

Restauration des cubes hyperspectraux du spectro-imageur MUSE

Sébastien BOURGUIGNON^{1*}, Hervé CARFANTAN², David MARY^{1†}, Éric SLEZAK^{1*}, Andrea FERRARI^{1†}

¹Laboratoires Cassiopée (1★) et Fizeau (1†)
Université de Nice Sophia Antipolis, CNRS, Observatoire de la Côte d'Azur, 06 304 Nice, France

² Université de Toulouse, UPS-OMP / CNRS; IRAP; 14, avenue Edouard Belin, 31 400 Toulouse, France
Sebastien.Bourguignon@oca.eu, Herve.Carfantan@ast.obs-mip.fr, David.Mary@unice.fr,
Eric.Slezak@oca.eu, Andre.Ferrari@unice.fr

Résumé – Nous envisageons la restauration d'observations en imagerie hyperspectrale de champs profonds de l'univers pour le projet instrumental MUSE. En raison de la taille massive des données et du fort niveau de bruit, le problème global de restauration demande à la fois une réduction de dimension et la prise en compte d'informations *a priori* pertinentes. Des contraintes de parcimonie spectrale sont introduites, permettant de prendre en compte ces deux aspects. Le problème tri-dimensionnel est alors contraint dans un espace spectral de dimension réduite et la déconvolution est réalisée avec un *a priori* spectralement fort et spatialement peu contraignant. Des simulations attestent de l'intérêt de cette approche conjointe spatiale et spectrale par rapport à une reconstruction individuelle de chaque spectre. En particulier, un exemple est présenté, où deux sources ponctuelles proches et spatialement convoluées sont efficacement restaurées et leurs spectres démélangés.

Abstract – We consider the restoration of extragalactic deep field hyperspectral imaging data in the context of the forthcoming MUSE instrument. Because of the high quantity of data and of the strong noise level, such restoration problem requires a dimension reduction operation and the incorporation of appropriate prior information. Both points are tackled in this paper by means of sparsity constraints in the spectral domain. The global three-dimensional problem is then constrained to a spectral subspace with lower dimension and deconvolution is performed with strong spectral prior information, and with almost no constraint on the spatial structure of the solution. Simulation results reveal the efficiency of this joint spatial and spectral approach, compared with the individual restoration of each spectrum. In particular, an example with two closely spaced and spatially convolved point sources shows satisfactory restoration and spectral unmixing performance.

1 Introduction

Nous nous intéressons à la restauration de données pour le projet MUSE (Multi-Unit Spectroscopic Explorer), instrument en cours de construction qui équipera un des télescopes de 8m du VLT (Very Large Telescope) de l'ESO en 2012. MUSE produira des cubes de données hyperspectrales de 300×300 pixels (pour un champ de 1 arcmin^2) sur environ 4000 longueurs d'onde, couvrant le domaine visible du spectre électromagnétique [1]. Un des objectifs principaux de MUSE réside dans l'observation de galaxies lointaines par l'acquisition d'un champ profond. Le champ couvert sera alors composé d'un grand nombre de galaxies situées à différentes distances, *résolues* pour les plus proches (*i.e.*, dont l'extension spatiale couvre plusieurs pixels) et *non résolues* pour les plus lointaines, dont l'extension est inférieure à la taille du pixel de l'instrument ($0.2 \times 0.2 \text{ arcsec}^2$). L'acquisition de telles données s'effectuera dans un environnement extrêmement bruyé, en raison notamment de la présence d'un signal parasite lié à l'atmosphère et au fond de ciel. La restauration des données MUSE est donc un problème particulièrement important et délicat, où toute méthode doit être développée sous des contraintes d'efficacité algorithmique permettant d'aborder des problèmes de grande taille. Nous abordons ce problème en intégrant une in-

formation *a priori* de parcimonie, permettant à la fois de prendre en compte des connaissances physiques au niveau spectral et de construire une méthode efficace en coût de calcul. La section 2 introduit certaines spécificités observationnelles fondamentales ainsi que la formalisation du problème de restauration. En section 3, nous décrivons l'apport d'information *a priori* à partir de contraintes de parcimonie selon l'axe spectral. La restauration est envisagée en section 4, où la parcimonie est aussi exploitée afin de réduire la dimension du problème d'optimisation sous-jacent. Des résultats sur un exemple simulé de taille spatiale réduite est présenté en section 5, où nous donnons également quelques conclusions et pistes de poursuite de ce travail.

