

Approximation et Estimation de Réponses Spectrales d'Instruments

Jihanne EL HAOUARI^{1,2} Jean-Yves TOURNERET^{1,2} Herwig WENDT¹ Christelle PITTET³ Jean-Michel GAUCEL⁴

¹Université de Toulouse, Institut de Recherche en Informatique de Toulouse (IRIT), CNRS, Toulouse INP-ENSEEIH, Toulouse

²Laboratoire TésA, 7 boulevard de la gare, 31500 Toulouse, France

³Centre National d'Études Spatiales, Centre Spatial de Toulouse, 18 avenue Edouard Belin, 31400 Toulouse, France

⁴Thales Alenia Space France, 5 allée des Gabians, 06150 Cannes, France

Résumé – Différents spectromètres ou imageurs hyperspectraux sont utilisés afin de déterminer la concentration de certains gaz au niveau de l'atmosphère. La détermination de la réponse spectrale de ces instruments est un problème important car une connaissance imparfaite peut induire des erreurs dans les concentrations de gaz obtenues. Dans cet article, nous proposons une nouvelle méthode d'estimation de la réponse spectrale d'un spectromètre basée sur un algorithme de type Orthogonal Matching Pursuit (OMP) qui permet de décomposer cette réponse dans un dictionnaire de fonctions de base de manière parcimonieuse.

Abstract – Spectrometers or hyperspectral imagers are widely used to determine the concentration of gases in the atmosphere. Estimating the spectral response of these instruments is an important problem since an imperfect knowledge can induce errors in the resulting gaz concentrations. This paper studies a new method for estimating an instrument spectral response function based on the Orthogonal Matching Pursuit (OMP) algorithm. This method decomposes the spectral response of interest as a sparse linear combination of atoms belonging to a dictionary.

1 Introduction

La télédétection spatiale permet de mesurer à distance la composition de l'atmosphère grâce à son interaction avec le rayonnement du soleil. En effet, la présence de molécules sur le trajet du rayonnement modifie le contenu spectral aux fréquences caractéristiques des différents éléments chimiques. À partir des spectres obtenus, il est possible de déterminer la concentration des différents gaz dans une colonne d'atmosphère en comparant le contenu spectral mesuré avec un modèle de transfert radiatif. La précision des mesures est un élément essentiel de la performance des missions spatiales liées à l'analyse de l'atmosphère.

Les instruments de mesure utilisés sont des spectromètres à haute résolution, dont les bandes spectrales sont centrées sur les fréquences caractéristiques du gaz à observer. Il est fondamental de connaître le modèle de l'instrument et de caractériser le plus précisément possible sa fonction de réponse spectrale (aussi appelée ISRF pour Instrument Response function). Les éléments optiques et électroniques qui composent ces instruments induisent des distorsions qui complexifient la connaissance parfaite de l'ISRF en vol. En revanche, on dispose d'une connaissance a priori des ISRFs au sol qui peuvent donc être approchées à l'aide de différents modèles. L'enjeu est ensuite de parvenir à estimer ces ISRFs lors de la phase de vol à partir de leur caractérisation faite au sol.

Des modèles paramétriques ont été largement utilisés dans la littérature pour l'estimation des ISRFs [1] mais ces estimations ne sont pas toujours très précises. Cet article propose une nouvelle méthode d'approximation et d'estimation des ISRFs basée sur la représentation parcimonieuse de ces fonctions dans un dictionnaire. Dans la section 2, nous formalisons le problème d'estimation des réponses spectrales à partir de données issues d'un spectromètre. Dans la section 3, nous présentons une nouvelle méthode d'estimation basée sur une

représentation parcimonieuse de l'ISRF dans un dictionnaire de fonctions de base. Dans la section 4, nous décrivons les données utilisées et comparons la méthode proposée à plusieurs alternatives de l'état de l'art. Les conclusions sont ensuite présentées dans la section 6.

