

UNIVERSITEIT ANTWERPEN

FYSICA

MASTERPROEF

Semilinaire spectraalanalyse

Auteur:

Thorvald Dox

Promotor:

Paul Scheunders

Copromotor:

Rob Heylen



Inhoudsopgave

Abstract (english)	3
Abstract (Nederlands)	4
Structuur van deze thesis	5
Inleiding	6
0.1 toepassingen	7
1 ontmengen	9
1.1 spectrale analyse	10
1.1.1 reflectie	10
1.1.2 atmosferische correctie	11
1.2 ontmengen	11
1.2.1 vrijheidsgraden	12
1.3 lineair ontmengen	12
1.3.1 implementatie in matlab	12
2 Bestaande methodes	13
2.1 multilineair ontmengen	13
2.1.1 berekening	13
2.1.2 reflectancy vs albedo	13
2.1.3 afhankelijke vs onafhankelijke P waarden	13
2.1.4 Ondergrens van P waarde	13
2.1.5 implementatie in matlab	13
2.2 Variabiliteit	13
2.3 MESMA	14
2.3.1 ontmengingsmethode naar keuz (lineair vs multilineair)	14
2.3.2 implementatie in matlab	14
2.4 AAM	14
2.4.1 implementatie in matlab	14
3 Nieuwe Methodes	15
3.1 Semi-linear model	15
3.1.1 Theoretische controle dmv monte carlo simulaties	15
3.2 multilineair AAM	15

4	experimentele vergelijking van verschillende methodes	16
4.1	looptijd en reconstructie-error	16
4.2	Alina dataset	16
4.3	Lijst en korte uitleg bij alle methodes	16
4.4	Bepreking lineair vs semi-lineair	17
4.5	Bespreking semi-lineair vs multilineair	17
4.6	Bespreking P-afhankelijkheid	17
4.7	Bespreking P-ondergrens	17
4.8	Bepreking multilineair AAM vs semilinair model	17
	Appendices	18
	Bibliografie	20

Abstract

Abstract

Structuur van deze thesis

De inleiding legt uit wat aardopservatie is, welke concepten hiervoor nodig zijn en een aantal toepassingen hiervoor. Dit hoofdstuk is vooral gebaseerd op *Fundamentals of remote sensing*^[3].

Het eerste hoofdstuk gaat over ont mengen. Hier wordt het concept ont mengen uitgelegd, en een voorbeeld gegeven hiervan, namelijk lineair ont mengen.

In het volgende hoofdstuk worden drie bestaande methodes uitgelegd. Het eerste deel gaat over het multilinair model, en is gebaseerd op *A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing*^[5]. De volgende delen gaan over selectiemethoden. Dit zijn methoden ontwikkeld om om te gaan met endmembervariabiliteit. Deze methoden staan beschreven in *Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization*^[6]. Deze methoden zijn volledig gekend in de literatuur maar voor deze thesis zijn deze methoden opnieuw berekend en geïmplementeert.

Het derde hoofdstuk beschrijft twee nieuwe methoden, gebaseerd op de methoden beschreven in het vorige hoofdstuk. Ook wordt er van de eerste methode een numeriek bewijs geleverd dat deze goede resultaten geeft door middel van monte-carlo simulaties.

In het laatste hoofdstuk worden al deze methoden, en een aantal varianten hierop vergeleken aan de hand van een experimentele dataset: de Alina dataset^[4] en wordt besproken welke methodes en varianten het beste zijn in welke situaties.