2 Spécificités observationnelles et restauration spatiale-spectrale

Sous sa forme globale, le problème de restauration peut s'écrire sous le modèle linéaire classique $\mathcal{Y} = \mathcal{H}(\mathcal{X}) + \mathcal{E}$ où \mathcal{Y} est le cube observé, \mathcal{X} le cube recherché, \mathcal{H} un opérateur linéaire représentant l'instrument et \mathcal{E} représente le bruit et les erreurs de modèle. La réponse instrumentale (PSF pour Point Spread Function) de MUSE est tri-dimensionnelle et nous faisons l'hypothèse de sa *séparabilité* en le produit d'une *FSF*

spatiale (*Field Spread Function*) par une *LSF* spectrale (*Line Spread Function*). Les caractéristiques de MUSE ne sont cependant pas invariantes par translation spatiale et spectrale, si bien qu'une telle PSF doit être définie en tout point du cube. Obtenir une estimation correcte de cette PSF est d'ailleurs un enjeu majeur, conditionnant le succès de toute méthode de traitement [2].

Il est connu [3] qu'en raison du mauvais conditionnement de \mathcal{H} et de la présence de bruit (lequel sera de niveau très élevé), la restauration ne peut se faire efficacement que si des contraintes sont apportées sur la solution recherchée. Deux éléments primordiaux sont ici à prendre en compte pour réaliser l'inversion, portant sur la nécessité de restreindre la taille du problème étudié – les dimensions du problème initial étant trop importantes pour la mise en œuvre de méthodes sophistiquées – et la prise en compte d'information *a priori* pertinente. Nous appuyons nos choix sur les remarques suivantes portant sur la spécificité des données.

- Les objets, même les plus étendus, n'occupent qu'une faible partie du champ couvert par l'instrument. Il est donc possible de restreindre le problème à des zones de couverture spatiale réduite, sans trop nuire à la reconstruction.
- Spectralement, par contre, l'information contenue dans toutes les longueurs d'onde correspondant à un même pixel présente une forte cohérence : il s'agit du spectre émis par la partie de la source (ou des sources, si plusieurs objets se chevauchent) vue par ce pixel, sur lequel on peut introduire de fortes contraintes liées à la physique des objets.

Nous considérons donc des sous-problèmes où \mathcal{X} et \mathcal{Y} ne contiennent que les spectres correspondant à un nombre de pixels restreint (au maximum quelques centaines). Nous envisageons alors la prise en compte d'information *a priori* au niveau spectral, sous la forme de contraintes de parcimonie dans un dictionnaire spécifiquement construit pour ce problème.

3 Parcimonie spectrale et restauration de spectres

Un premier travail sur les spectres de données de type MUSE [4], correspondant à une seule position spatiale dans le cube hyperspectral, a consisté en l'élaboration d'un dictionnaire de formes spectrales élémentaires, permettant de modéliser un spectre x sous la forme linéaire $\mathbf{W}\mathbf{u}$, où seulement quelques coefficients non nuls dans \mathbf{u} activent les colonnes correspondantes (les atomes) de \mathbf{W} . Par rapport aux approches parcimonieuses génériques à base de transformations multi-échelles, la construction d'un dictionnaire adapté permet de mieux modéliser les données et donc d'envisager une plus grande robustesse vis-à-vis du fort bruit environnant. Nous modélisons un spectre de galaxie comme la somme de trois composantes, ayant chacune leur dictionnaire de représentation : un spectre de raies, un spectre continu et une série de décrochages de ce continu. Pour le premier, nous considérons un ensemble de raies de largeur variable et discrétisées le long de l'axe fré-

quentiel, avec 11 largeurs possibles pour des supports variant de 1 (raies non résolues) à 138 points (soit 18 nm) pour les raies les plus larges. Le spectre continu est modélisé par un ensemble de sinusoides de basses fréquences. Enfin, le dictionnaire de décrochages est construit sous la forme d'échelons. Plus de détails sur la construction du dictionnaire peuvent être trouvés dans [4]. Dans les simulations actuelles où les spectres possèdent $N_\lambda = 3\,463$ points, \mathbf{W} contient $K_\lambda = 26\,015$ atomes.

