



基于漫游车的行星探测任务中多光谱图像的新颖性检测方法比较

1 2 2

汉娜·克纳¹ · 萨曼莎·基格² · 布赖恩·霍顿¹ · 杰恩·布埃·詹姆斯·贝尔三世¹ · 关志满¹ · 海尼·本·阿莫尔¹³¹

收稿日期: 2019-09-02 / 录用日期: 2020-06-3 / 在线发布: 2020-06-16
© 作者 2020

抽象

火星 科学实验室好奇 号火星车等基于火星车的行星探测任务的科学团队在做出后续 决定之前, 分析新数据的时间有限观察。 需要 能够 快速、智能地从行星仪器数据集中提取信息并将 注意力集中在最有希望或最新颖的观测上的系统。 在三 通道彩色图像 和非图像数据集的先前工作 中 已经探索了几种新颖性检测方法, 但很少有人考虑多光谱或高光谱图像。 用于 科学发现的数据集。 我们比较了 四种 nov-elty 检测方法的性能 — Reed Xiaoli (RX) 探测器、主成分分析 (PCA)、自动编码器和生成对抗网络 (GAN) — 以及每种方法 提供解释性可视化 以帮助科学家理解和信任系统所做的 预测的能力。 我们 表明, 像素级RX和经过结构相似性 (SSIM) 损失训练的自动编码器可以检测到PCA, GAN, GAN未检测到的形态学新颖性, 和均方误差自动编码器, 但 后一 种方法 更适合 检测光谱新颖性 - 即给定 方法的最佳方法设置 取决于 所寻求的新奇事物的类型。 此外, 我们发现自动编码器提供了最有用的解释性可视化, 使用户能够理解和信任模型检测, 并且 现有的 在这方面, GAN的新颖性检测方法可能受到限制。

负责 编辑: Indre Zliobaite。

B 汉娜·克纳
hkerner@asu.edu

¹ 亚利桑那州立大学, 781 E 露台 购物中心, 坦佩, AZ 85287, 美国
² 喷气推进实验室, 加州 理工学院, 4800 Oak Grove Drive, 帕萨迪纳, CA 91109, 美国
³ Applied Research, LLC, 9605 Medical Center Drive, Suite 113E, Rockville, MD 20850, 美国

关键词 新颖性 检测 · 无监督 学习 · 太空 探索

1 引言

新颖性检测方法的目标是识别以前未观察到的数据模式 (Markou和Singh 2003a, b; 钱多拉等人。2009; 皮门特尔等人。2014)。“新颖性”的确切定义因应用领域和数据类型而异,但在所有情况下,新颖的示例都在某种程度上不同于“正常”数据 (Pimentel et al. 2014),并且用户特别感兴趣 (Chandola et al. 2009)。在许多实际应用中,新颖性检测可以提供重要的、可操作的信息,例如医学图像中的新特征可能表明存在疾病或肿瘤 (Schlegl等人。2017),或机场安检处X射线扫描中的新颖性可能表明存在武器 (Akçay等人。2018)。

一个可能非常有利于新奇探测技术的应用领域是基于漫游车的行星探测。火星车任务,如火星科学实验室 (MSL) 好奇号火星车,由任务团队成员通过“战术规划”系统操作:火星车被命令在火星表面进行观测,火星车将这些观测的科学数据发送回地球,科学团队分析最新数据并决定根据这些数据对下一个溶胶进行什么观察,并且该过程重复。由于科学团队只有在火星车或三个火星轨道飞行器之一之间有清晰的视线时才能与火星车进行通信,深空网络,每天只有少数机会下行新数据和上行新计划。此外,连续的漫游车驱动器使得对后期识别的科学目标的后续观察越来越昂贵,以至于任务资源越来越昂贵 (因为漫游车需要扭转方向才能重新访问目标)。这些因素要求科学家在相对较短的时间内审查最新的科学数据并确定感兴趣的目標以进行后续分析。时间。MSL通常只有不到12个小时的科学规划时间,而即将到来的NASA Mars 2020火星车任务可能只有五个小时 (威尔逊等。2017)。需要能够快速、智能地从科学仪器数据中提取感兴趣信息的系统,以专注于潜在的发现,避免错过科学机会。这些系统还必须提供解释性的可视化,使科学家能够信任和理解系统是如何得出结论的,这是尚未探索的需求。在以前的工作中广泛。我们将研究重点放在MSL漫游车上的Mastcam成像系统上,该系统在电磁波谱的可见光和近红外区域获取多光谱图像。(贝尔等人。2017; 马林等人。2017)。与Mastcam类似的相机在火星探测漫游者精神和机遇号上 (Pancam, Bell III等人。2008年),并将登上火星2020号火星车 (Mastcam-Z, Bell III等人。2016)。因此,能够在Mastcam多光谱图像中检测新的地质情况。

¹ “sol”是自MSL开始在火星上运行以来经过的火星天数。

² 火星奥德赛,火星侦察轨道器和痕量气体轨道器 (ExoMars)。

³ 深空网络由位于戈德斯通 (加利福尼亚州)、马德里和堪培拉用于深空通信。

可以帮助增加 过去, 现在和未来基于火星车的火星探测任务的科学回报。这项工作 旨在 使规划和 数据分析 团队能够将有限的可用时间 花在最有希望或最新颖的观察上。

由于 新颖性检测 的目标是 识别 未经常或从未观察到的模式, 因此在许多应用领域中, 很难 获得标记的新示例。来自典型类的标记示例可能 很多, 但新颖的标记示例更为稀缺。因此, 一种常见的新颖性检测 方法是 基于典型 (非新颖) 训练示例构建模型, 并将新示例识别为较 差的示例。与典型例子相比, 该模型由该模型解释 (Pimentel等人。2014)。在这项工作中, 我们比较了 基于 主成分分析、里德-小利 (RX) 探测器、自编码器神经 的新型检测方法的性能。网络和生成对抗网络, 用于在 火星 表面的桅杆多光谱图像中优先处理具有新地质特征的图像。我们使用选择的 多个指标来评估 这些方法的性能, 以表示它们在操作使用中的性能, 包括检测的可解释性 (通过重建误差/残差), 这是 确保方法的操作采用的重要因素。我们介绍了 实验的几个关键发现:

- 我们提出了一种新的自动编码器损失函数 - 结构相似性指数 (SSIM), 这是一个传统上用于图像质量评估的指标 (Wang 等人。2004b) 一并表明, 使用SSIM损耗 训练的自动编码器更适合检测 形态学新颖性, 而使用常规均方误差 (MSE) 训练的自动编码器更适合检测形态学新颖性。损耗 更适合于 检测光谱新颖性。此外, 我们表明, 使用SSIM作为MSE自动编码器损失的正则化项可以提供比对应的更好的新颖性检测性能。仅 MSE 损失。
- 我们 表明, 与输入表示 为完整多光谱的其他方法相比, RX的像素光谱表示可以在某些新颖性类别上实现更好的性能 图像 (扁平向量或张量)。
- 我们 表明, 在比较的方法中, 自动编码器能够为用户提供最有用的解释性 可视化, 以便用户理解和信任新颖性检测系统做出的决策, 但是, 但是 现有的GAN方法 可能仅限于 为此目的提供有用解释 的能力。
- 给定应用 的最佳新颖性检测方法 取决于所寻求的新颖性类型。

2 相关 工作

已经广泛调查了异常检测方法, 包括新颖性检测和异常值检测 (Markou和Singh 2003a, b; 火星 2003; 霍奇和奥斯汀 2004; 阿格芒格等人。2006年; 摩德内西和布拉加 2009; 钱多拉等人。2009; 皮门特尔等人。2014)。虽然异常值检测方法 旨在以无监督的方式识别与 数据集中大多数示例 偏离的示例, 但新颖性检测方法旨在 识别 与 示例不同的示例

1 2 3

在训练期间看到。因此,新颖性检测可以被视为一个单类分类问题,其标准方法是典型的(非新颖的)训练示例构建一个模型,并且识别测试集中不能被该模型很好地表示的新例子(Pimentel等人, 2014)。为异常值和新颖性检测设计的方法通常可用于这两个问题,因此我们将在本节中介绍异常值和新颖性检测的相关工作。

内核方法在单类分类问题中,训练期间只有典型的标记示例可用,而新颖的标记示例仅用于评估。单类支持向量机(OC-SVM)是流行的支持向量机(SVM)方法的修饰,以实现单类分类(Scholkopf等人, 2000年)。OC-SVM仅围绕训练数据集中的典型数据学习决策边界,尽管验证数据集中通常包含新示例以调整超参数,因为OC-SVM的性能很大程度上取决于超参数设置(Ma and Perkins 2003; 王等, 2004a; 马内维茨和优素福 2001; 穆尼奥斯-马里等人, 2010; 皮门特尔等人, 2014; 埃尔法尼等人, 2016; 泽纳蒂等人, 2018b)。支持向量数据描述(SVDD)方法是SVM和OC-SM的另一个扩展,它使用人工自动优化模型超参数在超球体中围绕典型数据生成未标记的数据,并通过测试示例是否位于超球体内来确定新颖性(Pimentel et al. 2014; 坎贝尔和贝内特 2001; Tax and Duin 1999)。

基于重建的方法 基于重建的方法是另一组单类分类方法,通过学习典型输入示例与低维表示,可最大程度地减少输入与其从低维表示重建之间的损失。PCA可用于基于重建的新颖性检测,其中输入之间的重建误差及其来自主子空间的逆变换被用作新颖性分数(例如, Kwak 2008; 钱多拉等人, 2009; 托伊沃拉等人, 2010; 瓦格斯塔夫等人, 2013; 肖等, 2013; Jablonski et al. 2015)。Diaz和Hollmen(2002)使用基于核和基于最小二乘法的一般回归神经网络(GRNN)进行新颖性检测,并表明核与最小二乘法相比,基于方法提供了更有意义和可解释的残差(重建误差)。鉴于深度神经网络在学习高维数据中的复杂关系方面取得了成功(LeCun等人, 2015),最近的方法已经采用深度学习方法进行基于重建的新颖性检测。与PCA类似,自动编码器神经网络(Hinton和Salakhutdinov 2006)经过训练,可以最大限度地减少非新颖(典型)示例的重建误差,并且使用重建误差对新输入的新颖性进行评分(例如, Japkowicz等人, 1995年; 汤普森等人, 2002年; 威廉姆斯等人, 2002年; 马内维茨和优素福 2007; 熊和左 2016; 里希特和罗伊 2017; 周和帕恩罗斯 2017; 克纳等人, 2019)。还提出了用于新颖性检测的变分自动编码器(An and Cho 2015; 朴等人, 2018)。生成对抗网络(GAN)(Goodfellow等人, 2014),它们已成功用于学习复杂数据集的数据生成分布(例如, Antipov等人, 2017; 董等人, 2018),最近有人提出用于新颖性检测(Schlegl等人, 2017; Akcay et al. 2018; 泽纳蒂等人, 2018b)。

分布和密度估计方法 里德-小李 (RX) 方法, 该方法使用像素和背景分布之间的马哈拉诺比斯距离 (里德和 Yu 1990), 其核变体被广泛用于多光谱和高光谱图像中的无监督异常检测 (例如, Kwon 和 Nasrabadi 2005; 莫莱罗等人。2013; 周等。2016; 艾汉等人。2017; 瓦格斯塔夫等人。2019)。虽然 RX 通常用于检测全局或局部异常值/异常, 但它可以通过计算典型训练的背景统计数据来用于新颖性检测。数据集, 如我们的研究所述。对于高斯分布的数据, 由高斯概率分布建模的数据可能性阈值, 或使用高斯的高斯混合混合模型 (GMM), 可用于识别新的例子或外围的例子 (Chandola 等人。2009)。类似地, 核密度估计器 (KDE) 通过将单个核 (例如, 高斯核) 分配给每个数据点来估计数据集的概率密度, 并且对所有内核进行求和 (Silverman 1986)。与要素空间漫射区域中的点相比, 点靠近的密集区域对密度估计的贡献更大, 因此可以使用学习概率分布下的可能性阈值来识别异常值 (例如, Desforges 等人。1998年; Latecki et al. 2007; Ristic et al. 2008; Laxhammar et al. 2009; 舒伯特等人 2014)。GMM 和 KDE 是概率新颖性检测方法的例子, 该类别还包括统计假设检验和箱形图 (Pimentel 等人。2014)。局部异常值因子 (LOF) (Breunig 等人。2000) 通过计算每个点与其最近邻居相比的局部密度来检测特征空间稀疏区域中的异常值; 已经提出了对 LOF 的几项修改 (Tang 等人。2002年; 邱和傅 2003; 帕帕迪米特里乌等人。2003年; 唐等人。2007年)。

基于距离的方法 基于距离的新颖性检测方法包括最近邻 (例如, Angiulli 和 Pizzuti 2002; Ertöz et al. 2003年; Bay and Schwabacher 2003; 任冬梅等 2004年; 安倍等人。2006年; 于等人。2006年; 张和王 2006; 古廷等 2008年) 和聚类方法 (例如, Yu 等人。2002年; 他等人。2003年; 皮雷斯和桑托斯-佩雷拉 2005; Srivastava 和 Zane-Ulman 2005; 斯里-瓦斯塔瓦 2006; 布达拉科蒂等人。2006年; 克利夫顿等人。2007; 王 2009; Filippone et al. 2010; 赛义德等人。2010; 金等人。2012), 但由于高维数据集依赖于适当的距离度量, 因此可能存在这个问题 (Pimentel 等人。2014)。卡雷拉等人。(2015) 使用卷积稀疏模型从典型图像中学习局部结构, 并根据距离检测测试图像的新区域在学习过滤器和协同效率图以及协效图中非零元素的分布之间。

