

Reconstruction hyperspectrale à haute résolution à partir de mesures de spectrométrie

Ralph ABI RIZK¹, François ORIEUX¹, Alain ABERGEL²

¹Laboratoire des Signaux et Systèmes (L2S)
Université Paris-Sud – CNRS – CentraleSupélec
3 rue Juliot-Curie, 91912 Gif-sur-Yvette, France

²Institut d’Astrophysique Spatiale (IAS)
Université Paris-Sud – CNRS
91 405 Orsay, France

Ralph.abirizk@l2s.centralesupelec.fr, orieux@l2s.centralesupelec.fr
alain.abergel@ias.u-psud.fr

Résumé – Ce travail propose la reconstruction d’un cube hyperspectral infrarouge haute-résolution $2D+\lambda$ à partir des données brutes 2D issues d’un spectromètre à intégrale de champ. En effet le cube $2D+\lambda$, à deux dimensions spatiales et une dimension spectrale, est projeté sur des détecteurs 2D qui encodent une dimension spatiale et une dimension spectrale. Cependant, l’instrument n’est pas parfait et introduit à la fois un flou spatial et un flou spectral, variables spectralement. Pour prendre en compte ces effets, nous proposons un nouvel algorithme basé sur une approche de type problème inverse reposant sur un nouveau modèle direct des mesures et la minimisation d’un critère composite. Le critère inclut un terme de moindres carrés pour l’attache aux données et un terme de régularisation convexe pour préserver les contours spatiaux.

Abstract – We present in this work a reconstruction of a 3D hyperspectral cube from 2D spectrometer data. In fact, the observed cube with two spatial dimensions (α, β) and one spectral dimension λ is projected on a 2D detector with one spatial dimension and one spectral dimension. However, the instrument is not perfect and introduces a spatial blurring and a spectral blurring, spectrally variable. An algorithm based on least square approach with convex Huber regularization is proposed to reconstruct the original 3D cube while inverting the blurring introduced by the instrument.

1 INTRODUCTION

L’imagerie hyperspectrale fournit des spectres à différentes positions spatiales. Elle est aujourd’hui très utilisée dans de multiples domaines (télétection, astrophysique, sécurité alimentaire, analyse minéralogique, etc. [1]). Cependant, une observation directe des images hyperspectrales $2D+\lambda$ n’est pas possible car les détecteurs sont 2D.

L’objectif de ce travail est de reconstruire l’objet $2D+\lambda$, constitué de deux dimensions spatiales (α, β) et d’une dimension spectrale λ , à partir des données issues d’un imageur hyperspectral. Plusieurs difficultés se posent lors de la reconstruction hyperspectrale, en particulier à grandes longueurs d’onde :

- Premièrement, la réponse optique introduit un flou spatial aux données qui dépend de la valeur des longueurs d’onde. L’objet est d’autant plus flou spatialement que la

longueur d’onde est élevée [2].

- De plus, la dispersion du rayonnement est effectuée en utilisant un prisme ou un réseau de diffraction qui introduisent un flou spectral aux données. Ce flou dépend aussi des valeurs de longueur d’onde.
- Finalement, la sortie du réseau de diffraction dépend de la longueur d’onde, mais aussi de la position spatiale β . Ceci va entraîner une dégénérescence car le rayonnement reçue sur le détecteur ne peut pas être associée à un seul couple (β, λ) .

Pour surmonter ce dernier obstacle, les instruments de type spectromètre à intégrale de champs, ou IFU (*integral field unit*), sont utilisés [3]. Ces derniers consistent à diviser l’axe de β en plusieurs fentes en respectant α et λ . Chaque fente est placée en amont d’un réseau de diffraction et par conséquent, le phénomène de dégénérescence est limité.