Pour un spectre $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_{N_\lambda}]^T$, l'estimation parcimonieuse est réalisée dans le cadre du *Basis Pursuit De-Noising* [5] :

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{u}} &= \arg \min_{\mathbf{u}} (\mathbf{y} - \mathbf{L}\mathbf{W}\mathbf{u})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{L}\mathbf{W}\mathbf{u}) + \eta \|\mathbf{u}\|_1 \\ &= \arg \min_{\mathbf{u}} \left\| \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \mathbf{y} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \mathbf{L}\mathbf{W}\mathbf{u} \right\|^2 + \eta \|\mathbf{u}\|_1\end{aligned}$$

où \mathbf{L} représente la LSF et $\boldsymbol{\Sigma}$ est la matrice de covariance du bruit, supposée diagonale et connue. Dans le contexte de MUSE, le niveau de bruit étant fortement variable spectralement, le dictionnaire équivalent $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \mathbf{L}\mathbf{W}$ possède des colonnes de normes très différentes, ayant pour effet indésirable de produire des statistiques de détection non homogènes sur les différents coefficients de $\hat{\mathbf{u}}$ [4]. Il est donc préférable de normaliser ce dictionnaire et de considérer le problème "pondéré" :

$$\hat{\mathbf{v}} = \arg \min_{\mathbf{v}} \left\| \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \mathbf{y} - \bar{\mathbf{D}}\mathbf{v} \right\|^2 + \eta \|\mathbf{v}\|_1, \quad (1)$$

où $v_n = \|d_n\| u_n$ et $\bar{\mathbf{D}}$ est obtenu en normalisant les colonnes de $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \mathbf{L}\mathbf{W}$.

Notons que si un tel dictionnaire \mathbf{W} , construit à partir d'arguments physiques, permet d'incorporer une information *a priori* plus précise que par l'usage de dictionnaires à transformées, celui-ci est par contre dépourvu de propriétés exploitables pour des calculs rapides des produits matriciels et composé d'atomes très corrélés entre eux. Par conséquent, l'optimisation de (1) est un problème coûteux, pour lequel les nombreuses méthodes *de premier ordre* récemment proposées (cf. une liste non exhaustive dans [6]), reposant sur de nombreuses évaluations de directions de descente et donc du gradient de la partie quadratique du critère, se révèlent inadaptées. Dans [4], nous avons proposé un algorithme de type *Iterative Coordinate Descent* [7] avec des accélérations adaptées aux solutions parcimonieuses, permettant d'aborder (1) de manière efficace.

4 Exploitation dans un modèle spatial-spectral

Soit \mathcal{Y} un sous-cube de dimensions $N_a \times N_b \times N_\lambda$ correspondant à une fenêtre spatiale de $N_a \times N_b$ pixels, et comprenant l'intégralité des longueurs d'onde du cube initial. Supposons que le support de la FSF est de $(F_a + 1) \times (F_b + 1)$ points, et celui de la LSF de $L + 1$ points. Nous envisageons le modèle convolutif le plus complet, dans lequel nous cherchons à reconstruire toutes les inconnues ayant contribué aux données. \mathcal{X} est donc de dimensions $M_a \times M_b \times M_\lambda$ avec $M_a = N_a + F_a$, $M_b = N_b + F_b$ et $M_\lambda = N_\lambda + L$. Nous notons \mathbf{x}_k le spectre

du pixel k issu de \mathcal{X} et \mathbf{X} le vecteur colonne concaténant l'ensemble des spectres \mathbf{x}_k .

La restauration de \mathbf{X} à partir de \mathbf{Y} ne peut être effectuée de manière satisfaisante que par l'introduction d'information *a priori* sur la solution recherchée. Nous nous appuyons donc sur la modélisation spectrale détaillée en section 3, en définissant :

$$\hat{\mathbf{U}} = \arg \min_{\mathbf{U}} (\mathbf{Y} - \mathbf{H}\mathbf{W}_{3D}\mathbf{U})^T \boldsymbol{\Sigma}_{3D}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{H}\mathbf{W}_{3D}\mathbf{U}) + \gamma \|\mathbf{U}\|_1 \quad (2)$$

où le vecteur de coefficients \mathbf{U} est de taille $K_\lambda M_a M_b$, \mathbf{H} est la matrice de PSF de taille $N_a N_b N_\lambda \times M_a M_b M_\lambda$, \mathbf{W}_{3D} est la matrice bloc-diagonale composée de $M_a M_b$ blocs égaux à \mathbf{W} et $\boldsymbol{\Sigma}_{3D}$ est la matrice diagonale en dimension $N_a N_b N_\lambda$ comportant les variances de bruit correspondant aux données.

