
Algorithme primal-dual de points intérieurs pour l'estimation pénalisée des cartes d'abondances en imagerie hyperspectrale

Emilie Chouzenoux¹, Saïd Moussaoui², Maxime Legendre², Jérôme Idier²

1. Université Paris-Est Marne-la-Vallée, LIGM (UMR CNRS 8049)

emilie.chouzenoux@univ-mlv.fr

2. UNAM Université, Ecole Centrale de Nantes

CNRS, IRCCyN (UMR CNRS 6597)

prenom.nom@irccyn.ec-nantes.fr

RÉSUMÉ. L'estimation des cartes d'abondances en imagerie hyperspectrale nécessite de résoudre un problème d'optimisation sous des contraintes de positivité et d'additivité. Nous nous plaçons dans le cadre où les spectres des composants présents au sein de l'image ont été préalablement estimés par un algorithme d'extraction des pôles de mélange. Afin de réduire le temps de calcul, nous proposons un algorithme rapide de points intérieurs de type primal-dual pour l'estimation de ces cartes. En comparaison avec la méthode de référence FCLS, l'algorithme proposé présente l'avantage d'un coût de calcul réduit. Un second avantage est de pouvoir traiter le cas d'un critère pénalisé favorisant la régularité spatiale des cartes d'abondances. Des exemples sur des données synthétiques et réelles illustrent les performances de cet algorithme.

ABSTRACT. The estimation of abundance maps in hyperspectral imaging requires the resolution of an optimization problem under non-negativity and sum to one constraints. Assuming that the spectral signatures of the image components have been previously determined by an endmember extraction algorithm, we propose in this paper a primal-dual interior point algorithm for the estimation of their fractional abundances. In comparison with the reference method FCLS, our algorithm has the advantage of a reduced computational cost. Moreover, it allows to deal with a penalized criterion favoring the spatial smoothness of abundance maps. The performances of the proposed approach are discussed with the help of synthetic and real examples.

MOTS-CLÉS : imagerie hyperspectrale, optimisation sous contraintes, positivité, additivité, points intérieurs, algorithme primal-dual.

KEYWORDS: hyperspectral unmixing, constrained optimization, positivity, additivity, interior point methods, primal-dual algorithm.

DOI:10.3166/TS.30.35-59 © 2013 Lavoisier

Extended abstract***Problem statement***

Hyperspectral imaging corresponds to the measurement of the incident light reflection at the ground surface of an observed scene in several contiguous spectral bands. Despite of the high spatial resolution that can be attained by recent imaging devices, the surface area covered by any pixel of the image may contain different components. Therefore, the measured reflectance spectrum in each pixel can be explained as a mixture of the individual component reflectance spectra weighted by the proportion (abundance) of each component in this pixel area.

Let us consider N pixels of a hyperspectral image acquired in L spectral bands and assume a linear mixing model between P endmembers. The mixing model reads

$$\mathbf{Y} = \mathbf{S} \mathbf{C} + \mathbf{E},$$

where $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{L \times P}$ contains the P endmember spectra, $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ is the observation data matrix, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{P \times N}$ the fractional abundance matrix and $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ the measurement noise. Usual algorithms for solving the spectral unmixing inverse problem of estimating \mathbf{A} from \mathbf{Y} and \mathbf{S} consist in minimizing a least squares criterion under the physical constraints of non-negativity and sum-to-one. For instance, the former constraint leads to the *non-negative least squares* algorithm (NNLS) (Lawson, Hanson, 1974; Bro, De Jong, 1997), and the latter is handled by the *sum-to-one constrained least squares* (SCLS) method (Settle, Drake, 1993). Both constraints are accounted for by the *fully constrained least squares* (FCLS) algorithm (Heinz, Chang, 2001). However, all the mentioned methods suffer from a significant increase of the computation time in the case of large data sets (in terms of image size or number of components), and are limited to the case of a least-square criterion.

Proposed method

We propose in this paper a spectral unmixing algorithm based on penalized least squares estimation and interior point optimization (Wright, 1992; Boyd, Vandenberghe, 2004) using a primal-dual approach (Armand *et al.*, 2000). While the penalized least squares approach aims at introducing a prior knowledge on the abundance maps, the interior point optimization approach allows to minimize any convex objective function under equality (sum-to-one) and inequality (non-negativity) constraints. Therefore, it can be applied for the minimization of the least squares criterion augmented by a regularization term allowing to introduce a spatial smoothing of the abundance maps. From the numerical optimization point of view, the interior point algorithm needs to solve a large linear system of equations at each iterate. We will show that an approximate resolution of such system using a preconditioned bi-conjugate gradient (Van der Vorst, 1992) reduces significantly the computation cost without altering the unmixing performances.

Results and conclusion

The applicability of the proposed interior point primal-dual optimization algorithm is illustrated through examples on synthetic and real data. The superiority of our method over FCLS and NNLS is demonstrated in the case of non penalized unmixing. Our study shows that adding the regularization criterion leads to better results in terms of reconstruction quality as compared to the non penalized case. Moreover, the penalized approach only increases moderately the computation time of the algorithm thanks to the use of the approximate resolution of the primal system. Future studies will be directed at analyzing the theoretical convergence of the proposed algorithm and its application to the case of non-linear mixing models.

1. Introduction

L'imagerie hyperspectrale est une technique de mesure qui permet d'accéder à des informations liées à la composition d'une surface, en exploitant ses propriétés optiques (réflexion, absorption ou émission) dans plusieurs bandes de fréquences (Scott, 1997). Comme chaque pixel d'une image hyperspectrale correspond à une surface qui peut être composée de plusieurs types de constituants, chacun ayant sa propre signature spectrale, l'analyse de toutes les images devrait permettre l'identification de ces constituants et la détermination de leurs proportions au sein de chaque pixel (Chang, 2007). Le modèle le plus couramment utilisé suppose que le spectre de réflectance dans chaque pixel de l'image est la combinaison linéaire d'un nombre fini de spectres caractéristiques des constituants, appelés aussi pôles de mélange, pondérés par des coefficients, appelés abondances, qui sont liés à la proportion de chaque constituant dans ce pixel de l'image (Keshava, Mustard, 2002).

Plus précisément, considérons N pixels d'une image hyperspectrale acquise dans L bandes spectrales. Selon le modèle de mélange linéaire, le spectre

$$\mathbf{Y}_{\bullet,n} \triangleq [Y_{1,n}, \dots, Y_{L,n}]^t \in \mathbb{R}^L \quad (1)$$

du $n^{\text{ème}}$ pixel s'exprime comme la combinaison linéaire de P signatures spectrales

$$\mathbf{S}_{\bullet,p} \triangleq [S_{1,p}, \dots, S_{L,p}]^t \in \mathbb{R}^L, \quad (2)$$

entachée d'un bruit additif

$$\mathbf{E}_{\bullet,n} \triangleq [E_{1,n}, \dots, E_{L,n}]^t \in \mathbb{R}^L. \quad (3)$$

On peut ainsi écrire

$$\mathbf{Y}_{\bullet,n} = \sum_{p=1}^P C_{p,n} \mathbf{S}_{\bullet,p} + \mathbf{E}_{\bullet,n}, \quad (4)$$

où $S_{\bullet,p}$ est le spectre du $p^{\text{ème}}$ constituant et $C_{p,n}$ est le coefficient d'abondance du $p^{\text{ème}}$ constituant dans le $n^{\text{ème}}$ pixel. Si l'on considère tous les pixels de l'image hyperspectrale, l'équation (4) s'écrit sous forme matricielle

$$\mathbf{Y} = \mathbf{S}\mathbf{C} + \mathbf{E}, \quad (5)$$

avec $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ les observations associées aux pixels de l'image, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{L \times P}$ les signatures spectrales, $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{P \times N}$ les coefficients d'abondances et $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ le bruit associé aux observations, qui sera supposé i.i.d. gaussien, de moyenne nulle et de matrice de covariance inconnue. L'objectif du traitement est donc d'estimer \mathbf{S} et \mathbf{C} à partir de \mathbf{Y} , en utilisant le modèle (5). Les vecteurs d'abondances $\mathbf{C}_{\bullet,n} \triangleq [C_{1,n}, \dots, C_{P,n}]^t \in \mathbb{R}^P$ dans (5) étant reliés aux proportions des constituants de la surface, leur estimation doit être réalisée sous les contraintes de positivité et d'additivité

$$C_{p,n} \geq 0, \quad \forall p = 1, \dots, P, \quad \forall n = 1, \dots, N, \quad (6a)$$

$$\sum_{p=1}^P C_{p,n} = 1, \quad \forall n = 1, \dots, N. \quad (6b)$$

Afin de résoudre ce problème, deux stratégies concurrentes peuvent être adoptées (Keshava, Mustard, 2002 ; Dobigeon *et al.*, 2010) : les méthodes d'estimation séquentielle et les méthodes d'estimation conjointe. Dans la première approche, une procédure d'extraction des pôles du mélange est d'abord employée pour estimer les spectres des constituants des images avant d'appliquer un algorithme d'estimation des abondances. La deuxième approche se fonde sur une estimation conjointe des spectres purs et des abondances. Les travaux de (Parente, Plaza, 2010 ; Bioucas-Dias, Plaza, 2011) peuvent être consultés pour une revue récente et détaillée des méthodes existantes. D'un point de vue applicatif, la première approche est préconisée dans un contexte où l'hypothèse d'existence d'un nombre suffisant de spectres purs au sein des pixels de l'image est satisfaite, cette hypothèse étant exploitée par les méthodes d'extraction des pôles du mélange (Plaza *et al.*, 2004 ; Nascimento, Bioucas-Dias, 2005). L'approche séquentielle peut être également utilisée dans le cas où les spectres recherchés se situent dans une bibliothèque de spectres connus (Dobigeon *et al.*, 2008). L'estimation conjointe des spectres et des abondances s'avère nécessaire en l'absence de pixels purs et dans le cas où les spectres des constituants dépendent des conditions d'acquisitions (éclairage, atmosphère, etc.) (Moussaoui *et al.*, 2008 ; Healey, Slater, 1999 ; Huck *et al.*, 2010).

