Universiteit Antwerpen

Fysica

MASTERPROEF

Spectraalanalyse Variabiliteit voor niet-lineaire systemen.

Auteur:
Thorvald Dox

Promotor:
Paul Scheunders
Copromotor:
Rob Heylen





Inhoudsopgave

Abstract (english) Abstract (Nederlands) Structuur van deze thesis										
					Inleiding					
						0.1	Reflectie	7		
	0.2	Atmosferische correctie	8							
	0.3	Toepassingen	8							
1	Spectraal ontmengen									
	1.1	Resolutie	10							
	1.2	Spectrale analyse	11							
	1.3	Lineair ontmengen	11							
		1.3.1 Minimaliseren van reconstructie-error	12							
	1.4	Niet-lineaire interacties	13							
	1.5	Variabiliteit	14							
	1.6	Vrijheidsgraden	14							
2	Niet-lineariteit en endmember-variabiliteit									
	2.1	Bilineair ontmengen	15							
	2.2	Multilineair ontmengen	16							
		2.2.1 Berekening	16							
		2.2.2 Reflectantie vs albedo	18							
		2.2.3 Ondergrens van P waarde	19							
	2.3	MESMA	19							
		2.3.1 ontmengingsmethode naar keuze (lineair vs multilineair)	19							
	2.4	AAM	19							
3	Var	iabiliteit voor niet-lineaire systemen.	20							
_	3.1	Semi-lineair model	20							
	0.1	3.1.1 Theoretische controle dmv monte carlo simulaties	20							
	3.2	multilineair AAM	20							
	٠.٧	111411111111111111111111111111111111111	20							

4	exp	erimentele vergelijking van verschillende methodes	21		
	4.1	looptijd en reconstructie-error	21		
	4.2	Alina dataset	21		
	4.3	Lijst en korte uitleg bij alle methodes	21		
	4.4	Bepreking lineair vs semi-linair	22		
	4.5	Bespreking semi-lineair vs multilineair	22		
	4.6	Bespreking P-afhankelijkheid	22		
	4.7	Bespreking P-ondergrens	22		
	4.8	Bepreking multilinair AAM vs semilinair model	22		
Appendices					
Bi	Bibliografie				

Abstract

Abstract

Structuur van deze thesis

In de inleiding worden de fundamenten van aardobservatie beschreven. Dit hoofdstuk is vooral gebaseerd op Fundamentals of remote $sensing^{[3]}$.

Het eerste hoofdstuk introduceert het onderwerp van deze thesis: spectrale ontmenging. Eerst wordt het lineaire spectrale ontmengingsmodel beschreven, welke het meest gebruikte model is. Dan worden twee belangrijke problemen beschreven die niet met het lineaire model kunnen worden behandeld: niet-lineaire effecten en endmember variabiliteit.

In hoofdstuk 2 worden 2 state-of-the-art methodes uit de literatuur beschreven voor niet-lineair spectrale ontmenging en endmember variabiliteit. Het multilineair model is een methode voor niet-lineaire spectrale ontmenging, en wordt uitvoerig beschreven in: A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing [5]. De tweede methode brengt endmember variabiliteit in rekening en wordt behandeld in: Hyperspectral unmixing with endmember variability via alternating angle minimization [6].

Er zijn in de literatuur momenteel nauwelijks of geen methoden gekend die endmember variabiliteit in rekening brengen bij niet-lineaire ontmenging. Daarom heb ik in deze masterproef onderzoek gedaan naar de combinatie van niet-lineaire ontmenging en endmember variabiliteit. In het derde hoofdstuk beschrijf ik een aantal methodes die gelijktijdig rekening houden met beide concepten. Deze methodes zijn gebaseerd op combinaties van de 2 methodes uit hoofdstuk 2.

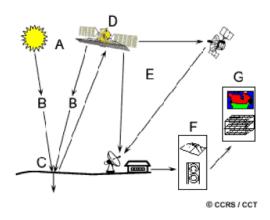
In hoofdstuk 4 worden de ontwikkelde methodes en een aantal varianten hierop gevalideerd op een experimentele dataset: de Alina dataset [4].

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 electromagnetische golven en het verwerken, analyseren en toepassen van deze informatie.