2 Estimation des réponses spectrales

2.1 Énoncé du problème

Dans cet article, on cherche à estimer la réponse spectrale d'un instrument en vol à partir de données mesurées. Le principe de l'estimation est identique pour différents spectromètres : on réalise une mesure en vol d'une scène parfaitement connue et on la compare avec un modèle spectral de la scène convolué par la meilleure connaissance de l'ISRF disponible [2, 3]. Le spectre mesuré en vol noté $S_{\text{mes}}(\lambda)$ peut s'exprimer comme le produit de convolution entre un spectre théorique noté $S_{\text{th}}(\lambda)$ lié à la scène imagée et l'ISRF de longueur d'onde centrale λ recherchée notée I_λ , ce qui peut s'écrire :

$$S_{\text{mes}}(\lambda) = (S_{\text{th}} * I_\lambda)(\lambda) = \int_{\lambda_{\text{min}}}^{\lambda_{\text{max}}} S_{\text{th}}(u) I_\lambda(\lambda - u) du. \quad (1)$$

On notera que l'ISRF I_λ dépend de la longueur d'onde centrale de l'ISRF. En discrétisant cette équation, on obtient :

$$S_{\text{mes}}(\lambda) \approx \sum_{n=1}^N S_{\text{th}}(\lambda_n^*) I_\lambda(\lambda - \lambda_n^*), \quad (2)$$

où les fréquences λ_n^* sont celles pour lesquelles le spectre théorique est connu. En pratique, on mesure le spectre $S_{\text{mes}}(\lambda)$ à plusieurs longueurs d'ondes λ_l , chacune associée à un pixel illuminé par le détecteur. Chaque pixel a sa propre ISRF qu'on dénotera I_l et qui provient d'un simulateur du CNES basé sur

un modèle de transfert radiatif. On cherche alors à estimer les ISRFs à ces longueurs d'ondes à partir des spectres mesurés $S_{\text{mes}}(\lambda_l)$ et théoriques $S_{\text{th}}(\lambda_n^*)$.

Une manière de procéder est d'utiliser un modèle paramétrique pour l'ISRF qui est ensuite reconstruite à partir du spectre mesuré en résolvant le problème inverse (2). Plusieurs modèles paramétriques utilisés dans la littérature sont rappelés dans la prochaine section.

2.2 Modèles paramétriques

Un premier choix pour approcher les ISRFs consiste à utiliser des modèles paramétriques gaussiens ou super-gaussiens [1]. Le modèle gaussien suppose que l'ISRF à la longueur d'onde λ_l est définie par :

$$I_l(\lambda; \beta_G) = A_G \exp\left(-\frac{(\lambda - \lambda_l - \mu_G)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (3)$$

où on rappelle que λ_l est la longueur d'onde centrale de l'ISRF. Cette ISRF dépend donc de trois paramètres qui sont regroupés dans le vecteur $\beta_G = (A_G, \mu_G, \sigma^2)^T$ qui doit être estimé.

Le modèle super gaussien suppose que l'ISRF est définie par (avec les notations de [1]) :

$$I_l(\lambda; \beta_{\text{SG}}) = A_{\text{SG}} \exp\left(-\left|\frac{\lambda - \lambda_l - \mu_{\text{SG}}}{w}\right|^k\right), \quad (4)$$

où $\beta_{\text{SG}} = (A_{\text{SG}}, \mu_{\text{SG}}, w, k)^T$ est le vecteur paramètre à estimer. Ce deuxième modèle est plus général que le modèle gaussien, qui correspond au cas particulier où $w = \sqrt{2}\sigma$ et $k = 2$. Le paramètre w est un paramètre d'échelle tandis que k est un paramètre de forme qui permet d'obtenir des ISRFs plus ou moins piquées ou aplaties. On notera que les modèles (3) et (4) diffèrent légèrement de ceux présentés dans [1] puisque des paramètres supplémentaires (moyennes μ_G et μ_{SG} et amplitudes A_G et A_{SG}) sont considérés.

