van dit pad wordt:

$$\mathbf{x}_{(i_1, i_2, i_3, \dots, i_R)} = \prod_{k=1}^{R-1} P_{i_k} (1 - P_{i_R}) \bigodot_{k=1}^R (a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \quad (2.11)$$

$$= \bigodot_{k=1}^{R-1} (P_{i_k} a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \odot (1 - P_{i_R}) a_{i_R} \mathbf{w}_{i_R} \quad (2.12)$$

$$\mathbf{x} = \sum_{R=1}^{\infty} \left(\sum_{i_1}^p \dots \sum_{i_R}^p \right) \bigodot_{k=1}^{R-1} (P_{i_k} a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \odot (1 - P_{i_R}) a_{i_R} \mathbf{w}_{i_R} \quad (2.13)$$

$$= \sum_{i=1}^p (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i \odot P_j a_j \mathbf{w}_j$$

$$+ \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i \odot P_j a_j \mathbf{w}_j \odot P_k a_k \mathbf{w}_k$$

$$+ \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p \sum_{l=1}^p (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i \odot P_j a_j \mathbf{w}_j \odot P_k a_k \mathbf{w}_k \odot P_l a_l \mathbf{w}_l$$

$$+ \dots \quad (2.14)$$

$$= \mathbf{z} + \mathbf{y} \odot \mathbf{z} + \mathbf{y} \odot \mathbf{y} \odot \mathbf{z} + \dots \quad (2.15)$$

$$= \mathbf{z} + \mathbf{y} \odot \mathbf{x} \quad (2.16)$$

$$= \frac{\mathbf{z}}{1 - \mathbf{y}} \quad (2.17)$$

waar

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^p P_i a_i \mathbf{w}_i \quad (2.18)$$

$$\mathbf{z} = \sum_{i=1}^p (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i \quad (2.19)$$

zodat

$$\mathbf{x} = \frac{\sum_{i=1}^p (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i}{1 - \sum_{i=1}^p P_i a_i \mathbf{w}_i} \quad (2.20)$$

De vrijheidsgraden naar waar dit moet worden opgelost zijn a_i en P_i , maar als volgende variabelen ingevoerd worden:

$$b_i = (1 - P_i) a_i \quad (2.21)$$

$$c_i = P_i a_i \quad (2.22)$$

ofwel

$$a_i = b_i + c_i \quad (2.23)$$

$$P_i = \frac{c_i}{b_i + c_i} \quad (2.24)$$

kan er geminimaliseerd worden naar b_i en c_i .

Merk op dat b_i en c_i ook een fysische betekenis hebben. Als een lichtstraal op een pixel valt is a_i de kans dat deze lichtstraal op materiaal i valt, is b_i de kans dat deze op het materiaal valt en daarna als deze reflecteert op de detector valt en c_i is de kans dat deze op het materiaal valt en reflecteert naar een ander materiaal. En de voorwaarde dat $\sum a_i = 1$ wordt nu $\sum b_i + c_i = 1$

$$\mathbf{x} = \frac{\sum_{i=1}^p b_i \mathbf{w}_i}{1 - \sum_{i=1}^p c_i \mathbf{w}_i} \quad (2.25)$$

Rekening houdend met errors moet de volgende vergelijking geminimaliseerd worden:

$$\min_{b_i, c_i} \left\| \mathbf{x} - \frac{\sum_{i=1}^p b_i \mathbf{w}_i}{1 - \sum_{i=1}^p c_i \mathbf{w}_i} \right\|^2 \quad (2.26)$$

Hoe van dit systeem over te gaan naar het voorgaande systeem staat beschreven in sectie 2.3.2

2.3.1 Schaduw

Als we schaduw terug toevoegen aan het systeem krijgen we

$$\mathbf{x} = \frac{l \sum_{i=1}^p b_i \mathbf{w}_i}{1 - \sum_{i=1}^p c_i \mathbf{w}_i} \quad (2.27)$$

Stel

$$b'_i = l b_i \quad (2.28)$$

en stel

$$s = l^{-1} \quad (2.29)$$

dan wordt de vergelijking hetzelfde als vergelijking 2.27. Alleen vervalt de voorwaarde $\sum b'_i + c_i = 1$. Als alle b'_i 's en c_i 's bekend zijn, kan s bepaald worden als volgt:

$$\sum_i (b_i + c_i) = 1 \quad (2.30)$$

$$\sum_i (s b'_i + c_i) = 1 \quad (2.31)$$

$$s \sum_i b'_i + \sum_i c_i = 1 \quad (2.32)$$

$$s = \frac{1 - \sum_i c_i}{\sum_i b'_i} \quad (2.33)$$

Bijgevolg is:

$$a_i = b_i + c_i \quad (2.34)$$

$$= s b'_i + c_i \quad (2.35)$$

$$= b'_i \frac{1 - \sum_i c_i}{\sum_i b'_i} + c_i \quad (2.36)$$

$$(2.37)$$

Het is eenvoudig in te zien dat deze tot één sommeren.

2.3.2 Onafhankelijke kans

In sectie 2.3 staat beschreven hoe men een systeem ontmengd gebruik makend van een verschillende reflectiekans voor elk materiaal. Als er uitgegaan wordt van een gelijke reflectiekans voor elk materiaal kan in formule 2.27 geëist worden dat alle P_i gelijk zijn. Dan vindt men volgende formule die ook gevonden werd in *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*⁵.

$$\mathbf{x} = \frac{(1 - P) \sum_{i=1}^p a_i \mathbf{w}_i}{1 - P \sum_{i=1}^p a_i \mathbf{w}_i} \quad (2.38)$$

⁵ Rob Heylen and Paul Scheunders, *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*

Stel dat men het minimalisatie probleem heeft opgelost en een stel P_i 's en a_i 's gevonden heeft, dan vindt men goede waarden voor P en a_i voor bovenstaand model. Het is logisch om te veronderstellen dat de a_i voor beide systemen gelijk zijn, dit is echter niet altijd het geval. Wanneer een bepaald materiaal een hoge of lage P_i -waarde heeft in vergelijking met P , kan het zijn dat de abundantie in het minimum verschillend is. Maar laten we veronderstellen dat de abundanties voor beide systemen gelijk zijn.