(Fundamentals of remote sensing [3] p5)

Aardobservatie begint bij een lichtbron¹. Dit is vaak de zon, maar dit proces is gelijkaardig voor andere lichtbronnen. De lichtbron zendt een lichtstraal uit, die eerst door de ruimte en vervolgens door de atmosfeer reist, totdat deze contact maakt met een materiaal op het aardoppervlak en hierop een of meermaals reflecteert. Deze reflectie verandert de eigenschappen van de lichtstraal. De gereflecteerde lichtstraal reist opnieuw door de ruimte, totdat deze in contact komt met de detector op een satelliet. Deze detector zet de lichtstraal om in elektrische signalen, die verzonden worden vanaf de satelliet naar het aardoppervlak, waar deze geanalyseerd kunnen worden. Dit volledige proces wordt afgebeeld op figuur 1.



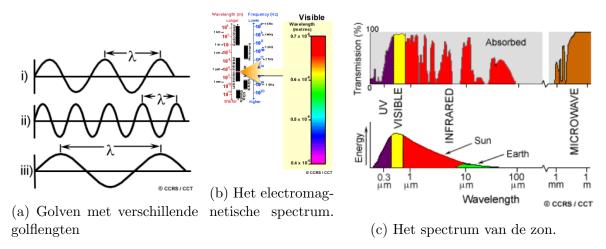
Figuur 1: Aardopservatie Deze afbeelding komt uit Fundamentals of remote $sensing^{[3]}$

Elektromagnetische golven

Een lichtstraal is een elektromagnetische golf, met als een van de belangrijkste eigenschappen voor aardob-

servatie de golflengte. Voor een vlakke golf is deze golflengte de afstand tussen twee opeenvolgende cycli, zoals te zien in figuur 2. Echter, een lichtstraal is bijna nooit een vlakke golf, maar een combinatie van verschillende vlakke golven met verschillende golflengten. De intensiteit van elke vlakke golf op elke specifieke golflengte wordt het spectrum genoemd. Soms wordt in plaats van golflengte ook frequentie gebruikt, deze is eigenlijk de snelheid van het licht gedeeld door de golflengte.

¹In het geval dat men geïnteresseerd is in het thermisch 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: Electromagnetische golven. Deze afbeeldingen komen uit Fundamentals of remote $sensing^{[3]}$

Hyperspectrale camera's

Gewone beelden van een camera bestaan uit drie kleuren, elk passende 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. Het zijn de kleuren die een mens kan waarnemen. Om dit beeld digitaal te vertalen, moet het beeld opgedeeld worden in kleine, even grote, vierkante elementen, genaamd pixels. Elk van deze pixels bevat voor elke kleur een waarde, die de respectievelijke intensiteit van alle kleuren in dit vierkant weergeeft. Hyperspectrale camera's werken in essentie op dezelfde manier, alleen detecteert deze camera niet alleen de hoeveelheid rood, groen en blauw, maar een groot aantal kleuren, genaamd banden. Door het grotere aantal banden in vergelijking met die van een gewone camera, kan hier meer informatie uit gehaald worden. De zon zendt vooral licht uit in het infrarood, het zichtbaar licht en het ultraviolet en daarom worden er vooral banden gebruikt uit dit spectrum, zoals te zien in figuur 2c.

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

0.1 Reflectie

Wanneer een lichtstraal invalt op een materiaal reflecteert dit een gedeelte van het licht en absorbeert het de rest. Het spectrum van deze lichtstraal die gereflecteerd wordt noemt men de reflectantie. Deze is afhankelijk van het materiaal en van de golflengte van het licht.

In deze thesis worden hiervoor drie aannames gemaakt. Ten eerste: de gereflecteerde lichtstraal heeft dezelfde golflengte als het invallende licht. Ten tweede: de intensiteit is van de gereflecteerde straal recht evenredig met de intensiteit van de invallende straal. Ten derde: de reflectie van een lichtstraal van een specifieke golflengte wordt niet beïnvloed door licht van andere frequenties. Deze drie aannames zijn correct in de klassieke fysica, maar er

zitten correcties van kwantummechanische effecten op. Deze zijn echter klein genoeg zodat ze als deel van de ruis beschouwd kunnen worden.

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

$$E_{out}(\lambda) = R_{\lambda} E_{in}(\lambda) \tag{1}$$

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

$$x = R \odot y \tag{2}$$

 $\operatorname{met} \odot$ het Hadamard ofwel elementwijs product. De vector R is de reflectie van het materiaal. Deze neemt in beschouwing dat er meerdere interacties kunnen gebeuren in het materiaal. Een reflectie die alleen een enkelvoudige interactie meeneemt, noemt men het albedo.