Les dimensions de l'optimisation (2) deviennent rapidement élevées lorsque la fenêtre spatiale augmente : avec une FSF de 25 pixels et une LSF de 11 points, on a, pour une fenêtre spatiale de 25 pixels : $\#\mathbf{Y} \times \#\mathbf{U} \simeq 280\,000 \times 2,1\,10^6$. Pour les raisons évoquées en fin de § 3, la structure spécifique du dictionnaire \mathbf{W} ne permet pas d'envisager des algorithmes rapides pour l'optimisation, dont le coût est alors prohibitif. Nous envisageons donc une approche sous-optimale, où nous considérons dans un premier temps les spectres du cube de données de manière indépendante – bien qu'ils soient spatialement convolués – en calculant leur décomposition parcimonieuse $\hat{\mathbf{v}}_k$ par (1). Nous obtenons ainsi, pour chaque spectre, un ensemble d'atomes représentatifs : $\Omega_k = \{m \in \{1 \dots K_\lambda\} | \hat{v}_{k,m} \neq 0\}$. Ensuite, dans (2), chaque décomposition \mathbf{u}_k de \mathbf{U} est restreinte dans le support restreint $\Omega = \cup_{k=1}^{N_a N_b} \Omega_k$. En pratique, nous utilisons dans (1) un paramètre η plutôt faible, afin de favoriser la détection de structures spectrales de faible amplitude au prix de plus nombreuses fausses alarmes. La suppression des fausses détections est alors favorisée par une seconde contrainte de parcimonie de la solution sur le support restreint.

Si \mathbf{W}_Ω représente les colonnes du dictionnaire spectral \mathbf{W} indexées par Ω et $\mathbf{W}_{3D,\Omega}$ est la matrice bloc-diagonale composée de $M_a M_b$ blocs égaux à \mathbf{W}_Ω , en tenant compte de la nécessaire normalisation du dictionnaire (cf. § 3), l'optimisation s'écrit :

$$\hat{\mathbf{V}}_\Omega = \arg \min_{\mathbf{V}_\Omega} \left\| \boldsymbol{\Sigma}_{3D}^{-1/2} \mathbf{Y} - \overline{\mathbf{D}}_{3D,\Omega} \mathbf{V}_\Omega \right\|^2 + \gamma \|\mathbf{V}_\Omega\|_1, \quad (3)$$

où $\overline{\mathbf{D}}_{3D,\Omega}$ est obtenu en normalisant les colonnes de $\boldsymbol{\Sigma}_{3D}^{-1/2} \mathbf{H}\mathbf{W}_{3D,\Omega}$. Les amplitudes non nulles de $\hat{\mathbf{V}}_\Omega$ sont ensuite ré-estimées par moindres carrés, afin d'éliminer le biais dû à la norme ℓ^1 . En notant \mathbf{N} la matrice diagonale de normalisation telle que $\overline{\mathbf{D}}_{3D,\Omega} = \boldsymbol{\Sigma}_{3D}^{-1/2} \mathbf{H}\mathbf{W}_{3D,\Omega} \mathbf{N}^{-1}$, la restauration est finalement obtenue par $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{W}_{3D,\Omega} \mathbf{N}^{-1} \hat{\mathbf{V}}_\Omega$. Ainsi, la déconvolution spatiale-spectrale est opérée au moyen de fortes contraintes spectrales, mais où le seul *a priori* spatial réside en la restriction des décompositions spectrales à vivre dans le même espace de représentation.

L'optimisation de (3) doit se faire sans recourir au stockage du dictionnaire $\overline{\mathbf{D}}_{3D,\Omega}$, de trop grande taille. Nous utilisons un algorithme de type *Iterative Coordinate Descent* [7], où chaque

colonne de $\overline{\mathbf{D}}_{3D,\Omega}$ est calculée aussi souvent que nécessaire à partir de la réponse instrumentale, de \mathbf{W} et des variances de bruit correspondantes.

5 Résultats et conclusions

Nous simulons l'observation d'une scène de 4×4 pixels \times 3 463 longueurs d'onde, composée de deux sources ponctuelles spatialement proches et de spectres différents, représentée en Figure 1a). Cette scène est convoluée par une FSF gaussienne circulaire de largeur à mi-hauteur (LMH) de 2 pixels et tronquée sur 3×3 pixels et par une LSF gaussienne de LMH de 2 éléments de résolution tronquée sur 11 points, produisant les données de la Figure 1b). Du bruit blanc gaussien est ensuite ajouté, dont le niveau varie en fonction de la longueur d'onde, cf. Figure 1c). La solution à reconstruire comprend alors 6×6 pixels \times 3 473 longueurs d'onde. Afin d'opérer la réduction de dimension, la décomposition de chaque spectre selon (1) est réalisée avec $\eta = 6$, générant un support actif Ω de 310 éléments spectraux, au lieu des 26 015 composantes initiales. Le nombre d'inconnues chute alors de $26\,015 \times 36 = 936\,540$ dans (2) à $310 \times 36 = 11\,160$ dans (3). La reconstruction obtenue à partir de ces décompositions est représentée en Figure 1e), montrant notamment de nombreuses fausses détections de motifs spectraux dues à la faible valeur de η .