Inleiding

Aardobservatie is de wetenschap van het bepalen van informatie over het aardoppervlak vanop een afstand. Dit wordt gedaan door het meten en vastleggen van gereflecteerde of uitgezonden energie en het verwerken, analyseren en toepassen van deze informatie. (*Fundamentals of remote sensing*^[3] p5)

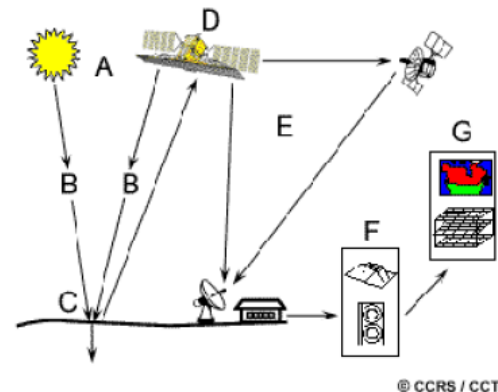
Het gedetailleerde proces verloopt zoals hierna beschreven^[3], en is te zien in figuur 1.

Een lichtstraal ontstaat aan een zo genaamde lichtbron¹. In de meeste gevallen is deze lichtbron de zon. Deze lichtstraal reist door de ruimte en door de atmosfeer, tot deze contact maakt met het materiaal, en hierop een of meerdere keren reflecteert. Daarna reist deze lichtstraal opnieuw door de atmosfeer tot deze contact maakt met een camera op een sateliet. De eigenschappen van deze lichtstraal worden beïnvloed door elk van deze processen.

Elke lichtstraal is een golf in het elektromagnetische spectrum. Deze golf wordt enerzijds bepaald door zijn golflengte, wat de lengte is tussen twee opeenvolgende maxima van de golf, zoals afgebeeld in figuur 2a. Anderzijds wordt de golf bepaald door de intensiteit, wat de grootte is van de piek van elke golf.

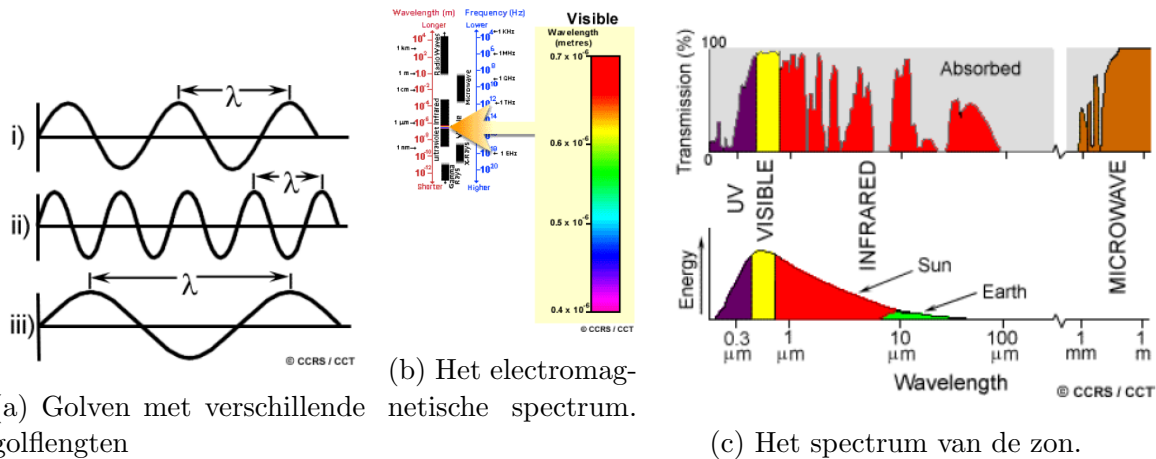
Soms wordt de frequentie van de golf gebruikt om deze te karakteriseren, maar die kan bepaald worden uit de golflengte en de snelheid van het licht. In werkelijkheid is een lichtstraal niet een golf, maar een combinatie van verschillende golven met elk hun golflengte en intensiteit. De bijbehorende intensiteit bij elke golflengte wordt het spectrum genoemd.