Noem P_i de kans dat een willekeurige straal als laatste geïnterageerd heeft met materiaal i , gegeven dat het geïnterageerd heeft ergens in de pixel. Dit is equivalent aan te stellen: hoe groot is de kans dat een willekeurige straal interageert met het specifieke materiaal i , gegeven dat het interageert met een willekeurig materiaal in de pixel? Uit sectie 2 volgt dat dit de abundantie van het materiaal is en dat deze onafhankelijk is van de oorsprong van de lichtstraal. Wat is de kans dat deze lichtstraal afkomstig van materiaal i nog een keer interageert met het materiaal. Deze was gegeven als P_i . Dit maakt de totale kans dat een lichtstraal nog eens interageert met het materiaal $\sum P_i a_i$. Dit is per definitie P , dus $P = \sum P_i a_i = \sum c_i$.

2.3.3 Implementatie in matlab

In matlab[?] wordt vergelijking 2.26 geminimaliseerd aan de hand van de matlabfunctie `fmincon`, die deze functie numeriek minimaliseert.

Als dit geïmplementeerd wordt kan er gebruik gemaakt worden van afhankelijke of onafhankelijke P waarden, en kan schaduw wel of niet meegenomen worden. Als de kansen onafhankelijk zijn moet tussen het minimaliseren en de berekening van de abundanties, reflectie en reconstructie-error, b en c vervangen worden door

$$b'_i = \left(1 - \sum_j c_j\right) (b_i + c_i) \quad (2.39)$$

$$c'_i = \left(\sum_j c_j\right) (b_i + c_i) \quad (2.40)$$

Dit is equivalent aan de abundanties en P waarde te bepalen uit sectie 2.3.2. Deze waarden worden terug ingevuld in b en c .

Om de schaduw niet mee te nemen moeten b en c sommeren tot een. Dus kan volgende substitutie doorgevoerd worden:

$$b'_i = \frac{b_i}{\sum_j b_j + \sum_j c_j} \quad (2.41)$$

$$c'_i = \frac{c_i}{\sum_j b_j + \sum_j c_j} \quad (2.42)$$

Merk op dat deze niet alleen na het minimaliseren moet gebeuren, maar ook in de tussenliggende functie waarop het minimalisatieproces gebeurt.

?

Merk op dat een systeem dat schaduw meeneemt extra locale minima genereert in de randpunten, zodat dit slechte oplossingen geeft met het `fmincon` algoritme, aangezien dit algoritme zoekt naar locale minima, terwijl de oplossingen van de ontmenging liggen in de globale minima.

Hoofdstuk 3

Spectraalontmenging met meerdere eindmembers

In het Engels wordt dit “Multiple Endmember Spectral Mixing Analysis” genoemd, vandaar dat de afkorting “MESMA”.

3.1 Variabiliteit

Dit onderdeel is gedeeltelijk gebaseerd op *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*⁶.

De bedoeling is dat elk reflectiespectrum of albedo gekoppeld wordt aan een specifieke stof. Maar als er gekeken wordt naar bijvoorbeeld bomen, asfalt of gras hebben deze vele mogelijke spectra die deze kunnen reflecteren. Dit probleem kan opgelost worden door een databank aan te leggen van elke stof met daarin elk mogelijk reflectiespectrum van deze stof. Dan kan bij het ont mengen voor elke pixel uit elke databank de best passende pixel gekozen worden en op basis daarvan ontmengd.

3.1.1 MESMA

In de praktijk wordt dit gedaan door elke pixel te ont mengen ten opzichte van elke combinatie van spectra uit datasets of deelverzamelingen van datasets.

Een bepaalde pixel kan niets of een verwaarloosbare abundantie hebben voor een bepaalde eindmember. Daarom moeten we niet uit elke dataset een spectrum halen, maar uit een gegeven deelverzameling.

Voor elke pixel wordt voor elke deelverzameling voor elke combinatie het spectrum ontmengd. Dit gebeurt op de volgende manier.

Er wordt gelopen over alle pixels. Aangezien er geen interpixel interacties zijn kunnen de pixels gewoon worden gelineariseerd. Daarna wordt er voor elke pixel gelopen over alle mogelijke deelverzamelingen.

⁶ Rob Heylen, Alina Zare, Paul Gader, and Paul Scheunders, *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*

Binaire selectie van deelverzamelingen

Voor elke deelverzameling kan elke eindmember wel of niet bijgevoegd zijn. Bijgevolg gegeven p het aantal databanken, dan zijn er 2^p mogelijke deelverzamelingen. Deze kunnen gedefinieerd worden door alle nummers van 0 tot $2^p - 1$ binair uit te schrijven en elk cijfer te verbinden met een enkele eindmember. Als er bijvoorbeeld 4 eindmembers zijn worden de getallen van 0 tot 15 binair uitgeschreven. Neem bijvoorbeeld het getal 11, binair is dit 1011, en dus is de elfde deelverzameling degene die het de eerste, derde en vierde materiaal bevat. Merk op dat voor het werkelijk implementeren er vanaf 1 geteld moet worden, in plaats van 0, omdat 0 de lege verzameling is.

Overvloedige tellers

Om voor elke dataset over alle combinaties te lopen, kan de methode van de “overflowing counters” gebruikt worden. Dit betekent dat de teller een lijst van getallen is en dat telkens het eerste getal geïncrementeerd wordt. Wanneer een getal zijn maximum bereikt, wordt deze in de plaats naar nul gezet en wordt het volgende getal geïncrementeerd. Dit wordt herhaald tot het laatste getal zijn maximum bereikt. Een voorbeeld hiervan in het dagelijkse leven is een analoge kilometerteller.

Men kan in het lineaire geval de oplossingen met negatieve abundanties weglaten, zodat het niet negatief zijn niet geforceerd wordt in het ontmengingsalgoritme, maar gedaan wordt door het selectiealgoritme. Voor het multilineaire geval is dit niet nodig, aangezien de voorwaarden bepaald worden door het minimalisatiealgoritme.