Dans ce travail, nous nous plaçons dans le cadre de la première approche et nous nous intéressons au développement d'une méthode d'estimation rapide des cartes d'abondances. Les algorithmes usuels sont basés sur la minimisation du critère des moindres carrés sous la contrainte (6a) (NNLS (Lawson, Hanson, 1974 ; Bro, De Jong, 1997), *non-negative least squares*) ou (6b) (SCLS (Settle, Drake, 1993), *sum-to-one constrained least squares*) ou encore sous les deux contraintes (6a) et (6b) (FCLS (Heinz, Chang, 2001), pour *fully constrained least squares*). Dans (Dobigeon *et al.*,

2008) une méthode d'estimation par approche bayésienne couplée avec des techniques de simulation Monte Carlo par chaînes de Markov est proposée pour résoudre le problème d'estimation sous les contraintes (6a) et (6b). Cette approche bayésienne offre l'avantage de pouvoir estimer également le nombre de composants au sein de l'image. Néanmoins, toutes ces méthodes sont caractérisées par un coût de calcul important, notamment dans le cas d'images de grande taille. De plus, la méthode FCLS ne s'applique pas dans le cas d'un critère prenant en compte les éventuelles corrélations inter-pixels.

Nous proposons dans cet article un algorithme rapide basé sur une stratégie de points intérieurs (Wright, 1992 ; Forsgren *et al.*, 2002 ; Boyd, Vandenberghe, 2004) permettant de minimiser un critère strictement convexe quelconque en intégrant les contraintes de positivité et d'additivité. Par conséquent, cet algorithme peut s'appliquer au cas d'un critère des moindres carrés pénalisé par un terme convexe favorisant la régularité spatiale des cartes d'abondances. Du point de vue de l'implémentation, l'algorithme d'optimisation adopté nécessite la résolution à chaque itération d'un système d'équations linéaires dont la taille dépend de la taille des images et du nombre de constituants. Nous montrons que la résolution approchée de ce système par un algorithme de gradient conjugué linéaire (Dixon, 1973 ; Van der Vorst, 1992) permet de réduire notablement le temps de calcul. Des illustrations sur la base d'images simulées et réelles permettront d'illustrer ce gain en temps de calcul par rapport à une méthode de type FCLS, la qualité de l'estimation étant préservée, ainsi que le gain de performances lié à l'introduction d'une pénalisation spatiale.

Le suite de cet article est organisée comme suit. La section 2 présente la méthode d'optimisation proposée pour l'estimation des cartes d'abondances. Son implémentation dans le cadre des problèmes de grande taille ainsi qu'une variante présentant un coût de calcul réduit sont discutées dans la section 3. La section 4 illustre les performances de cette approche en termes de temps de calcul et de comparaison avec la méthode de référence FCLS dans le cas non pénalisé. La réduction du temps de calcul apportée par la forme accélérée de l'algorithme primal-dual est démontrée dans le cas pénalisé. Une application à des données réelles est enfin présentée pour illustrer l'applicabilité de l'approche proposée.

2. Optimisation sous contraintes pour l'estimation des cartes d'abondances

Nous adoptons une approche itérative pour traiter le problème d'estimation sous les contraintes de positivité et d'additivité. Pour cela, le problème d'estimation est d'abord formulé comme la minimisation d'un critère $F(\mathbf{C})$ strictement convexe de $\mathbb{R}^{P \times N}$. Puis un algorithme de type points intérieurs est utilisé pour résoudre le problème suivant :

$$\min_{\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{P \times N}} F(\mathbf{C}) \quad \text{sous les contraintes (6a) – (6b).} \quad (7)$$

Le critère $F(\mathbf{C})$ résulte de la modélisation statistique du processus de mesure ainsi que du rajout éventuel de connaissances *a priori* sur les cartes d'abondances.

2.1. Construction du critère

Une stratégie courante consiste à définir $F(\cdot)$ comme le critère des moindres carrés non pénalisé (Lawson, Hanson, 1974 ; Bro, De Jong, 1997 ; Settle, Drake, 1993 ; Heinz, Chang, 2001),

$$F(\mathbf{C}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{S}\mathbf{C}\|_F^2, \quad (8)$$

où $\|\cdot\|_F$ représente la norme de Frobenius. Ce critère mesure l'adéquation aux données sous l'hypothèse d'un bruit de mesure additif blanc gaussien de moyenne nulle. Il est également possible d'introduire une pénalisation $R(\mathbf{C})$, pondérée par un paramètre η ,

$$F(\mathbf{C}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{S}\mathbf{C}\|_F^2 + \eta R(\mathbf{C}), \quad (9)$$

afin de favoriser la régularité de la répartition spatiale des coefficients d'abondances. Un exemple de terme de régularisation est de la forme

$$R(\mathbf{C}) = \sum_{p=1}^P \left(\varphi(\nabla^v C_{p,\bullet}) + \varphi(\nabla^h C_{p,\bullet}) \right), \quad (10)$$

avec $C_{p,\bullet} \triangleq [C_{p,1}, \dots, C_{p,N}]^t \in \mathbb{R}^N$, ∇^v et ∇^h respectivement les opérateurs de gradient spatial vertical et horizontal, et φ une fonction de pondération quadratique (ℓ_2) favorisant l'apparition de zones lisses dans les cartes, ou semi-quadratique ($\ell_2 - \ell_1$) pour également préserver les discontinuités (Geman, Reynolds, 1992 ; Geman, Yang, 1995 ; Idier, 2001).

2.2. Intégration de la contrainte d'égalité

Tout d'abord, à l'aide d'un changement de variable, le problème (7) est transformé en un nouveau problème faisant apparaître des contraintes d'inégalité uniquement. Comme souligné dans (Armand *et al.*, 2000), pour tout vecteur initial $\mathbf{C}_{\bullet,n}^{(1)}$ vérifiant la contrainte (6b), le vecteur défini par $\mathbf{C}_{\bullet,n} = \mathbf{C}_{\bullet,n}^{(1)} + \mathbf{Z}\mathbf{A}_{\bullet,n}$, avec $\mathbf{A}_{\bullet,n} \triangleq [A_{1,n}, \dots, A_{P-1,n}]^t \in \mathbb{R}^{P-1}$, satisfait également cette contrainte d'additivité si $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{P \times P-1}$ est une matrice dont les colonnes forment l'espace nul de $\mathbf{1}_{1 \times P}$. Dans notre cas, cette matrice étant, par exemple, donnée par :

$$Z_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ -1 & \text{si } i = j + 1, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (11)$$

le problème (7) est réécrit sous la forme

$$\min_{\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(P-1) \times N}} F(\mathbf{C}^{(1)} + \mathbf{Z}\mathbf{A}), \quad (12)$$

sous les contraintes

$$\mathbf{Z}\mathbf{A}_{\bullet,n} + \mathbf{C}_{\bullet,n}^{(1)} \geq 0, \quad \forall n = 1, \dots, N. \quad (13)$$

En introduisant l'opérateur $\mathbf{m} = \text{vect}(\mathbf{M})$ qui correspond à la transformation de la matrice \mathbf{M} en un vecteur \mathbf{m} dans l'ordre lexicographique, ce problème s'exprime de façon équivalente sous la forme :

$$\min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{(P-1)N}} \Phi(\mathbf{a}), \quad \text{sous les contraintes } \mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t} \geq \mathbf{0}, \quad (14)$$

où le critère $\Phi(\cdot)$ se déduit de $F(\cdot)$ par $\Phi(\mathbf{a}) = F(\mathbf{C}^{(1)} + \mathbf{Z}\mathbf{A})$, $\mathbf{a} = \text{vect}(\mathbf{A})$ et $\mathbf{t} = \text{vect}(\mathbf{C}^{(1)})$. La matrice \mathbf{T} est égale à $\mathbf{I}_N \otimes \mathbf{Z}$ où \otimes est le produit de Kronecker et \mathbf{I}_N est la matrice identité de taille $N \times N$.

2.3. Algorithme de points intérieurs primal-dual

La résolution du problème d'optimisation sous contraintes (14) se fait par un algorithme itératif de type points intérieurs. A chaque itération, la satisfaction stricte des contraintes est assurée par une fonction de mérite présentant une barrière logarithmique à la frontière du domaine admissible des solutions (Wright, 1992).