L'estimation par (3) est réalisée avec $\gamma = 10^1$, produisant la restauration représentée Figure 1f), pour laquelle seulement 20 composantes de $\hat{\mathbf{V}}_\Omega$ sont non nulles. Nous ne représentons que les 16 pixels centraux, bien qu'une scène de 36 pixels soit reconstruite. À titre de comparaison, les résultats obtenus en restaurant indépendamment chaque spectre par (1) avec cette fois $\eta = 10$ sont représentés en Figure 1d). Concentrons-nous sur les deux pixels où sont théoriquement centrées les sources. Dans les deux cas, les restaurations individuelles des spectres sont contaminées par des raies parasites provenant de l'autre objet. Cet effet est particulièrement bien corrigé par la prise en compte d'un modèle convolutif spatial, puisque de telles interférences ne sont plus visibles en Figure 1f). De manière analogue, ce modèle permet de concentrer efficacement l'information sur les deux pixels "actifs", la reconstruction dans les autres pixels étant de très faible énergie, voire nulle. Ainsi, l'image moyennée de la Figure 1f) illustre la qualité de la déconvolution spatiale, en isolant correctement les deux pixels informatifs (notons qu'un troisième pixel sur cette image a une intensité non nulle en ligne 3, colonne 3, en raison d'une faible composante continue estimée dans le spectre correspondant).

Sur cet exemple de petite taille à vocation illustrative, des résultats satisfaisants ont été obtenus en termes de déconvolution (notamment spatiale) et de réduction de bruit. Une approche originale a été développée, où la nature tri-dimensionnelle de l'attache aux données permet d'envisager la déconvolution à la

1. Ces paramètres ont été choisis empiriquement, de façon à minimiser les fausses détections de raies tout en préservant la détection des raies à l'extrémité droite du spectre en 2^{ème} ligne, 3^{ème} colonne.