3.1.2 Selecteren versus ontmengen, het semilineair model

De ontmengingsmethode voor dit systeem kan in principe vrij gekozen worden, maar in het algemeen wordt lineair ontmengen gebruikt. Dit heeft als voordeel dat dit een snel en vectoriseerbaar algoritme is, en het kan versneld worden door middel van ‘Angle Minimalisation’⁶. Als men het multilineair ontmengen uit het vorige hoofdstuk zou gebruiken, zou dit een ontzettend traag algoritme worden. Voor elke pixel voor elke deelverzameling voor elke combinatie loopt dit algoritme, dat ongeveer 0.1 seconden duurt. Zelf met de kleine dataset die gebruikt zal worden in het volgende hoofdstuk, duurt dit 3 uur voor elke pixel. Wat we kunnen doen is voor het selecteren van materialen uit de dataset gebruik maken van het lineaire systeem, en voor het werkelijk ontmengen kunnen we gebruik maken van het multilineaire model. Verder in dit verslag zullen we dit het semilineair model noemen.

⁶ Rob Heylen, Alina Zare, Paul Gader, and Paul Scheunders, *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*

3.2 Juistheid van het semilineair model

In deze sectie testen we hoe nauwkeurig het semi-lineair model is, in vergelijking met het lineaire en multilineaire model.

Een eerste punt waarop we kunnen vergelijken is de looptijd van elk algoritme. Dit staat beschreven in sectie 3.2.2, maar het is eenvoudig in te zien dat het multilineaire systeem een veel langere looptijd heeft dan het lineaire of het semilineaire. De grote bottleneck is de functie `fmincon`, die ongeveer 0.1 seconden duurt om een gegeven functie (in dit geval de reconstructie-error) te minimaliseren. Het lineaire model heeft deze functie niet nodig, het semilineaire model een enkele keer, maar het multilineaire model moet deze functie uitvoeren voor elke mogelijke combinatie van eindmembers. Dit is het product van het aantal elementen in elke verzameling in de bibliotheek, voor elke deelverzameling, wat een groot getal is. Daarom is het efficiënter om een model te construeren waarvan de reconstructie-error en alle data van het multilineaire model gekend zijn, zodat de andere modellen ermee vergeleken kunnen worden. Dit wordt gedaan in de volgende subsectie. In sectie 3.2.2 worden alle drie de modellen toegepast op een steekproef uit werkelijke experimentele data.

3.2.1 Theoretische controle

Om te testen of de benadering die in het vorige onderdeel gemaakt is geldig is, wordt gebruik gemaakt van volgende methode. Hierbij is gebruik gemaakt van een bestaande, experimenteel gemeten bibliotheek, afkomstig uit de *Alina dataset*⁴.

1. Als eerste wordt een ‘pixel’ gecreëerd met willekeurige abundanties. Als men gewoon een uniforme verdeling neemt en deze daarna normeert, bestaat er een grotere kans dat de pixels ongeveer evenredig verdeeld zijn, en weinig kans dat deze bijna zuiver zijn. Dit is in tegenstelling met de werkelijkheid waar de overgrote meerderheid van de pixels zuiver is. Daarom wordt er gebruik gemaakt van de Dirichlet verdeling, die een evenredige verdeling in de genormeerde simplex weergeeft.
2. Voor elke eindmember in bovenstaande pixel wordt een willekeurig spectrum gekozen uit de respectievelijke bibliotheek.
3. Deze pixel wordt gemengd aan de hand van het multilineaire model. Hierdoor zal als dit ontmengd wordt de reconstructie-error per definitie nul zijn, tenzij voor numerieke imperfecties. De grootste bijdrage van numerieke errors is de stopvoorwaarde van de functie `fmincon`, die voor een error zorgt van ongeveer 10^{-6} . De P waarde voor dit model wordt met de hand gekozen.
4. Voor het gemengde spectrum uit de vorige stap worden via het lineaire model de ‘correcte’ spectra uit de bibliotheek bepaald.
5. De pixel wordt ontmengd aan de hand van de gevonden elementen in de bibliotheek, op zowel de lineaire als de multilineaire methode.

⁴ Xiaoxiao Du, Alina Zare, Paul Gader, and Dmitri Dranishnikov, *Spatial and spectral unmixing using the beta compositional model*, Journal of selected topics in applied earth observation and remote sensing **7** (2014), no. 6, 1994–2003

Deze procedure kan worden herhaald voor verschillende waarden voor abundanties en P . De waarden worden telkens uitgemiddeld voor verschillende pixelabundanties voor een constante P , om willekeur weg te werken. Hieruit kan ook door middel van de standaardafwijking de foutenvlag bepaald worden. Uiteindelijk zijn we geïnteresseerd in volgende grootheden:

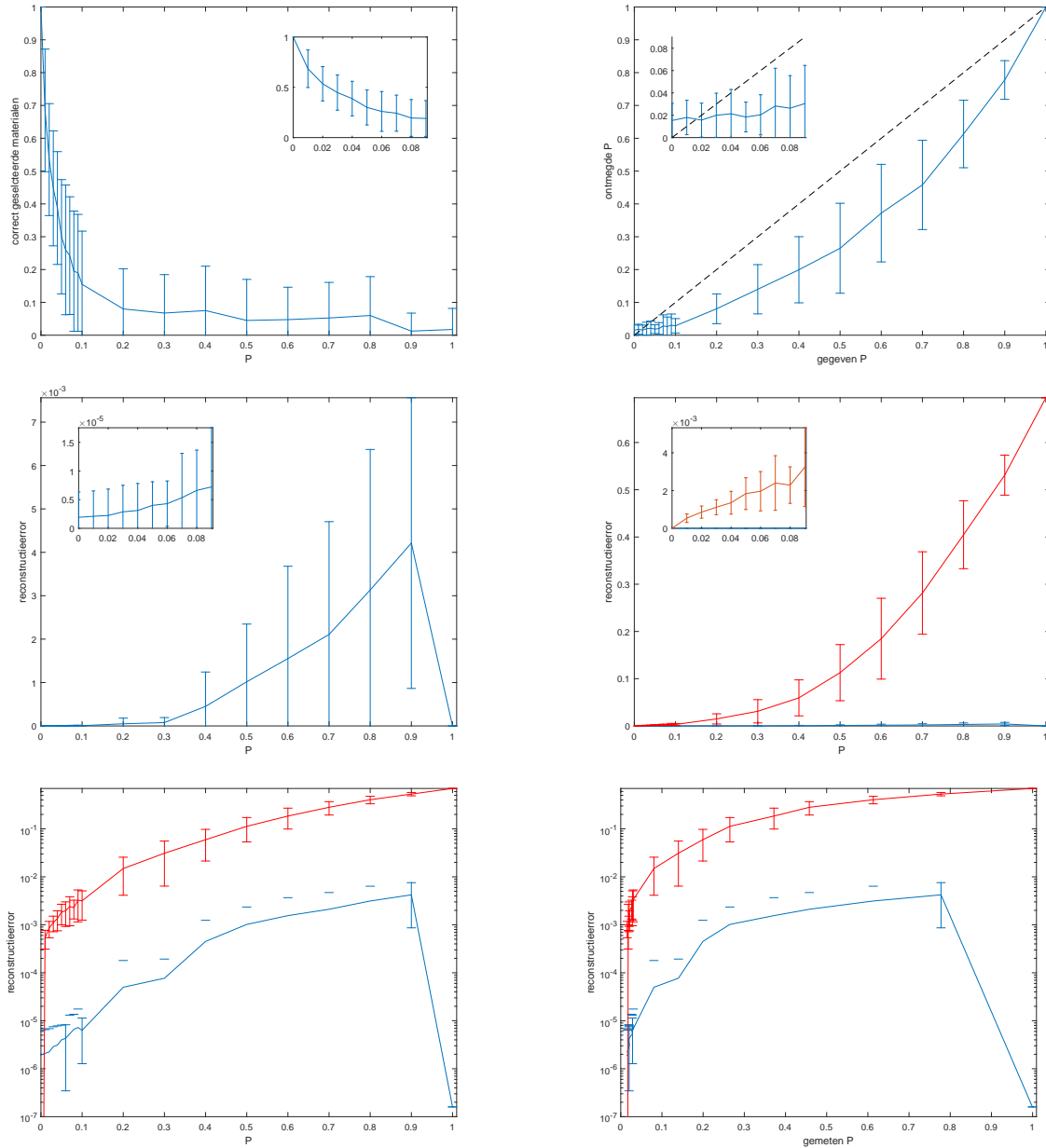
- ‘correctheid’: Dit is een getal tussen 0 en 1 dat aangeeft hoeveel spectra er correct gekozen zijn uit de bibliotheek, gedeeld door het totale aantal spectra.
- reconstructie-error: De reconstructie-error van het herberekenen van de nieuwe data.
- gemeten reflectie: de P waarde gevolgd uit de nieuwe set van spectra. Als onze benadering correct is zou dit gelijk moeten zijn aan P .
- maximale hoek: Dit is de hoek⁶ tussen het gegeven en het geselecteerde spectrum, het maximaal genomen over alle eindmembers. Merk op dat tussen de verschillende pixels het gemiddelde gebruikt wordt, maar tussen de verschillende eindmembers het maximum. Als het correcte spectrum gekozen wordt is deze 0, en tussen twee willekeurige spectra is deze rond de 0.7. Rond de 0.3 is meestal een goede waarde om te zeggen dat twee spectra op elkaar lijken.

De verschillende data voor deze waarden kan gevonden worden in figuur 3.1. Het eerste wat kan opgemerkt worden is dat de standaardafwijking overal vrij groot is, en dat bijgevolg het resultaat sterk afhangt van de abundantie in de verschillende pixels. Als we kijken naar de reconstructie-error zien we dat deze relatief klein blijft voor lage P waarden. Aangezien voor hogere waarden de benadering met de albedos gemaakt in vorige sectie toch niet meer geldt, is dit geen probleem, aangezien beide modellen daar niet meer geldig zijn. In beide gevallen is de reconstructie-error ongeveer twee grootteordes kleiner dan die van het lineaire model. De rede dat de reconstructie-error keldert voor een waarde in de buurt van een, is omdat het mengingsalgoritme niet meer correct werkt voor deze waarden, en deze ook niet fysisch relevant is. Als de reflectie 1 is, zal een lichtstraal blijven reflecteren en nooit op de detector vallen.

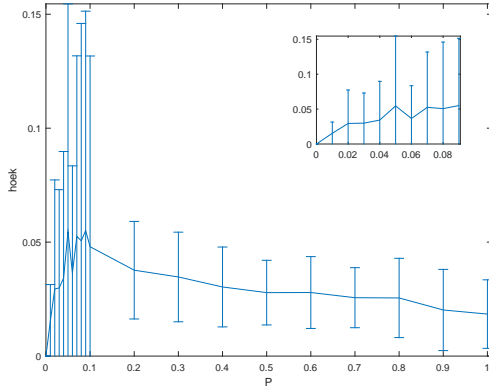
Als we kijken naar de ‘correctheid’ zien we dat de meeste materialen niet correct geselecteerd worden, aangezien dat de waarde voor $P = 0.03$ al onder de helft ligt. Dit heeft weinig invloed op de reconstructie-error, aangezien het anders geselecteerde materiaal een goede benadering is voor het oorspronkelijke spectrum.

Kijken we naar de gemeten P waarden dan zien we dat deze consequent lager zijn dan de gegeven P waarden. Dit is wat verwacht wordt aangezien de elementen geselecteerd zijn met een algoritme dat lineair is, wat wil zeggen $P = 0$. Daarom gaan ‘meer lineaire’ ontmengingen sneller gekozen worden en wordt de interne reflectie dus lager. Dit is een probleem om bij een ontmengde waarde te bepalen hoe goed de reconstructie-error nog is aangezien deze afhankelijk is van P en we de ‘echte’ P niet kunnen meten, alleen de ‘gemeten’ P . Daarom staat er nog een extra grafiek, namelijk de reconstructie-error in functie van de gemeten P in plaats van de echte P .