Pour simplifier le problème, on suppose que l'ISRF I_l peut être considérée comme constante pour L spectres mesurés associés à des longueurs d'onde consécutives notées $\lambda_{l-\frac{l}{2}}, \dots, \lambda_{l+\frac{l}{2}}$. La méthode d'estimation proposée dans [1] est la méthode des moindres carrés qui consiste à minimiser par rapport au vecteur $\beta \in \{\beta_G, \beta_{\text{SG}}\}$ la fonction de coût suivante :

$$R_l(\beta) = \sum_{l' = l - \frac{l}{2}}^{l + \frac{l}{2}} [S_{\text{mes}}(\lambda_{l'}) - (S_{\text{th}} * I_l)(\lambda_{l'}; \beta)]^2, \quad (5)$$

$$= \sum_{l' = l - \frac{l}{2}}^{l + \frac{l}{2}} \left[S_{\text{mes}}(\lambda_{l'}) - \sum_{n=1}^N S_{\text{th}}(\lambda_n^*) I_l(\lambda_{l'} - \lambda_n^*; \beta) \right]^2. \quad (6)$$

3 Apprentissage de dictionnaire

L'ISRF peut être difficile à modéliser analytiquement par un vecteur de paramètres de dimension finie car elle intègre un nombre important de "contributeurs" associés aux éléments optiques de l'instrument (fente, miroir, lentille, séparatrice, élément disperser), au détecteur et au mode d'acquisition. Les modèles gaussiens et super-gaussiens parviennent difficilement à prendre en compte les différentes formes d'ISRFs

que l'on peut observer en pratique (qui sont parfois asymétriques). Cette observation nous a poussé à développer une nouvelle approche permettant d'approcher et d'estimer le plus précisément possible les ISRFs de spectromètres.

3.1 Approximation des ISRFs

Des modèles basés sur l'apprentissage de dictionnaires ont été utilisés avec succès pour plusieurs applications du traitement des images comme le débruitage, la classification ou la reconstruction d'images [4, 5]. Ces modèles s'appuient sur une représentation parcimonieuse des données observées sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions de base (appelées atomes) appartenant à un dictionnaire. Plus précisément, cette représentation est basée sur le modèle suivant :

$$I_l \approx I_l^K = \sum_{k=1}^K \alpha_k \Phi_{\gamma_k}, \quad (7)$$

où $I_l = [I_l(\lambda_l - \lambda_1^*), \dots, I_l(\lambda_l - \lambda_N^*)]^T \in \mathbb{R}^N$, $I_l^K \in \mathbb{R}^N$ est une approximation de l'ISRF I_l avec K atomes et $\Phi_{\gamma_k} \in \mathbb{R}^N$ est la γ_k ème fonction de base du dictionnaire $\Phi \in \mathbb{R}^{N \times K}$.

L'apprentissage du dictionnaire Φ consiste tout d'abord à déterminer les atomes du dictionnaire permettant de représenter les données d'intérêt puis de décomposer de manière parcimonieuse les nouvelles données dans ce dictionnaire [6]. Le problème de décomposition peut s'écrire [7] :

$$\arg \min_{\alpha} L(\alpha, \mu) = \arg \min_{\alpha} \|I_l - \Phi \alpha\|_2^2 + \mu \|\alpha\|_0, \quad (8)$$

où $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_K)^T \in \mathbb{R}^K$ et où $\|\cdot\|_0$ désigne la pseudo-norme l_0 . Le problème (8) étant NP-difficile, une première méthode de résolution consiste à simplifier le problème afin de pouvoir appliquer des méthodes de résolution exactes.