其他方法 隔离森林算法 刘等。(2008) 是一种基于随机森林的方法, 它通过递归和随机分区其特征来“隔离”单个示例。对于新示例, 隔离示例所需的分区数往往比典型示例更小 (树较浅)。新颖性检测与零射击学习问题密切相关, 零次学习旨在从训练期间未见过的类中对示例进行分类, 并且可能涉及检测偏离训练样本的分布外示例。Bhattacharjee et al. (2019) 研究了使用自动编码器进行新颖性检测的情况, 以检测训练数据集中未见的类中的示例。李等人。(2018) 使用 Maha-

测试样本与从深度神经网络末端的隐藏表示计算的类条件高斯分布之间的lanobis距离。

先前研究的一个重要局限性是，他们使用包含非图像/相对低维数据，灰度图像或颜色（RGB）的数据集在很大程度上评估了新颖性检测方法。图像。此外，其中许多数据集是基准数据集，并不模拟现实世界的应用程序，这些应用程序将从新颖性检测方法的采用中受益匪浅。在这项工作中，我们评估了涉及PCA，RX，自动编码器和GAN的四种新颖性检测方法，用于由火星科学实验室（好奇号）火星车上的Mastcam仪器用于在科学操作规划期间对图像进行预先迭代以进行审查的实际任务。我们将研究重点放在基于重建的方法上，因为残差（重建误差）提供了一种清晰的方法，可以识别输入与图像的新颖性分数直接相关。我们使用选择的多个指标来评估这些方法的性能，以表示它们在操作使用中的性能，包括检测的可解释性（通过重建误差/残差）。通过使用具有挑战性的多光谱图像真实世界数据集评估现有的新颖性检测方法，我们展示了性能和可解释性的权衡在先前研究中未探索的方法和识别的局限性之间。

3 数据集

MSL火星车用于在火星上进行地质观测的一种仪器是桅杆相机，或“桅杆相机”，一对安装在火星车桅杆上的CCD成像仪。~地表以上2米（格罗辛格等人。2012；贝尔等人。2017；马林等人。2017）。与Mastcam类似的相机称为“Mastcam-Z”，将登上Mars 2020火星车（Bell III等人。2016）。每个Mastcam相机或“眼睛”都有一个八位滤光轮，可以以“真彩色”（拜耳图案宽带红色，绿色和蓝色），并具有六个窄带光谱滤光片，范围为~400-1100 nm（可见于短波近红外）（Bell等人。2017）。成像仪具有不同的焦距：左眼为34 mm，右眼为100 mm，因此它们被称为“M-34”和“M-100”分别。每只眼睛之间的一些波段波长也不同（Bell等人。2017）。出于这个原因，我们将M-34和M-100的图像视为两个独立的数据集，应该为此开发两个单独的新颖性检测系统。在这项研究中，我们选择使用M-100（右眼）数据集，因为使用右眼获得的多光谱图像比使用右眼获得的多光谱图像更多。在我们研究的横移期间的左眼。Mastcam图像中新地质学的例子包括铁陨石（惠灵顿等人。2017a；约翰逊等人。2014年）和破碎的岩石，在尘土飞扬的表面下暴露矿物学。

我们基于重建的新颖性检测实验需要两个数据集：一个代表火星的典型地质 - 将用于训练，验证和测试模型 - 另一个数据集包含专家识别的新示例，这些示例仅用于测试。为了构建这些数据集，我们考虑了在sols（着陆后的火星日）1至1666之间使用所有六个窄带光谱获得的所有Mastcam多光谱图像。过滤器（sols 1-1666对应于地球日期

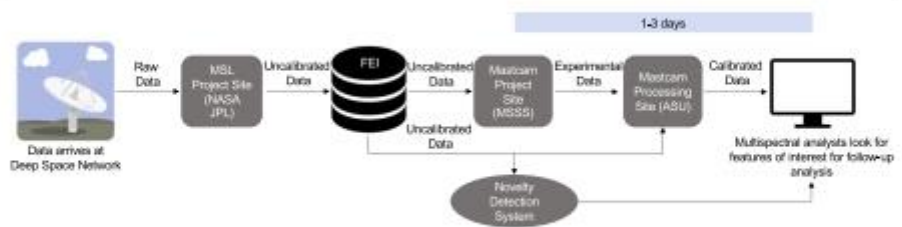


图1 桅杆图像处理管道图示

2012年8月6日至2017年 4月14日)。在 战术 规划 期间 可用的 最早的Mastcam 图像 产品 是 全分辨率 图像 的 未校准 缩略图 版本。当 MSL 火星车 获取 Mastcam 图像 时，全分辨率 图像 存储在 火星车 的 车载 计算机上。漫游车 首先 下行链路 Mastcam 图像 的 低 分辨率 缩略图 版本，然后 (在 带宽 允许 的 情况下) 发送 多光谱 图像 的 全分辨率 版本。图 1 显示 了 Mastcam 图像 数据 到达 深空 网络 后 的 流量。当 数据 从 火星车 发送 到 深空 网络 时，原始 图像 数据 被 发送 到 喷气 推进 实验室 的 MSL 项目 团队，谁 处理 原始 数据 并将 未校准 的 图像 发布 到 Mastcam 仪器 团队 成员 订阅 的 文件 交换 接口 (FEI) 服务器 自。在 Mastcam 项目 主 站点 (马林 空间 科学 系统，MSSS) 接收 到 未校准 的 数据 后，对 其 进行 处理 以 创建 “实验 性 数据” 数据 记录，其中 包含 未 校准 图像 产品 中 未 包含 的 其他 非 图像 数据 (例如，标头 信息)。在 下 一个 计划 日 开始 时，数据 下行 后，这些 实验 数据 被 发送 到 亚 利桑 那 州 立 大学 的 Mastcam 校准 团队 大学 (ASU)，创建 经 辐射 校准 的 数据 版本，供 MSL 科学 团队 成员 用于 战术 规划。通过使用 未经 校准 而 不是 辐射 校准 的 Mastcam 图像 版本，新颖 性 检测 系统 可以 提供 关于 战术 规划 感兴趣 的 潜在 观测 的 见解。团队 比 当前 的 全手 动 流程 提前 1-3 天。虽然 新颖 性 检测 方法 有 可能 使用 全分辨率 和/或 校准 的 观察 结果 来 提高 性能，但 我们 的 目标 是 提供 有关 新颖 性 的 见解 在 战术 计划 开始 之前，尽早 进行 新的 观测。因此，我们 选择 使用 全分辨率 多光谱 图像 的 未校准 缩略图 版本，因为 这些 产品 是 最早 可用 于 战术 科学 规划 的 产品。

这些 影像 构成 了 包含 477 个 多光谱 (6 波段) 缩略图 的 数据 集。两位 合著 者 (D. Wellington 和 S. 雅各布) 具有 审查 Mastcam 多光谱 产品 的 经验，审查 了 该 源 数据 集 中的 图像 以及 他们 认为 地质 有趣 或 “新颖” 的 标记 区域 到 火星 的 典型 地质。这些 考虑 基于 文献 中 已 发表 的 结果 (例如，Rice 等人。2013; L  veill   et al. 2014; 约翰逊 等人。2014, 2015; 惠灵顿 等 2017a, b; 惠灵顿 2018) 和 科学 团队 在 战术 规划 期间 的 讨论，其中 获得 了 该 数据 集 中的 图像。这些 标签 位于

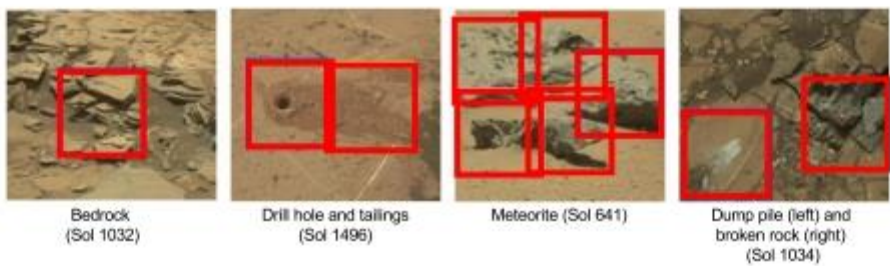


图2 桅杆图像中新地质周围的边界框标签示例

表 1 训练中的 64 个 × 64 个 × 6 个图像磁贴的数量，验证和测试数据集	数据集 编号 典型 磁贴 编号 新奇 瓷砖 火车 9302 0
	验证 1386 0
	测试 426 430

64 × 64 × 6 像素边界框的形式（例如，图。 2⁴）。他们在477张源图像中的156张中识别了237个新颖的 边界框。我们将 剩余的 321 张源图像 分类为仅包含典型地质，并 分别使用 80%/10%/10% 的拆分将它们划分为训练集、验证集和测试集 （随机后 ）。为了增加 可用于训练和验证的典型图像的数量，我们从 训练和验证数据集中的图像中对 64 × 64 × 6 像素的图块进行了子采样 使用 步幅大小为 16 像素的滑动窗口。这产生了 9, 302 个典型训练磁贴和 1, 386 个典型验证磁贴。 我们使用 32 像素的较大步幅来对测试图像中的切片进行 子采样，以减少 测试数据集中图像之间的重叠，生成 345 个典型测试图块。

包含新型边界框标签的 156张图像仅用于测试。 我们再次使用 32 像素步幅从这些图像 中对 64 × 64 × 6 像素的图块进行子采样。任何与 新型边界框标签中心 重叠的图块都 被归类为新型测试图块（430 个图块），而与小说无重叠的图块 边界框标签 被归类为 典型测试切片，并添加到典型测试数据集（81 个切片）中。表 1 汇总了每个数据集中 新颖和典型图像的数量。

为了进一步评估Mastcam图像 中不同类型新地质的模型性能，我们 根据 Mastcam专家的输入将新型测试数据集分为8个子类 。多光谱分析人员：陨石、浮岩、基岩、矿脉、碎石、自卸桩、钻孔 和除尘工具（DRT）点（图 3）。陨石是 来自太阳系 其他地方的流星的 岩石碎片，进入火星大气层并降落在火星表面；在火星车探测任务期间 ， 陨石是在火星上偶然发现的 ， 根据陨石的类型，在Mastcam图像中可能是 明显或微妙的（惠灵顿2018））。浮石 是通过其他地质过程运输到其当前位置的松散岩石，

⁴ 由于Mastcam数据集 中的图像是多光谱（6波段），因此在所有图表中都显示了示例从 数据集中，我们将输入图像的通道2（805 nm），0（527 nm）和1（447 nm） 分别显示为红色，绿色和蓝色。



图3 桅杆多光谱影像数据集中8类 新地质 显示的图像是缩略图 中的子框架

子类	编号	瓷砖
DRT 点	111	
自卸 桩	93	
破碎 的岩石	76	
钻孔	62	
陨石	34	
静脉	30	
浮 石	18	
基岩	11	

因此，它们的组成类似于 源材料 而不是周围材料（惠灵顿2018）。 相比之下，基岩描述了在原地形成的材料。 矿脉是 填充岩石裂缝的材料（通常是浅色调的）。 破碎 的岩石子类描述了被打破或压碎的岩石（由 漫游车轮或其他 仪器）以暴露岩石的 新鲜内部。 自卸桩、 钻孔和 DRT 点子类都描述了由 漫游车在表面上执行接触科学 而创建的特征。自卸桩 是由 Chemin和 /或SAM分析的钻孔样品材料（Blake等人。 2012; 格罗辛格等人。 2012; 马哈菲等人 2013）仪器倾倒回 表面，使这些仪器 可用于新样品。 钻孔是漫游车钻入岩石时产生的孔 ， 尾矿是孔周围去除的材料 。 DRT斑点是椭圆形斑点 ， 使用漫游车 上的旋转除尘工具 除尘除尘； 除尘区域和 背景 之间的 对比度 取决于灰尘底部岩石 的颜色和 覆盖岩石 的尘埃层。 表 2 给出了每个类别中包含的新型测试磁贴的数量 。 完整的 数据集可以在 <https://doi.org/10.5281/zenodo.1486195> 访问。

4 方法

在这种新颖性检测应用中，有许多典型地质学的 标记示例 ，并且火星表面上的新颖地质学实例相对较少。 我们选择了四种方法来评估 在基于漫游车的多光谱图像中检测新地质的情况，仅在训练期间使用典型示例：PCA，RX探测器，自动编码器和GAN。 除RX外，所有这些方法都是基于重建的方法， 我们选择这些方法 是因为它们 能够使 图像中的新检测可视化。

辅助解释。我们选择 评估RX和PCA ， 因为它们是公认的新颖性检测方法，可作为深度学习 方法的信息基线。我们选择 评估自动编码器和GAN，因为与传统 方法 相比，深度学习 方法已被证明 对许多高维表现出更好的性能。图 像 数 据 集 。 每 种 方 法 的 代 码 都 可 以 在 <https://github.com/JPLMLIA/mastcam-noveltydet> 访问。我们将在下面讨论每种方法的实现 细节。