Gewone beelden van een camera bevatten drie kleuren, elke passend bij een specifieke golflengte. De keuze voor deze drie kleuren, namelijk rood, groen en blauw, is een gevolg van de beperkingen van het menselijk oog. Dit zijn namelijk de kleuren dat een mens kan waarnemen. Om dit beeld digitaal te representeren, moet het beeld opgedeeld worden in kleine, even grootte, vierkante elementen, genaamd pixels. Elk van deze pixels bevat voor elke kleur een waarde, die de intensiteit van deze kleur in dit vierkant weergeeft. Hyperspectrale cameras werken in essentie op dezelfde manier, alleen detecteert deze camera niet alleen de



Figuur 1: Aardobservatie Deze afbeelding komt uit *Fundamentals of remote sensing*^[3]

¹In het geval dat men geïnteresseerd is in het termisch infrarood spectrum, is er geen lichtbron nodig aangezien materialen op kamertemperatuur van nature dit soort licht uitstralen, ten gevolge van black body radiation.



Figuur 2: elektromagnetische golven. Deze afbeeldingen komen uit *Fundamentals of remote sensing*^[3]

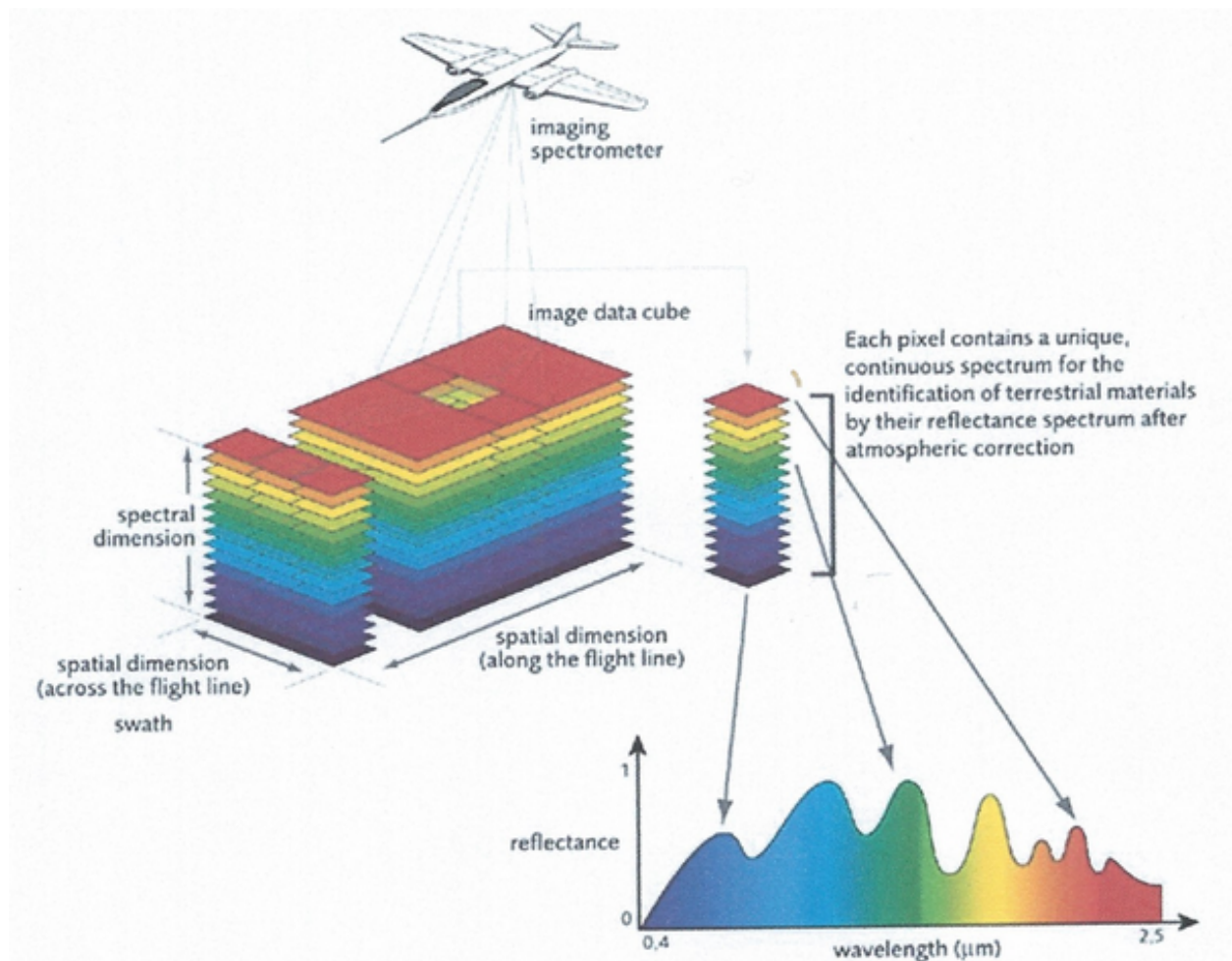
hoeveelheid rood, groen en blauw, maar detecteert deze een groot aantal banden. Doordat deze banden meer informatie bevatten dan de banden van een gewone camera, kan hier meer informatie uit gehaald worden. Omdat de zon vooral licht uitzendt in het infrarood, zichtbaar licht en ultraviolet worden er vooral banden gebruikt in dit spectrum, zoals te zien in figuur 2c.