Une solution classique pour résoudre (8) consiste à remplacer la pseudo-norme l_0 par la norme l_1 , ce qui conduit au problème appelé LASSO [8] qui peut être résolu de plusieurs manières [9, 10]. Une seconde méthode consiste à rechercher une solution approchée avec un algorithme glouton tel que l'algorithme "Orthogonal Matching Pursuit" (OMP). Il s'agit d'une modification de l'algorithme "Matching Pursuit" qui améliore la convergence en ajoutant une étape d'orthogonalisation [11, 12]. L'algorithme OMP est un algorithme itératif, qui à chaque étape choisit l'atome du dictionnaire qui est le plus adapté pour approcher la fonction à optimiser, ici $L(\alpha, \mu)$. Cet algorithme permet d'obtenir une décomposition très flexible de l'ISRF dans la mesure où le dictionnaire est suffisamment riche, i.e., contient une collection d'atomes permettant d'approcher toutes les réponses spectrales de spectromètres.

Pour déterminer le dictionnaire Φ , nous proposons d'effectuer la décomposition en valeurs singulières (SVD) d'une matrice M dont les colonnes sont des exemples représentatifs d'ISRFs (voir section 4 pour plus de détails) :

$$M = U \Lambda V^H, \quad (9)$$

où U et V sont des matrices unitaires, Λ est une matrice diagonale composée des valeurs singulières de M rangées par ordre décroissant et H désigne l'opérateur transposé conjugué. Le dictionnaire Φ est alors formé par les N_D premières colonnes de V associées aux plus grandes valeurs singulières de M .¹

¹ On pourrait également utiliser l'algorithme K-SVD qui est une technique classique d'apprentissage de dictionnaire [4].

3.2 Résolution du problème inverse

Pour appliquer la méthode d'apprentissage de dictionnaire à la résolution du problème inverse (2), on suppose qu'il existe une décomposition parcimonieuse des ISRFs au sol dans un dictionnaire Φ (dictionnaire déterminé à l'aide de la SVD de la matrice M). La mesure des ISRFs au sol consiste à envoyer un laser à une longueur d'onde stable et connue, et à mesurer la réponse de chaque pixel à cette longueur d'onde. On obtient ainsi une courbe qu'on appelle ILS (pour "Instrument Line Shape") avec en abscisse l'indice du pixel et en ordonnée la réponse du pixel. L'ISRF d'un pixel est ensuite reconstruite à partir de toutes les ILS à toutes les longueurs d'onde, avec en abscisse la longueur d'onde et en ordonnée la réponse d'un même pixel à ces différentes longueurs d'onde. On peut produire des ISRFs de scènes de différents types en éclairant l'instrument avec le laser de manière uniforme ou en ajoutant des masques qui obturent une partie de l'instrument pour simuler des scènes non uniformes.

En écrivant la relation de convolution avec la décomposition parcimonieuse des ISRFs, on obtient :

$$\begin{aligned} S_{\text{mes}}(\lambda_l) &\approx \sum_{n=1}^N S_{\text{th}}(\lambda_n^*) \sum_{k=1}^K \alpha_k \Phi_{\gamma_k}(\lambda_l - \lambda_n^*) \\ &\approx \sum_{k=1}^K \alpha_k \sum_{n=1}^N S_{\text{th}}(\lambda_n^*) \Phi_{\gamma_k}(\lambda_l - \lambda_n^*) \\ &\approx \sum_{k=1}^K \alpha_k \Psi_{\gamma_k}(\lambda_l). \end{aligned} \quad (10)$$

Le dictionnaire Φ et le spectre théorique S_{th} étant connus dans notre application, en convoluant ces deux termes, on obtient un nouveau dictionnaire également connu noté Ψ . Le problème d'estimation consiste alors à estimer le vecteur parcimonieux α à partir de (10), ce que nous proposons de faire à l'aide de l'algorithme OMP.