4.1 断续器

PCA 将数据线性投影定义为主子空间，该子空间在数据中保留最大方差。主成分是 数据协方差矩阵的特征向量，可以使用奇异值分解（SVD） 计算（Tipping和Bishop 1999）：

$$U = \text{SVD}(\Sigma) \quad (1)$$

其中 Σ 是 数据集 X 的协方差矩阵。PCA 可用于通过保留顶部的 k 个主分量（ U 的前 k 列） 并将数据投影到 k 维主子空间：

$$z = U^T x \quad (2)$$

其中 U 的列 包含 k 个主成分， x 是像素的向量 图像 中的强度， z 是主子空间中 x 的降维表示。逆 变换从原始数据点在主子空间中 的表示形式重建原始数据点：

$$\hat{x} = U z = U U^T x \quad (3)$$

其中 \hat{x} 是图像 x 的重建。当PCA 用于降低数据的维度相关性时， x 和 \hat{x} 之间的重建误差可以 解释为新颖性评分（Wagstaff等人。2013年）：

$$\text{断续器}(\hat{x}, x) = \|x - \hat{x}\|_2 \quad (4)$$

我们使用 Scikit-learn Python包 来应用PCA（Pedregosa et al. 2011）。

4.2 RX 探测器

RX探测器 通常用于 检测多光谱或高光谱图像中的异常像素。RX为每个像素分配一个异常分数，该像素是 像素之间的 Maha-lanobis 距离和根据 数据估计的背景分布（Reed和Yu 1990年; Chang和蒋2002）。背景 通常被淡化 为图像中的所有像素，除了 被测像素，或者周围的像素窗口

被测像素。由于我们的目标是识别与数据集相关的新特征，而不是在单个图像中识别新特征，因此我们计算了每个像素的RX异常得分。尊重整个训练数据集的背景，即：

$$\text{断器} \quad x_i = (x_i - \mu_t)^T \Sigma_t^{-1} (x_i - \mu_t) \tag{5}$$

$1 \times m$ $1 \times m$

其中 $x_i \in R$ 是像素 i 在 m 个多光谱波段上的光谱， $\mu_t \in R$ 是从训练数据集中的所有像素光谱计算的平均光谱， $\Sigma_t \in R$ 是从训练数据集中的所有像素光谱计算的协方差矩阵。自等式 5 计算图像中每个像素的RX异常评分，而不是整个图像，我们计算了图像的代表性RX异常评分作为平均值图像中所有像素的RX得分。

还可以使用展平的多光谱图像矢量作为输入表示而不是像素光谱来计算图像的RX异常评分。此表示形式等效于PCA的输入表示形式（第4.1节）。在此公式中，我们使用以下等式（下标）计算图像相对于整个训练数据集背景的RX异常分数。“f”表示拼合的图像表示形式）：

$$\text{断器} \quad x_i = (x_i - \mu_t)^T \Sigma_t^{-1} (x_i - \mu_t) \tag{6}$$

n n

其中 $x_i \in R$ 是展平多光谱图像矢量， n 是多光谱图像中的像素数， $\mu_t \in R$ 是计算得出的平均图像矢量， $\Sigma_t \in R$ 是从训练数据集中的所有图像计算出的协方差矩阵。

Eqs 中的逆协方差矩阵。5 和 6 沿方差最小（最低特征向量）的主分量投影输入数据，并且新颖性被评估为与均值的距离空间。类似地，PCA中的重构误差将新颖性评估为低方差主分量空间中输入数据与平均值的距离（Chang和蒋2002）。PCA和RX之间的主要区别在于，PCA中的重建误差测量沿分量 $k + 1$ 到 n 的残差信息，其中 k 是投影矩阵中保留的高方差分量数， n 是输入数据要素的数量（ n 是扁平化图像表示），而RX中的逆协方差矩阵包括所有分量（Chang and Chiang 2002; 瓦格斯塔夫 等人。2019）。

4.3 自动编码器

自动编码器是一种学习数据集中显著特征的神经网络。卷积自动编码器（CAE）由编码器网络组成，用于将输入映射（压缩）到低维编码，以及解码器网络以从编码重建输入（也称为“瓶颈”表示）使用卷积层（Masci等人。2011）。我们使用的CAE在编码器中具有三个卷积层，在解码器中使用了三个转置卷积层。我们使用了 5×5 卷积

表 3 CAE 体系结构。以“E”和“D”开头的层分别是 编码器和解码器的一部分

图层 尺寸 输入 64 × 64 × 6	
E1	64 × 64 × 12
E2	32 × 32 × 8
E3 (瓶颈)	16 × 16 × 3
D1	32 × 32 × 8
D2	64 × 64 × 12
D3 (输出)	64 × 64 × 6

所有层中的内核， 第一层和最后一层的步幅大小为 1 像素，所有其他层的步幅大小为 2 像素。表 3 给出了 CAE 每层的表示形式的大小。瓶颈表示的维度为 16 × 16 × 3，因此输入在被 解码器重建之前 被压缩了 32 倍。CAE 使用典型图像 的数据集进行训练。

CAE 损耗函数 用于 最小化CAE输入和重建之间误差的最常见损耗函数是均方误差 (MSE) (Masci等人。 2011; 熊和左 2016; 里希特和罗伊 2017; 克纳等人。 2019) ， 定义为：

$$E(X)=\frac{1}{NMK}\sum_{k=1}^K\sum_{j=1}^M\sum_{i=1}^N(x_{ij}-\tilde{x}_{ij})^2$$

(7)

其中 x_{ij} 和 \tilde{x}_{ij} 分别是输入和重建图像 X 和 \tilde{X} 在第 i 行、列 j 和带 k 处的像素强度; N 和 M 是 每个图像的空间维度; K 是多光谱波段的数量。 在之前的工作 中已经 提出了其他损失函数，包括二进制交叉熵（其中每个像素的输出被解释为概率） (Alain和Bengio 2014; 克雷斯韦尔等人。 2017) 和互通信息 (Hjelm等人。 2019) 。

MSE损失的一个限制是，具有 相同MSE的两个图像可能具有 非常不同的像素误差空间分布，例如，误差可以 分散为噪声在整个图像中或可能扭曲 图像中主体的结构 (Wang和Bovik 2009) 。 Diaz和Hollmen (2002) 还表明，基于最小二乘法 的方法 可能导致平凡的解和无效的残差来解释异常偏差。结构相似性指数 (SSIM) 最初被提出用于图像质量分析，以克服MSE的这些局限性 (Wang等人。 2004b) 。 SSIM测量 图像 与其压缩版本 之间的 结构信息 退化 (例如，使用JPEG压缩)，其 假设是 人类的视觉系统 专注于场景中的结构信息 (Wang等人。 2004b; Wang和Bovik 2009) 。 将 CAE作为 压缩函数，将重构图像作为 输入图像的 有损形式，我们建议 使用SSIM来优化 CAE 的权重，使 SSIM 最大化。多光谱输入图像 X 与其重建 \tilde{X} 之间的 SSIM 定义为：

$$S(X, \hat{X}) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \frac{(2\mu_{X_k}\mu_{\hat{X}_k} + C_1)}{(2\sigma_{X_k}\sigma_{\hat{X}_k} + C_2)} \quad (8)$$

其中 K 是 X 中的带数, μ_{X_k} 和 $\mu_{\hat{X}_k}$ 是 X 和 \hat{X} 的波段 k 中的平均像素强度; σ_{X_k} 和 $\sigma_{\hat{X}_k}$ 是像素强度在 X 的波段 k 中的变化

和 \hat{X} ; σ_{X_k} 是 X 和 \hat{X} 的带 k 中像素强度之间的协方差; 和 $C_1 = 0.01$ 和 $C_2 = 0.03$ 是确保正值的小常数, 其中 $R = 255$ 是像素强度的动态范围 (Wang 等人, 2004b)。由于我们希望在训练自动编码器时最大化 SSIM, 因此 SSIM 损耗函数可将负 SSIM 降至最低。

最后, 我们建议使用第三个损失函数, 它结合了 MSE 和 SSIM 损失:

$$H(X, \hat{X}) = -S(X, \hat{X}) + \lambda E(X, \hat{X}) \quad (9)$$

5

其中 λ 是用于平衡 MSE 损失幅度与 SSIM 损失幅度的恒定加权因子, 因为 SSIM 值的范围为 $(-1, 1]$ 。在 A 节 5.1, 我们比较了使用 MSE 损失, SSIM 损失以及 MSE 和 SSIM 组合的混合损失训练的 CAE 的性能, 以分离新颖的典型示例。我们没有考虑二进制交叉熵损失, 因为我们希望将每个像素中的重建解释为与输入相比的“预期”信号 (“观察到”) 信号。我们使用 Python 中的 TensorFlow 库来实现 (Abadi 等人, 2015)。

CAE 新颖性评分 当 CAE 用于新颖性检测时, 测试图像的新颖性评分通常被选为 MSE (等式 7) 或 ℓ_2 -范数, 介于输入和重建的图像 (Richter and Roy 2017; 周和帕恩罗斯 2017; 克纳等人, 2019 年):

$$\text{aCAE}(X, \hat{X}) = \|X - \hat{X}\|_2 \quad (10)$$

在之前的工作中, 我们观察到输入图像中的像素和重建图像之间的大部分误差是由于重建中的噪声而不是空间或光谱引起的。重建不良的特征 (Kerner 等人, 2019)。为了解决这个问题, 我们提出了一种新的分数, 可以捕获输入图像和重建图像之间的大误差数量, 我们称之为“异常值计数”。“异常值计数”计算为输入和重建图像之间每个像素中高于平均误差的误差数, 即数字的像素数, 其为以下不等式为真:

$$(x_{ij}^{kj} - \bar{x}_{ij}^{kj}) > \frac{1}{NMK} \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (x_{ij}^{kj} - \bar{x}_{ij}^{kj}) \quad (11)$$

⁵ https://www.tensorflow.org/api_docs/python/tf/image/ssim.

~~多光谱技术新颖性检测方法的比较~~ 1655年, 其中 x_{ij} , \hat{x}_{ij} , N , M , 和 K 被定义为

Eq. 7. 在A节。5.1、我们比较

两个新奇性评分 (ℓ_2 -范数 (等式 10) 和异常值计数 (等值 11)) 的有效性, 用于分离新颖和典型测试示例。

4.4 甘语

生成 对抗网络 (GAN) 是一种 神经网络, 它通过两 个网络的最小最大优化来学习数据集的数据生成分布 (Goodfellow等人。2014) 。 生成器网络 $G(z)$ 从 d 维正态分布 (其中 d 是潜在向量 z 的大小) 采样, 并试图 重建一个 类似于 训练数据集中 的图像的图像 X 。 鉴别器网络 $D(X)$ 试图通过将输入分类为 *真实* 或 *虚假* 来区分训练图像和生成的图像。 鉴别器 *最小化* 训练期间的二进制交叉熵损失, 而 生成器同时 *最大化* 鉴别器损失:

$$C_{\text{迪斯}}(y, y') = y \log(\sigma(\hat{y})) - (1 - y) \log(1 - \sigma(y')) \quad (12)$$

其中 y 是输入图像的二进制标签 (*真实* 或 *虚假*), y' 是 $D(X)$ 的 logit 输出, $\sigma(y')$ 是 sigmoid 函数用于将 logit 映射到 区间 $[0, 1]$:

$$\sigma(y') = \frac{1}{1 + e^{-y'}} \quad (13)$$

在双向GAN (BiGAN) 中, 第三个 称为 编码器网络 $E_G(X)$ 的 *网络* 同时被训练将图像映射到 潜在向量 $z \in \mathbb{R}$ (类似) 到 CAE的编码器网络) (Donahue等人。2017) 。 因此, 在 BiGAN中, 发生器学习 从 编码向量 而不是随机采样的向量 z , 即 $G(E(X))$ 重建图像。 我们使用 BiGAN方法进行新颖性检测 (Zenati等人。2018b, a), 其中 BiGAN 使用 典型图像的数据集进行训练, z 的尺寸为 1×100)。表 4 描述了 BiGAN 体系结构。编码器网络使用 5×5 个卷积内核, 而 生成器和鉴别器网络使用 4 个卷积内核 \times 4 个卷积内核。除编码器网络 的第一层外, 所有卷积层都使用 2×2 像素步幅。图像 的新颖性分数定义为:

$$\text{甘语}(\mathcal{X}, \mathcal{X}) = \frac{G + \alpha D}{(1 - \alpha) L} \quad (14)$$

其中 L_G 是发电机损耗 $\|\mathcal{X} - G(E(\mathcal{X}))\|$, L_D 是 鉴别器特征丢失 $\|f(\mathcal{X}) - f(\mathcal{X})\|$ 其中 $f(\cdot)$ 表示 鉴别器网络 最后一层 (在 logit 输出层之前) 的特征激活, α 是两者之间的恒定权重因子 术语 (Zenati et al. 2018a) 。 我们使用了 $\alpha = 0.1$ 如 Zenati et al. (2018a) 。

表 4 BiGAN 架构 (Zenati 等人。[2018a](#))

图层	尺寸
编码器	
输入	$64 \times 64 \times 6$
E1	$64 \times 64 \times 64$
E2	$32 \times 32 \times 128$
E3	$16 \times 16 \times 256$
输出	1×100
发电机	
输入	1×100
G1	1×256
G2	1×32
G3	$32 \times 32 \times 64$
输出	$64 \times 64 \times 6$
鉴别器	
输入	$64 \times 64 \times 6$
D1	$32 \times 32 \times 64$
D2	$16 \times 16 \times 128$
D3	$8 \times 8 \times 256$
D4	1×512
产出	1×1

5 实验

5.1 自动编码器 丢失 功能

在A节。[4.3](#)，我们描述了三种损耗函数，用于调整 CAE的 编码器和解码器权重以进行新颖性检测：均方误差 (MSE) ([方程 7](#))，结构相似性 (SSIM) ([等式8](#))，以及 MSE和SSIM ([等式9](#)) 相结合的混合损耗。我们使用 $\lambda = 0$ 比较了 混合损失函数的性能。1、0.01, 0.001. 我们训练了 CAE, 直到 三个比较损失函数 (批大小 = 100) 中的每一个都收敛了 验证损失, 并在测试数据集上测试了每个模型 包含典型和新颖的图像示例。图4显示了 接收器工作特性 (ROC) 曲线