⁶ Rob Heylen, Alina Zare, Paul Gader, and Paul Scheunders, *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*



Figuur 3.1: Vergelijking tussen het lineair, semilineair en multilineair model. Voor elke P waarde zijn er 100 pixels berekend. Rood is steeds het lineaire geval en blauw is het semilineair geval. Merkt trouwens op dat wanneer het eindpunt van de onderste foutenvlag onder nul ligt, alleen de bovengrens getekend is en niet de foutenvlag zelf op de logaritmische grafieken. Deze figuren zijn gemaakt met *matlab*⁷



Figuur 3.2: Gevonden hoek in functie van de reflectie. Men ziet dat de foutenvlaggen veel groter zijn dan de data zelf. Deze figuren zijn gemaakt met *matlab*⁷

Om te weten te komen hoe goed de nieuwe bibliotheekelementen lijken op de oude, kan gebruik worden gemaakt van de hoek tussen deze twee spectra. Maar zoals te zien in figuur 3.2 zijn de foutenvlaggen op deze waarden veel groter dan de waarden zelf, dus kan uit deze grafiek weinig afgeleid worden.

maximale reflectie

Op de grafieken is te zien dat de reconstructieerror van het semilinaire model exact nul wordt als $P = 1$. Op zich is dit geen probleem aangezien deze situatie in werkelijkheid niet zal voorkomen en ook niet fysisch relevant is. Als een lichtstraal een kans van 1 heeft om terug op het materiaal te vallen, zal deze nooit op de detector vallen. Uit vergelijking 35 volgt:

$$\mathbf{x} = \frac{\sum_{i=1}^p (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i}{1 - \sum_{i=1}^p P_i a_i \mathbf{w}_i} \quad (3.1)$$

Vullen we $P \rightarrow 1$ in dan krijgt men

$$\mathbf{x} = 0 \quad (3.2)$$

Dit geldt zowel voor de het reconstructiespectrum als het gemengde spectrum, en de reconstructieerror is dus de norm van de nulvector, en deze is nul.

3.2.2 Experimentele controle

In deze sectie worden de reconstructie-errors en waarden van werkelijke data uit de *Alina dataset*⁴ bepaald, aan de hand van de verschillende modellen. Hierbij ontmenging we de derde rij van pixels. Dit zorgt ervoor dat er nog maar 19 pixels ontmengd moeten worden in plaats van het volledige aantal pixels uit de dataset, wat dit haalbaar maakt voor het multilineaire algoritme te gebruiken. De x-as op de grafieken verderop die positie-gelabeld is komt overeen met de positie van de waarden op de x-as.

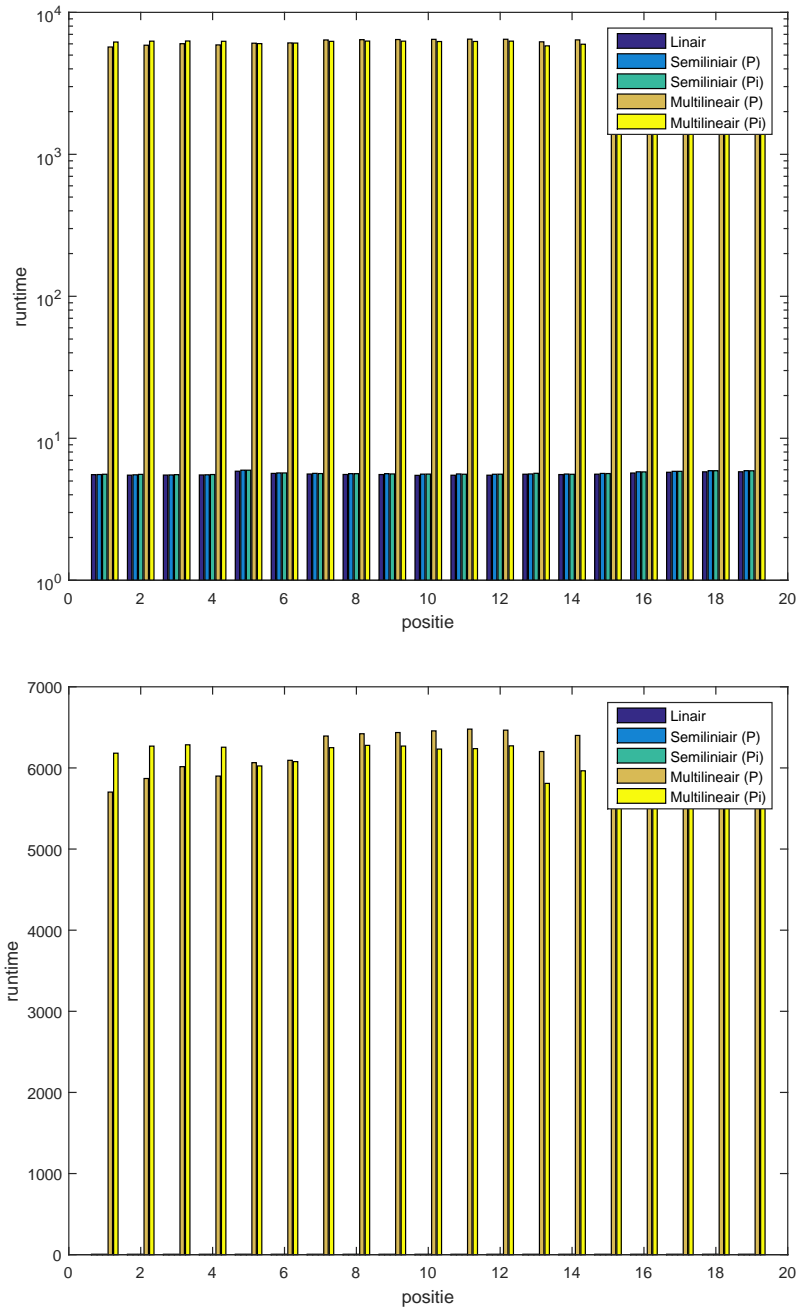
In figuur 3.3 is de looptijd van verschillende pixels weergegeven. Hierop is eenvoudig te zien dat het semilineaire model en het lineaire model ongeveer dezelfde looptijd hebben. Dit is echter voor een kleine dataset, merk op dat voor een groter aantal pixels het semilineaire model slechter schaalst dan het lineaire model, en voor een grotere bibliotheek ze allebei gelijkmatig schalen. De bottleneck zal in werkelijkheid altijd zitten in de bibliotheken en niet in de werkelijke ontmenging. In het multilineaire model zijn deze twee niet meer gescheiden en zien we dus een enorme toename in looptijd.