Het doel van spectrale analyse is het bepalen van de hoeveelheden van elk materiaal in een specifieke pixel, gegeven het spectrum van deze pixel. Verschillende methoden hiervoor worden beschreven in deze thesis.

0.1 toepassingen

Een veelgebruikte toepassing van aardobservatie is het in kaart brengen van landbouwgewassen^[3]. Men kan niet alleen het soort gewas op een akker in kaart brengen, maar ook onder andere de gezondheid en verwachte oogst van verschillende gewassen. Deze informatie is nuttig voor de landbouwers zelf, omdat deze aan de hand van de data kunnen bepalen welke gewassen het beste groeien op welke plaats en wanneer er het best gezaaid of geoogst wordt. Ook is dit nuttig voor overheden en verzekeraars, omdat deze kunnen nagaan welke planten er geplant worden, kunnen voorspellen wat de oogst gaat zijn en kunnen bepalen wat de schade is na een droogte of storm. In het verleden werd het in kaart brengen van gewassen gedaan door steekproeven te nemen met de hand vanop de grond, maar aardobservatie is nauwkeuriger, goedkoper en kan eenvoudiger gestandaardiseerd worden.

Een andere toepassing is geologie. Men kan het soort gesteente van het aardoppervlak in kaart brengen, maar ook de formatie en zelfs gesteentes onder het aardoppervlak. Een van de voor de hand liggende toepassingen hiervan is de mijnbouw, maar dit kan ook gebruikt worden voor het voorspellen van aardbevingen, aardverschuivingen en vulkanisme. Daarom kan dit gebruikt worden voor het plannen van wegen, gebouwen en andere structuren. Meestal wordt deze data gebruikt in combinatie met data verzameld op de grond, namelijk radarbeelden.



Figuur 3: Opbouw van een hyperspectraal beeld. Deze afbeelding komt uit *Fundamentals of remote sensing*^[3]

Hoofdstuk 1

ontmengen

Een pixel in een hyperspectraal beeld bevat meerdere materialen. Een van de belangrijkste oorzaken is het gevolg van de beperkte resolutie van de camera. Echter, de hoeveelheid licht dat op de camera valt is beperkt, en moet verdeelt worden over de verschillende pixels en de verschillende banden. Dit betekent dat wanneer de pixels te klein worden, elke pixel te weinig licht krijgt en de signaal ruis verhouding te laag wordt. En aangezien de licht bestaat uit fotonen, is er een limiet van de gevoeligheid van de camera, en is de enige methode om de gevoeligheid te verhogen een langere belichtstijd. Dit zorgt voor een vergroting van de ruis en is niet haalbaar voor een satelliet in een baan rond de aarde. Maar zelfs als het praktisch haalbaar was om de resolutie kleiner te maken, ligt het probleem vooral in de fractalische eigenschappen van veel objecten. Neem nu bijvoorbeeld een bos. Als we een zeer grove resolutie gebruiken, vallen er verschillende soorten bomen in een enkele pixel. Als de pixels kleiner worden, kunnen bomen al van elkaar onderscheiden worden, maar de takken van verschillende bomen nog niet. Zelfs als we enkel een blad beschouwen zijn er nog verschillende materialen, aangezien de nerven van het blad een ander materiaal hebben dan de bladmoes. Een ander voorbeeld zijn mineralen. Een gesteente bevat verschillende mineralen, maar om deze van elkaar te kunnen onderscheiden moet de pixelgrootte al op microscopisch niveau zijn.