对于 CAE, 具有 MSE、SSIM 和混合损耗以及 L_2 -范数 和 异常值计算新颖性分数。ROC 曲线说明了 一系列阈值设置 (在本例中为新颖性的 阈值) 的真阳性率和误报率之间的权衡 将小说与典型例子分开) ([Krzanowski和Hand 2009](#))。对于 每个阈值 , 沿 ROC 曲线具有较高真阳性率和较低误报 率的 点将 更接近图的左上象限 并在曲线下 跨越 更大的区域。因此, 从每条ROC曲线计算的 曲线下面积 (AUC) ([表5](#)) 通常用于 总结模型的辨别性能并进行比较 在选择阈值之前有多个模型 ([Rosset 2004](#))。

CAE-SSIM 和 CAE-Hybrid ($\lambda = 0.01$) 方法与 异常值计数新颖性分数相结合, 与 测试数据集的最高 AUC 分数 (0.65) 并列。然而

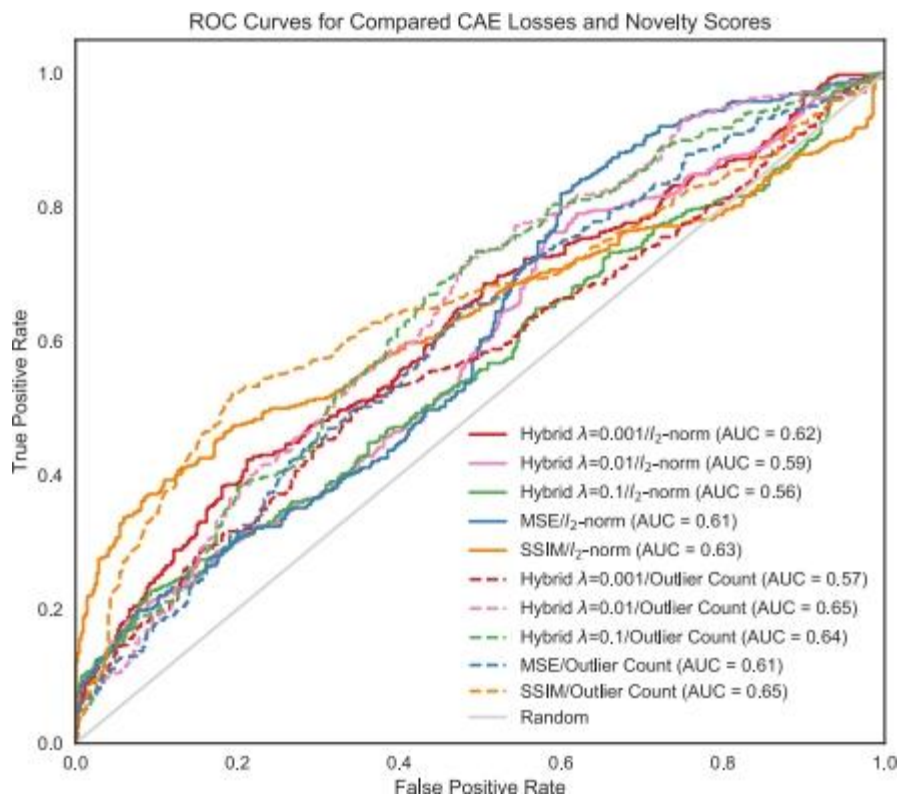


图 4 CAE 的 ROC 曲线，使用三个损耗函数和两个新奇分数中的每一个进行训练（在线彩色数字）

表5 测试数据集上具有MSE、SSIM和混合损失函数的CAE的ROC AUC分数（最高分以粗体显示）	损失 函数 新颖性 评分 AUC
	MSE /2 -norm 0.61 Hybrid (λ= 0.1) /2 -范数 0.56
	混合 (λ= 0.01) /混合 (λ=2-标准 0.59
	0.001) /SSIM /2-标准 0.62
	2-标准 0.63
	MSE 异常值 计数 0.59 混合 (λ= 0.1) 异常值 计数 0.64 混合 (λ= 0.01) 异常值 计数 0.65 混合 (λ= 0.001) 异常值 计数 0.57 SSIM 异常值 计数 0.66

比较这两种方法（橙色与粉红色虚线）的 ROC 曲线 表明，CAE-SSIM 方法以低得多的误报率达到了其最大真阳性率 速率比 CAE 混合方法。 换句话说， CAE-Hybrid 方法 的更高真阳性率将 以牺牲比 CAE-SSIM 方法更多的误报 率为代价（关于 此测试数据集）。 在实践中，对于在操作上用于战术规划的新颖性检测系统，正确优先的新观测与错误优先级的 比率非常重要。优先级 高， 以加快图像审查速度，同时保持 用户对系统的信任 - 因此，在具有等效性的两个模型 之间 AUC 评分， 在其最大真阳性率下具有较低误报 率的模型是首选（本实验中的CAE-SSIM）。

5.2 新颖性 检测 性能

我们评估了Sect 中描述的每种新颖性检测方法。 4.结合 新颖典型 测试数据集。 我们使用 SSIM、MSE 和混合 ($\lambda = 0$) 评估 CAE。 01) 损失函数。我们使用 CAE-SSIM 和 CAE-Hybrid 的异常值计数新颖性评分，以及 CAE-MSE 的 $1/2$ - 标准新颖性评分（即，性能最佳的分数 对于这些损失函数; 见图。 4和表5）。 我们使用 整个新型测试数据集 以及8个新颖子类中的每一个 计算了每种方法的ROC AUC分数（图3, 表2）， 与 典型的测试数据集相结合。我们在图中报告了这些分数。 5和表6。我们将 PCA 方法的结果 标记为“PCA（平放）”， 以 强调此方法的输入表示 形式是扁平化多光谱图像矢量（如 RX（平面）方法）， 与 CAE 和 GAN 方法（其输入为 张量和 RX（像素））形成对比 输入 为像素光谱的方法。 图中的灰色虚线。 5 表示随机 选择 每个示例的新颖或典型方法的 AUC 分数。

对于与 典型测试数据集相结合的整个新型测试数据集，RX（像素）方法具有最佳性能，而RX（平坦）具有最差的性能（否

表6 综合 新型和典型测试数据集以及 每个新型子类的ROC AUC分数

新奇 类	CAE-Hybrid	CAE-MSE	CAE-SSIM	GAN	PCA	f	断续器	断续器											
全部	0.65	0.61	0.66	0.59	0.50	0.49	0.72	陨石	0.50	0.77	0.56	0.74	0.78	0.45	0.97	浮点	0.44	0.82	0.37
0.78	0.87	0.56	0.57	基岩	0.66	0.87	0.16	0.88	0.87	0.42	0.53	静脉	0.58	0.94	0.13	0.96	0.95	0.36	0.22
破碎 的岩石	0.64	0.88	0.38	0.84	0.90	0.49	0.42	自卸 桩	0.66	0.48	0.88	0.49	0.47	0.50	f	0.83	钻孔		
0.81	0.49	0.79	0.52	0.51	0.51	0.90	DRT 点	0.64	0.39	0.85	0.34	0.41	0.52	0.85					

上标“f”表示 输入表示是 平展图像向量，“p”表示输入表示是像素谱。 粗体文本表示 每个类别中最高的 AUC 分数

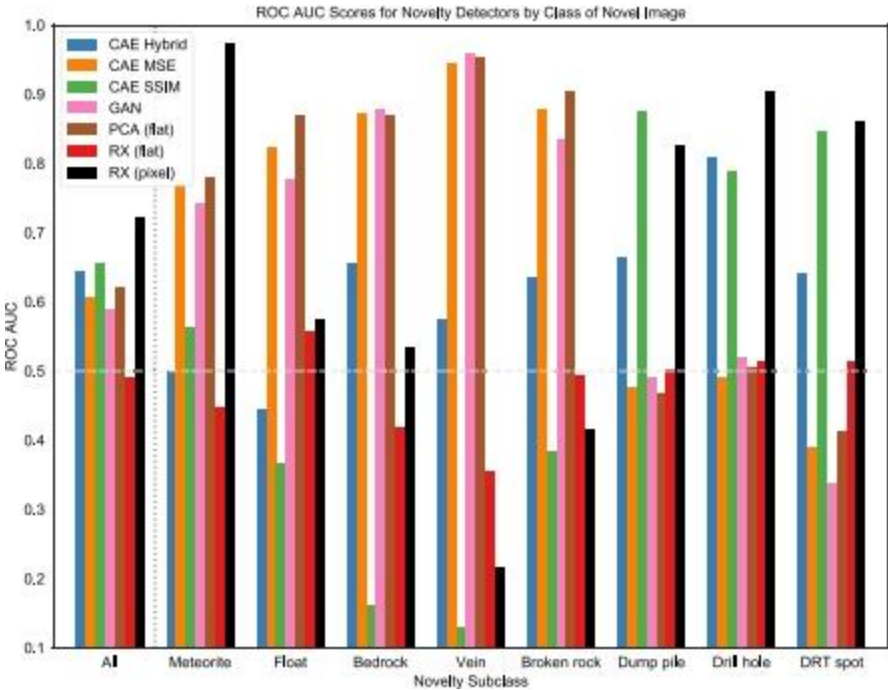


图5 综合新型和典型测试数据集以及 每个新型子类的ROC AUC分数（在线彩色图）

比随机猜测更好）。在浮石、基岩、矿脉和破碎岩类别中，CAE-MSE、GAN 和 PCA 方法的表现相对较好，而 CAE-SSIM、CAE-Hybrid、RX（平坦）和 RX（像素）则表现相对较好。方法明显更差（AUC评分接近或比随机更差）。在钻孔、DRT 点和自卸桩类别中，除 CAE-SSIM、CAE-Hybrid 和 RX（像素）之外，所有方法都表现不佳。在陨石类别中，RX（像素）具有最佳性能，其次是CAE-MSE，PCA和GAN方法的可比性能；CAE-SSIM，CAE-Hybrid和RX（扁平）在陨石类别中表现最差。因为 DRT 点、钻孔 和自卸桩类别在新型测试数据集的频率 高于其他类别（表 2），这些 类别中 RX（像素）、CAE-SSIM 和 CAE-Hybrid 的高性能分数导致使用整个新数据集时 AUC 分数更高，尽管 在其他几个类别中表现不佳。这些结果揭示了 基于模型性能的三组新图像类别：一组 包含钻孔、DRT 点和自卸桩类别；一个包含 浮子，基岩，矿脉和破碎岩石类别；以及一个 包含 陨石类别的类别。我们将在 Sect 中进一步探讨这三个类别的模型性能差异的解释。 7.

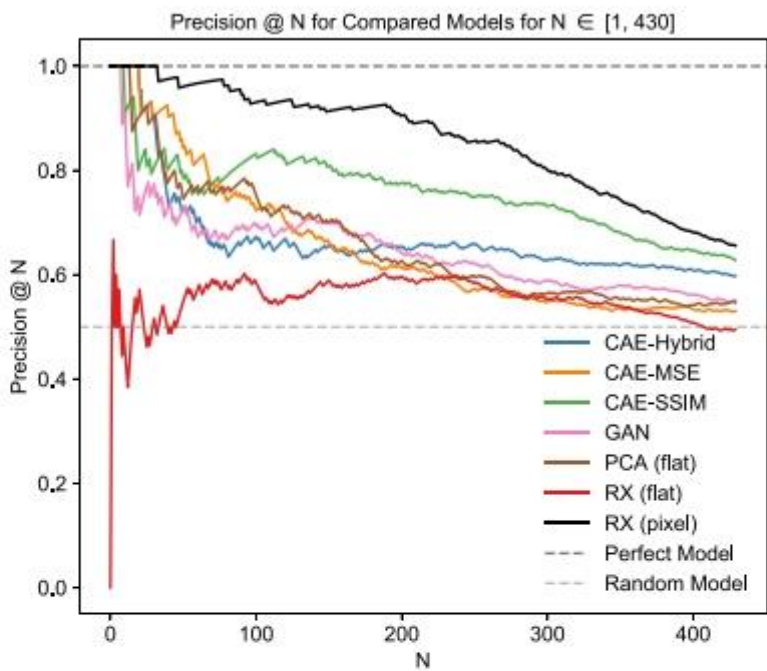


图6 每种方法的N 精度 最高可达 $N = 430$ （测试数据集中的新图像数量）（在线彩色图）

表7 $N = 20$ 时的精度和 最新 20张图像中新颖示例的分数，按新颖性评分方法 $N = 20$ RX 时的精度 $N = 20$ RX 时的假阴性（像素） 1.0 0.46

CAE-MSE	1.0	0.81
PCA（扁平）	0.90	0.05
CAE-Hybrid	0.90	0.30
CAE-SSIM	0.80	0.50
甘	0.75	0.10
RX（扁平）	0.55	0.70

在 $N = 20$ 时具有最高精度的方法，以粗体显示

5.3 新奇排名

在MSL好奇号火星车上的 Mastcam 或其他仪器的科学规划周期中，科学团队成员 处理和分析从火星车向下链接的最新图像的机载计算机，以确定感兴趣的目标 以进行后续分析。因此， 在实践中，科学 团队成员可以从新颖性检测算法中受益，这些算法可以快速确定 最有趣的观察结果的优先级， 例如，通过按新颖性对新图像进行排名。得分。为了评估 每种新颖性检测方法 在这种优先级上下文中的性能，我们对 组合新颖和 组合中的图像 进行了排序。