In figuur 3.4 zijn de reconstructie-errors weergegeven. Merk op dat per definitie de reconstructie-error van het lineaire model groter is dan deze van het semilineaire model en deze van het multilineaire model, op numerieke berekeningserrors na. Ook is de reconstructie-error van de afhankelijke kansen per definitie kleiner dan deze van de onafhankelijke parameters. Maar zoals te zien op figuur 3.4 is deze vermindering enorm klein. Aangezien dit een verdubbeling van de vrije parameters inhoudt, is dit geen verbetering op het model. Anderzijds is te zien dat voor sommige pixels het semilineaire model een enorme verbetering is op het lineaire model, en soms dat beide modellen equivalent zijn. Aan de andere kant hebben het semilineaire en het multilineaire model bijna altijd een weinig verschillende reconstructie-error.

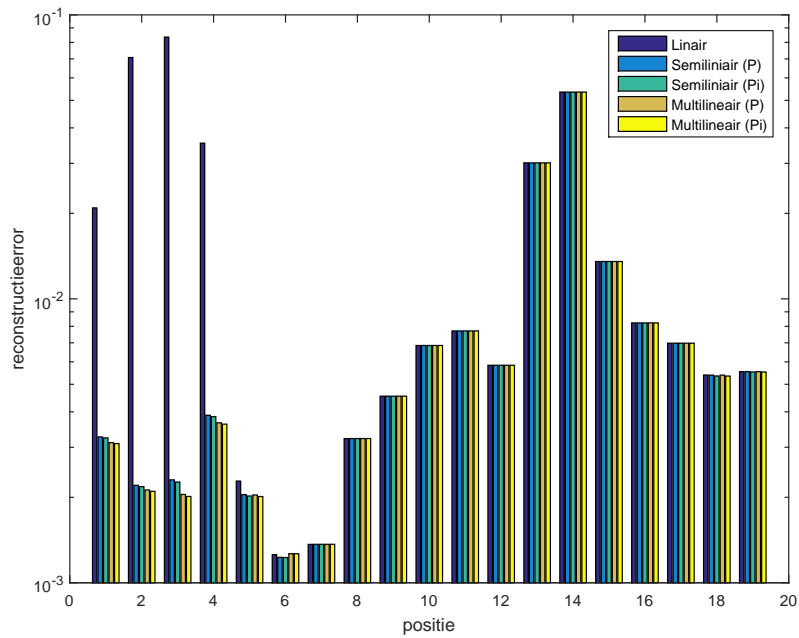
Ter conclusie is het semilineaire model een sterke verbetering in looptijd ten opzichte van het multilineaire model, met een zeer klein kwaliteitsverlies, terwijl dit ten opzichte van het lineaire model een sterke kwaliteitswinst is voor sommige pixels zonder te verliezen aan snelheid.

In figuur 3.5 is enerzijds het quotiënt van de lineaire en semilineaire reconstructie-error weergegeven en rechts de P waarde berekend aan de hand van het semilineaire model. Men ziet dat de pixels waar het semilineaire algoritme een sterke verbetering geeft qua reconstructie-error, ook een hogere P waarde hebben. Dit is logisch, aangezien het lineaire algoritme ervan uitgaat dat $P = 0$. Merk ook op dat dit overeenkomt met de ground-truth voor eikenbomen. Aangezien eikenbomen een fractalischer oppervlak hebben dan bijvoorbeeld asfalt, wat meer naar rechts in de afbeelding ligt, verwachten we hier ook een hogere P waarde. Ter conclusie: het semilineaire model is vooral een verbetering ten opzichte van het lineaire model voor gebieden met meer fractalische oppervlakken, zoals vegetatie.

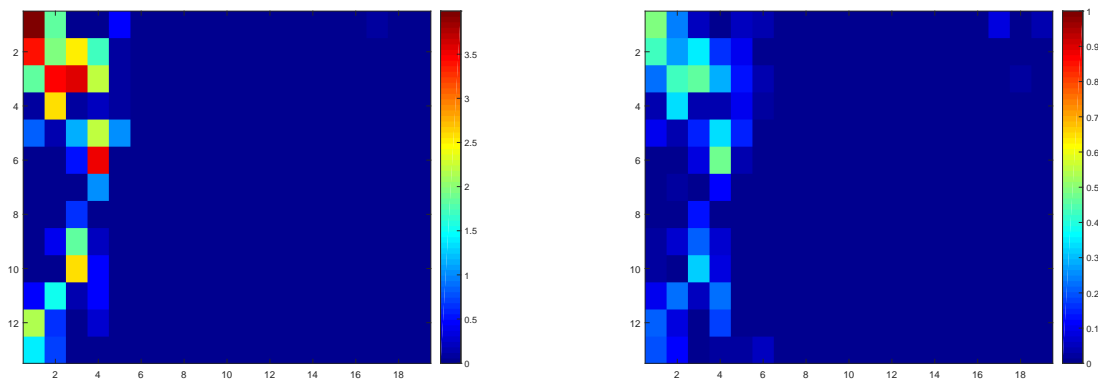
⁴ Xiaoxiao Du, Alina Zare, Paul Gader, and Dmitri Dranishnikov, *Spatial and spectral unmixing using the beta compositional model*, Journal of selected topics in applied earth observation and remote sensing **7** (2014), no. 6, 1994–2003