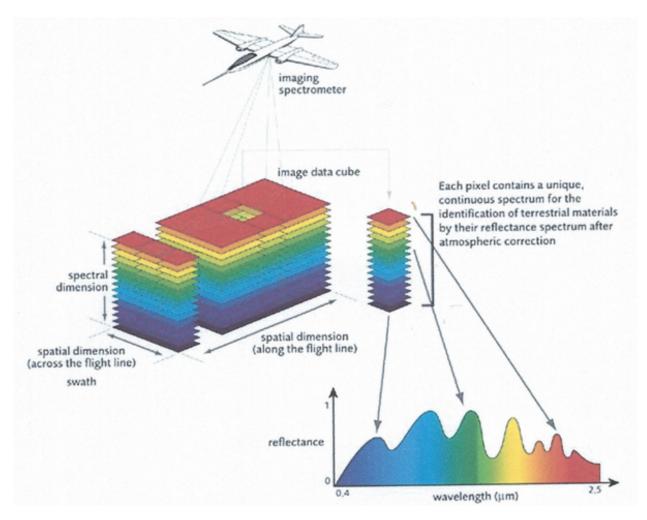
0.2 Atmosferische correctie

Wanneer de lichtbron uniform en genormaliseerd is, is de reflectie gelijk aan de reflectantie. Alleen is de gebruikte lichtbron - meestal is dit de zon - niet uniform. Verder beïnvloeden verschillende effecten de lichtstraal [3] zoals verschuiving, atmosferische verstrooiing, Rayleigh verstrooiing, Mie verstrooiing, nonselectieve verstrooiing, atmosferische absorptie, ozon absorptie, CO_2 -absorptie en interpixel verstrooiing. De gebruikte datasets in deze thesis zijn door een algoritme gecorrigeerd voor al deze effecten, en de beelden kunnen dus beschouwd worden als verlicht door een uniforme lichtbron, waarbij de gedetecteerde lichtstraal alleen beïnvloed is door reflecties en Gaussische ruis.

0.3 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 de gezondheid en verwachte oogst van verschillende gewassen. In het verleden werd het in kaart brengen van gewassen gedaan door steekproeven met de hand vanop de grond te nemen, maar aardobservatie is nauwkeuriger, goedkoper en kan gestandaardiseerd worden. Enerzijds is deze informatie 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, aan de andere kant is deze informatie ook nuttig voor overheden en verzekeraars, omdat deze kunnen nagaan welke planten er geplant worden, voorspellen wat de oogst gaat zijn en de schade bepalen na een droogte of storm.

Aardobservatie wordt ook toepast in de geologie. Van de aardbodem kan niet alleen het soort gesteente aan de oppervlakte in kaart gebracht worden, maar ook de formatie van deze gesteentes en zelfs de gesteentes liggend onder de aardbodem. Een van de voor de hand liggende toepassingen hiervan is de mijnbouw; een andere, het voorspellen van aardbevingen,



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

aardverschuivingen en vulkanisme, wat inhoudt dat aardobservatie gebruikt kan worden voor het plannen van wegen, gebouwen en andere structuren.

Hoofdstuk 1

Spectraal ontmengen

1.1 Resolutie

Een pixel in een hyperspectraal beeld bevat een of meerdere materialen. Indien elke pixel maar een enkel materiaal zou bevatten, zou elk spectrum van elke pixel vergeleken kunnen worden met een referentiespectrum. Echter, het is theoretisch onmogelijk om een camera te maken met een resolutie die groot genoeg is om dit te verwezenlijken. De hoeveelheid licht die op de camera valt is immers beperkt, en moet verdeeld worden over alle pixels en de verschillende banden. Dit betekent dat wanneer de pixels te klein worden, elke pixel te weinig licht krijgt en de signaal-ruisverhouding te laag wordt, en aangezien licht bestaat uit fotonen, is er een limiet aan de gevoeligheid van de camera.

De enige methode om de gevoeligheid te verhogen is bijgevolg een langere belichtingstijd. Hierdoor vergroot de ruis en dit is niet haalbaar voor een satelliet in een baan rond de aarde - zelfs als het praktisch haalbaar is om de resolutie kleiner te maken, ligt het probleem vooral in de fractalische eigenschappen van vele objecten.

Als bijvoorbeeld, bij het observeren van een bos een grove resolutie gebruikt wordt, 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 die bomen nog niet. Zelfs een blad bestaat nog uit verschillende materialen, aangezien de nerven van het blad uit een ander materiaal bestaan dan de bladmoes. Ook bij mineralen heeft men eenzelfde probleem: een gesteente bevat verschillende mineralen, maar om deze van elkaar te kunnen onderscheiden moet de pixelgrootte van microscopisch niveau zijn.