1 2 3

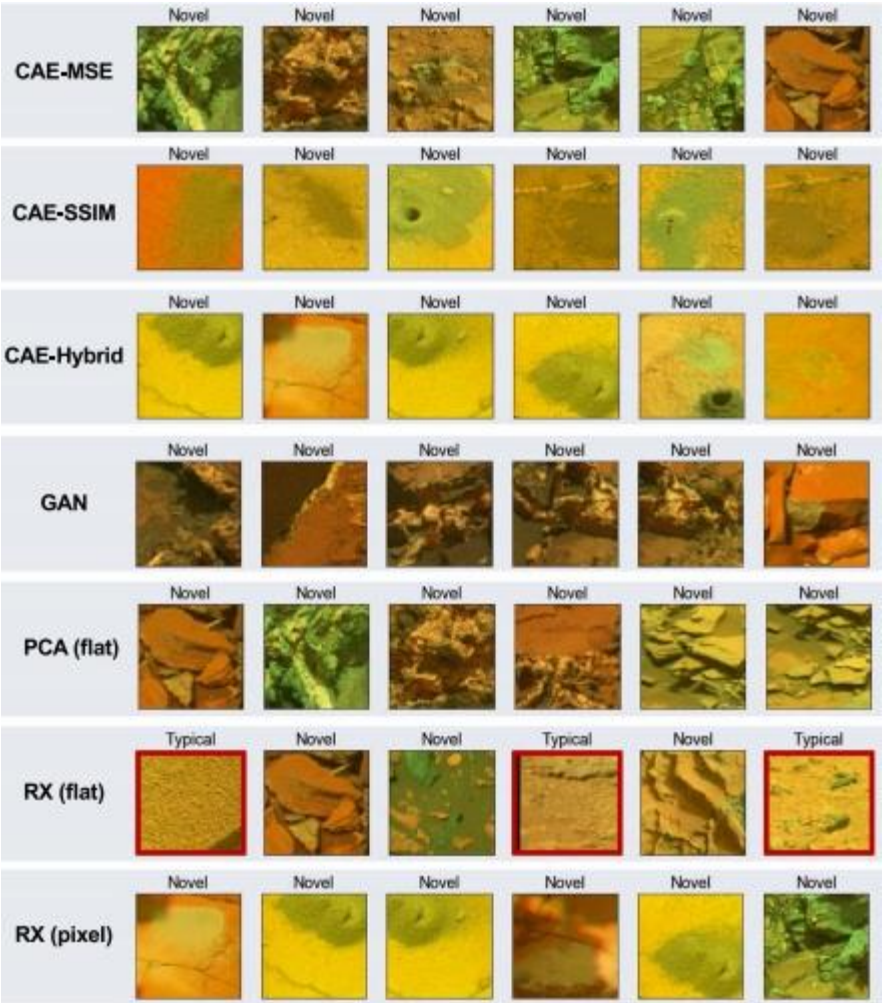


图 7 测试图像，每种方法具有 6 个最高新颖性分数。红色框表示误报（在线彩色数字）

典型测试数据集按新颖性分数降序排列，并计算 $N \in [1, 430]$ （图6）的“N精度”（ $P@N$ ），其中 $N = 430$ 测试数据集中新示例的数量。 N 处的精度是前 N 位中 正确结果的比例（Campos等人。2016年）：

$$P@N = \frac{\text{\#真阳性}}{N}$$

(15)

图 6 显示 RX（像素）方法对于 N 的所有值具有 最高的 $P@N$ 。CAE, GAN和PCA方法显示出类似的趋势，其中 $P@N$ 分数从高开始 然后逐渐下降，但 CAE-SSIM除外，其增加



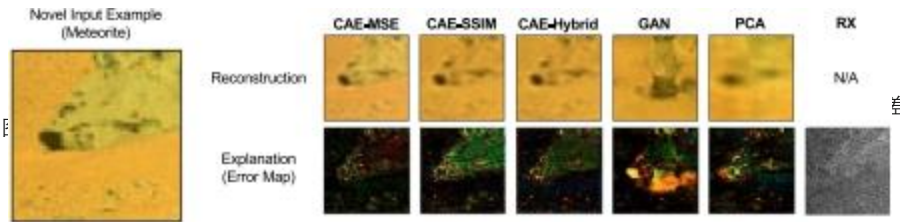
图8 测试图像，每种方法具有6个最低的新颖性分数。红框表示漏报（在线彩色数字）

在 $N = 60$ 左右陡峭。为了帮助科学规划团队将有限的可用时间集中在来自一组新下行的多光谱图像观测中最有希望的观测上，这一点更为重要。对于 N 的低值，具有较高的 $P@N$ ，并尽可能少地出现假阴性（表示错过的新奇事物）。表7显示了 $N = 20$ 时的精度以及最新20张图像中新颖示例的新颖性分数（ N 处的假阴性）。RX（像素）和 CAE-MSE 方法在 $N = 20$ 时具有最高的精度，但 RX（像素）方法具有较低的假阴性率。PCA 在 $N = 20$ 时具有最低的假阴性分数， $P@N = 20$ 分数接近 1.0（总体最佳 $P@N$ 分数）。因此，我们得出结论，RX（像素），CAE-MSE 和 PCA 方法具有 $P@N$ 测量的最佳性能。

在图中。7，我们使用 每种方法显示 6张新奇得分最高的图像，以及图中最低新颖性得分的图像。8. 图 7 显示，除 RX (flat) 之外的所有方法都正确地识别了前 6 个排名中的新示例。图 8 显示 PCA 和 GAN 方法都正确地识别了底部 6 中的典型示例，而所有其他方法在底部6张图片。PCA 和 GAN方法评选最不新颖的图像主要包含训练数据集中经常出现的特征 - 校准目标（黑色圆柱形）顶部有球体 的物体）和沙子。

6 解释

为了使所提出的新颖性检测方法 在实践中有用，它们 还必须提供解释性的可视化，使科学家能够信任并理解为什么图像是识别的。小说是新颖的，图像中的 哪些特征是新颖的。由于 GAN, CAE 和 PCA 方法是 基于重建的方法，其中整体图像的新颖性分数是输入之间相似性的某种度量 和重建图像，输入和重建图像之间的残差可 用作输入图像中 要素的可视化（两者都在空间中）和光谱尺寸）， 模型重建 得很差（如 Kerner 等人。2019; Diaz and Hollmen 2002，例如）。我们将 残差或误差映射 $\delta(X, \hat{X})$ 定义为包含元素 $(x_{i,j} - \hat{x}_{i,j})$ 的 $64 \times 64 \times 6$ 张量 \hat{i}_j for $i = 1, \dots, N$, $j = 1, \dots, M$, 和 $k = 1, \dots, K$ 其中 $N = 64$ 是行数， $M = 64$ 是列数， $K = 6$ 是每个多光谱图像中的通道数（Kerner 等。2019）。RX 不是一种基于重建的方法，但 RX 是否计算图像中每个像素的异常评分，该像素 可以 可视化 为单通道图像。在图中。9，我们展示了 每个模型的 重建和解释可视化（GAN, CAE 和 PCA 方法的错误映射；RX 的像素异常得分）来自包含镍铁陨石的新型测试数据集的示例。在除RX之外的所有误差图中，我们以 波段 2，0 和 1显示 误差（与输入和重建图像所示的波段相同）。图9显示了 使用所示示例的所有三种CAE方法产生的类似解释，其中误差图中的大多数高误差像素 对应于 新型陨石。在 输入图像中（尽管不同的波段在三种方法之间具有较高的误差）。PCA 误差图还显示 与



陨石像素，但它们 在陨石区域上的分布 似乎不如CAE误差图 中均匀分布，并且误差最大的 是集中在 陨石。在RX可视化 中，可以 辨认出陨石的 结构，但误差图很嘈杂，陨石没有 明显突出 从背景中，就像在其他方法中 一样。

GAN误差图 显示了 高误差 像素和 陨石 之间的一些 重叠，但是 存在 与 陨石 不重合的大簇高误差 像素。输入图像 的 GAN 重建 似乎 显示了 类似于 Mastcam 校准 目标和岩石 的特征，而不是陨石的 较低分辨率 版本 就像在其他 方法中 一样。在训练期间，BiGAN 的 编码器 网络 学习 根据 特征图 中的激活 将 典型 图像 从 训练 数据集 映射到 潜在 向量 $z \in \mathbb{R}^{100}$ 在训练 期间 学到的，使 生成器 网络 能够 生成 类似于 z 中 训练 数据集中 的图像。其 结果是 训练 数据集中的 类似 图像 将位于 潜在 z 空间中的 附近，并且 潜在 空间中 的 聚类 应 包含 具有 相似 特征 的图像（例如，校准 目标 或 沙子）（Donahue 等人。2017）。给定一个 与 训练 数据集中 其他 典型 图像 共享 特征的 典型 测试 图像，我们希望 编码器 映射 输入 图像 到 潜在 空间中 靠近 类似 图像 的表示。但是，给定一个 新颖 的测试 图像，我们不应 该 期望 编码器 将 输入 映射 到 有意义的 编码 z ，因为 特征 提取 对 编码器的（卷积）层 进行了 调整，以 提取 典型 训练 图像 中 常见的 features。因此，生成的 图像 可能 看起来 与 新颖 的输入 图像 不同，因为它 是以 编码器 中的 虚假 激活 为条件 的。我们将在 第三节中 进一步 探讨 这一点。7.

在分析多光谱图像时，科学家通常使用 光谱分析工具来检查 图像中一 组 像素中的 光谱。规格 是 x 轴 上的 波长 和 y 轴 上的 反射率 的图。科学家 将 观察到的 光谱 与 二分 物质的 已知 光谱 模式和 特征 进行比较，以 得出 对 观测 数据的 解释（惠灵顿 等人）。铝。2017a）。而图。图9以 图像 的 形式 显示 输入 与其 重建 之间的 残余 误差，我们还可以 可视化 输入 与其 重建 之间的 残余 误差 用于 每个 多光谱 通道 中的 单个 像素 值。因此，所有 通道 上 单个 像素 的 残差 表示 每个 波长 的 反射率 中 新颖性 的 大小 和 方向。光谱。

图10（左）显示了 包含 图中 铁 陨石 的 新 图像 和 CAE-MSE 误差图。9，具有 最高 误差（最新颖）和 最低 误差（最不新颖）的 像素 分别 以 紫色 和 绿色 表示。在 图中的 右侧。10，我们 绘制了 输入 图像 中 这两个 像素 位置 的所有 波段 的 值谱 与 重建 图像 的 比较。使用 这种 可视化，科学家 可以 快速 识别 每个 波段 中 新颖性 的 方向 和 程度，并将 这些 信息 与 他们的 领域 专业知识 相结合，以 对 新奇性 进行 地质 解释。在本例中，比较 新颖 的 像素 输入 和 重建 的 光谱，显示 滤光片 3（805 nm）中的 反射率 较低，而 滤光片 中的 反射率 较高 滤光片 6（1013 nm）比 CAE-MSE 模型 预期（重建）的 要大。805 nm 波段 的 下部 反射率 表明 岩石 较少 的 红色 或 灰尘 较少，这与 深色 外观 一致 铁 陨石。这

1 2 3

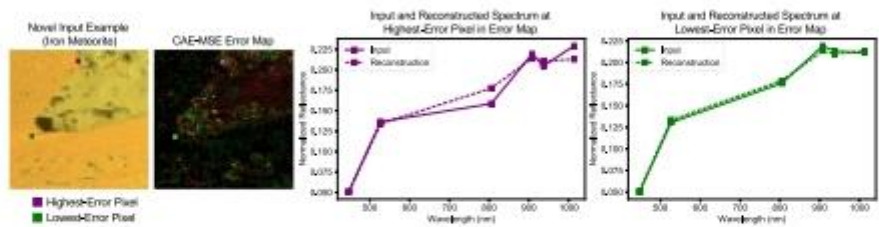


图10 新颖的输入图像和误差图，例如 包含 部分铁陨石， 像素位置具有最高（最新颖）和最低（最新颖）重建误差分别以紫色和绿色表示。图比较了新颖和典型像素位置的归一化输入和重建光谱。每个像素中的 反射率值通过除以 光谱中所有值的总反射率进行归一化（在线颜色图）

1013 nm 波段 的反射率较高，导致从滤光片 5（937 nm）到滤光片 6 的正斜率，这与 近红外反射的增加 一致 相对于 火星本地 材料，铁陨石的典型值（Gaffey 1976; 惠灵顿等 2017a）。相反，比较 最小新颖（典型）像素 的输入和重建光谱表明，观察到的（输入）和预期的（重建）光谱显示最小差异。这种类型的 解释是通过基于重建的方法实现的，因为它需要一个重建的信号来与输入信号进行比较，因此这种解释不是 可用于 RX探测器（这不是 基于重建的方法）。

7 讨论

7.1 CAE 损耗 函数

在 A 节。5.2，我们发现 CAE-SSIM 在 检测 DRT 点、 钻孔 和 自卸 桩 中的新实例方面，性能优于除RX（像素）以外的所有方法。子类，但 与其他 方法 相比，其他子类的性能较差。这三种 CAE 方法之间的唯一区别是 用于训练模型的损失函数。在图中。11，我们展示了 来自 静脉子类（左）和 DRT 斑点子类（右）的示例新图像。对于每个图像，我们显示了 来自 CAE-MSE，SSIM 损耗 和混合 ($\lambda = 0.01$) 损失 以及 输入图像和重建图像之间的误差图。误差 图显示输入图像中 未由每个模型重建的特征，因此未通过损失函数进行优化。在矿脉示例中（图 11，左图），浅色调矿脉的矿物学是新特征，因此，如果模型将矿脉检测为 新颖的，我们期望看到彩色像素在空间上与输入图像中的静脉对齐。CAE-MSE 和 CAE-Hybrid 缺失都 检测到 静脉是新颖的。虽然 CAE-SSIM 误差图包括 矿脉，但它也 包括 整个岩石，使其分散以区分岩石还是矿脉 被检测为新奇。在形态学上新颖的例子中（图 11，右图），DRT 去除 灰尘的明亮椭圆 是新特征，这是一种空间模式，在训练数据集中的典型图像。当使用 MSE 损失 训练 CAE 时，