2.3.1. Principe

Les conditions d'optimalité dites de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) permettant de caractériser la solution \mathbf{a} de (14) et les multiplicateurs de Lagrange associés $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{NP}$ s'expriment sous la forme :

$$\begin{cases} \nabla \Phi(\mathbf{a}) - \mathbf{T}^t \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t}) = \mathbf{0} \\ \mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t} \geq \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \end{cases} \quad (15)$$

où $\boldsymbol{\Lambda} \triangleq \text{Diag}(\boldsymbol{\lambda})$. L'approche primale-duale consiste à estimer de façon jointe \mathbf{a} et $\boldsymbol{\lambda}$ en résolvant une séquence de problèmes correspondant à des versions perturbées des conditions KKT paramétrées par une suite de paramètres positifs $\{\mu_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ convergeant vers 0 :

$$\begin{cases} \nabla \Phi(\mathbf{a}) - \mathbf{T}^t \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t}) = \boldsymbol{\mu}_k \\ \mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t} \geq \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \end{cases} \quad (16)$$

avec $\boldsymbol{\mu}_k \triangleq \mu_k \mathbf{1}_{NP \times 1}$.

2.3.2. Algorithme primal-dual

Une itération k de l'algorithme primal-dual se décompose en deux étapes. Tout d'abord, $(\mathbf{a}_{k+1}, \boldsymbol{\lambda}_{k+1})$ est calculé en fonction de $(\mathbf{a}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)$ en résolvant (16). Puis le paramètre μ_{k+1} est déterminé selon une règle de mise à jour permettant de garantir la convergence de l'algorithme. Dans le cadre des problèmes de grande taille, il n'est pas possible de résoudre (16) de façon exacte. En pratique, une solution approchée de

(16) est obtenue par quelques itérations de Newton couplées avec une recherche de pas (Boyd, Vandenberghe, 2004, chap. 11), selon le schéma général :

$$(\mathbf{a}_{k+1}, \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) = (\mathbf{a}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k^a, \boldsymbol{\lambda}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k^\lambda). \quad (17)$$

2.3.2.1. Calcul des directions primales et duales

Les directions de Newton primales-duales $(\mathbf{d}_k^a, \mathbf{d}_k^\lambda)$ sont calculées en résolvant le système linéaire

$$\begin{pmatrix} \nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k) & -\mathbf{T}^t \\ \boldsymbol{\Lambda}_k \mathbf{T} & \text{Diag}(\mathbf{T} \mathbf{a}_k + \mathbf{t}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{d}_k^a \\ \mathbf{d}_k^\lambda \end{pmatrix} = -\mathbf{r}_{\mu_k}(\mathbf{a}_k, \boldsymbol{\lambda}_k), \quad (18)$$

où $\mathbf{r}_{\mu}(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda})$ est le résidu primal-dual défini par les deux premières équations de KKT perturbées,

$$\mathbf{r}_{\mu}(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}) = \begin{pmatrix} \nabla \Phi(\mathbf{a}) - \mathbf{T}^t \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{T} \mathbf{a} + \mathbf{t}) - \boldsymbol{\mu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{\mu}^{\text{prim}}(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}) \\ \mathbf{r}_{\mu}^{\text{dual}}(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}) \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Le système (18) n'est pas inversé de façon directe. En effet, il est souligné dans (Wright, 1994 ; 1998) que ce système devient très mal conditionné, notamment à l'approche de la convergence de l'algorithme, dès lors qu'une des contraintes est active. De plus, celui-ci ne vérifie pas les propriétés de symétrie ni de définie positivité, souhaitables dès lors que l'on applique une stratégie d'inversion itérative. Plusieurs stratégies de résolution de (18), présentées dans (Forsgren *et al.*, 2002, sec. 5.1), permettent de pallier ces difficultés. Nous utilisons la technique de (Conn *et al.*, 1996 ; Armand *et al.*, 2000), consistant à effectuer le calcul des directions en deux étapes : la direction primale \mathbf{d}_k^a est d'abord obtenue par inversion du système réduit

$$\mathbf{H}_k \mathbf{d}_k^a = -\nabla \Phi(\mathbf{a}_k) + \mathbf{T}^t \text{Diag}(\mathbf{T} \mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \boldsymbol{\mu}_k \quad (20)$$

avec

$$\mathbf{H}_k = \nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k) + \mathbf{T}^t \text{Diag}(\mathbf{T} \mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \boldsymbol{\Lambda}_k \mathbf{T}. \quad (21)$$

En fait, ce système réduit s'obtient par substitution de \mathbf{d}_k^λ dans l'équation (18) par son expression déduite de la seconde partie de ce système,

$$\mathbf{d}_k^\lambda = \text{Diag}(\mathbf{T} \mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} [\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\Lambda}_k \mathbf{T}(\mathbf{a}_k + \mathbf{d}_k^a) - \boldsymbol{\Lambda}_k \mathbf{t}]. \quad (22)$$

Finalement, après obtention de la direction primale, l'expression (22) est utilisée pour déterminer la direction duale \mathbf{d}_k^λ .

2.3.2.2. Recherche de pas

Le pas α_k est déterminé de façon à garantir la convergence de l'algorithme et à vérifier les deux contraintes d'inégalité de (16). La convergence de l'algorithme est garantie sous réserve que le pas entraîne une décroissance suffisante d'une fonction de mérite primale-duale $\Psi_{\mu}(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda})$ liée aux conditions d'optimalité du problème

(Forsgren *et al.*, 2002, sec. 5.2). Nous employons la fonction de mérite primale-duale de (Forsgren, Gill, 1998 ; Armand *et al.*, 2000) définie par

$$\Psi_{\mu}(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}) = \Phi(\mathbf{a}) - \mu \sum_{i=1}^{NP} \ln([\mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t}]_i) + \boldsymbol{\lambda}^t (\mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t}) - \mu \sum_{i=1}^{NP} \ln(\lambda_i [\mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t}]_i). \quad (23)$$

Nous soulignons la présence des deux fonctions barrières logarithmiques pour satisfaire strictement les contraintes d'inégalités de (16).

La décroissance suffisante de la fonction de mérite se traduit par la vérification de la condition d'Armijo

$$\psi_{\mu_k}(\alpha_k) - \psi_{\mu_k}(0) \leq c \alpha_k \nabla \psi_{\mu_k}(0), \quad c \in (0, 1/2), \quad (24)$$

où

$$\psi_{\mu_k}(\alpha) = \Psi_{\mu_k}(\mathbf{a}_k + \alpha \mathbf{d}_k^a, \boldsymbol{\lambda}_k + \alpha \mathbf{d}_k^{\lambda}). \quad (25)$$

L'obtention d'un pas α_k vérifiant (24) est réalisée par une simple stratégie de rebroussement (ou *backtracking*). Partant d'un pas initial α_k^0 , et s'il ne vérifie pas la condition d'Armijo, on rebrousse chemin en essayant des pas plus petits $\alpha_k^0 \tau$, $\alpha_k^0 \tau^2$, etc., avec $\tau \in (0, 1)$. Afin que la fonction $\psi_{\mu}(\cdot)$ soit bien définie, le backtracking est initialisé de la façon suivante :

$$\begin{cases} \alpha_k^0 = 1 & \text{si } \alpha_k^+ = +\infty \\ \alpha_k^0 = 0.99 \alpha_k^+ & \text{sinon} \end{cases} \quad (26)$$

où α_k^+ est la plus grande valeur telle que

$$\boldsymbol{\lambda}_k + \alpha \mathbf{d}_k^{\lambda} > 0, \quad \mathbf{T}(\mathbf{a}_k + \alpha \mathbf{d}_k^a) + \mathbf{t} > 0. \quad (27)$$

Soulignons que des stratégies de recherches de pas plus sophistiquées ne semblent pas nécessaires dans le cadre des méthodes primales-duales (Chouzenoux *et al.*, 2011).

2.3.2.3. Mise à jour du paramètre de barrière et critère d'arrêt de l'algorithme

La résolution de (14) étant effectuée par l'algorithme 1, nous utilisons le critère d'arrêt global (Boyd, Vandenberghe, 2004, chap. 11)

$$\mu_k \leq \mu_{\min}, \quad \text{ou} \quad \|\mathbf{r}_0(\mathbf{a}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)\| \leq \epsilon_0. \quad (28)$$

Le paramètre de barrière μ_k est mis à jour selon la règle de μ -criticité définie dans (El-Bakry *et al.*, 1996) :

$$\mu_k = \theta \frac{\delta_k}{NP}, \quad (29)$$

où $\delta_k = (\mathbf{T}\mathbf{a}_k + \mathbf{t})^t \boldsymbol{\lambda}_k$ est le saut de dualité et $\theta \in (0, 1)$.

Enfin, l'arrêt de la boucle interne de calcul des directions primales et duales est régi par deux conditions (Conn *et al.*, 1996 ; Johnson *et al.*, 2000) :

$$\|r_{\mu_k}^{\text{prim}}(\mathbf{a}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)\|_{\infty} \leq \epsilon_k^{\text{prim}}, \quad (30)$$

$$\delta_k/NP \leq \epsilon_k^{\text{dual}}, \quad (31)$$

avec $\epsilon_k^{\text{prim}} = \eta^{\text{prim}} \mu_k$, $\epsilon_k^{\text{dual}} = \eta^{\text{dual}} \mu_k$ où η^{prim} et η^{dual} deux paramètres positifs, et $\eta^{\text{dual}} < \theta^{-1}$.