Hierom is het van belang om een spectra van een pixel, dat een combinatie is van de spectra van de verschillende materialen in deze pixel, te kunnen “ontmengen”. Hierbij zijn we specifiek geïnteresseerd in de abundantie van elk materiaal: een getal dat het gedeelte van de lichtstralen dat afkomstig is van dat specifiek materiaal weergeeft. Aangezien dit een goede maat is voor de aanwezige hoeveelheid van een bepaald materiaal in een pixel, is dit de belangrijkste parameter waarin we geïnteresseerd zijn.

1.1 spectrale analyse

Het spectra van licht kan beschreven worden als een wiskunde functie die een frequentie omzet in een intensiteit. In werkelijkheid bevat een hyperspectraal beeld niet de volledige functie, maar bevat deze tweehonderd waarden in deze functie, de zogenoemde banden. Dit matlab^[7] zal dit worden opgeslagen als een driedimensinale tensor, waarbij de verschillende assen de x positie, y positie en band van de pixel weergeven. In deze thesis zijn we niet geïnteresseerd in interpixel-interacties, wat betekend dat het materiaal in een pixel geen invloed heeft op het spectrum van andere pixels. Daardoor kan de drie-dimensionale matrix worden omgezet in een matrix, waar de rijen de verschillende pixels zijn en de colommen de de banden.

Endmembers zijn de spectra van de verschillende materialen waarin het beeld wordt ontmengd. Echter, om een goede theorie te construeren om deze spectra te ontmengen, moet eerst een model ontwikkeld worden om deze spectra te ontmengen. De meest voor de hand liggende methode is de lineaire methode, waar het spectrum van elke endmember wordt vermenigvuldigd met de abundantie, en dan worden alle spectra opgeteld.

1.1.1 reflectie

Wanneer een lichtstraal invalt op een materiaal reflecteert deze een gedeelte van dit licht en absorbeert dit de rest. De hoeveelheid energie van deze lichtstraal die gereflecteerd wordt is afhankelijk van het materiaal en van de golflengte van het licht. In deze thesis worden hiervoor drie aannames gemaakt. Als eerste heeft de gereflecteerde lichtstraal dezelfde golflengte als het invallende licht. Als tweede aanname wordt beweert dat de intensiteit van de gereflecteerde straal recht evenredig is aan de intensiteit van de invallende straal. Als laatste aanname wordt aangenomen dat als een invallende straal en gegeven combinatie is van verschillende golflengten, de reflectie de som is van de reflecties van elke afzonderlijke golflengte. Deze drie aannames zijn correct volgens de klassieke fysica, maar hier zitten correcties op van kwantummechanische effecten. Deze zullen echter klein genoeg zijn dat deze als deel van de ruis beschouwd kunnen worden.

De intensiteit van de uitgaande straal kan geschreven worden als volgt:

$$E_{out}(\lambda) = R_{\lambda}E_{in}(\lambda) \quad (1.1)$$

Dit is een stelsel van vergelijkingen (een vergelijking voor elke waarde van λ , wat overeenkomt met een band in het spectrum). Zowel de intensiteiten als de reflectiecoëfficiënten kunnen samengesteld worden tot een vector, en dan geldt

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \odot \mathbf{y} \quad (1.2)$$

met \odot het Hadamard ofwel elementwys product. De vector \mathbf{R} noemt men het spectrum van het materiaal. Merk op dat in tegenstelling tot het spectrum van licht, dit geen intensiteiten bevat maar dimensielose voorfactoren. Dus hoewel deze beide concepten allebei spectrum heten en vergelijkbare vormen en gebruiken hebben, zijn deze in wezen verschillend.