La reconstruction standard est basée sur la co-addition. Cette méthode ne prend pas en considération l’effet de flou spatial et spectral introduit par l’instrument, et consiste à concaténer les différentes sorties 2D des différentes fentes [4]. Elle est efficace pour des petites valeurs de longueur d’onde comme dans les do-

Ce travail a été financé par le cnes par le biais d’une allocation de recherche

maines ultraviolet, visible ou très proche infrarouge, mais pas à plus grande longueur d'onde. Nous nous intéressons en effet ici à l'instrument MIRI-MRS (Mid Infrared Instrument - Medium Resolution Spectroscopy) [3] à bord du James Webb Space Telescope (JWST) qui devrait être lancé en 2021. Sa bande spectrale s'étend de 5 à 28 μm et par conséquent, les effets de flou doivent être pris en considération.

La reconstruction proposée est basée sur les approches inverses. Nous utilisons tout d'abord un modèle instrument, basé en particulier sur la diffraction, et dont la réponse dépend de la longueur d'onde. Il comprend notamment l'optique et en premier lieu le miroir d'entrée puis le système dispersif en longueur d'onde (prisme ou réseau de diffraction). Ayant un ciel discret comme entrée, le modèle instrument direct reproduit fidèlement les données 2D en sortie, floutée spatialement et spectralement par l'instrument. Pour effectuer la reconstruction, un algorithme basé sur les moindres carrés avec une régularisation convexe est adopté pour empêcher l'amplification du bruit sans pénalisation excessive sur les hautes valeurs du gradient spatial [5].

L'article est organisé comme suit. La partie 2 présente le modèle instrument. Celui-ci est utilisé dans la partie 3 afin de développer un modèle direct linéaire (3.1) puis l'algorithme de reconstruction (3.2). La partie 4 présente des résultats de reconstruction testés avec des données simulées issues de l'instrument MIRI-MRS.

2 MODÈLE INSTRUMENT

Le signal à l'entrée de l'instrument est modélisé par $\phi(\alpha, \beta, \lambda)$ avec $(\alpha, \beta) \in \mathbb{R}^2$ les deux dimensions spatiales et $\lambda \in \mathbb{R}^+$ la dimension spectrale (mesurée en microns pour le JWST).

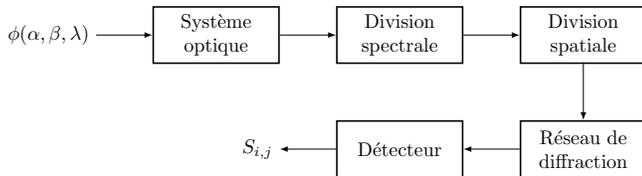


FIGURE 1 – Diagramme du modèle instrument

Le système optique permet de former des images sur le plan focal [6]. Malheureusement, la résolution spatiale de l'image focalisée est limitée par la diffraction à cause de la dimension finie de l'ouverture (miroir primaire du télescope), ce qui introduit un flou spatial qui varie spectralement. Étant donné un champ de vue, l'instrument étant considéré spatialement stationnaire, les images sur le plan focal pour des valeurs données de longueur d'onde sont convoluées par la PSF (Point Spread Function) optique h :

$$\phi^{opt}(\alpha, \beta, \lambda) = \phi(\alpha, \beta, \lambda) *_{\alpha, \beta} h(\alpha, \beta, \lambda). \quad (1)$$

À cause de la diffraction, la largeur de la PSF h augmente linéairement avec la longueur d'onde, comme illustré Fig 2.

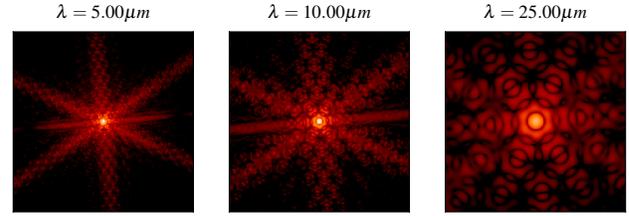


FIGURE 2 – PSF à trois longueurs d'onde calculées avec le simulateur WebbPSF du JWST [7]