Figuur 3.3: Looptijd van het programma voor de verschillende modellen. (P) betekent een onafhankelijke kans, (Pi) betekent een eindmember afhankelijke kans. Er is zowel een lineaire als logaritmische versie weergegeven. Deze figuren zijn gemaakt met *matlab*⁷



Figuur 3.4: Reconstructie-error voor de verschillende modellen. (P) betekent een onafhankelijke kans, (Pi) betekent een eindmember afhankelijke kans. Deze figuren zijn gemaakt met *matlab*⁷



Figuur 3.5: Relatieve reconstructie-error en reflexie voor de Alina dataset. Deze figuren zijn gemaakt met *matlab*⁷

	$P > 0$	$P > -1$
afhankelijke P	Real	Free
onafhankelijke P	Strict	Strong

Tabel 4.1: Benamingen van de verschillende parameteropties voor multilineair ontmengen

Hoofdstuk 4

vergelijking van verschillende ontmengingsmodellen

4.1 andere modellen

4.1.1 Hoekminimalisatie

4.1.2 Bilineair model

4.2 modeleigenschappen

parametervrijheid

Iteratiesnelheid

Selectiemethode

Ontmengingsmethode

4.2.1 mogelijke verklaringen voor negatieve reflectiekans

naaste buur interactie

albedo vs reflectie

4.3 experimentele vergelijking van verschillende modellen

lineair (600)	2.0071	83.5303	3.0000	0.8162	0.0000	0.0000	0.1838	0.0000	0.0000
strict semilineair (600)	2.0038	2.3042	4.0000	0.4928	0.0000	0.0000	0.5072	0.4538	0.0000
real semilineair (600)	2.0596	2.2637	7.0000	0.2836	0.0000	0.0000	0.7164	0.0078	0.0000
strict AAM ML (600)	0.0897	2.2376	4.0000	0.6209	0.0000	0.2153	0.1638	0.4716	0.0000
strict AAM ML (60)	0.0689	2.3583	4.0000	0.5339	0.0000	0.1338	0.3323	0.4750	0.0000
strong semilineair (600)	1.9998	2.3042	4.0000	0.4928	0.0000	0.0000	0.5072	0.4538	0.0000
free semilineair (600)	2.1052	2.2394	7.0000	0.1534	0.0000	0.0000	0.8466	-0.8858	0.0000
strong AAM ML (600)	0.0872	2.2376	4.0000	0.6209	0.0000	0.2154	0.1637	0.4716	0.0000
strong AAM ML (60)	0.0687	2.2833	4.0000	0.5469	0.0000	0.1229	0.3301	0.4657	0.0000

Tabel 4.2: MyTableCaption

lineair (600)	1.9980	6.9800	3.0000	0.3620	0.1524	0.4856	0.0000	0.0000	0.0000
strict semilineair (600)	2.0328	6.9809	4.0000	0.3612	0.1529	0.4859	0.0000	0.0013	0.0013
real semilineair (600)	2.0736	6.9795	7.0000	0.3543	0.1551	0.4907	0.0000	0.0004	0.0019
strict AAM ML (600)	0.0913	6.9809	4.0000	0.3612	0.1529	0.4859	0.0000	0.0013	0.0013
strict AAM ML (60)	0.0677	8.4695	4.0000	0.1729	0.2774	0.5497	0.0000	0.2399	0.2399
strong semilineair (600)	2.0284	6.9746	4.0000	0.3721	0.1459	0.4820	0.0000	-0.0152	-0.0152
free semilineair (600)	2.1068	6.5928	7.0000	0.2123	0.1368	0.6510	0.0000	-0.8221	-0.1494
strong AAM ML (600)	0.0903	6.9746	4.0000	0.3721	0.1459	0.4820	0.0000	-0.0152	-0.0152
strong AAM ML (60)	0.0681	7.0478	4.0000	0.2386	0.1427	0.6187	0.0000	-0.1453	-0.1453

Tabel 4.3: MyTableCaption

lineair (600)	1.9700	7.7091	3.0000	0.7467	0.1712	0.0820	0.0000	0.0000	0.0000
strict semilineair (600)	2.0204	7.7101	4.0000	0.7467	0.1712	0.0821	0.0000	0.0000	0.0000
real semilineair (600)	2.0519	7.7101	7.0000	0.7467	0.1712	0.0821	0.0000	0.0000	0.0000
strict AAM ML (600)	0.1005	7.7101	4.0000	0.7467	0.1712	0.0821	0.0000	0.0000	0.0000
strict AAM ML (60)	0.0681	16.5107	4.0000	0.6999	0.2901	0.0101	0.0000	0.1530	0.1530
strong semilineair (600)	2.0259	1.7678	4.0000	0.8812	0.0538	0.0650	0.0000	-0.3051	-0.3051
free semilineair (600)	2.0831	1.6729	7.0000	0.6334	0.2679	0.0987	0.0000	-0.9455	0.8967
strong AAM ML (600)	0.1022	1.7678	4.0000	0.8812	0.0538	0.0650	0.0000	-0.3051	-0.3051
strong AAM ML (60)	0.0682	2.0675	4.0000	0.8478	0.0688	0.0834	0.0000	-0.2422	-0.2422