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

1.2 Spectrale analyse

Het spectrum van licht kan beschreven worden als een wiskundige functie die frequentie omzet in intensiteit. een hyperspectraal beeld bevat niet de volledige functie, maar bevat tweehonderd waarden uit deze functie, de zogenoemde banden. In matlab $^{[7]}$ wordt dit opgeslagen als een driedimensionale tensor, waarbij de verschillende assen de x positie, y positie en de band van de pixel weergeven.

In deze thesis is men niet geïnteresseerd in interpixel-interacties, er wordt vanuit gegaan dat het materiaal in een pixel geen invloed heeft op het spectrum van andere pixels. Correcter zegt dit dat de materialen in een enkele pixel niet meer invloed hebben op naastliggende pixels dan op andere willekeurige pixels in het beeld. Daardoor is de exacte structuur van de pixels niet van belang en kan deze worden vervangen door een lijst van pixels die elk afzonderlijk ontmengd moeten worden. Hierdoor kan de drie-dimensionale tensor worden omgezet in een matrix, waarin de rijen de verschillende pixels zijn en de kolommen de banden.

1.3 Lineair ontmengen

Bij lineair ontmengen wordt uitgegaan van het linear mixing model. Een lichtstraal valt in op een pixel op een enkel wel bepaald materiaal, interageert eenmalig met dit materiaal en valt daarna op de detector. Het spectrum van de teruggekaatste lichtstraal alleen afhangt van de reflectantie van het materiaal, de endmember genaamd. De totale reflectantie van een gemeten pixel is het gewogen gemiddelde van de verschillende endmembers, waarbij het gewicht van elke endmember bepaald wordt door het gedeelte van de lichtstralen dat door dit materiaal gereflecteerd wordt. Dit gedeelte is de abundantie. In symbolen geeft dit:

$$x = \sum_{i} a_i e_i \tag{1.1}$$

Waarbij x het gemeten spectrum is, e_i de endmembers en a_i de abundanties. Omdat het mixing model slechts een benadering is van de werkelijkheid en omdat er op een experimentele meting altijd een vorm van ruis zit, kan het exacte spectrum nooit gevonden worden. Er wordt daarom gezocht naar het reconstructiespectrum dat het dichtst bij het werkelijke spectrum ligt. Hierbij wordt verondersteld dat de ruis normaal verdeeld is. Dit is een eenvoudig gevolg van het centrale-limiettheorema, dat zegt dat de som van een groot aantal kansvariabelen normaal verdeeld is.

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

$$x = y + \eta \tag{1.2}$$

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

Deze norm kan berekend worden gebruik makend van vergelijking 1.2.

$$|\boldsymbol{\eta}| = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}| \tag{1.3}$$

De uitdrukking |x - y| noemt men het reconstructie-error. Het is deze uitdrukking die geminimaliseerd moet worden bij ontmenging.

1.3.1 Minimaliseren van reconstructie-error

Voor het lineair model wordt er vanuit gegaan dat de endmembers gekend zijn, maar de abundanties en de ruis niet. Als de ruis wordt toegevoegd aan vergelijking 1.1 dan geldt:

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i} a_{i} \boldsymbol{e}_{i} + \eta \tag{1.4}$$

Het minimaliseren van de reconstructie-error, gebruik makend van vergelijking 1.3:

$$\operatorname{argmin}_{a_1...a_p} \left| \boldsymbol{x} - \sum_{i=1}^p a_i \boldsymbol{e}_i \right|^2 \tag{1.5}$$

Indien de abundanties a_i vrije reële waarden zouden zijn, zou dit minimum eenvoudig berekend kunnen worden, door een projectie te nemen opgespannen door het vlak van de endmembers. Deze projectie kan genomen worden als volgt. Neem $E = [e_1, e_2, ..., e_n]$ een matrix met als kolommen de verschillende endmembers. De projectie op de deelruimte opgespannen door de elementen van E kan gevonden worden aan de hand van de Penroseinverse matrix.

$$\boldsymbol{a} = (E^T E)^{-1} E^T \boldsymbol{x} \tag{1.6}$$

Doordat de abundanties gedeeltes van lichtstralen zijn die op een materiaal botsen, zijn er twee extra voorwaarden. Enerzijds moeten de abundanties positief zijn, aangezien men geen negatieve hoeveelheid lichtstralen kan hebben - dit noemt men de nietnegativiteitsvoorwaarde; anderzijds kan elke lichtstraal maar op een enkel materiaal botsen, dus is de som van alle gedeeltes één - dit noemt men de eenheidssom-voorwaarde.