Algorithme 1. Algorithme de points intérieurs primal-dual

Initialiser $\boldsymbol{\lambda}_0 > \mathbf{0}$ et \mathbf{a}_0 vérifiant $\mathbf{T}\mathbf{a}_0 + \mathbf{t} > \mathbf{0}$

Tant que (28) n'est pas vérifiée **faire**

Tant que (30) et (31) ne sont pas vérifiées **faire**

Calculer \mathbf{d}_k^a par résolution du système (20)

Déduire \mathbf{d}_k^{λ} de (22)

Déterminer α_k vérifiant (24) par rebroussement

Mettre à jour $(\mathbf{a}_{k+1}, \boldsymbol{\lambda}_{k+1})$ selon (17)

Fait

Mettre à jour μ_{k+1} d'après (29).

Fait

2.3.2.4. Analyse de convergence

La convergence de l'algorithme 1 dans le cas strictement convexe est donnée dans le théorème 1, déduit de (Armand *et al.*, 2000).

THÉORÈME 1. — *Supposons que l'ensemble $\mathcal{S} = \{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{NP-N} \mid \mathbf{T}\mathbf{a} + \mathbf{t} > \mathbf{0}\}$ est non vide et borné et que la fonction $\Phi(\cdot)$ est strictement convexe et deux fois différentiable sur \mathbb{R}^{NP-N} . Alors la boucle externe de l'algorithme 1 génère une suite bornée $\{\mathbf{a}_k\}$ qui converge vers la solution unique du problème (14).*

3. Mise en œuvre de l'algorithme primal-dual

Le coût de calcul de l'algorithme 1 est fortement dépendant du coût de l'inversion du système linéaire primal

$$\mathbf{H}_k \mathbf{d}_k^a = -\mathbf{g}_k, \quad (32)$$

où

$$\begin{cases} \mathbf{g}_k &= \nabla \Phi(\mathbf{a}_k) - \mathbf{T}^t \text{Diag}(\mathbf{T}\mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \boldsymbol{\mu}_k, \\ \mathbf{H}_k &= \nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k) + \mathbf{T}^t \text{Diag}(\mathbf{T}\mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \boldsymbol{\Lambda}_k \mathbf{T}. \end{cases}$$

Afin de réduire le temps de calcul, il est judicieux d'alléger la complexité de cette étape. Nous étudions tout d'abord dans cette section la structure de la matrice \mathbf{H}_k en distinguant le cas sans pénalisation et avec pénalisation. Puis, nous proposons une variante accélérée de l'algorithme primal-dual, consistant à résoudre (32) de façon approchée. Enfin, le réglage des paramètres de l'algorithme primal-dual initial et de sa version accélérée est discuté.

3.1. Structure du système primal-dual

3.1.1. Critère des moindres carrés non pénalisé

Étudions tout d'abord la structure du terme $\mathbf{T}^t \text{Diag}(\mathbf{T}\mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \mathbf{\Lambda}_k \mathbf{T}$. D'après la section 2, on a $\mathbf{T} = \mathbf{I}_N \otimes \mathbf{Z}$. Par conséquent, \mathbf{T} est une matrice bloc-diagonale de N blocs identiques égaux à \mathbf{Z} :

$$\mathbf{T} = \text{Bdiag}(\mathbf{Z}). \quad (33)$$

Pour tout $n \in \{1, \dots, N\}$, notons $\mathbf{A}_{\bullet, n}^{(k)} \in \mathbb{R}^{P-1}$ (resp. $\mathbf{L}_{\bullet, n}^{(k)} \in \mathbb{R}^P$) la n -ième colonne de $\mathbf{A}_k = \text{mat}(\mathbf{a}_k)$ (resp. de $\mathbf{L}_k = \text{mat}(\mathbf{\lambda}_k)$) où $\text{mat}(\cdot)$ est l'opérateur réciproque de $\text{vect}(\cdot)$ défini précédemment. Ainsi, on a

$$\text{Diag}(\mathbf{T}\mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \mathbf{\Lambda}_k = \text{Bdiag}(\mathbf{D}_n^{(k)}), \quad (34)$$

où $\mathbf{D}_n^{(k)}$ désigne une matrice diagonale de taille $P \times P$ de diagonale

$$\text{Diag} \left(\mathbf{Z}\mathbf{A}_{\bullet, n}^{(k)} + \mathbf{C}_{\bullet, n}^{(1)} \right)^{-1} \mathbf{L}_{\bullet, n}^{(k)}. \quad (35)$$

Donc $\mathbf{T}^t \text{Diag}(\mathbf{T}\mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \mathbf{\Lambda}_k \mathbf{T}$ est également une matrice bloc-diagonale définie par :

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^t \text{Diag}(\mathbf{T}\mathbf{a}_k + \mathbf{t})^{-1} \mathbf{\Lambda}_k \mathbf{T} &= \text{Bdiag}(\mathbf{Z})^t \text{Bdiag}(\mathbf{D}_n^{(k)}) \text{Bdiag}(\mathbf{Z}), \\ &= \text{Bdiag}(\mathbf{Z}^t \mathbf{D}_n^{(k)} \mathbf{Z}). \end{aligned} \quad (36)$$

Intéressons-nous maintenant à la structure de la matrice hessienne $\nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k)$ dans le cas du critère des moindres carrés non pénalisé (8) :

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k) &= (\mathbf{I}_N \otimes \mathbf{S}\mathbf{Z})^t (\mathbf{I}_N \otimes \mathbf{S}\mathbf{Z}), \\ &= \text{Bdiag}(\mathbf{Z}^t \mathbf{S}^t \mathbf{S}\mathbf{Z}), \end{aligned} \quad (37)$$

où (37) est une conséquence des propriétés du produit de Kronecker (Van Loan, 2000) :

$$\begin{cases} (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^t = \mathbf{A}^t \otimes \mathbf{B}^t, \\ (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(\mathbf{C} \otimes \mathbf{D}) = \mathbf{AC} \otimes \mathbf{BD}. \end{cases} \quad (38)$$

En utilisant (36), on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_k &= \text{Bdiag}(\mathbf{Z}^t \mathbf{S}^t \mathbf{S} \mathbf{Z}) + \text{Bdiag}(\mathbf{Z}^t \mathbf{D}_n^{(k)} \mathbf{Z}), \\ &= \text{Bdiag}(\mathbf{Z}^t (\mathbf{S}^t \mathbf{S} + \mathbf{D}_n^{(k)}) \mathbf{Z}). \end{aligned} \quad (39)$$

En conclusion, dans le cas d'un critère des moindres carrés non pénalisé, la matrice \mathbf{H}_k est une matrice bloc-diagonale contenant N blocs distincts, carrés de taille $P - 1 \times P - 1$. L'inverse de cette matrice s'obtient simplement en calculant l'inverse de chacun des blocs :

$$\mathbf{H}_k^{-1} = \text{Bdiag}((\mathbf{Z}^t (\mathbf{S}^t \mathbf{S} + \mathbf{D}_n^{(k)}) \mathbf{Z})^{-1}). \quad (40)$$

3.1.2. Critère des moindres carrés pénalisé

L'ajout d'un terme de pénalisation a pour effet de modifier la structure du hessien $\nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k)$. Considérons une fonction de pénalisation de forme générale

$$R(\mathbf{C}) = \sum_{p=1}^P \varphi(\Delta \mathbf{C}_{p,\bullet}), \quad (41)$$

où $\mathbf{C}_{p,\bullet} \in \mathbb{R}^N$ représente la p -ième carte d'abondance, $\Delta \in \mathbb{R}^{Q \times N}$ est une matrice de pénalisation et φ est une fonction de pondération différentiable et strictement convexe de \mathbb{R}^Q dans \mathbb{R} . La matrice $\nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k)$ a pour expression

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k) = \text{Bdiag}(\mathbf{Z}^t \mathbf{S}^t \mathbf{S} \mathbf{Z}) + \eta (\Delta \otimes \mathbf{Z})^t \text{Diag}(\ddot{\varphi}((\Delta \otimes \mathbf{Z}) \mathbf{a}_k)) (\Delta \otimes \mathbf{Z}), \quad (42)$$

où $\ddot{\varphi}(\cdot)$ est la dérivée seconde de $\varphi(\cdot)$. Dans le cas particulier où $\Delta = \mathbf{I}_N$, une démarche similaire à celle de la section précédente conduit à

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{a}_k) = \text{Bdiag} \left(\mathbf{Z}^t (\mathbf{S}^t \mathbf{S} + \eta \text{Diag}(\ddot{\varphi}(\mathbf{Z} \mathbf{A}_{\bullet,n}^{(k)}))) \mathbf{Z} \right). \quad (43)$$

Alors, \mathbf{H}_k est bloc-diagonale et peut être inversée simplement.

De meilleurs résultats de reconstruction sont obtenus en considérant une pénalisation plus élaborée. Par exemple, une régularisation spatiale, prenant en compte les corrélations entre pixels voisins, est obtenue en prenant φ quadratique, $Q = 2N$ et $\Delta = [(\nabla^v)^t \quad (\nabla^h)^t]^t$ avec ∇^v et ∇^h respectivement les opérateurs de gradient spatial vertical et horizontal. La structure complexe de la matrice hessienne (42) dans ce cas ne permet pas d'exprimer simplement la solution du système (32). En pratique, le système est inversé en utilisant la décomposition de Cholesky de \mathbf{H}_k .