4 Résultats expérimentaux

4.1 Instrument, données et simulations

Les données utilisées dans cet article proviennent de simulations réalisées par le CNES pour la mission MicroCarb. L'objectif principal de cette mission est de déterminer la concentration en dioxyde de carbone CO_2 au niveau de l'atmosphère sur l'ensemble du globe avec une précision importante de l'ordre du ppm. L'instrument MicroCarb est un spectromètre à haute résolution spectrale qui possède deux bandes d'absorption dans l'infra-rouge (1596.7 - 1618.9nm et 2023 - 2051nm) permettant de récupérer les raies d'absorption du CO_2 et deux bandes dans le proche infra-rouge (758.3 - 768.8 nm et 1264 - 1282.2nm) pour mesurer la concentration en oxygène O_2 . Les spectres théoriques sont obtenus grâce au logiciel de transfert radiatif 4A/OP [13] pour les bandes MicroCarb.

Pour les méthodes paramétriques étudiées dans cet article, l'estimation des paramètres se fait à l'aide de l'algorithme des moindres carrés non-linéaires. Cet algorithme itératif nécessite de définir un point de départ (une initialisation) et un critère d'arrêt. La fonction `fminsearch` de MATLAB a été utilisée pour minimiser le résidu associé à l'algorithme des moindres

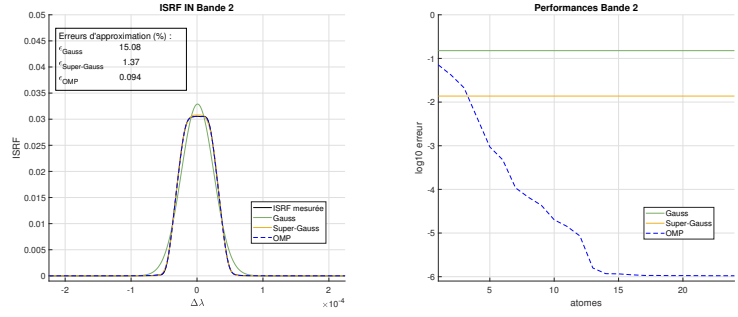


FIGURE 1 : Approximations de l'ISRF issues des modèles Gauss, Super-Gauss et OMP avec les erreurs associées.

carrés non-linéaires. Cette fonction utilise l'algorithme d'optimisation de Nelder-Mead [14]. Lors de l'initialisation du problème d'approximation d'une ISRF, la moyenne μ_{G_0} est égale au barycentre de l'ISRF et l'écart type σ_0 est calculé en utilisant la largeur à mi-hauteur de l'ISRF. Dans le cas gaussien, l'amplitude est initialisée par $A_{G_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0^2}$. Dans le cas

du modèle super-gaussien, notre initialisation est définie par $\mu_{SG_0} = \mu_{G_0}$, $k_0 = 2$, $w_0 = \sqrt{2}\sigma_0$ et $A_{SG_0} = \frac{k_0}{2w_0} \Gamma(1/k_0)$.

Les méthodes paramétriques et d'apprentissage de dictionnaire sont appliquées à la première bande associée au CO_2 . Pour l'algorithme OMP, le dictionnaire est construit en utilisant la SVD sur 1024 exemples d'ISRFs présents dans cette bande spectrale. La taille du dictionnaire est fixée à $N_D = 25$ et les résultats ne varient que très peu lorsque celle-ci augmente.

Pour chaque modèle, il est tout d'abord important d'évaluer sa capacité à approcher une ISRF réelle. Un exemple de critère de performance est l'erreur absolue normalisée entre l'ISRF approchée et l'ISRF réelle qui est définie par :

$$\epsilon_l = \frac{\sum_{n=1}^N |I(\lambda_l - \lambda_n^*) - \hat{I}(\lambda_l - \lambda_n^*)|}{\sum_{n=1}^N I(\lambda_l - \lambda_n^*)}. \quad (11)$$