1.1.2 atmosferische correctie

Wanneer de lichtbron die we beschouwen uniform and genormaliseerd is, is het spectrum van het materiaal gelijk aan het spectrum van het gedetecteerde licht. Alleen is de in werkelijkheid gebruikte lichtbron -meestal is dit de zon- niet uniform. En zijn er verschillende effecten die de lichtstraal beïnvloeden^[3] zoals verschuiving, atmosferische verstrooiing, rayleigh verstrooiing, Mie verstrooiing, nonselectieve verstrooiing, atmosferische absorpsie, ozon absorpsie, CO_2 *absorpsie en interpixel verstrooiing die het spectrum beïnvloeden. De gebruikte datasets in deze thesis zijn al door een algoritme gecorrigeerd voor al deze effecten, en we kunnen deze dus beschouwen als verlicht door een uniforme lichtbron.

1.2 ontmengen

Bij het ontmengen gaat het erom dat de juiste abundanties en endmembers gevonden worden zodat als deze gemengd worden volgens ons bovengenoemde mixing model, men als uiteindelijk spectrum terug het gemeten spectrum krijgt. In dit hoofdstuk beperken we ons tot de abundanties, het bepalen van de endmembers wordt beschreven in hoofdstuk 2.

Echter, omdat het mixing model slechts een benadering is van de werkelijkheid en omdat op een experimentele meting altijd een vorm van ruis zit, kan het exacte spectrum nooit terug gevonden worden. Er wordt daarom gezocht naar het reconstructiespectrum dat het meeste lijkt op het werkelijke spectrum. De ruis was verondersteld normaal verdeeld ofwel Gaussisch verdeeld te zijn, wat meestal het geval is in de meeste takken van de fysica. Dit is een eenvoudig geval van het centrale-limiet theorema, dat zegt dat de som van een groot aantal kansvariabelen normaal verdeeld is.

Noem \mathbf{x} het gemeten spectrum, en \mathbf{y} het reconstructiespectrum, met $\boldsymbol{\eta}$ de ruis, dan is

$$\mathbf{x} = \mathbf{y} + \boldsymbol{\eta} \quad (1.3)$$

De kans dat \mathbf{x} gemeten wordt, gegeven dat \mathbf{y} het werkelijk gemeten spectrum is, is $f(\boldsymbol{\eta})$, waarbij f de normale verdeling is. Aangezien de normale verdeling alleen afhankelijk is van de kwadratische norm, zijn we ook alleen geïnteresseerd in de kwadratische norm van de ruis. De normale verdeling is ook groter wanneer deze kwadratische norm kleiner is, dus moet om de kans te maximaliseren de norm van de ruis geminimaliseerd worden.

Deze norm kan berekend worden gebruik makend van vergelijking 1.3.

$$|\boldsymbol{\eta}| = |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \quad (1.4)$$

De uitdrukking $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ noemt men de reconstructieerror. Het is deze uitdrukking dat geminimaliseerd moet worden.

Het minimaliseren van een uitdrukking om een waarde te vinden noemt men een optimalisatieprobleem, omdat men op zoek is naar de optimale waarden voor de verschillende parameters.

1.2.1 vrijheidsgraden

In een optimalisatieprobleem noemt men het aantal reële continue variabelen waarvan een variable afhangt de vrijheidsgraden. Wanneer het aantal te bepalen vrijheidsgraden groter is dan het aantal gegeven vrijheidsgraden, dan is het probleem ondergedefinieerd. Dit houdt in dat er meerdere mogelijke oplossingen voor de vrije parameters zijn waarvoor alle voorwaarden voldaan zijn. Als dit voorkomt, is een gevonden oplossing niet met zekerheid de juiste oplossing, en geeft het model dus verkeerde oplossingen terug, die lijken te voldoen aan het systeem.