3.2. Algorithme primal-dual accéléré

Même dans le cas où \mathbf{H}_k est bloc-diagonale, la résolution du système (32) est coûteuse et fortement dépendante de la taille du problème considéré. Nous proposons dans

cette section une version accélérée de l'algorithme primal-dual dans laquelle la direction primale \mathbf{d}_k^a est obtenue par résolution approchée de (32). Plus précisément, \mathbf{d}_k^a est obtenue en appliquant un algorithme de gradient conjugué au système $\mathbf{H}_k \mathbf{d} = -\mathbf{g}_k$. L'algorithme utilisé (algorithme 2) est le gradient biconjugué (Van der Vorst, 1992) auquel est incorporée une stratégie de préconditionnement basée sur une décomposition LU incomplète de \mathbf{H}_k . L'algorithme est stoppé dès que l'une des conditions suivantes est vérifiée (Johnson *et al.*, 2000) :

$$\|\mathbf{r}_i\|/\|\mathbf{g}_k\| \leq \min(\eta_1^{\text{pcg}}, \eta_2^{\text{pcg}} \delta_k / \|\mathbf{g}_k\|), \quad (44)$$

$$\omega_i = 0, \quad (45)$$

$$i \geq I_{\max}, \quad (46)$$

où δ_k est le saut de dualité à l'itération k , et η_1^{pcg} , η_2^{pcg} et I_{\max} sont des paramètres positifs.

Algorithme 2. Calcul approché de la direction primale par gradient biconjugué préconditionné

Effectuer la décomposition $\mathbf{LU} \approx \mathbf{H}_k$

Initialiser $\mathbf{d}_0 = \mathbf{0}$, $\mathbf{r}_0 = -\mathbf{g}_k$, $\hat{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{r}_0$

$\rho_0 = \alpha = \omega_0 = i = 1$ et $\boldsymbol{\nu}_0 = \mathbf{p}_0 = \mathbf{0}$

Tant que (Aucune des conditions (44)-(45)-(46) n'est vérifiée) **faire**

$$\rho_i = \hat{\mathbf{r}}_0^t \mathbf{r}_{i-1}$$

$$\beta = (\rho_i / \rho_{i-1})(\alpha / \omega_{i-1})$$

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \beta(\mathbf{p}_{i-1} - \omega_{i-1} \boldsymbol{\nu}_{i-1})$$

$$\mathbf{y} = (\mathbf{LU})^{-1} \mathbf{p}_i$$

$$\boldsymbol{\nu}_i = \mathbf{H}_k \mathbf{y}$$

$$\alpha = \rho_i / (\hat{\mathbf{r}}_0^t \boldsymbol{\nu}_i)$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{r}_{i-1} - \alpha \boldsymbol{\nu}_i$$

$$\mathbf{z} = (\mathbf{LU})^{-1} \mathbf{s}$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{H}_k \mathbf{z}$$

$$\omega_i = (\mathbf{L}^{-1} \mathbf{t})^t (\mathbf{L}^{-1} \mathbf{s}) / (\mathbf{L}^{-1} \mathbf{t})^t (\mathbf{L}^{-1} \mathbf{t})$$

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{d}_{i-1} + \alpha \mathbf{y} + \omega_i \mathbf{z}$$

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{s} - \omega_i \mathbf{t}$$

$$i = i + 1$$

Fait

Retourner $\mathbf{d}_k^a = \mathbf{d}_i$.

Nous en déduisons une variante accélérée de l'algorithme primal-dual (algorithme 3). Cependant, l'étude théorique de la convergence de cet algorithme est laissée comme perspective de ce travail.

Algorithme 3. Algorithme de points intérieurs primal-dual accéléré

Initialiser $\lambda_0 > \mathbf{0}$ et \mathbf{a}_0 vérifiant $T\mathbf{a}_0 + \mathbf{t} > \mathbf{0}$

Tant que ((28) n'est pas vérifiée) **faire**

Tant que (30) et (31) ne sont pas vérifiées **faire**

Calculer \mathbf{d}_k^a par l'algorithme 2

Déduire \mathbf{d}_k^λ de (22)

Déterminer α_k vérifiant (24) par rebroussement

Mettre à jour $(\mathbf{a}_{k+1}, \lambda_{k+1})$ selon (17)

Fait

Mettre à jour μ_{k+1} d'après (29).

Fait

3.3. Réglage des paramètres de l'algorithme

L'algorithme 1 et sa variante 3 dépendent de plusieurs paramètres qui règlent la précision du calcul des directions primales et duales (η^{prim} , η^{dual} et η_1^{pcg} , η_2^{pcg} , I_{max} dans la version accélérée), la mise à jour du paramètre de barrière (θ), et la précision de la résolution du problème contraint initial (μ_{min} et ϵ_0). Ces paramètres influent sur la vitesse de convergence de l'algorithme. Nous avons obtenu le meilleur compromis entre le nombre d'itérations de la boucle interne et le nombre d'itérations globales pour les valeurs suivantes :

$$\eta^{\text{prim}} = 100, \quad \eta^{\text{dual}} = 1.9, \quad \theta = 0.5, \quad (47)$$

$$\mu_{\text{min}} = 10^{-9}, \quad \epsilon_0 = 10^{-7}, \quad (48)$$

$$I_{\text{max}} = 200, \quad \eta_1^{\text{pcg}} = 10^{-3}, \quad \eta_2^{\text{pcg}} = 10^{-2} \quad (49)$$

Notons que les valeurs (47) sont identiques à celles utilisées dans (Conn *et al.*, 1996 ; Johnson *et al.*, 2000).

4. Résultats expérimentaux

Nous analysons tout d'abord les performances de l'algorithme 1 en termes de temps de calcul pour la minimisation du critère des moindres carrés sous contraintes d'additivité et de positivité. Dans ce cadre, une comparaison avec l'algorithme FCLS est réalisée. Nous présentons ensuite les résultats obtenus dans le cas de l'intégration d'une régularisation spatiale sur les cartes d'abondances. L'analyse se focalisera sur le gain en temps de calcul introduit par le calcul de la direction primale par la méthode approchée 2, conduisant à l'algorithme 3.

4.1. Simulation des mélanges

Nous disposons d'un ensemble de spectres issus de la bibliothèque USGS (U.S. Geological Survey) (Clark *et al.*, 1993) qui sont utilisés pour créer des mélanges artificiels permettant d'étudier les performances des méthodes sur des données réalistes. La figure 1 illustre $P = 5$ spectres, de $L = 224$ bandes spectrales, choisis arbitrairement dans cette bibliothèque.

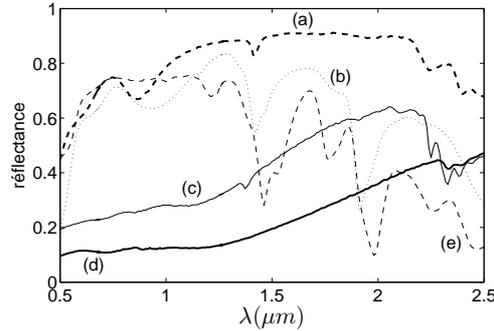


Figure 1. Signatures spectrales sélectionnées dans la bibliothèque USGS. (a) Andradite. (b) Erionite. (c) Chlorite. (d) Biotite. (e) Carnallite

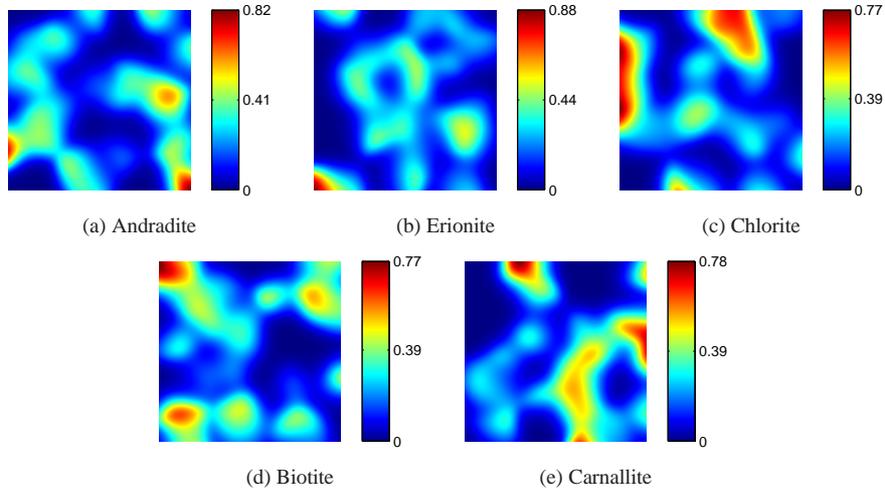


Figure 2. Exemple de cartes d'abondances simulées de taille $N = 256^2$ pour $P = 5$

Par ailleurs, des cartes d'abondances sont simulées de façon à contenir trente motifs gaussiens, de variance égale à $\frac{N}{200}$, positionnés aléatoirement au sein de l'image et normalisés pour satisfaire la contrainte (6b). La figure 2 illustre un exemple de cartes d'abondances générées pour $P = 5$ et $N = 256^2$. Nous pouvons constater que cette stratégie de simulation nous permet d'obtenir des cartes dans lesquelles il n'existe

pas de pixels purs et également d'obtenir une corrélation spatiale de la répartition des composantes.