Niet-negativiteit

De niet-negativiteitsvoorwaarde geeft weer dat de abundanties allemaal positief moeten zijn, dus groter dan nul. Dit betekent dat men niet moet projecteren op de deelruimte, maar op een deelverzameling ervan. Hiervoor kan een aangepast algoritme gebruikt worden, namelijk het "nonnegative least-squares curve fitting" of lsqnonneg algoritme. Dit algoritme is veel berekeningsintensiever dan het *penrose-inverse* algoritme. Later in sectie 1.5 wordt een alternatieve methode beschreven om met deze voorwaarde om te gaan.

Eenheidssom

De eenheidssom-voorwaarde geeft weer dat de abundanties moeten sommeren tot één. Dit zorgt ervoor dat de mogelijke abundanties geen deelruimte meer opspannen, aangezien het nulpunt geen element meer is van het hypervlak. Dit kan worden opgelost door een van de endmembers als schaduw te beschouwen. Dit verschuift het hypervlak over de vector e_1 zodanig dat het nulpunt deel wordt van de hyperruimte en dit terug een deelruimte is.

Deze transformatie houdt in dat de matrix E getranslateerd wordt naar $[e_2 - e_1; e_3 - e_1; ...; e_n - e_1]$ en het gemeten spectrum naar $\mathbf{x} - e_1$. Na deze transformatie kan het *Penrose-inverse* algoritme worden toegepast, zodat men de abundanties $a_2, a_3, ..., a_n$ krijgt. De laatste abundantie a_1 kan gevonden worden door de eenheidssomvoorwaarde te eisen, zodat $a_1 = 1 - \sum i = 2^n a_i$.

Het algoritme dat beide bovenstaande correcties doorvoert is het Fully constrained least-squares unmixing model. Het algoritme dat enkel de eenheidssomvoorwaarde meeneemt, maar niet de niet-negativiteisvoorwaarde, noemt men het sum-to-one constrained least-squares unmixing model.

Volgende secties beschrijven twee belangrijke problemen voor spectraal ontmengen. Hiervoor wordt een oplossing beschreven in de rest van deze thesis.

1.4 Niet-lineaire interacties

In vorige sectie is men ervan uitgegaan dat elke lichtstraal maar een keer interageert met een enkel materiaal. Dit is een goede benadering als men vlakke gebieden met duidelijk verdeelde endmembers beschouwd. Dit geldt echter niet meer voor geometrische structuren zoals gebouwen of vegetatie, waarbij enkelvoudige interacties zeldzaam zijn en de meerderheid van de lichtstralen meermaals interageert. Hetzelfde geldt voor gebieden met mineralen, waarbij lichtstralen meerdere keren interageren met een enkele korrel en effecten zoals transmissie belangrijk worden.

In deze thesis wordt geen rekening gehouden met transmissie-effecten en interpixelinteracties. Dit laatste is het fenomeen waarbij een lichtstraal interageert met materialen in twee of meer verschillende pixels. Wel wordt er rekening gehouden met niet-lineaire effecten in een enkele pixel, wat inhoudt dat een lichtstraal meerdere keren kan interageren met dezelfde of verschillende materialen in een enkele pixel. Hiervoor bestaan er twee veelgebruikte modellen, namelijk het bilineair en het multilineair model.

1.5 Variabiliteit

In dit hoofdstuk werd ervan uitgegaan dat elke endmember een enkel vast spectrum heeft. In werkelijkheid is dit niet het geval. Enerzijds worden materialen met verschillende spectra beschouwd als een enkel materiaal. Bijvoorbeeld de bovenkant en de onderkant van een blad, die een verschillend spectrum hebben, zien we als een materiaal. Ook door de mens gemaakte materialen, zoals beton en asfalt, kunnen verschillende spectra hebben. Meestal is het niet interessant om een onderscheid te maken tussen deze verschillende materialen. Aan de andere kant kan het spectrum van een enkel materiaal ook verschillen dankzij verschillen in belichting en atmosfeer. Deze beide effecten zorgen ervoor dat een enkele endmember meerdere spectra heeft. Dit concept noemt men variabiliteit. Hierdoor word elke endmember beschreven door een bibliotheek van spectra, in plaats van een enkel spectrum. Hoe kan worden ontmengd, rekening houdend met variabiliteit staat beschreven in sectie 2.3.