L'image sur le plan focal est ensuite sélectionnée par une fente, et le rayonnement issu de la fente dirigé vers un réseau de diffraction [8] qui le disperse en longueur d'onde. Dans l'idéal, la sortie du réseau pour une source ponctuelle monochromatique est un Dirac sur le détecteur dont la position spatiale dépend de la longueur d'onde. Mais le réseau n'est pas parfait et la résolution spectrale de la sortie est limitée. De plus la position dépend aussi de la position spatiale dans la fente. La réponse (PSF) du réseau h_r s'écrit [9]

$$h_r(\lambda', \beta, \lambda) = \frac{\pi L}{\lambda} \text{sinc}^2 \left(\pi L \left(\frac{\lambda' - c\beta}{\lambda} - \frac{1}{a} \right) \right). \quad (2)$$

Cette PSF est non stationnaire; sa largeur augmente avec la longueur d'onde comme illustré Fig. 3(a). De plus, la position sur l'axe de sortie λ' dépend de λ et de β . Enfin le facteur c dépend de l'instrument et permet le changement d'unité entre la position spatiale et la position spectrale sur le détecteur. L'éq. 2 fait aussi intervenir :

- la longueur du réseau L qui contrôle la largeur de la PSF.
- le pas du réseau a qui contrôle la position de la réponse sur le détecteur. Pour un instrument calibré, la longueur d'onde au maximum de la PSF doit correspondre à la longueur d'onde d'entrée λ , conduisant à $a = 1$ comme illustré Fig. 3(b).

Enfin, le système étant supposé linéaire, la sortie 2D est la somme des contributions de toutes les entrées en β et λ , et dépend par conséquent de la position spatiale α et d'une longueur d'onde équivalente λ' .

Notons qu'avant son passage par le réseau de diffraction, le cube d'entrée est divisé spatialement en fentes pour minimiser l'effet de dégénérescence du couple (β, λ) , et spectralement en canaux pour couvrir toute la bande spectrale mesurée en utilisant plusieurs détecteurs [3]. Ces deux sélections sont modélisées comme un simple fenêtrage de l'entrée ϕ^{opt} .

3 MODÈLE DIRECT ET RECONSTRUCTION

3.1 MODÈLE DIRECT

Le ciel discret est ici représenté par un vecteur $\mathbf{x}[k, l, m] \in \mathbb{R}^{N_\alpha \times N_\beta \times N_\lambda}$. C'est un cube hyperspectral 2D+ λ de taille $(N_\alpha, N_\beta, N_\lambda)$. Pour chaque valeur de λ , le ciel est convolué spatia-

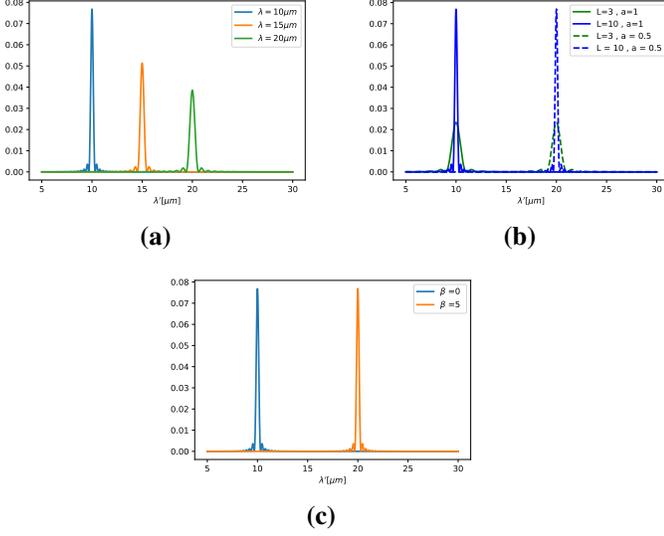


FIGURE 3 – (a) PSF du réseau à trois valeurs de λ . La largeur augmente avec λ . (b) Effets de L et a . (c) Effet de β sur la sortie du réseau (λ') pour λ donné.

lement par la PSF optique (Eq. 1). On introduit une approximation circulante pour un calcul plus rapide de convolution par transformée de Fourier discrète [10]. Le ciel convolué \mathbf{x}^{opt} est

$$\mathbf{x}_m^{\text{opt}} = \mathbf{F}^t \mathbf{\Lambda}_m \mathbf{F} \mathbf{x}_m \quad (3)$$

où \mathbf{x}_m est l'image monochromatique à la longueur d'onde d'indice m , \mathbf{F} la transformée de Fourier discrète 2D, et $\mathbf{\Lambda}_m$ la matrice diagonale correspondant appliquant la fonction de transfert optique à la longueur d'onde d'indice m .