Un bruit gaussien i.i.d de moyenne nulle et de variance adéquate est ajouté pour obtenir un rapport signal sur bruit de 20 dB dans chaque pixel de l'image. Les résultats de simulation présentés dans cet article ont tous été obtenus avec Matlab 2007b sur un MacbookPro muni d'un processeur Intel Core 2 Duo 2.4 GHz et de 4 Go de RAM avec un bus de 667 MHz.

4.2. Moindres carrés sous contraintes de positivité et d'additivité

Tout d'abord, nous nous proposons de comparer l'algorithme primal-dual non pénalisé (IPLS, *Interior Point Least Squares*) à la méthode de référence FCLS (Heinz, Chang, 2001), en termes de temps de calcul, pour la résolution du problème des moindres carrés contraint (7)-(8). Nous nous concentrons ici sur la version exacte 1 de IPLS, puisque, comme souligné en section 3.1.1, dans le cas non pénalisé, le calcul de la direction primale est peu coûteux. Des images hyperspectrales de tailles variables (de $N = 64^2$ à 256^2) ont été simulées en considérant un nombre de constituants égal à $P = 3, 5$ ou 10 . Notons que la méthode FCLS et notre méthode résolvent le même problème d'optimisation. Le critère à minimiser étant strictement convexe, et les contraintes convexes, il y a unicité de la solution, et par conséquent, les deux méthodes doivent fournir des résultats identiques (à la précision numérique près). En effet, pour l'ensemble des tests effectués, les solutions fournies par les algorithmes FCLS et IPLS sont similaires en termes de valeur de résidu et de qualité de reconstruction. Cependant, comme illustré par la figure 3, le temps de calcul nécessaire à l'optimisation du critère est sensiblement réduit par l'utilisation de l'algorithme primal-dual.

A titre d'exemple, un gain de temps d'un facteur de l'ordre de 5 est obtenu pour une image de taille 256^2 dans le cas de $P = 10$ composantes. Pour la même taille d'image, ce facteur est de l'ordre de 7 pour $P = 5$ et 11 pour $P = 3$. Notons également la forte croissance du coût de calcul lorsque la taille de l'image augmente. Cependant, ce coût de calcul pourrait être réduit par une implémentation exploitant le potentiel de parallélisation offert par ces deux méthodes.

4.3. Intégration d'une pénalisation spatiale

Nous présentons à présent les résultats d'estimation obtenus par la résolution du problème pénalisé (7)-(9), où R est la fonction de pénalisation de l'équation (10), visant à tenir compte de la régularité de la distribution spatiale des cartes d'abondances. Dans ce contexte, seul l'algorithme primal-dual pénalisé (IPPLS, *Interior Point Pena-*

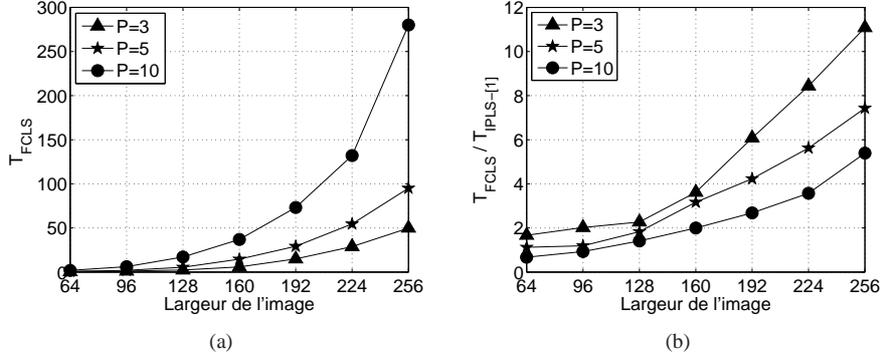


Figure 3. Temps de calcul de l'algorithme FCLS (a) et gain en temps de calcul apporté par l'algorithme IPLS 1 (b) en fonction de la taille de l'image et du nombre de composantes

lized Least Squares) est applicable, dans sa version exacte 1 ou approchée 3. La qualité de l'estimée \hat{C} est évaluée au sens de l'erreur quadratique moyenne normalisée

$$EQMn(\%) = \frac{100}{P} \sum_{p=1}^P \left(\|C_{p,\bullet} - \hat{C}_{p,\bullet}\|_2^2 / \|C_{p,\bullet}\|_2^2 \right), \quad (50)$$

par rapport aux cartes de référence $C_{p,\bullet}$, $p \in \{1, \dots, P\}$. Le paramètre de régularisation η est choisi égal à 0.1 afin de minimiser cette erreur de reconstruction.

L'analyse rapportée dans la figure 4 montre que la version accélérée 3 présente un temps de calcul sensiblement réduit.

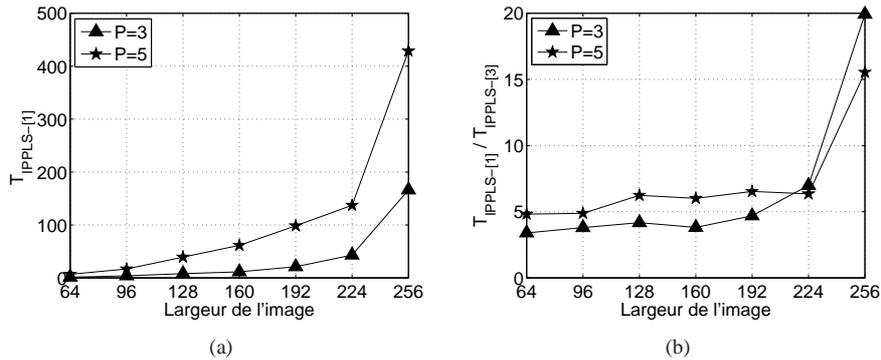


Figure 4. Temps de calcul pour l'algorithme primal-dual exact 1 (a) et gain en temps de calcul apporté par l'algorithme accéléré 3 (b) en fonction de la taille de l'image, pour $P = 3$ et $P = 5$

Les tableaux 1 et 2 présentent les résultats obtenus en termes de qualité d'estimation des cartes d'abondances et de temps de calcul, par IPLS et IPPLS, dans leur

version accélérée 3, pour $P = 5$ composantes, $N = 256^2$ pixels et différents niveaux de rapport signal sur bruit. Sont indiqués également, à titre de comparaison, les résultats obtenus par les méthodes de références NNLS et FCLS. Les stratégies IPLS et FCLS étant basées sur la même formulation variationnelle, elles conduisent à des valeurs très similaires d'erreur de reconstruction. Nous pouvons constater que le rajout de la régularisation permet de réduire l'erreur d'estimation des cartes. Cette amélioration est d'autant plus notable que le niveau de bruit est élevé. À l'inverse, la méthode NNLS conduit à des erreurs importantes, du fait du non respect de la contrainte d'additivité sur les abondances estimées. Remarquons enfin que notre stratégie d'accélération, basée sur l'utilisation d'un algorithme de résolution approchée de la direction primale, permet de conserver un temps de calcul raisonnable, comparé à celui de FCLS et NNLS.

Tableau 1. Performance des différents algorithmes en termes d'erreur de reconstruction moyenne EQMn (%) pour $P = 5$, $N = 256^2$

RSB	NNLS	FCLS	IPLS 3	IPPLS 3
5	9.26	1.21	1.20	0.77
10	2.07	0.47	0.47	0.25
15	0.80	0.12	0.11	0.07
20	0.43	0.04	0.04	0.03

Tableau 2. Performances des différents algorithmes en termes de temps de calcul (en secondes) pour $P = 5$, $N = 256^2$

RSB	NNLS	FCLS	IPLS 3	IPPLS 3
5	99.71	91.01	10.11	19.48
10	100.23	90.80	10.15	19.40
15	100.35	90.66	9.99	19.02
20	100.42	90.51	9.94	19.18

4.4. Application à des données réelles

Dans cette section, nous appliquons la méthode proposée à l'analyse de données réelles obtenues par le spectro-imageur AVIRIS (Vane *et al.*, 1993 ; Green, *et al.*, 1998), disponibles sur le site <http://aviris.jpl.nasa.gov/>. L'image considérée est celle de Cuprite, site minier situé au sud du Nevada avec beaucoup de minerais et peu de végétation. Ce cube de données a été retenu car il est très largement utilisé pour illustrer les méthodes d'analyse d'images hyperspectrales. Il a été enregistré par l'instrument AVIRIS le 19 juin 1997 puis prétraité pour réduire la contribution atmosphérique et éliminer les bandes défectueuses. Finalement, le cube retenu est de taille 250×190 pixels et 188 bandes spectrales.