1.6 Vrijheidsgraden

In een optimalisatieprobleem noemt men het aantal reële continue variabelen waarvan een systeem afhankelijk is de vrijheidsgraden. Wanneer het aantal te bepalen vrijheidsgraden groter is dan het aantal gegeven parameters, dan is het probleem ondergedefiniëerd. Dit houdt in dat er meerdere oplossingen voor de vrije parameters mogelijk zijn waarvoor aan alle voorwaarden voldaan is. Als dit gebeurt, is een gevonden oplossing niet met zekerheid de juiste oplossing, en geeft het model 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 werd 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 met de werkelijkheid overeenkomt. Bij vergelijking van verschillende modellen, zal een model met meer vrijheidsgraden een lagere reconstructie-error hebben.

Hoofdstuk 2

Niet-lineariteit en endmember-variabiliteit

2.1 Bilineair ontmengen

Het bilineair model beschrijft dat elke lichtstraal één of twee keer kan reflecteren in een enkele pixel. Van dit model bestaan twee varianten. Enerzijds bestaat het model van Nascimento en Somers^[5]. Deze voert de bilinaire term in als volgt.

$$x = \sum a_i e_i + \sum a_i a_j e_i \odot e_j + \eta$$
 (2.1)

Dit geeft in de praktijk geen goede resultaten, omdat het bilineair model is ontwikkeld voor objecten met een ingewikkelde geometrie, en deze methode bevat echter geen parameters of informatie over deze geometrie. Dit probleem kan worden opgelost door gebruik te maken van het Fan model [5], dat beschrijft dat de endmembers worden gemengd als volgt:

$$x = \sum a_i e_i + \sum \gamma_{ij} a_i a_j e_i \odot e_j + \eta$$
 (2.2)

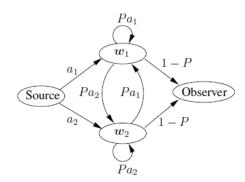
Dit model heeft een ander probleem, namelijk dat voor een model met p materialen, dit model p^2 extra vrijheidsgraden bevat. Daardoor is er geen garantie dat het model het juiste resultaat weergeeft, zoals beschreven in sectie 1.6.

Van wege deze problemen met het bilineaire model, wordt er overgegaan naar het multilineair model dat sterker fysisch onderbouwd is, en dat meer dan twee reflecties meeneemt. Dit model wordt beschreven in de volgende sectie.

2.2 Multilineair ontmengen

Het multilinair model gaat ervan uit dat een lichtstraal meerdere keren kan reflecteren in een enkele pixel. Dit model is gebaseerd op A multilinear mixing model for nonlinear spectral $unmixing^{[5]}$.

De inkomende lichtstraal valt in op een materiaal binnen een pixel. Wanneer deze invalt op het materiaal heeft deze een kans P om opnieuw in te vallen op hetzelfde of een ander materiaal in dezelfde pixel, en een kans (1-P) om te reflecteren naar de detector. De kans voor de gereflecteerde lichtstraal om in te vallen op een specifiek materiaal is gelijk aan diezelfde kans voor een lichtstraal afkomstig van de bron, namelijk de abundantie van de materiaal. Het spectrum van de lichtstraal verandert bij elke interactie zoals beschreven in sectie 0.1. Dat wil zeggen dat de uitgaande lichtstraal het elementwijs product is van de invallende lichtstraal en het albedo van het materiaal. Dit hele proces kan worden voorgesteld als een Markov-ketting (zie figuur 2.1).



Figuur 2.1: Markov-ketting van het multilineair model

2.2.1 Berekening

In deze sectie noemen we het "pad" van een lichtstraal de verzameling van de verschillende endmembers waarop het materiaal reflecteert, waarbij er rekening wordt gehouden met de volgorde. De kans dat een welbepaald pad gevolgd wordt, wordt als volgt genoteerd:

$$\mathcal{P}(i_1, i_2, i_3, ..., i_R) \tag{2.3}$$

Deze uitdrukking geeft de kans weer dat een lichtstraal reflecteert op materiaal i_1 , daarna op i_2 , op i_3 en zo voort, totdat deze uiteindelijk interageren met materiaal i_R . R is hier het totaal aantal materialen waarop gereflecteerd wordt.

De kans op dit pad kan worden uitgerekend aan de hand van het hiervoor genoemde Markov-proces^[5].