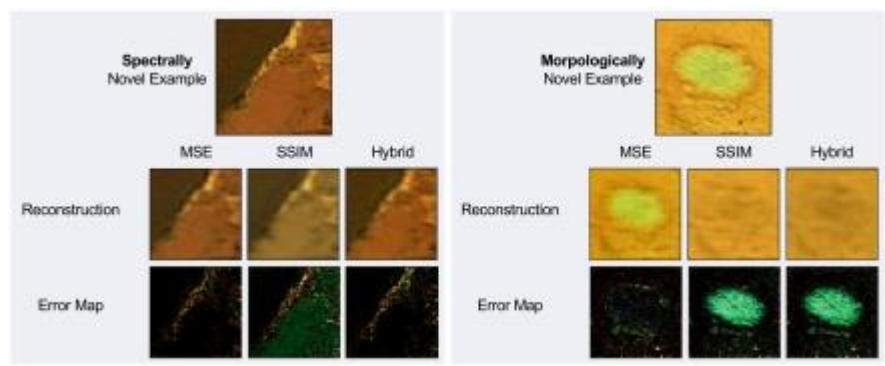


图11 具有 CAE重建和误差图的新型测试数据集的光谱 （左）和形态学（右）新示例

模型很好地重建了图像的形状，在椭圆的边界处有一些模糊；但是，当CAE被训练以优化SSIM或SSIM和MSE的组合时，CAE根本不会重建DRT点。

这表明，在训练CAE时优化SSIM可以在训练期间保留输入和重建之间的空间结构，但代价是光谱信息，导致潜在特征图主要编码spatial信息。这导致了形态学上的新颖性，如图中的DRT斑点。在测试时重建得很差（或根本没有）。相比之下，MSE是输入和重建之间像素强度均值差的度量，不测量任何空间关系，因此令人鼓舞。潜在的特征编码了原始的光谱信息。这导致在测试时很难重建光谱新颖性。混合损耗旨在利用MSE和SSIM的优势来检测光谱和形态上的新特征，但选择最佳 λ_{mix} 的设置取决于特定的应用程序或数据集。

7.2 RX 像素 表示

结果如图所示。结果表明，在比较方法中，只有RX（像素）和结构相似性训练的CAE（SSIM和Hybrid）对自卸桩、钻孔、和DRT点类别。在上一节中，我们通过区分光谱和形态学新颖性，讨论了为什么CAE与SSIM与MSE损失的情况。由于RX（像素）的输入表示是没有任何空间上下文的单个像素频谱，因此这并不能解释RX在这些类别中的卓越性能。我们观察到，对于除陨石以外的所有新类别，当RX（像素）得分高时，PCA、GAN和CAE-MSE方法的得分较低，并且反之亦然。输入表示是PCA的扁平化多光谱图像矢量和GAN和CAE-MSE方法的多光谱图像张量。这两种制图表达都包括空间上下文。RX（像素）的良好性能和其他方法在自卸桩、钻孔和DRT光斑类别中的性能较差表明，空间上下文执行

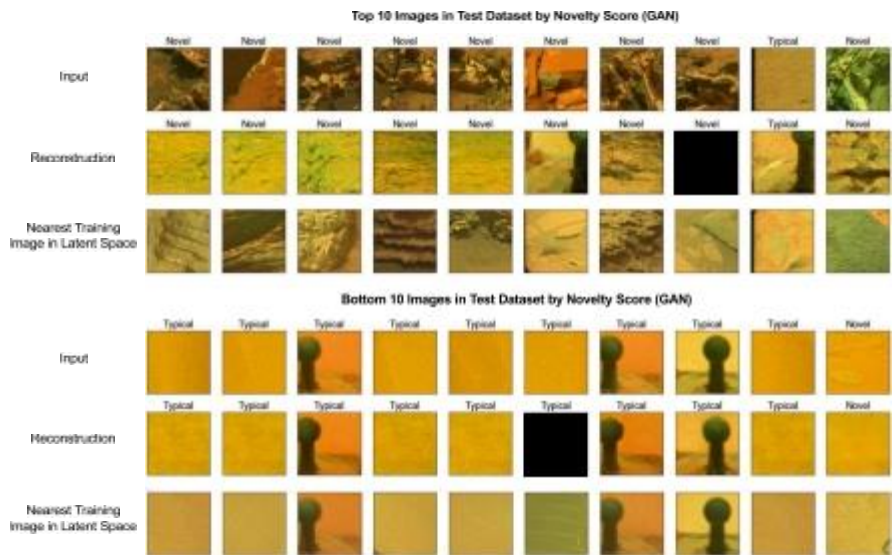


图 12 使用 GAN 方法的测试数据集中具有最高（顶部）和最低（底部）新颖性分数的图像，以及每个测试数据集的 GAN 重建（生成器输出）输入和离潜在空间中训练数据集最近的图像。输入图像上方的标签表示图像标签（新颖或典型）

无助于识别这些新颖性（除非模型被训练成像 SSIM 一样对空间信息进行编码）。相反，PCA、GAN 和 CAE-MSE 方法的良好性能以及 RX（像素）在浮石、基岩、矿脉和破碎岩石类别中的较差性能表明，空间背景确实有助于识别这些类别中的新颖性。这种性能差异也可能是我们根据该方法的像素 RX 分数计算整个图像的新颖性分数的结果，即，通过计算图像中所有像素的平均 RX 分数。这可能会导致图像的新奇性得分很高，这些图像包含相对于图像中大多数其他像素的强烈异常值的光谱（因此偏向平均值），或者其中新颖的特征跨越了图像中总像素的很大一部分（因此是新颖的像素分数不会被大量低非新颖像素分数稀释）。这也可以解释 RX（像素）在陨石类别中的良好性能，因为陨石在近红外（加菲 1976; 惠灵顿等 2017a），陨石覆盖了我们数据集中大多数图像中大部分框架（见图。例如，3 和 9）。

7.3 GAN 重建

我们在 Sect 中讨论过。6. 我们不应该期望 BiGAN 编码器网络将新图像映射到潜在向量 z ，从而使生成器网络能够重建出现的图像。类似于新颖的输入图像，因为它可能以编码器网络中的虚假激活为条件，因为编码器是用典型的训练图像训练的。为了验证这个假设，在图中。12 我们用

使用 GAN 方法的测试数据集中最高（顶部）和最低（底部）新颖性分数 - 根据以下表示测试数据集中“最新颖”和“最典型”的图像 GAN 模型，以及潜在空间中训练数据集的重建（生成器输出）和最接近的图像（使用欧氏距离）。大多数典型图像都包含训练数据集中经常观察到的校准目标或沙子，并且重建的图像与输入图像。在包含 DRT 斑点的 10 张得分最低的图像中，有一张新图像。虽然重建的图像显示新特征（DRT 点）没有保留（正如预期的那样，因为训练数据集没有包含任何 DRT 斑点），与 DRT 斑点相对应的像素强度差异可能不够大，无法产生高新颖性得分。图中的大多数小说图像。12 张（上图）包含矿脉，但第六幅图像包含碎石，第九幅图像包含可能错误分类的典型图像。由于图像左侧的黑色条纹（图像伪影）而新颖。具有此黑色条纹的图像已从训练数据集中过滤掉，因此在测试图像中看到此功能时，可能（有充分的理由）是误以为是小说。静脉图像的重建在视觉上彼此相似，但与输入图像几乎没有相似之处。潜在空间中与这些新输入最接近（典型）的训练图像也是不同的，但似乎具有相似的整体着色或包含线性特征，这表明这些特征可能由编码器网络中的卷积层提取。在诸如此类的示例中，我们在 Sect 中讨论的解释性可视化。对于希望了解输入图像中的哪些特征被探测器认为是新颖的科学家来说，9 可能没有用处。这是 GAN 方法在新颖性检测方面的重要限制，而能够对检测进行解释性可视化的 GAN 方法可能是一种对未来工作的宝贵主题。

图中的前 10 个和后 10 个图像中都有一个图像。12，其中重建的图像包含所有零。虽然这些图像看起来与行中的其他图像几乎相同（新示例为矿脉，典型示例为沙子），但重建是异常和最接近的训练图像与每行中相似输入图像的图像不相似。这表明 GAN 方法在新颖性检测方面也可能存在一些不稳定性。

8 结论

以前探索多光谱图像和科学数据的新颖性检测方法的工作有限。在这项工作中，我们比较了自动编码器，GAN，PCA 和 RX 方法的性能，这些方法用于在多光谱图像中优先处理具有新颖地理逻辑特征的图像。Mastcam 成像系统获得的火星表面，以加速火星科学实验室（MSL）好奇号火星车的战术规划。我们发现，根据 ROC AUC 分数和精度@N 来衡量，RX（像素）方法具有最佳的整体性能，但可能不是最合适的。有效的解释性可视化，允许用户了解图像中被检测为新颖的特征。对于 CAE 方法，我们表明，在训练期间最大化结构相似性（SSIM）可以准确识别形态学上新颖的特征，这些特征是大多数其他方法未检测到

(包括使用 均方误差训练的 CAE)。对于具有光谱 nov-elties 的图像，我们发现 具有 MSE 损失和 PCA 的 CAE 具有最佳性能。CAE 方法 还被证明可以在图像和像素光谱水平上为新检测 提供更有效 的解释可视化。最后，我们证明了 现有的 GAN 新颖性检测方法在实现检测的解释可视化 方面的能力 可能受到限制，这对于 它们在新颖性检测应用中的实际应用。 在未来的 研究中，我们计划研究选择自动编码器损耗函数对 不同类型新颖 性检测性能的影响 (例如， 光谱与形态学) 以及残差图像的可解释性[例如，如 Diaz 和 Hollmen (2002) 所示的一般回归 神经网络]。

在对新颖性检测方法 的比较 进行研究之后，我们正在 积极将这些方法的接口开发到 MSL 和 Mars 2020 的战术规划过程中，在 实际环境中评估他们的好坏。 此外，我们正在 研究 使用这些和其他 新颖性检测方法来识别目标，以便在漫游车上进行后续分析，作为 基于新颖性的 收集增加科学 的自主探索 (AEGIS) 自主瞄准系统的变体 (Francis 等人， 2017)。虽然 本研究中 提出的深度学习 方法 (自动编码器和 GAN) 的训练时间比 PCA 和 RX 更长，但所有方法都有类似的推理。使用 GPU 的测试示例的时间 (本研究使用了 Tesla M60 GPU)，因此 同样适用于 地面分析。 然而，深度学习 模型的大小和复杂性会给 它们在漫游车的车载计算机上的实现带来问题，因此我们将评估 PCA，RX 和其他 计算效率更高的方法。最后，我们计划 扩展 这项工作，以探索火星，地球和其他行星的轨道遥感图像的新颖性检测系统，以优先考虑 包含罕见表面特征或大气现象的图像。

这项工作 部分由 NASA STTR#80NSSC17C0035 和 NASA / JPL 资助，来自 火星科学实验室 Mastcam 仪器调查。它是 (部分) 在 加州理工学院 喷气推进实验室进行的，根据 与美国国家航空航天局的合同，并获得了资金。通过 内部战略大学研究部分 (SURP) 计划。

开放获取 本文 采用 知识共享 署名 4.0 国际许可协议进行许可，该许可证 允许以任何媒介或格式使用，共享，改编，分发和复制，如 只要您给予原作者和来源适当的信用，提供知识共享 许可的链接，并指明是否进行了更改。 本文 中的图像或其他 第三方材料 包含在 文章的知识共享许可中，除非在 材料。如果材料 未包含在 文章的知识共享许可中，并且您 的预期用途 不受法律规定 允许或超过 允许的使用， 您需要 直接获得版权所有者的许可。要查看此许可证的副本，请访问 <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>。

引用

阿巴迪 M，阿加瓦尔 A，巴勒姆 P，布雷夫多 E，陈 Z，雪铁龙 C，科拉多 G，戴维斯 A，迪恩 J，德文 M，格马瓦特 S，古德费罗 I，竖琴 A，欧文 G，伊萨德 M，贾 Y，凯撒 L，库德鲁 M，莱文伯格 J，曼 D，蒙加 R，摩尔 S，穆雷 D，什伦斯 J，施泰纳 B，萨茨克一世，塔克 P，范胡克 V，瓦苏德万