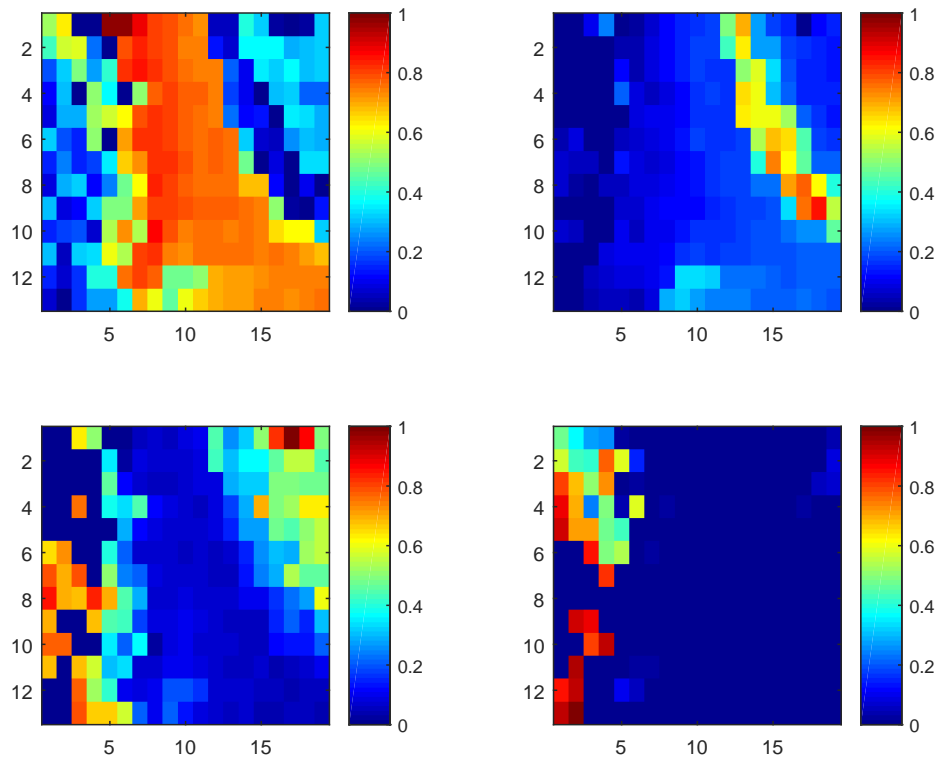
Tabel 4.4: MyTableCaption

Hoofdstuk 5

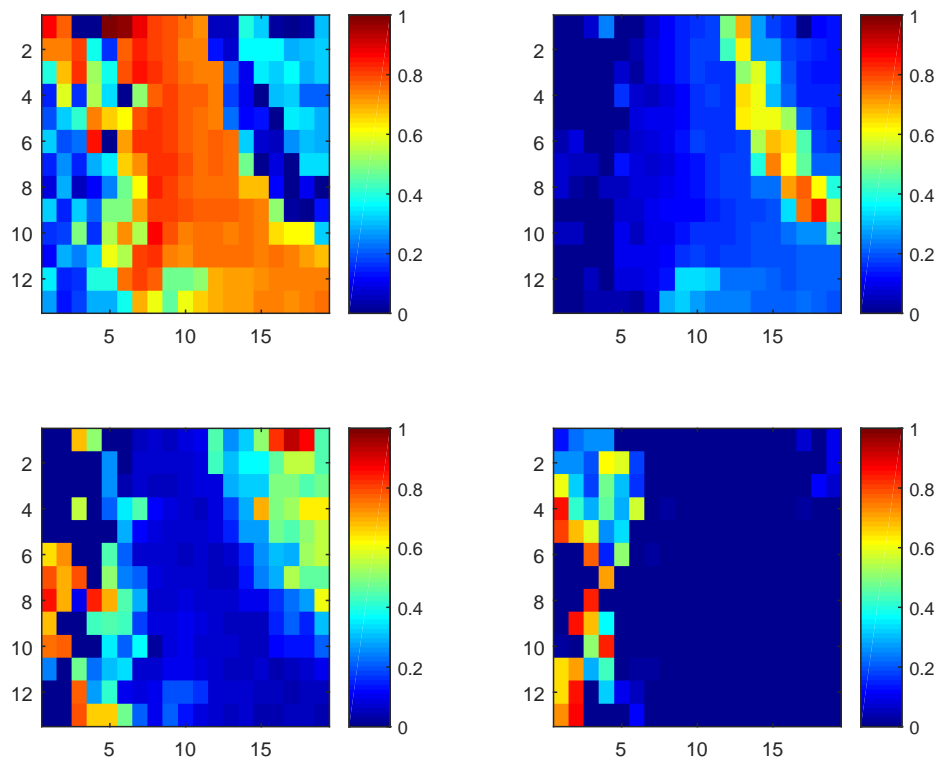
toepassen op datasets

In dit hoofdstuk wordt de hierboven geconstueerde methode toegepast op de *alina dataset*⁴.

⁴ Xiaoxiao Du, Alina Zare, Paul Gader, and Dmitri Dranishnikov, *Spatial and spectral unmixing using the beta compositional model*, Journal of selected topics in applied earth observation and remote sensing **7** (2014), no. 6, 1994–2003



Figuur 5.1: ontmenging van de *alina dataset*⁴ aan de hand van het semilineaire model. Deze figuur is gemaakt met *matlab*⁷



Figuur 5.2: ontmenging van de *alina dataset*⁴ aan de hand van het lineaire model. Deze figuur is gemaakt met *matlab*⁷

Appendices

Bibliografie

- [1] Jose M. Bioucas-dias, Antonio Plaza, Gustavo Camps-Valls, Paul Scheunders, Nasser M. Nasrabadi, and Jocelyn Chanussot, *Hyperspectral remote sensing data analysis and future challenges*, Geoscience and remote sensing magazine (2013), 6–36.
- [2] Jose M. Bioucas-dias, Antonio Plaza, Nicolas Dobigeon, Mario Parente, Qian Du, Pual Grader, and Jocelyn Chanussot, *Hyperspectral unmixing overview: Geometrical, statistical and sparse regression based approaches.*, Journal of selected topics in applied earth opservation and remote sensing **5** (2012), no. 2, 354–376.
- [3] Canada centre for remote sensing, *Fundamentals of remote sensing*, Natural Resources Canada.
- [4] Xiaoxiao Du, Alina Zare, Paul Gader, and Dmitri Dranishnikov, *Spatial and spectral unmixing using the beta compositional model*, Journal of selected topics in applied earth opservation and remote sensing **7** (2014), no. 6, 1994–2003.
- [5] Rob Heylen and Paul Scheunders, *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*.
- [6] Rob Heylen, Alina Zare, Paul Gader, and Paul Scheunders, *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*.
- [7] MATLAB, *version 8.5.0 (r2015a)*, The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2015.