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

Het spectrum van de uitgaande straal ten gevolge van een specifiek pad is $\bigcirc_{k=1}^{R} \boldsymbol{w}_{i_k}$, waarbij \boldsymbol{w}_{i_k} het albedo is van materiaal i_k , en \bigcirc het elementwijs product. Hiermee kan de bijdrage van een specifiek pad -de kans vermenigvuldigt met het spectrum- berekend worden als volgt:

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

Gesommeerd over alle mogelijke paden geeft dit het totale reconstructiespectrum. Deze som over alle paden kan berekend worden door de som te nemen over alle mogelijke waarden van R voor een enkel pad, en dan als R -het aantal interacties- gekend is, kan er voor elke interactie gesommeerd worden over alle materialen. Wanneer alle bijdragen van elk pad gesommeerd zijn over alle paden, geeft dit het totale spectrum dat de detector meet, en dit is gelijk aan:

$$x = \sum_{R=1}^{\infty} \left(\sum_{i_1}^p \dots \sum_{i_R}^p \right) P^{R-1} (1 - P) \bigodot_{k=1}^R (a_{i_k} w_{i_k})$$
 (2.6)

Stel dat de kans dat een lichtstraal nog een keer interageert, afhankelijk is van het materiaal, dan kan de kans dat een specifiek pad gevolgd word op analoge wijze worden berekend.

$$\mathcal{P}(i_1, i_2, i_3, ..., i_R) = \prod_{k=1}^{R-1} P_{i_k} (1 - P_{i_R})$$
(2.7)

$$= \prod_{k=1}^{R} P_{i_k} \frac{1 - P_{i_R}}{P_{i_R}} \tag{2.8}$$

Waarbij P_{i_k} de reflectiekans van materiaal i_k is.

Het spectrum afkomstig van een specifiek pad wordt:

$$\boldsymbol{x}_{(i_1, i_2, i_3, \dots, i_R)} = \prod_{k=1}^{R-1} P_{i_k} (1 - P_{i_R}) \bigodot_{k=1}^R (a_{i_k} \boldsymbol{w}_{i_k})$$
(2.9)

$$= \bigodot_{k=1}^{R-1} (P_{i_k} a_{i_k} \boldsymbol{w}_{i_k}) \odot (1 - P_{i_R}) a_{i_R} \boldsymbol{w}_{i_R}$$
(2.10)

$$x = \sum_{R=1}^{\infty} \left(\sum_{i_1}^p \dots \sum_{i_R}^p \right) \bigoplus_{k=1}^{R-1} (P_{i_k} a_{i_k} \mathbf{w}_{i_k}) \odot (1 - P_{i_R}) a_{i_R} \mathbf{w}_{i_R}$$
(2.11)

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

$$+\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{p}\sum_{k=1}^{p}(1-P_i)a_i\boldsymbol{w}_i\odot P_ja_j\boldsymbol{w}_j\odot P_ka_k\boldsymbol{w}_k$$

$$+\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{p}\sum_{k=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}(1-P_{i})a_{i}\boldsymbol{w}_{i}\odot P_{j}a_{j}\boldsymbol{w}_{j}\odot P_{k}a_{k}\boldsymbol{w}_{k}\odot P_{l}a_{l}\boldsymbol{w}_{l}$$

$$+ \dots$$
 (2.12)

$$= z + y \odot z + y \odot y \odot z + \dots \tag{2.13}$$

$$= \boldsymbol{z} + \boldsymbol{y} \odot \boldsymbol{x} \tag{2.14}$$

$$=\frac{z}{1-y}\tag{2.15}$$

waar

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{p} P_i a_i \mathbf{w}_i \tag{2.16}$$

$$\boldsymbol{z} = \sum_{i=1}^{p} (1 - P_i) a_i \boldsymbol{w}_i \tag{2.17}$$

zodat

$$x = \frac{\sum_{i=1}^{p} (1 - P_i) a_i \mathbf{w}_i}{1 - \sum_{i=1}^{p} P_i a_i \mathbf{w}_i}$$
 (2.18)

Dit is een uitdrukking voor het multilineair mengen van endmembers waarbij de reflectiekans endmember-afhankelijk is. Indien men geïntereseerd is in een onafhankelijke reflectiekans, kan men de formule hiervoor bekomen door te stellen dat $P_i = P \forall i$ zodat het reconstructiespectrum gelijk wordt aan:

$$x = \frac{(1-P)\sum_{i=1}^{p} a_{i} \mathbf{w}_{i}}{1-P\sum_{i=1}^{p} a_{i} \mathbf{w}_{i}}$$
(2.19)

wat exact overeenkomt met de formule in de literatuur^[5].