- V, Vinyals O, Warden P, Wicke M, Yu Y, Zheng X (2015) TensorFlow: Large-scale machine learning on 异构 分布式 系统。 <https://doi.org/10.1038/nn.3331>
- Abe N, Zadrozny B, Langford J (2006) 通过采样进行异常值检测, 并保证准确性。在: ACM SIGKDD 知识发现和数据挖掘国际会议 (KDD)。第 767-772 页。 <https://doi.org/10.1145/1150402.1150501>
- Agyemang M, Barker K, Alhajj R (2006) 对数字和符号异常值挖掘技术的全面调查。智能数据肛门 10 (6): 521-538。 <https://doi.org/10.3233/IDA-2006-10604>
- Akcaay S, Atapour-Abarghouei A, Breckon T (2018) GANomaly: 通过对抗训练进行半监督异常检测。在: 亚洲 计算机视觉会议 (ACCV)。第 622-637 页
- Alain G, Bengio Y (2014) 正则化自动编码器从数据生成分布中学到了什么。J Mach Learn Res 15: 3743-3773
- An J, Cho S (2015) 基于变分自动编码器的异常检测, 使用重建概率。技术。SNU数据挖掘中心 代表
- Angiulli F, Pizzuti C (2002) 高维空间中的快速异常值检测。在: 欧洲 数据挖掘和知识发现 原则会议 (PKDD)。第 15-27 页。 https://doi.org/10.1007/3-540-45681-3_2
- Antipov G, Baccouche M, Dugelay JL (2017) 通过条件生成对抗网络面对衰老。在: IEEE 图像处理国际会议。第 2089-2093 页。 <https://doi.org/10.1109/ICIP.2017.8296650>
- Ayhan B, Dao M, Kwan C, Chen HM, Bell JF, Kidd R (2017) 一种新颖的利用图像配准技术在火星探测器中处理Mastcam图像, 并应用于图像 融合、像素聚类和异常检测。IEEE J Sel Top Appl Earth Observ Remote Sens 10 (10): 4553-4564。 <https://doi.org/10.1109/JSTARS.2017.2716923>
- Bay SD, Schwabacher M (2003) 使用随机化和简单的修剪规则在近线性时间中挖掘基于距离的异常值。在: ACM SIGKDD 知识发现和数据挖掘国际会议 (KDD)。第 29-38 页。 <https://doi.org/10.1145/956750.956758>
- 贝尔 JF, 戈德伯 A, 麦克奈尔 S, 卡普林格 MA, Maki JN, Lemmon MT, Van Beek J, Malin MC, 惠灵顿 D, Kinch KM, Madsen MB, Hardgrove C, Ravine MA, Jensen E, Harker D, Anderson RB, Herkenhoff KE, Morris RV, Cisneros E, Deen RG (2017) 火星科学实验室好奇号火星车桅杆凸轮仪器: 飞行前和飞行中校准, 验证和 数据归档。地球空间科学 4 (7): 396-452。 <https://doi.org/10.1002/2016EA000219>
- Bell III J, Calvin W, Farrand W, Greeley R, Johnson J, Joliff B, Morris R, Sullivan R, Thompson S, Wang A, Weitz C, Squyres S (2008) Mars Exploration Rover Pancam multispectral 古塞夫陨石坑和子午线平原的岩石, 土壤和尘埃成像。在: 贝尔 III J (编辑) 火星表面: 组成, 矿物学和物理性质, 第 13 章。第 281-314 页
- Bell III JF, Maki JN, Mehall GL, Ravine MA, Caplinger MA (2016) Mastcam-Z: 为 NASA Mars 2020 漫游车设计一对地质, 立体和多光谱变焦相机。载于: 第三届 行星飞行任务仪器国际 研讨会, 第 1980 卷
- Bhattacharjee S, Mandal D, Biswas S (2019) 基于自动编码器的新奇检测, 用于广义零射击学习。在: 2019 IEEE 图像处理国际会议 (ICIP)。第 3646-3650 页。 <https://doi.org/10.1109/ICIP.2019.8803562>
- Blake D, Vaniman D, Achilles C, Anderson R, Bish D, Bristow T, Chen C, Chipera S, Crisp J, Des Marais D, Downs RT, Farmer J, Feldman S, Fonda M, Gailhanou M, Ma H, Ming DW, Morris RV, Sarrasin P, Stolper E, Treiman A, Yen A (2012) 火星科学实验室 CheMin 矿物学仪器的表征和校准。空间科学修订版 170 (1-4): 341-399。 <https://doi.org/10.1007/s11214-012-9905-1>
- Breunig MM, Kriegel HP, Ng RT, Sander J (2000) LOF: 识别基于密度的局部异常值。在: ACM SIGMOD 关于数据 管理的国际会议。第 93-104 页。 <https://doi.org/10.1145/342009.335388>
- Budalakoti S, Srivastava AN, Akella R, Turkov E (2006) 大型 高维符号序列中的异常检测。技术。众议院 TM-2006-214553, 美国宇航局艾姆斯研究中心
- Campbell C, Bennett KP (2001) 新颖性检测的线性规划方法。在: 神经信息处理系统的进步 (NIPS)。第 395-401 页
- Campos GO, Zimek A, Sander J, Campello RJGB, Micenkova B, Schubert E, Assent I, Houle ME (2016) 关于 无监督异常值检测的评估: 度量, 数据集和 实证研究。数据 Min Knowl Discov 30 (4): 891-927。 <https://doi.org/10.1007/s10618-015-0444-8>

- Carrera D, Boracchi G, Foi A, Wohlberg B (2015) 通过卷积稀疏模型检测异常结构。在: 神经网络国际联合会 (IJCNN)。第 1-8 页。 <https://doi.org/10.1109/IJCNN.2015.7280790>
- Chandola V, Banerjee A, Kumar V (2009) 异常检测。ACM Comput Surv 41 (3): 1–58. <https://doi.org/10.1145/1541880.1541882>
- Chang CL, Chiang SS (2002) 高光谱图像的异常检测和分类。IEEE Trans Geosci Remote Sens 40 (6): 1314–1325. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2002.800280>
- Chiu AL, Fu AWc (2003) 局部异常值检测的增强功能。在: 国际数据库工程和应用研讨会。第 298–307 页。 <https://doi.org/10.1109/IDEAS.2003.1214939>
- Clifton DA, Bannister PR, Tarassenko L (2007) 喷气发动机振动数据中新颖性检测的框架。Key Eng Mater 347: 305–310. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.347.305>
- Creswell A, Arulkumaran K, Bharath AA (2017) 关于去噪自动编码器训练以最小化二进制交叉熵。arXiv 预印本 arXiv: 1708.08487
- Desforges MJ, Jacob PJ, Cooper JE (1998) 概率密度估计在工程中异常条件检测中的应用。机甲工程学报 212 (8): 687–703. <https://doi.org/10.1243/0954406981521448>
- Diaz I, Hollmen J (2002) 残差生成和可视化, 用于理解新的工艺条件。在: 神经网络国际联合会。IJCNN'02 (Cat. 编号: 02CH37290)。第 2070–2075 页。 <https://doi.org/10.1109/IJCNN.2002.1007460>
- Donahue J, Krahenbuhl P, Darrell T (2017) 对抗特征学习。在: 学习表征国际会议 (ICLR)。第 1–18 页
- Dong HW, Hsiao WY, Yang LC, Yang YH (2018) MuseGAN: 用于符号音乐生成和伴奏的多轨顺序生成对手网络。在: AAAI 人工智能会议。第 34–41 页
- Erfani SM, Rajasegarar S, Karunasekera S, Leckie C (2016) 使用具有深度学习的线性单类 SVM 进行高维和大规模异常检测。模式重验 58: 121–134. <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2016.03.028>
- Ertöz L, Steinbach M, Kumar V (2003) 在文档集中查找主题: 共享的最近邻方法。Clust Inf Retr 11: 83–103. https://doi.org/10.1007/978-1-4613-0227-8_3
- Filippone M, Masulli F, Rovetta S (2010) 在核诱导中应用可能性 c 均值算法空间。IEEE Trans Fuzzy Syst 18 (3): 572–584. <https://doi.org/10.1109/TFUZZ.2010.2043440>
- 弗朗西斯 R, 埃斯特林 T, 多兰 G, 约翰斯通 S, 盖恩斯 D, 维尔玛 V, 伯尔 M, 弗莱登旺 J, 蒙塔尼奥 S, 维也纳 R 等人 (2017) 火星科学实验室 chemcam 的宙斯盾自主瞄准: 部署和初始科学团队使用的结果。科学机器人 2 (7): ean4582. <https://doi.org/10.1126/scirobotics.2017.02.000003>
- Gaffey MJ (1976) 陨石类的光谱反射特性。地球物理学杂志 81 (5): 905–920. <https://doi.org/10.1029/JB081i005p00905>
- Ghohing A, Parthasarathy S, Otey ME (2008) 快速挖掘高维数据集中基于距离的异常值。数据 Min Knowl Discov 16 (3): 349–364. <https://doi.org/10.1007/s10618-008-0093-2>
- Goodfellow I, Pouget-Abadie J, Mirza M, Xu B, Warde-Farley D, Ozair S, Courville A, Bengio Y (2014) 生成对抗网。在: 神经信息处理系统的进步 (NIPS)。页码 2672–2680
- GRotzinger JP, Crisp J, Vasavada AR, Anderson RC, Baker CJ, Barry R, Blake DF, Conrad P, Edgett KS, Ferdowski B, Gellert R, Gilbert JB, Golombek M, Gómez-Elvira J, Hassler DM, Jandura L, Litvak M, Mahaffy P, Maki J, Meyer M, Malin MC, Mitrofanov I, Simmonds JJ, Vaniman D, Welch RV, Wiens RC (2012) 火星科学实验室任务和科学调查。太空科学修订版 170 (1–4): 5–56. <https://doi.org/10.1007/s11214-012-9892-2>
- He Z, Xu X, Deng S (2003) 发现基于集群的局部异常值。Pattern Recogn Lett 24 (9–10): 1641–1650. [https://doi.org/10.1016/S0167-8655\(03\)00003-5](https://doi.org/10.1016/S0167-8655(03)00003-5)
- Hinton GE, Salakhutdinov RR (2006) 用神经网络降低数据的维度。科学 313 (5786): 504–507. <https://doi.org/10.1126/science.1127647>
- Hjelm RD, Fedorov A, Lavoie-Marchildon S, Grewal K, Bachman P, Trischler A, Bengio Y (2019) 通过相互信息估计和最大化学习深度表示。在: 国际学习代表会议 (ICLR)
- Hodge VJ, Austin J (2004) 异常值检测方法的调查。Artif Intell Rev 22 (2): 85–126. <https://doi.org/10.1007/s10462-004-4304-y>

- Jablonski JA, Bihl TJ, Bauer KW (2015) 高光谱异常检测的主成分重建误差。IEEE Geosci Remote Sens Lett 12 (8) : 1725–1729. <https://doi.org/10.1109/LGRS.2015.2421813>
- Japkowicz N, Myers C, Gluck M (1995) 分类的新奇检测方法。载于：国际 人工智能 联合会会议 (IJCAI)，第1卷。第518–523页
- Johnson JR, Bell JFI, Gasnault O, Le Mouellic S, Rapin W, Bridges J, Wellington DF (2014) 火星科学实验室 (MSL) 好奇号探测器观测到的第一颗陨石。在：美国地球物理联盟 (AGU) 秋季会议
- J小奥森, 贝尔 J III, 本德尔 S, 布兰尼 D, 克劳蒂斯 E, 德弗洛雷斯 L, 埃尔曼 B, 加斯诺特 O, 贡代特 B, 金奇 K, 莱蒙 M, 勒穆埃利奇 S, 莫里斯 S, 赖斯 M, 维也纳 R (2015) ChemCam火星 好奇号着陆点表面材料的被动反射光谱。伊卡洛斯249: 74–92. <https://doi.org/10.1016/J.ICARUS.2014.02.028>
- Kerner HR, Wellington DF, Wagstaff KL, Bell JF, Ben Amor H (2019) 多光谱图像的新颖性检测，应用于行星探索。在：AAAI 人工智能 会议。第9484–9491页。 <https://doi.org/10.1609/aaai.v33i01.33019484>
- Kim D, Kang P, Cho S, HJ Lee, Doh S (2012) 基于机器学习的新颖性检测，用于半导体制造中的故障晶圆检测。专家系统应用 39 (4) : 4075–4083。 <https://doi.org/10.1016/J.ESWA.2011.09.088>
- Krzanowski WJ, 手持DJ (2009) 连续 数据的ROC曲线。CRC出版社, 博卡拉顿
- Kwak N (2008) 基于l1范数最大化的主成分分析。IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell 9: 1672–1680. <https://doi.org/10.1109/TPAMI.2008.114>
- KWon H, Nasrabadi NM (2005) Kernel RX-algorithm: a nonlinear anomaly detector for hyperspec-tral imagery. IEEE Trans Geosci Remote Sens 43 (2) : 388–397. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2004.841487>
- Latecki LJ, Lazarevic A, Pokrajac D (2007) 具有核密度函数的异常值检测。Mach Learn Data min pattern Recogn. https://doi.org/10.1007/978-3-540-73499-4_6
- Laxhammar R, Falkman G, Sviestins E (2009) 海上交通中的异常检测 - 高斯混合模型和核密度估计器的比较。在：信息融合国际会议
- LeCun Y, Bengio Y, Hinton G (2015) 深度学习。自然 521 (7553) : 436–444. <https://doi.org/10.1038/自然14539>
- Lee K, Lee K, Lee H, Shin J (2018) 用于检测分布外样本的简单统一框架和对抗性攻击。在：神经信息处理系统的进展。pp 7167–7177 Léveillé RJ, Bridges J, Wiens RC, Mangold N, Cousin A, Lanza N, Forni O, Ollila A, Grotzinger J, Clegg S, Siebach K, Berger G, Clark B, Fabre C, Anderson R, Gasnault O, Blaney D, Deflores L, Leshin L, Maurice S, Newsom H (2014) 凸起的裂缝填充化学 耶洛奈夫湾的山脊, 盖尔陨石坑: 了解火星上过去的水活动和可居住性的窗口。地球物理学研究行星杂志 119 (11) : 2398–2415. <https://doi.org/10.1002/2014JE004620>
- LIU FT, Ting KM, 周振 (2008) 隔离林。在：IEEE 数据挖掘国际会议 (ICDM)。第413–422页。 <https://doi.org/10.1109/ICDM.2008.17>
- Ma J, Perkins S (2003) 使用一类支持向量机进行时间序列新颖性检测。在：国家神经网络联合会议，第3卷。第1741–1745页。 <https://doi.org/10.1109/IJCNN.2003.1223670>
- Mahaffy P, Webster CR, Atreya SK, Franz H, Wong M, Conrad PG, Harpold D, Jones JJ, Leshin LA, Manning H, Owen T, Pepin RO, Squyres S, Trainer M, Science Team T MSL (2013) 好奇号火星探测器火星 大气 中气体的丰度和同位素组成。科学 341 (6143) : 263–266. <https://doi.org/10.1126/science.194.4271.1298>
- Malin MC, Ravine MA, Caplinger MA, Tony Ghaemi F, Schaffner JA, Maki JN, Bell JF, Cameron JF, Dietrich WE, Edgett KS, Edwards LJ, Garvin JB, Hallet B, Herkenhoff KE, Heydari E, Kah LC, Lemmon MT, Minitti ME, Olson TS, Parker TJ, Rowland SK, Schieber J, Sletten R, Sullivan RJ, Sumner DY, Yingst AR, Duston BM, McNair S, Jensen EH (2017) 火星 科学 实验室 (MSL) 桅杆 相机 和 下降 成像仪: 调查 和 仪器 描述。地球 空间 科学 4 (8) : 506–539. <https://doi.org/10.1002/2016EA000252>
- Manevitz L, Yousef M (2007) 通过神经网络的单类文档分类。神经计算 70 (7–9) : 1466–1481. <https://doi.org/10.1016/J.NEUCOM.2006.05.013>
- Manevitz LM, Yousef M (2001) 用于文档分类的单类 SVM。J Mach Learn Res 2: 139–154