Het aantal vrijheidsgraden van het gemeten spectrum is per definitie het aantal banden van de gebruikte sensor. Bij de Avari sensor, welke gebruikt is voor de beelden in dit verslag, is dit 200. Maar uit dimensionale analyse volgt dat het werkelijke aantal vrijheidsgraden maar rond de 15 ligt. Als er dus een model gebruikt wordt met meer dan 15 parameters geeft dit per definitie een goed resultaat, zelfs als dit model totaal niet overeenkomt met de werkelijkheid. Wanneer verschillende modellen vergeleken worden, zal een model met meer vrijheidsgraden een lagere reconstructie-error hebben.

1.3 lineair ontmengen

niet-negativiteit

sum to one

1.3.1 implementatie in matlab

Hoofdstuk 2

Bestaande methodes

2.1 multilineair ontmengen

Uitleg → lichtstraal heeft kans om te reflecteren

2.1.1 berekening

2.1.2 reflectancy vs albedo

2.1.3 afhankelijke vs onafhankelijke P waarden

2.1.4 Ondergrens van P waarde

Of dat $P > 0$ moet gebruikt worden als voorwaarde of niet.

2.1.5 implementatie in matlab

2.2 Variabiliteit

- variabiliteit
- bibliotheek → model
- pixel-afhankelijke selectie

2.3 MESMA

- Ontmengen aan de hand van elke subset
- Selectie op basis van niet-negativiteitsvoorwaarde

2.3.1 ontmengingsmethode naar keuz (lineair vs multilineair)

2.3.2 implementatie in matlab

2.4 AAM

- concept hoek in hoogdimensionale ruimtes
- AAM

2.4.1 implementatie in matlab

Hoofdstuk 3

Nieuwe Methodes

3.1 Semi-lineair model

ontkoppeling van Ontmenging in MESMA bij selectie tov ontmenging voor abundancies

3.1.1 Theoretische controle dmv monte carlo simulaties

3.2 multilineair AAM

Hoofdstuk 4

experimentele vergelijking van verschillende methodes

4.1 looptijd en reconstructie-error

4.2 Alina dataset

4.3 Lijst en korte uitleg bij alle methodes

Elke methode is hiervoor beschreven, maar dit beschrijft kort de verschillen in de methodes en hoe deze geïmplementeerd zijn door middel van ‘schakelaars’ in de code. Ook een uitleg bij de weergave van de resultaten.

- lineair MESMA
- semi-lineair MESMA
- multi-lineair MESMA
- lineair AAM
- multilineair AAM

→ Voor de multilineaire modellen wordt ook al dan niet $P > 0$ en P materiaalafhankelijk vergeleken.

4.4 Bepreking lineair vs semi-lineair

Verschil voor hoge reflectie (bomen) → semilinair geeft betere resultaten voor dezelfde runtime

4.5 Bespreking semi-lineair vs multilineair

→ semilinair geeft vergelijkbare resultaten op kortere tijd

4.6 Bespreking P-afhankelijkheid

→ P-afhankelijkheid geeft vergelijkbare resultaten op gelijke tijd, maar heeft meer vrijheidsgraden

4.7 Bespreking P-ondergrens

verschil voor lage reflectie (asfalt) → Weglaten van ondergrens geeft betere resultaten op gelijke tijd.

4.8 Bepreking multilineair AAM vs semilinair model

→ zelfde resultaten voor kortere tijd.

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*, pages 6–36, June 2013.
- [2] Jose M. Bioucas-dias, Antonio Plaza, Nicolas Dobigeon, Mario Parente, Qian Du, Pual Grader, and Jocelyn Chanussot. Hyperspehyper unmixing overview: Geometrical, statistical and sparse regression based approaches. *Journal of selected topics in applied earth opservation and remote sensing*, 5(2):354–376, April 2012.
- [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(6):1994–2003, June 2014.
- [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.