Afin d'illustrer les différentes étapes du traitement, la méthode VCA est d'abord utilisée pour l'estimation des pôles du mélange, puis les différents algorithmes proposés dans cet article sont appliqués pour l'estimation des cartes d'abondances avec ou

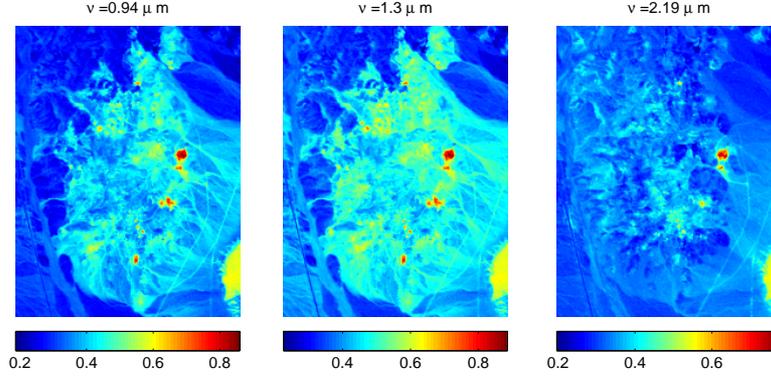


Figure 5. Aperçu des images spectrales pour trois bandes de longueurs d'ondes

Tableau 3. Performances des différents algorithmes en termes de temps de calcul (en secondes) en fonction du nombre de composantes pour les données Cuprite

P	NNLS	FCLS	IPLS 1	IPLS 3	IPPLS 1	IPPLS 3
3	29.52	28.92	4.66	4.51	337.6	7.74
4	39.59	40.89	7.59	7.79	645.4	14.17
5	52.95	52.25	11.16	11.27	1263.6	22.49
6	65.36	64.99	23.10	23.13	1520.1	43.58
7	77.62	78.16	24.66	24.45	2260.8	45.34
8	89.80	93.96	30.74	30.89	–	56.97
9	103.14	106.45	39.60	40.32	–	72.80
10	114.69	120.02	48.08	49.16	–	90.87
11	130.20	132.39	65.23	66.96	–	123.57
12	161.40	163.15	84.19	87.26	–	152.38
13	189.76	192.19	97.64	102.15	–	181.07
14	216.14	221.65	116.50	121.07	–	206.75
15	242.67	251.50	133.87	138.75	–	236.36

sans pénalisation spatiale. Le tableau 3 résume le temps de calcul de l'étape d'estimation des abondances pour différents nombres de sources. Ces résultats sont en parfait accord avec ceux obtenus dans le cas de mélanges synthétiques : dans le cas non pénalisé, nous observons une réduction du temps de calcul par la méthode primale-duale. Dans le cas d'une pénalisation spatiale, la résolution approchée du système primal est à privilégier pour réduire le temps de calcul. Cette troncature n'apporte aucun gain significatif dans le cas non pénalisé. Nous signalons également que la résolution exacte n'a pas été possible pour $P \geq 8$ pour cause d'insuffisance en espace mémoire.

La figure 6 présente le rapport signal sur résidu en décibels, défini par

$$RSR = 20 \log_{10} \left(\frac{\|\mathbf{Y}\|_F}{\|\mathbf{Y} - \mathbf{S}\hat{\mathbf{C}}\|_F} \right). \quad (51)$$

Nous remarquons que les méthodes NNLS, IPLS et IPPLS conduisent à des valeurs similaires de RSR. La méthode NNLS permet d'obtenir un RSR plus élevé, ce qui correspond à une meilleure vérification du modèle de mélange. Ces observations sont confirmées par la figure 7, présentant la valeur du RSR pour chaque pixel n , obtenu avec $P = 6$. Cependant, comme nous pouvons le voir dans le tableau 4, cette méthode conduit à l'apparition de coefficients de mélanges qui peuvent être supérieurs à 1, et dont la somme n'est pas égale à 1.

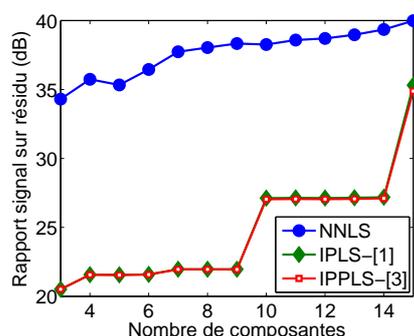


Figure 6. Rapport signal sur résidu (en dB) pour les différents algorithmes en fonction du nombre de composantes pour les données Cuprite

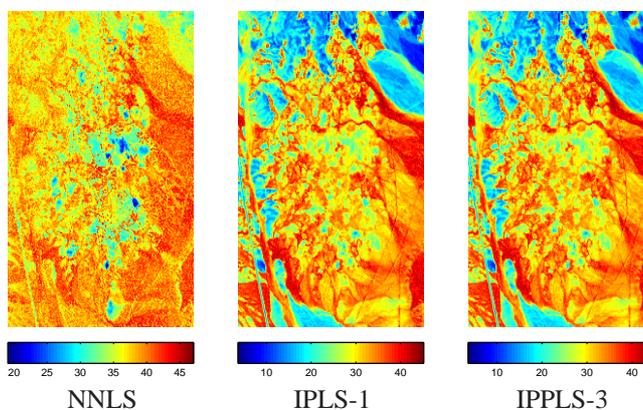


Figure 7. Rapport signal sur résidu par pixel obtenu par les différentes méthodes d'estimation pour les données Cuprite avec $P = 6$

La figure 8 illustre les résultats des méthodes NNLS, IPLS et IPPLS pour $P = 6$ en termes de spectres purs et de cartes d'abondances. Nous pouvons constater par exemple sur les images 8(d) et 8(e) l'effet de lissage introduit par la régularisation spatiale. À l'inverse, les cartes obtenues par NNLS demeurent très bruitées. Il serait par ailleurs judicieux de réaliser une analyse plus complète de l'effet de la régularisation en envisageant des fonctions de pénalisation $\ell_2 - \ell_1$ et des images présentant des régions homogènes et des contours plus marqués.

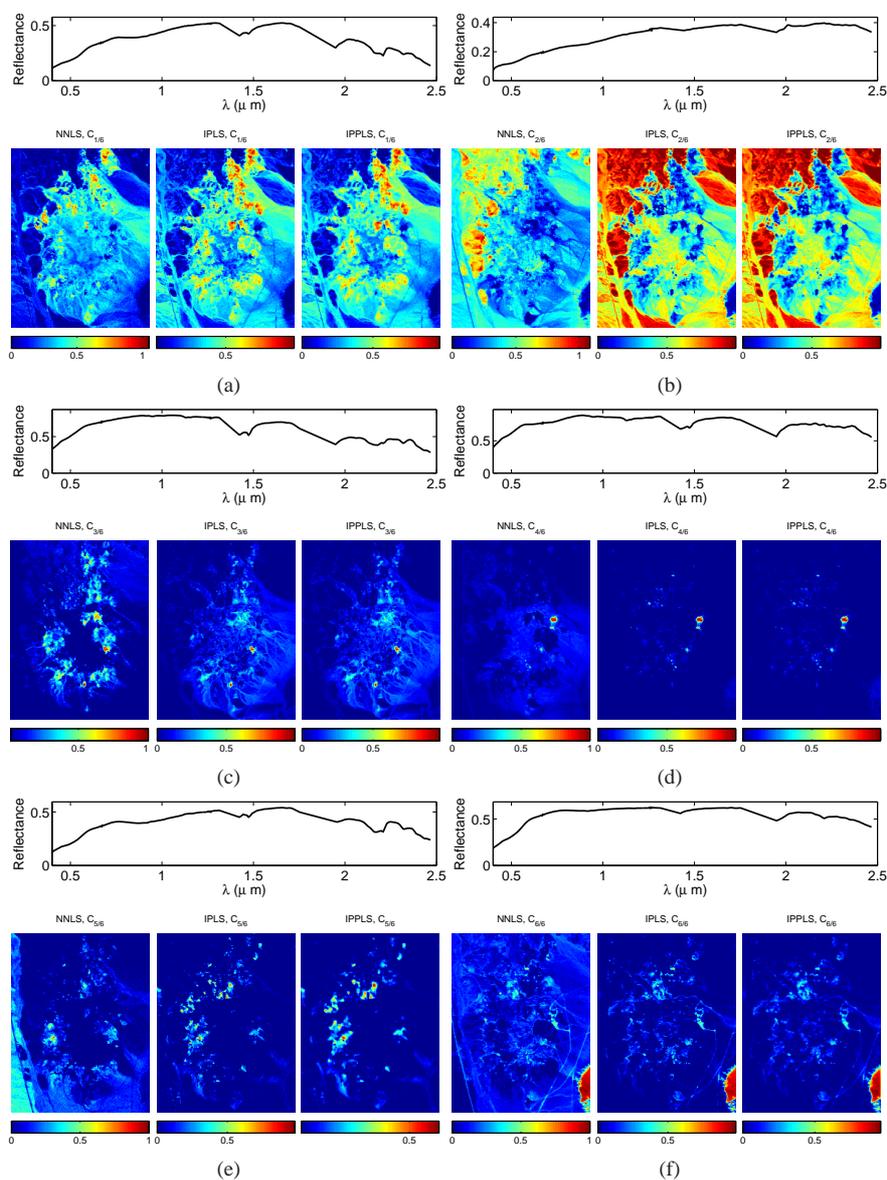


Figure 8. Aperçu des spectres estimés par VCA et des cartes d'abondances obtenues pour $P = 6$ avec ou sans régularisation spatiale

Tableau 4. Somme (moyenne et écart type sur l'ensemble des pixels) et valeurs extrémales des abondances estimées par NNLS en fonction du nombre de composantes pour les données Cuprite

P	somme	min	max
3	0.889 (0.107)	0.469	1.747
6	0.963 (0.132)	0.498	1.555
10	0.907 (0.117)	0.498	1.555
15	1.125 (0.186)	0.690	2.427

5. Conclusion

Nous avons proposé un algorithme rapide pour l'estimation des cartes d'abondances en imagerie hyperspectrale sous contraintes de positivité et additivité. Cette approche peut s'appliquer au cas d'un bruit non nécessairement gaussien ou de contraintes de somme inférieure ou égale à un. En outre, l'utilisation d'une méthode de type points intérieurs permet de traiter simultanément tous les pixels de l'image et par conséquent d'intégrer simplement une information spatiale sur les coefficients. Nous avons montré que la résolution approchée du système primal permet de pallier la forte augmentation du temps de calcul induit par l'introduction de la pénalisation. La prochaine étape de ce travail consiste en l'étude de la convergence théorique de cet algorithme et en son extension au cas de mélanges non linéaires.