- Markou M, Singh S (2003a) 新颖性检测: 综述 - 第1部分: 统计方法。签名过程 83 (12): 2481-2497. <https://doi.org/10.1016/J.SIGPRO.2003.07.018>
- Markou M, Singh S (2003b) 新颖性检测: 综述 - 第2部分: 基于神经网络的方法。签名过程 83 (12): 2499-2521. <https://doi.org/10.1016/J.SIGPRO.2003.07.019>
- Marsland S (2003) 学习系统中的新颖性检测。神经计算分析 3 (2): 157-195
- Masci J, Meier U, Cireşan D, Schmidhuber J (2011) 用于分层特征提取的堆叠卷积自动编码器。在: 人工神经网络国际会议 (ICANN): 人工神经网络和机器学习。第52-59页。 https://doi.org/10.1007/978-3-642-21735-7_7
- Modenesi AP, Braga AP (2009) 分析合成和真实数据的时间序列新颖性检测策略。神经过程 Lett 30 (1): 1-17. <https://doi.org/10.1007/s11063-009-9106-4>
- Molero JM, Garzon EM, Garcia I, Plaza A (2013) 用于高光谱数据异常检测的RX算法的全球的本地版本的分析和优化。IEEE J Sel Top Appl Earth Observ Remote Sens 6 (2): 801-814. <https://doi.org/10.1109/JSTARS.2013.2238609>
- Munoz-Mari J, Bovolo F, Gomez-Chova L, Bruzzone L, Camp-Valls G (2010) 用于遥感数据分类的半监督一类支持向量机。IEEE Trans Geosci Remote Sens 48 (8): 3188-3197. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2010.2045764>
- Papadimitriou S, Kitagawa H, Gibbons P, Faloutsos C (2003) LOCI: 使用局部相关积分的快速异常值检测。在: 数据工程国际会议。第315-326页。 <https://doi.org/10.1109/ICDE.2003.1260802>
- Park D, Hoshi Y, Kemp CC (2018) 使用基于LSTM的变分自动编码器用于机器人辅助进食的多模态异常检测器。IEEE Robot Autom Lett 3 (3): 1544-1551. <https://doi.org/10.1109/LRA.2018.2801475>
- 佩德雷戈萨 F, 瓦罗夸 G, 格兰福特 A, 米歇尔 V, 锡里翁 B, 格里塞尔 O, 金发女郎 M, 普雷滕霍夫 P, 韦斯 R, 杜堡 V, 范德普拉斯 J, 帕索斯 A, 库尔纳波 D, 布鲁彻 M, 佩罗特 M, 公爵夫人 E (2011) Scikit-learn: machine learning in python. J Mach Learn Res 12: 2825-2830
- Pimentel MA, Clifton DA, Clifton L, Tarassenko L (2014) 新奇检测 综述。签名过程99: 215-249. <https://doi.org/10.1016/J.SIGPRO.2013.12.026>
- Pires A, Santos-Pereira C (2005) 使用聚类和鲁棒估计器来检测多变量数据中的异常值。在: 关于稳健统计的国际会议。 https://doi.org/10.1007/978-3-642-57489-4_41
- Reed I, Yu X (1990) 自适应多波段CFAR检测 光谱分布未知的光学图案。IEEE Trans Acoust Speech Signal Process 38 (10): 1760-1770. <https://doi.org/10.1109/29.60107>
- Ren D, Wang B, Perrizo W (2004) RDF: 一种基于密度的离群值检测方法, 基于垂直数据表示。在: IEEE 数据挖掘国际会议 (ICDM)。第503-506页。 <https://doi.org/10.1109/ICDM.2004.10010>
- Rice MS, Bell III JF, Godber A, Wellington DF, Fraeman AA, Johnson JR, Kinch KM, Malin MC, Grotzinger JP, the MSL Science Team (2013) Mastcam Multipectral Imaging Results from the 耶洛奈夫湾 火星科学实验室调查。载于: 欧洲行星科学大会 (EPSC), 第8卷
- Richter C, Roy N (2017) 通过深度学习和新奇检测进行安全视觉导航。在: 机器人: 科学与系统 (RSS). <https://doi.org/10.15607/RSS.2017.XIII.064>
- Ristic B, La Scala B, Morelande M, Gordon N (2008) AIS数据中运动模式的统计分析: 异常检测和运动预测。在: 信息融合国际会议。第1-7页。 <https://doi.org/10.1109/ICIF.2008.4632190>
- ROsset S (2004) 通过 AUC 选择型号。在: 机器学习国际会议 (ICML)。 <https://doi.org/10.1145/1015330.1015400>
- Schlegl T, Seebock P, Waldstein SM, Schmidt-Erfurth U, Langs G (2017) 无监督异常检测与生成对抗网络一起指导标记发现。在: 医学成像 信息处理国际会议 (IPMI)。第146-157页。 https://doi.org/10.1007/978-3-319-59050-9_12
- Scholkopf B, Williamson R, Smola A, Shawe-Taylor J, Platt J, Holloway R (2000) 用于新颖性检测的支持向量法。在: 神经信息处理系统的进步 (NIPS)。第582-588页
- Schubert E, Zimek A, Kriegel HP (2014) 具有灵活核密度估计的广义异常值检测。在: SIAM 数据挖掘国际会议 (SDM)。第542-550页。 <https://doi.org/10.1137/1.9781611973440.63>
- Silverman BW (1986) 用于统计和数据分析的密度估计。Monogr Stat Appl Probab. <https://doi.org/10.1002/bimj.4710300745>

- Srivastava A, Zane-Ulman B (2005) 发现有关复杂空间系统 的文本报告中反复出现的异常现象。在: IEEE航空航天会议。第3853-3862页。 <https://doi.org/10.1109/AERO.2005.1559692>
- Srivastava AN (2006) 使用高维聚类技术发现航空航天问题报告中反复出现的异常。在: IEEE航空航天会议。 <https://doi.org/10.1109/航空.2006.1656136>
- Syed Z, Saeed M, Rubinfeld I (2010) 识别没有标记训练数据的高风险患者: 预测不良结果的异常检测方法。在: AMIA年度研讨会。第772-776页
- Tang J, Chen Z, Fu AWc, Cheung DW (2002) 提高 异常值检测对低密度模式的有效性。在: 亚太-亚洲 知识发现和数据挖掘会议 (PAKDD)。第535-548页。 https://doi.org/10.1007/3-540-47887-6_53
- Tang J, Chen Z, Fu AW, Cheung DW (2007) 大型数据集、框架和方法中 异常值检测方案的能力。Knowl Inf Syst 11 (1): 45-84. <https://doi.org/10.1007/s10115-005-0233-6>
- Tax DM, Duin RP (1999) 支持向量域描述。Pattern Recogn Lett 20 (11-13): 1191-1199. [https://doi.org/10.1016/S0167-8655\(99\)00087-2](https://doi.org/10.1016/S0167-8655(99)00087-2)
- Thompson B, Marks R, Choi J, El-Sharkawi M, Huang MY, Bunje C (2002) 自编码器新颖性评估中的内隐学习。载于: 神经网络国际联合会会议, 第3卷。第2878-2883页。 <https://doi.org/10.1109/IJCNN.2002.1007605>
- Tipping ME, Bishop C (1999) 概率主成分分析。J R Stat Soc Ser B (Stat Methodol) 61 (3): 611-622. <https://doi.org/10.1111/1467-9868.00196>
- Toivola J, Prada MA, Hollmén J (2010) 在结构健康测量的投影空间中的新颖性检测。在: 智能 数据分析国际研讨会 (IDA)。第208-219页。 https://doi.org/10.1007/978-3-642-13062-5_20
- Wagstaff KL, Lanza NL, Thompson DR, Dietterich TG, Gilmore MS (2013) 使用DEMUD 进行解释指导科学发现。在: AAAI 关于人工智能的会议。第905-911页
- Wagstaff KL, Doran G, Davies A, Anwar S, Chakraborty S, Cameron M, Daubar IJ, Phillips C (2019) 能够对 欧罗巴快船 的科学价值事件进行机载检测太空船。在: ACM SIGKDD 知识发现和挖掘国际会议 (KDD)。第2191-2201页。 <https://doi.org/10.1145/3292500.3330656>
- Wang CH (2009) 使用基于内核的聚类技术的异常值识别和市场细分。专家系统应用 36 (2): 3744-3750. <https://doi.org/10.1016/J.ESWA.2008.02.037>
- 王勇, 黄军, 矿工A (2004a) 使用一类 SVM进行异常入侵检测。在: IEEE SMC信息保障研讨会。第358-364页。 <https://doi.org/10.1109/IAW.2004.1437839>
- 王Z, Bovik A (2009) 均方误差: 爱它还是离开它? 信号 保真度测量的新视角。IEEE 信号处理 Mag 26 (1): 98-117. <https://doi.org/10.1109/MSP.2008.930649>
- Wang Z, Bovik AC, Sheikh HR, Simoncelli EP (2004b) 图像质量评估: 从误差可见性到结构相似性。IEEE Trans Image Process 13 (4): 600-612. <https://doi.org/10.1109/TIP.2003.819861>
- 惠灵顿DF (2018) 可见 光到近红外的火星: 红色星球的 两种视图。博士论文, 亚利桑那州立大学
- Wellington DF, Bell JF III, Johnson JR, Kinch KM, Rice MS, Godber A, Ehlmann BL, Fraeman AA, Hardgrove C (2017a) Visible to Near-Infrared MSL/Mastcam Multipectral Imaging: 初步结果来自火星盖尔陨石坑内选定的高兴趣科学目标。Am Mineral 102 (6): 1202-1217. <https://doi.org/10.2138/am-2017-5760CCBY>
- 惠灵顿DF, 贝尔III JF, 约翰逊JR, 赖斯MS, Fraeman AA, Horgan B (2017b) 火星盖尔陨石坑内材料的可见可见光/近红外光谱差异: MSL / Mastcam多光谱的 参数化观察。在: 第48届月球和行星科学会议 (LPSC)
- Williams G, Baxter R, He H, Hawkins S, Lifang Gu (2002) RNN在数据挖掘中用于异常值检测的 比较研究。在: IEEE 数据挖掘国际会议 (ICDM)。第709-712页。 <https://doi.org/10.1109/ICDM.2002.1184035>
- Wilson M, Trosper J, Abilleira F (2017) NASA Mars 2020 Landed Mission Development. 技术。加州理工学院 喷气推进实验室代表
- Xiao Y, Wang H, Xu W, Zhou J (2013) 基于L1范数的KPCA用于新颖性检测。模式识别 46 (1): 389-396. <https://doi.org/10.1016/J.PATCOG.2012.06.017>
- Xiong Y, Zuo R (2016) 使用 深度自动编码器网络识别 地球化学异常。Comput Geosci 86: 75-82. <https://doi.org/10.1016/J.CAGEO.2015.10.006>

- Yu D, Sheikholeslami G, Zhang A (2002) FindOut: 在非常大的 数据集中**查找**异常值。 Knowl Inf Syst 4 (4) : 387–412. <https://doi.org/10.1007/s101150200013>
- Yu JX, Qian W, Lu H, Zhou A (2006) 在分类/数值空间中寻找中心局部异常值。 Knowl Inf Syst 9 (3) : 309–338. <https://doi.org/10.1007/s10115-005-0197-6>
- Zenati H, Foo CS, Lecouat B, Manek G, Ramaseshan Chandrasekhar V (2018a) **高效** GAN 基异常检测。在：学习 表征国际会议 (ICLR)
- Zenati H, Romain M, Foo CS, Lecouat B, Chandrasekhar VR (2018b) Adversarially learned anomaly detection. 在：IEEE 数据挖 掘 国际会议 (ICDM) 。 第 727–736 页。 <https://doi.org/10.1109/ICDM.2018.00088>
- Zhang J, Wang H (2006) 检测 高维数据的 离群子空间：新的任务、算法和性能。 Knowl Inf Syst 10 (3) : 333–355. <https://doi.org/10.1007/s10115-006-0020-z>
- Zhou C, Paaenroth RC (2017) 使用强大的深度自动编码器进行异常检测。 在：ACM SIGKDD 知识发现和数据挖掘国际会议 (KDD) . <https://doi.org/10.1145/3097983.3098052>
- Zhou J, Kwan C, Ayhan B, Eismann MT (2016) 一种使用高光谱图像进行异常和变化检测的 **新型**聚类 Kernel RX 算法。 IEEE Trans Geosci Remote Sens 54 (11) : 6497–6504. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2016.2585495>

出版商的注释 施普林格自然对已出版地图和机构附属关系中的 管辖权主张保持中立。