Le ciel convolué \mathbf{x}^{opt} est ensuite fenêtré spatialement et spectralement

$$\mathbf{x}_i^{\text{opt}}[k, l, m] = \mathbf{x}^{\text{opt}}[k, l, m] \mathbf{w}_i[k, l, m] \quad (4)$$

où i représente l'index de chaque sélection et \mathbf{w}_i le fenêtrage correspondant.

La longueur L du réseau contrôle la largeur de sa PSF (voir Fig. 2). Un lien direct existe donc entre L et la résolution spectrale $R = \lambda/\Delta\lambda$ supposée connue, avec $\Delta\lambda$ la largeur à mi-hauteur de la PSF à la longueur d'onde λ . On montre aisément que la largeur à mi-hauteur de la PSF définie par l'équation 2 est $\Delta\lambda \approx 2.8\lambda/\pi L$ ce qui permet de déduire la relation entre L et la résolution R : $L = 2.8 R/\pi$.

Finalement, le réseau de diffraction est un système linéaire, mais non stationnaire. Sa sortie est obtenue comme

$$\mathbf{s}[k, m'] = \sum_{l=1}^{N_\beta} \sum_{m=1}^{N_\lambda} \mathbf{x}_i^{\text{opt}}[k, l, m] \times \mathbf{h}_r[m', l, m]. \quad (5)$$

avec $k \in [1, \dots, N_\alpha]$ l'indice correspondant à la position spatiale et $m' \in [0, \dots, M]$ l'indice correspondant à la longueur d'onde.

3.2 Inversion

Le modèle direct est linéaire (mais non stationnaire) et s'écrit donc comme $\mathbf{s} = \mathbf{H}\mathbf{x}$ où \mathbf{s} est l'ensemble des données et \mathbf{H}

le modèle de l'instrument. La reconstruction repose sur l'optimisation d'un critère composite par un terme de fidélité et un terme de régularisation. Un terme de régularisation convexe est ajouté au critère et le cube $\hat{\mathbf{x}}$ reconstruit [5] est exprimé comme

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{s} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 + \mu \sum_{i \in \mathcal{I}} \phi(\mathbf{d}_i^t \mathbf{x}) + \tau \|\mathbf{D}_w \mathbf{x}\|^2$$

où \mathbf{D}_w est un opérateur de différence en longueur d'onde, \mathbf{d}_i l'ensemble des différences en ligne et colonne et μ, τ les paramètres de régularisation correspondants. Le bruit est considéré blanc iid ici mais peut être étendu sans problème à un bruit non stationnaire de covariance connue. On choisit également un potentiel $\ell_2 \ell_1$ pour préserver les contours et un potentiel ℓ_2 car les spectres ne présente pas de discontinuités importantes dans les cas traités pour le moment. Enfin $\phi(\delta)$ est le potentiel de Huber définie par

$$\phi_H(\delta) = \begin{cases} \delta^2 & |\delta| \leq T \\ 2T|\delta| - T^2 & |\delta| > T \end{cases} \quad (6)$$

Le minimiseur $\hat{\mathbf{x}}$ n'est pas explicite et est calculé à l'aide d'un algorithme semi-quadratique de type Geman et Yang [11].