4.2 Approximation de l'ISRF

On cherche à estimer la première ISRF associée à la bande choisie. Les résultats de l'approximation sont présentés dans la figure 1. Pour la figure de gauche, le nombre d'atomes utilisés pour l'algorithme OMP est fixé à $K = 5$, ce qui est suffisant pour obtenir des erreurs d'approximation inférieures à celles attendues par le CNES ($\epsilon_l < 0.1\%$). Ces résultats indiquent que le modèle super-gaussien donne une meilleure approximation de l'ISRF que le modèle gaussien, ce qui est en accord avec [1]. L'utilisation de l'algorithme OMP permet d'obtenir des performances encore meilleures, ce qui est un résultat très prometteur. Notons que la seule méthode permettant d'obtenir des erreurs ϵ_l inférieures à 1% est celle basée sur l'algorithme OMP. À partir de $K = 3$ atomes, cet algorithme donne de meilleures performances que les modèles paramétriques gaussiens et super-gaussiens.

4.3 Résolution du problème inverse

Le spectre mesuré est simulé pour la bande choisie en effectuant la convolution entre le spectre théorique défini pour cette bande et une ISRF donnée. Ensuite, pour chaque fréquence λ_l du spectre mesuré, l'ISRF est estimée en utilisant les modèles paramétriques ou la méthode d'apprentissage de dictionnaire

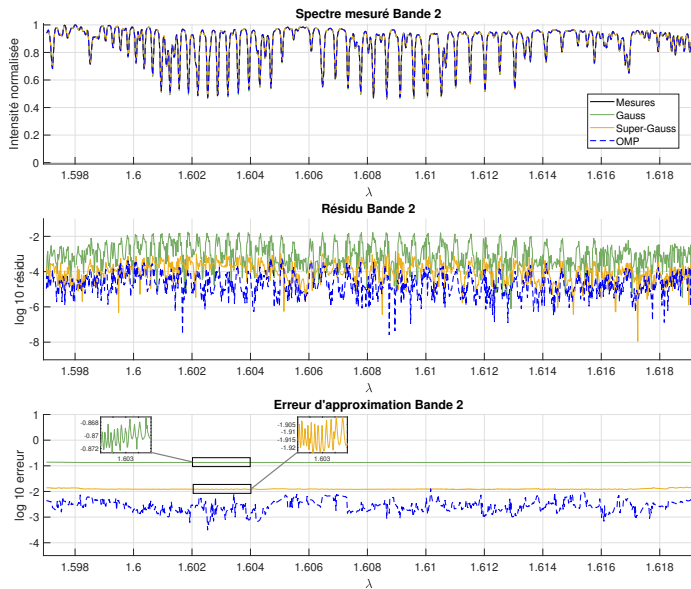


FIGURE 2 : Reconstructions du spectre mesuré en utilisant les approximations gaussienne, super-gaussienne et parcimonieuse, et erreurs résiduelles et d’approximation de l’ISRF.

présentés précédemment. Plus précisément, pour chaque valeur de λ_l , l’ISRF est estimée à l’aide d’une fenêtre glissante comportant 80 observations spectrales situées autour de λ_l . L’erreur d’approximation de l’ISRF est évaluée pour chaque fenêtre. Le spectre mesuré est finalement reconstruit par convolution entre les approximations obtenues aux différentes valeurs de λ_l et le spectre théorique. On utilise $K = 5$ atomes pour l’algorithme OMP. Les résultats sont présentés dans la figure 2.

Pour la résolution du problème inverse, les résultats utilisant l’algorithme OMP sont à nouveau meilleurs que ceux utilisant les modèles paramétriques et sont les seuls permettant d’obtenir des erreurs d’approximation $\epsilon_l < 1\%$ et même parfois $\epsilon_l < 0.1\%$. Notons que l’erreur d’approximation pour les modèles gaussien et super-gaussien n’est pas constante (voir zooms dans la figure (2)). Elle est supérieure à 1% pour le modèle gaussien et à 10% pour le modèle super-gaussien.