Bibliographie

- Armand P., Gilbert J. C., Jan-Jégou S. (2000). A feasible BFGS interior point algorithm for solving strongly convex minimization problems. *SIAM Journal on Optimization*, vol. 11, p. 199-222.
- Bioucas-Dias J. M., Plaza A. (2011). An overview on hyperspectral unmixing: geometrical, statistical, and sparse regression based approaches. In *Proceeding of the IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS'11)*. Vancouver, Canada.
- Boyd S., Vandenberghe L. (2004). *Convex optimization*. New York, Cambridge University Press.
- Bro R., De Jong S. (1997). A fast non-negativity constrained least squares algorithm. *Journal of Chemometrics*, vol. 11, p. 393-401.
- Chang C.-I. (2007). *Hyperspectral data exploitation*. Wiley Interscience.
- Chouzenoux E., Moussaoui S., Idier J. (2011). Efficiency of linesearch strategies in interior point methods for linearly constrained signal restoration. In *Proceedings of the IEEE workshop on Statistical Signal Processing Workshop (SSP'11)*, p. 101-104. Nice, France.
- Clark R. N., Swayze G. A., Gallagher A., King T. V., Calvin W. M. (1993). The U.S. geological survey digital spectral library: version 1 (0.2 to 3.0 μm). *U.S. Geological Survey, Open File Rep.* 93-592.

- Conn A., Gould N., Toint P. L. (1996). A primal-dual algorithm for minimizing a nonconvex function subject to bounds and nonlinear constraints. In G. Di Pillo, F. Giannessi (Eds.), *Nonlinear optimization and applications*, 2^e éd.. Kluwer Academic Publishers.
- Dixon L. C. W. (1973). Conjugate directions without linear searches. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, vol. 11, n^o 3, p. 317-328.
- Dobigeon N., Moussaoui S., Coulon M., Tourneret J., Hero A. O. (2010). Algorithmes bayésiens pour le démelange supervisé, semi-supervisé et non supervisé d'images hyperspectrales. *Traitement du signal*, vol. 27, n^o 1, p. 79–108.
- Dobigeon N., Tourneret J.-Y., Chang C.-I. (2008). Semi-supervised linear spectral unmixing using a hierarchical Bayesian model for hyperspectral imagery. *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 56, n^o 7, p. 2684–2695.
- El-Bakry A. S., Tapia R. A., Tsuchiya T., Zhang Y. (1996, June). On the formulation and theory of the newton interior-point method for nonlinear programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, vol. 89, p. 507–541.
- Forsgren A., Gill P. E. (1998, April). Primal-dual interior methods for nonconvex nonlinear programming. *SIAM Journal on Optimization*, vol. 8, p. 1132–1152.
- Forsgren A., Gill P. E., Wright M. H. (2002). Interior methods for nonlinear optimization. *SIAM Review*, vol. 44, n^o 4, p. 525-597.
- Geman D., Reynolds G. (1992). Constrained restoration and the recovery of discontinuities. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. 14, p. 367–383.
- Geman D., Yang C. (1995). Nonlinear image recovery with half-quadratic regularization. *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 4, p. 932–946.
- Green R., *et al.* (1998). Imaging spectroscopy and the airborne visible/infrared imaging (AVIRIS) spectrometer. *Remote Sensing of Environment*, vol. 65, p. 227–248.
- Healey G., Slater D. (1999). Models and methods for automated material identification in hyperspectral imagery acquired under unknown illumination and atmospheric conditions. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 37, n^o 6, p. 2706-2716.
- Heinz D. C., Chang C.-I. (2001). Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 39, n^o 3, p. 529 -545.
- Huck A., Guillaume M., Blanc-Talon J. (2010). Minimum dispersion constrained nonnegative matrix factorization to unmix hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 48, n^o 6, p. 2590-2602.
- Idier J. (2001). Convex half-quadratic criteria and interacting auxiliary variables for image restoration. *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 10, n^o 7, p. 1001-1009.
- Johnson C. A., Seidel J., Sofer A. (2000, April). Interior-point methodology for 3-D PET reconstruction. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, vol. 19, n^o 4, p. 271–285.
- Keshava N., Mustard J. F. (2002, January). Spectral unmixing. *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 19, n^o 1, p. 44 -57.
- Lawson C. L., Hanson R. J. (1974). *Solving least-squares problems*. Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice-Hall.

- Moussaoui S., Hauksdóttir H., Schmidt F., Jutten C., *et al.* (2008, June). On the decomposition of Mars hyperspectral data by ICA and Bayesian positive source separation. *Neurocomputing*, vol. 71, n° 10–12, p. 2194–2208.
- Nascimento J. M. P., Bioucas-Dias J. M. (2005, April). Vertex component analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 43, n° 4, p. 898–910.
- Parente M., Plaza A. (2010, June). Survey of geometric and statistical unmixing algorithms for hyperspectral images. In *Proceedings of the IEEE Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS'10)*. Reykjavik, Iceland.
- Plaza A., Martinez P., Perez R., Plaza J. (2004, March). A quantitative and comparative analysis of endmember extraction algorithms from hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 42, n° 3, p. 650–663.
- Scott J. R. (1997). *Remote sensing: The image chain approach*. New York: Oxford Univ. Press.
- Settle J. J., Drake N. A. (1993). Linear mixing and the estimation of ground cover proportions. *International Journal of Remote Sensing*, vol. 14, n° 6, p. 1159–1177.
- Van der Vorst H. A. (1992, March). BI-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 13, p. 631–644.
- Vane G., Green R. O., Chrien T. G., Enmark H. T., Hansen E. G., Porter W. M. (1993). The airborne visible/infrared imaging spectrometer (AVIRIS). *Remote Sensing of Environment*, vol. 44, n° 2-3, p. 127–143.
- Van Loan C. F. (2000). The ubiquitous Kronecker product. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 123, n° 1-2, p. 85–100.
- Wright M. H. (1992, January). Interior methods for constrained optimization. *Acta Numerica*, vol. 1, p. 341–407.
- Wright M. H. (1994). Some properties of the Hessian of the logarithmic barrier function. *Mathematical Programming*, vol. 67, n° 2, p. 265–295.
- Wright M. H. (1998). Ill-conditioning and computational error in interior methods for nonlinear programming. *SIAM Journal on Optimization*, vol. 9, n° 1, p. 84–111.

Emilie Chouzenoux est, depuis septembre 2011, maître de conférences à l'université Paris-Est Marne-la-Vallée. Elle effectue son activité de recherche au Laboratoire d'Informatique Gaspard Monge (LIGM, UMR CNRS 8049), dans l'équipe Signal et Communications. Ses thèmes de recherche concernent les méthodes d'optimisation convexe et non convexe pour la résolution de problèmes inverses de grande taille en traitement du signal et de l'image.

Saïd Moussaoui est, depuis septembre 2006, maître de conférences à l'école Centrale de Nantes au sein du département Automatique et Robotique. Il effectue son activité de recherche à l'Institut de recherche en communications et cybernétique de Nantes (IRCCyN, UMR CNRS 6597), dans l'équipe ADTSI (analyse et décision en traitement du signal et de l'image). Ses thèmes de recherche concernent les méthodes d'optimisation et de simulation bayésienne et leur utilisation pour le développement

de méthodes de résolution de problèmes inverses en traitement statistique du signal et de l'image. Les applications concernent la spectrométrie et l'imagerie hyperspectrale.

***Maxime Legendre** est, depuis mars 2012, doctorant dans l'équipe ADTSI (analyse et décision en traitement du signal et de l'image) de l'Institut de recherche en communications et cybernétique de Nantes (IRCCyN, UMR CNRS 6597). Il travaille actuellement sur les méthodes d'optimisation et leur implémentation parallèle pour l'imagerie spatiale.*

***Jérôme Idier** est Directeur de recherche au CNRS. Diplômé de Supélec, Gif-sur-Yvette (1988), il a obtenu un doctorat de physique de l'Université Paris-Sud, Orsay en 1991, puis une habilitation à diriger des recherches de la même université en 2001. Depuis 1991, il est chercheur au CNRS, au Laboratoire des signaux et systèmes et à l'Institut de recherche en communications et cybernétique de Nantes depuis septembre 2002. Jérôme Idier est membre de la section 7 du Comité national de la recherche scientifique depuis 2012. Ses principaux sujets d'intérêt concernent les approches statistiques pour la restauration de signaux et d'images.*