4 TEST ET RÉSULTATS

4.1 Application sur l'instrument MIRI-MRS du JWST

Nous considérons l'instrument MIRI-MRS [3] pour la simulation des données à partir d'un cube hyperspectral de taille $N_\alpha \times N_\beta \times N_\lambda = 95 \times 95 \times 4000$ pixels. Le pas spatial est de $\Delta_\alpha = \Delta_\beta = 0.273$ arcsec/pixel. La dimension spectrale couvre une bande de longueur d'onde allant de $17.66 \mu\text{m}$ à $28.45 \mu\text{m}$. La PSF optique $h(\alpha, \beta, \lambda)$ est calculée pour chaque valeur de λ avec le simulateur WebbPSF [7]. L'ensemble des fentes donne un champ de vue de 37×48 pixels (soit 10×12 arcsec²). La bande spectrale mesurée est divisée en trois canaux, ayant son propre ensemble de 12 fentes de tailles 37×4 pixels. La sortie du réseau est projetée sur un détecteur 2D de taille 37×1024 pixels pour une fente, avec un pas spatial $T_\alpha = 0.273$ arcsec, et des pas spectraux $T_\lambda = 0.00318 \mu\text{m}$, $0.00376 \mu\text{m}$ et $0.00439 \mu\text{m}$ respectivement pour les trois canaux.

4.2 Résultats et discussion

Les données simulées sont corrompues par un bruit blanc gaussien avec un SNR de 25 dB. La Fig.4(a) montre l'image du cube d'entrée pour $\lambda = 27 \mu\text{m}$. Le rectangle blanc représente le champ de vue observé par l'instrument. La fig.4(b) présente la sortie de l'instrument projetée sur le détecteur 2D pour une fente d'un canal.

La Fig.4(c) montre la reconstruction standard basée sur la co-addition. Cette méthode est rapide en temps, mais les résultats sont limités en résolution. L'erreur relative E_{coadd} , calculée

pour le troisième canal entre le cube original x et le cube reconstruit \hat{x} , est de 14.4%.

La Fig.4(d) montre la même image monochromatique reconstruite par la méthode proposée. Les paramètres μ et τ qui interviennent dans le terme de régularisation sont choisis égaux et fixé, de même que le paramètre T du potentiel de Huber, à une valeur optimale pour minimiser l'erreur de reconstruction. L'erreur relative pour le troisième canal est $E_{Huber} = 7.2\%$. On observe parfaitement à la Fig. 4(d) que la reconstruction proposée améliore significativement la résolution spatiale, débruite les spectres, et permet également par déconvolution de minimiser le mélange spectral (Fig. 5), aboutissant à un cube reconstruit \hat{x}_H sensiblement plus fidèle au cube d'entrée.

La reconstruction a duré 2h 30 heures avec le langage Python et numpy, sur un ordinateur avec de 16 GB de mémoire et un mono CPU à 2.8 GHz.

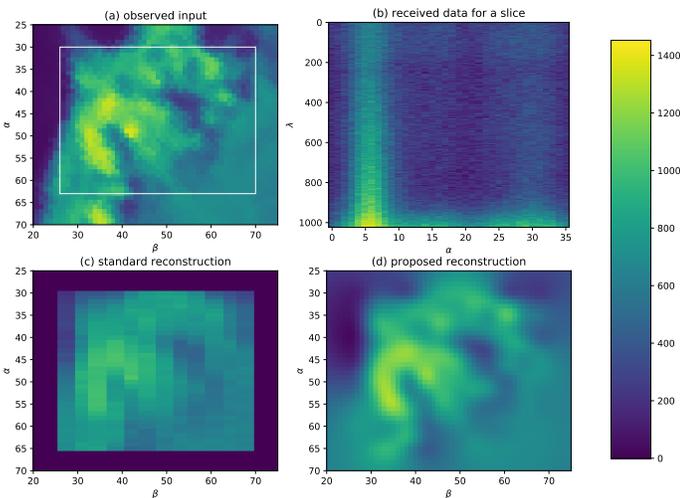


FIGURE 4 – (a) Image d'entrée pour $\lambda = 27 \mu m$, (b) sortie de l'instrument pour une fente, (c) et (d) construction standard et proposée pour $\lambda = 27 \mu m$, respectivement.