Om aan de hand van dit model te ontmengen, moet nog steeds gebruik gemaakt worden van het minimaliseren van de reconstructie-error.

$$\operatorname{argmin}_{a_1...a_p; P_1...P_p} \left| \boldsymbol{x} - \frac{\sum_{i=1}^{p} (1 - P_i) a_i \boldsymbol{w}_i}{1 - \sum_{i=1}^{p} P_i a_i \boldsymbol{w}_i} \right|^2$$
 (2.20)

Aangezien deze vergelijking niet lineair is en bijgevolg ook geen hypervlak opspant, kan deze uitdrukking niet geminimaliseerd worden door middel van projecties, en zijn er hier geavanceerde minimalisatietechnieken nodig. In matlab^[7] wordt voor deze thesis hiervoor de functie fmincon gebruikt. Deze neemt de uitdrukking $\left| \boldsymbol{x} - \frac{\sum_{i=1}^{p} (1-P_i)a_i\boldsymbol{w}_i}{1-\sum_{i=1}^{p} P_ia_i\boldsymbol{w}_i} \right|^2$ in en geeft hier een minimum voor terug. Dit heeft als nadeel dat het draaien van deze functie op de experimentele data later beschreven in deze thesis, een looptijd heeft van ongeveer 0.1 seconden per pixel, in tegenstelling tot het berekenen van pseudo-inversen, wat ongeveer 50 microseconden in beslag neemt.

2.2.2 Reflectantie vs albedo

Het albedo \mathbf{w}_i uit vorige sectie kan niet exact gemeten worden. In theorie kan deze afgeleid worden uit de reflectie van een meting met een enkele endmember. Dit kan bepaald worden door vergelijking 2.18 te inverteren, zodat:

$$\boldsymbol{w}_i = \frac{\boldsymbol{e}_i}{\boldsymbol{e}_i P_i + 1 - P_i} \tag{2.21}$$

waarbij de deling de elementwijze deling is.

Hierbij wordt verondersteld dat P_i gekend is, wat in werkelijkheid niet het geval is. Daarom wordt verondersteld dat $P_i \approx 0$ wat neerkomt op een benadering die stelt dat $\boldsymbol{w}_i \approx \boldsymbol{e}_i$.

2.2.3 Ondergrens van P waarde

P is per definitie een getal groter dan nul, omdat kansen tussen nul en één liggen. Echter, het is mogelijk om in vergelijking 2.18 een negatieve waarde in te voeren. Deze waarde kan negatief zijn in twee situaties. Enerzijds - zoals beschreven in de vorige sectie- is het albedo slechts een benadering. Doordat de reflectie van de referentie-endmember nul wordt verondersteld te zijn, is deze lager dan in werkelijkheid. Bijgevolg zal ook de reflectiekans van de pixel lager zijn dan in werkelijkheid. In het geval dat de reflectiekans van de pixel lager is dan de reflectiekans van het referentiemateriaal, ligt deze waarde onder nul. Merk op dat dit systeem niet lineair is, waardoor een verkeerde reflectiekans in bovengenoemde sectie niet kan opgelost worden door het herdefiniëren van P. Anderzijds, zijn er ook interpixelinteracties die invloed hebben op het systeem. Deze kunnen extra lichtstralen die hebben gereflecteerd op een materiaal in een andere pixel toevoegen aan het systeem, wat zorgt voor een verlaging van de reflectiekans.

2.3 MESMA

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

2.3.1 ontmengingsmethode naar keuze (lineair vs multilineair)

2.4 AAM

- concept hoek in hoogdimentonale ruimtes
- AAM

Hoofdstuk 3

Variabiliteit voor niet-lineaire systemen.

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

 $[\]rightarrow$ Voor de multilineaire modellen wordt ook al dan nie
tP>0en Pmateriaalafhankelijk vergeleken.

4.4 Bepreking lineair vs semi-linair

Verschil voor hoge reflectie (bomen) \rightarrow semilineair geeft betere resultaten voor dezelfde runtime

4.5 Bespreking semi-lineair vs multilineair

→ semilineair geeft vergelijkbare resultaten op kortere tijd

4.6 Bespreking P-afhankelijkheid

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

4.7 Bespreking P-ondergrens

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

4.8 Bepreking multilinair AAM vs semilinair model

 \rightarrow zelfde resultaten voor kortere tijd.

Appendices

 ${\bf Spectraal analyse\ Variabiliteit\ voor\ niet-lineaire\ systemen.}$

Bibliografie

- [1] Jose M. Biouscas-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. Biouscas-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.