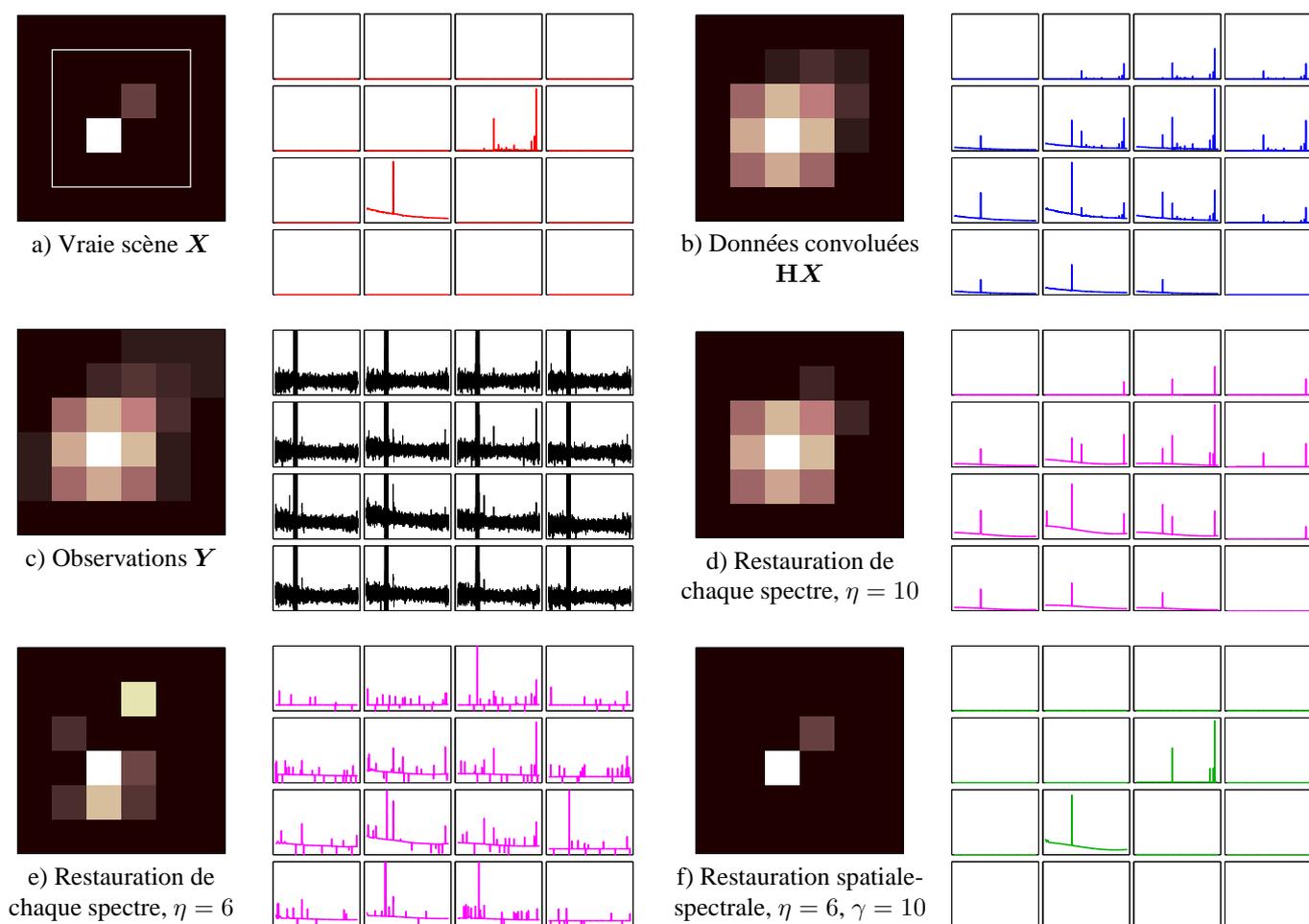


FIGURE 1 – Scène simulée et restauration : moyennes du cube selon la longueur d’onde et spectres des 16 pixels centraux.

fois spatiale et spectrale, mais au moyen d’information *a priori* s’exprimant essentiellement selon la dimension spectrale. La restriction des spectres composant une scène au même sous-ensemble d’atomes de représentation, opérée à des fins calculatoires, apporte cependant une légère information de structuration spatiale. Cette méthodologie a également fourni des résultats encourageants sur des problèmes de plus grande dimension, au prix d’une augmentation du coût de calcul.

Obtenir un réglage non supervisé des hyperparamètres η dans (1) et γ dans (3) est un problème ouvert. Si le réglage du premier n’est pas très critique et a essentiellement un rôle technique de réduction de dimension (le but étant de favoriser les détections au prix de possibles fausses alarmes), le réglage de γ dépend de la quantité d’information détectable dans les données, de la taille spatiale du problème et de la valeur de η . Il nous semble également de première importance d’étudier le comportement de cette approche sur des problèmes plus complexes, comportant à la fois des sources étendues et ponctuelles. Dans ce cas, l’utilisation de modèles *a priori* plus contraints, faisant par exemple intervenir un mélange spatial de spectres, couplé à la même modélisation de parcimonie des spectres recherchés, nous semble une piste particulièrement intéressante.

Références

- [1] R. Bacon et coll., *Probing unexplored territories with MUSE : a second generation instrument for the VLT*. Proc. SPIE, p. 62690J, 2006.
- [2] E. Villeneuve et coll., *Modélisation et estimation de la PSF d’un instrument hyperspectral au sol pour l’astrophysique*, Actes du XXIII^{ème} colloque GRETSI, Bordeaux, sep. 2011.
- [3] J. Idier, Ed., *Approche bayésienne pour les problèmes inverses*, Traité IC2, Série traitement du signal et de l’image, Hermès, Paris, nov. 2001.
- [4] S. Bourguignon, D. Mary et É. Slezak, *Sparsity-based restoration of astrophysical spectra : models and algorithms*, IEEE J. Selected Topics Sig. Proc., à paraître, sep. 2011.
- [5] S.S. Chen, D.L. Donoho et M.A. Saunders, *Atomic decomposition by basis pursuit*, SIAM J. Sci. Comput., vol. 20, no. 1, p. 33–61, 1998.
- [6] M. Zibulevsky et M. Elad, *L1-L2 Optimization in Signal and Image Processing*, IEEE Signal Proc. Mag., vol. 27, no. 3, pp. 76–88, mai 2010.
- [7] P. Tseng, *Convergence of a block coordinate descent method for nondifferentiable minimization*, J. Optim. Theory Appl., vol. 109, pp. 475–494, 2001.