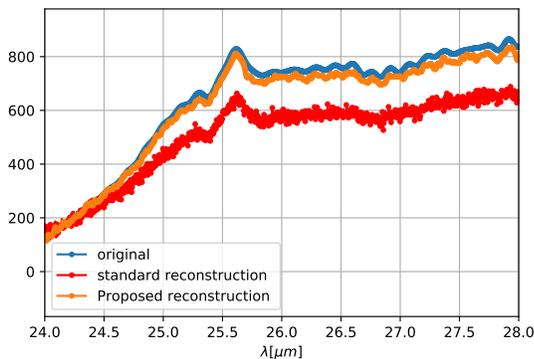


FIGURE 5 – Spectre du cube original, du cube reconstruit par la méthode standard et par la méthode proposée pour un pixel en $\alpha = \beta = 50$.

5 Conclusion

Nous avons modélisé dans ce travail un instrument hyperspectral qui prend comme entrée un cube 3D ayant deux dimensions spatiales (α, β) et une dimension spectrale λ , et qui fournit des données 2D avec une dimension spatiale α et une dimension spectrale λ' . Nous avons proposé un nouveau modèle instrument et modèle direct prenant en compte les réponses instrumentales introduisant des flous spatiaux et spectraux.

La méthode standard de type coaddition souffre des limitations dues aux flous et reconstruit un cube avec une résolution spatio spectrale dégradée. Pour améliorer la reconstruction, nous proposons une reconstruction en inversant notre modèle instrument et basée sur les moindres carrées avec une régularisation convexe pour préserver les contours. Le cube reconstruit est débruité et sa résolution sensiblement améliorée. L'erreur relative est diminuée d'un facteur de l'ordre de 2 par rapport à la méthode standard.

Références

- [1] M. J. Khan, H. S. Khan, A. Yousaf, K. Khurshid, and A. Abbas, "Modern trends in hyperspectral image analysis : A review," *IEEE Access*, vol. 6, pp. 14118–14129, 2018.
- [2] Loïc Denis, Eric Thiébaud, Ferréol Soulez, Jean-Marie Becker, and Rahul Mourya, "Fast approximations of shift-variant blur," *Int. J. Comput. Vision*, vol. 115, no. 3, pp. 253–278, Dec. 2015.
- [3] M. Wells and etal W. Pel, J., "The mid-infrared instrument for the james webb space telescope, vi : The medium resolution spectrometer," *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, vol. 127, pp. 646–664, 07 2015.
- [4] P. W.T. Yuen and M. Richardson, "An introduction to hyperspectral imaging and its application for security, surveillance and target acquisition," *The Imaging Science Journal*, vol. 58, no. 5, pp. 241–253, 2010.
- [5] Idier J, *Approche bayésienne pour les problèmes inverses*, hermes science, 2001.
- [6] M. A. Hadj-Youcef, F. Orieux, A. Fraysse, and A. Abergel, "Restoration from multispectral blurred data with non-stationary instrument response," in *2017 25th European Signal Processing Conference (EUSIPCO)*, Aug 2017, pp. 503–507.
- [7] "Psf simulation tool," <https://jwst.stsci.edu/>.
- [8] Fabrizio Vagni, "Survey of hyperspectral and multispectral imaging technologies (étude sur les technologies d'imagerie hyperspectrale et multispectrale)," p. 44, 05 2007.
- [9] T. Rodet, F. Orieux, J.-F. Giovannelli, and A. Abergel, "Data inversion for hyperspectral objects in astronomy," 09 2009, pp. 1 – 4.
- [10] Bassam Bamieh, "Discovering the fourier transform : A tutorial on circulant matrices, circular convolution, and the dft," vol. abs/1805.05533, 2018.
- [11] J. Idier, "Convex half-quadratic criteria and interacting auxiliary variables for image restoration," *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 10, no. 7, pp. 1001–1009, July 2001.