5 Conclusion

Dans cet article, nous avons proposé une nouvelle méthode permettant de résoudre les problèmes d’approximation et d’estimation des réponses spectrales d’instruments au sol et en vol. Cette méthode est basée sur une décomposition parcimonieuse de ces réponses spectrales dans un dictionnaire de fonctions de base appelées atomes. Les expériences réalisées utilisant des données réalistes simulées par le CNES permettent d’apprécier la bonne performance de cette méthode, qui donne des résultats plus convaincants que ceux obtenus dans la littérature à l’aide de modèles paramétriques simples. Ces travaux seront poursuivis par le développement de modèles permettant de prendre en compte certains effets physiques tels que la lumière diffuse ou parasite pouvant dégrader l’estimation des réponses spectrales des instruments. D’autres méthodes d’apprentissage de dictionnaires, comme la méthode K-SVD, seront également considérées pour analyser l’importance du choix de ce dictionnaire.

Références

- [1] S. Beirle, J. Lampel, C. Lerot, H. Sihler, and T. Wagner, “Parameterizing the instrumental spectral response function and its changes by a super-Gaussian and its derivatives,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 2, pp. 581–598, 2017.
- [2] M. Hamidouche and G. Lichtenberg, “In-flight retrieval of SCIAMACHY instrument spectral response function,” *Remote Sensing*, vol. 10, no. 3, pp. 401, 2018.
- [3] K. Sun et al., “Deriving the slit functions from OMI solar observations and its implications for ozone-profile retrieval,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 10, pp. 3677–3695, 2017.
- [4] M. Aharon, M. Elad, and A. Bruckstein, “K-SVD : An algorithm for designing overcomplete dictionaries for sparse representation,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 54, no. 11, pp. 4311–4322, 2006.
- [5] E. Tsiliogianni, L. P. Kondi, and A. K. Katsaggelos, “Preconditioning for underdetermined linear systems with sparse solutions,” *IEEE Signal Process. Lett.*, vol. 22, no. 9, pp. 1239–1243, 2015.
- [6] I. Tošić and P. Frossard, “Dictionary Learning,” *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 28, no. 2, pp. 27–38, 2011.
- [7] Z. Zhang, Y. Xu, J. Yang, X. Li, and D. Zhang, “A survey of sparse representation : Algorithms and applications,” *IEEE Access*, vol. 3, pp. 490–530, 2015.
- [8] M. Tan, I. W. Tsang, and L. Wang, “Matching pursuit LASSO. Part I : Sparse recovery over big dictionary,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 63, no. 3, pp. 727–741, 2015.
- [9] M. A. T. Figueiredo, R. D. Nowak, and S. J. Wright, “Gradient projection for sparse reconstruction : Application to compressed sensing and other inverse problems,” *IEEE J. Sel. Top. Signal Process.*, vol. 1, no. 4, pp. 586–597, 2007.
- [10] S.-J. Kim et al., “An interior-point method for large-scale ℓ_1 -regularized least squares,” *IEEE J. Sel. Top. Signal Process.*, vol. 1, no. 4, pp. 606–617, 2007.
- [11] S. G. Mallat and Z. Zhang, “Matching pursuits with time-frequency dictionaries,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 41, no. 12, pp. 3397–3415, 1993.
- [12] Y. C. Pati, R. Rezaiifar, and P. S. Krishnaprasad, “Orthogonal matching pursuit : recursive function approximation with applications to wavelet decomposition,” in *Proc. Asilomar Conf. Signals, Systems and Computers*, Pacific Grove, CA, USA, 1993, pp. 40–44 vol.1.
- [13] NOVELTIS, CNES, and LMD, “4A/OP - operational release for 4A - automatized atmospheric absorption atlas,” <https://4aop.noveltis.fr/references-and-publications>.
- [14] J. C. Lagarias, J. A. Reeds, M. H. Wright, and P. E. Wright, “Convergence properties of the Nelder-Mead simplex method in low dimensions,” *SIAM J. Optim.*, vol. 9, pp. 112–147, 1998.