

Table des matières

1	Introduction	13
1.1	Contexte et généralités	13
1.2	Objectifs et contributions	15
1.3	Organisation du manuscrit	17
2	Spectroscopie et imagerie hyperspectrale pour l'étude des minéraux	19
2.1	Introduction	19
2.2	Spectroscopie visible et proche-infrarouge	20
2.2.1	La lumière, un rayonnement électromagnétique	20
2.2.2	Interaction rayonnement-matière	20
2.3	Spectre de réflectance des minéraux	24
2.3.1	Processus électroniques et absorptions associées	24
2.3.2	Processus vibrationnels et absorptions associées	25
2.3.3	Variabilité des spectres de réflectance des minéraux	30
2.3.4	Signatures spectrales des principaux minéraux	33
2.4	Imagerie hyperspectrale aérienne et satellitaire	34
2.4.1	Caractéristiques des capteurs	37
2.4.2	Principe d'acquisition	37
2.4.3	Équation du transfert radiatif	39
2.4.4	Masques spectraux et correction atmosphérique	39
2.4.5	Cas des mélanges de minéraux et avec d'autres matériaux	40
2.5	Conclusion	40
3	Modélisation d'un spectre de réflectance de minéral et prise en compte du bruit dans une image hyperspectrale	43
3.1	Introduction	43

3.2	Modélisation d'un spectre de réflectance de minéral	44
3.2.1	État de l'art des modèles	44
3.2.2	Modèle retenu	45
3.2.3	Identifiabilité et limites du modèle EGO	47
3.3	Modélisation du bruit dans une image hyperspectrale	48
3.3.1	Sources du bruit instrumental	48
3.3.2	Modèles de bruit sur la luminance	49
3.3.3	Modèles de bruit sur la réflectance	50
3.3.4	Méthodes d'estimation du bruit dans une image hyperspectrale	51
3.4	Conclusion	52
4	Déconvolution d'un spectre de réflectance de minéral : procédure greedy-AGM	53
4.1	Introduction	53
4.2	État de l'art	54
4.2.1	Choix de la déconvolution spectrale	54
4.2.2	Approche AGM et méthodes associées	55
4.3	Procédure greedy-AGM	57
4.3.1	Principe de fonctionnement	57
4.3.2	Pré-estimation et retrait du continuum	58
4.3.3	Pré-estimation des absorptions	59
4.3.4	Optimisation conjointe du continuum et des absorptions	63
4.3.5	Paramétrisation de la procédure	63
4.4	Conclusion	65
5	Applications de la procédure greedy-AGM	67
5.1	Introduction	67
5.2	Validation sur des données synthétiques	68
5.2.1	Génération des données	68
5.2.2	Résultats sur les données non bruitées	69
5.2.3	Comparaison sur les données bruitées	72
5.2.4	Conclusion des résultats sur données synthétiques	73
5.3	Application à des spectres de laboratoire	74
5.3.1	Description des spectres choisis et préparation des données	74

5.3.2	Absorptions ferriques de la goethite	75
5.3.3	Doublet de kaolinite et absorptions secondaires	76
5.3.4	Continuum et absorptions de la nontromite	77
5.3.5	Absorptions du gypse et effets des masques spectraux	78
5.3.6	Discrimination des absorptions de calcite et dolomite	79
5.4	Conclusion	79
6	Procédure d'identification de minéraux	81
6.1	Introduction	81
6.2	Problématique et état de l'art	82
6.2.1	Problématique	82
6.2.2	Approches expertes pour l'identification	83
6.2.3	Principe de logique floue	84
6.3	Procédure d'identification proposée	85
6.3.1	Principe général	85
6.3.2	Étape 1 : calcul de coïncidence	86
6.3.3	Étape 2 : identification par logique floue	87
6.3.4	Étape 3 : gestion des mélanges et discrimination des minéraux	89
6.3.5	Base de données des positions des absorptions des minéraux	90
6.4	Validation sur des données synthétiques	90
6.4.1	Description des données	90
6.4.2	Identification de la montmorillonite	91
6.4.3	Mélanges d'alunite et de kaolinite	91
6.4.4	Discrimination de l'illite et de la muscovite	92
6.5	Conclusion	93
7	Campagne d'acquisitions et applications	95
7.1	Introduction	95
7.2	Campagne d'acquisition d'images hyperspectrales et de données terrain	96
7.2.1	Présentation des carrières étudiées	96
7.2.2	Mesures terrain réalisées	97
7.2.3	Acquisition et pré-traitement des images hyperspectrales	98
7.2.4	Préparation des procédures greedy-AGM et d'identification	98
7.3	Résultats - Carrière de Cherves-Richemont	99

7.3.1	Déconvolution spectrale par greedy-AGM	100
7.3.2	Identification des minéraux	100
7.4	Résultats - Carrière de Chevanceaux	102
7.4.1	Déconvolution spectrale par greedy-AGM	103
7.4.2	Cartographie	103
7.4.3	Identification des minéraux	104
7.5	Conclusion	105
8	Conclusions et perspectives	107
9	Annexe : bruit dans les images hyperspectrales	109
9.1	Modèles de bruit sur la luminance	109
9.1.1	Bruit signal indépendant	109
9.1.2	Bruit signal dépendant	109
9.2	Hypothèse S^{atm} faible	110
9.3	Étude du bruit pour le capteur AVIRIS	111
9.3.1	Objectifs et présentation des données	111
9.3.2	Validation des modèles et des méthodes	111
9.3.3	Évolution du bruit pour le capteur AVIRIS	112

Table des figures

1.1	Principe d'acquisition d'une image hyperspectrale	14
1.2	Exemple de spectres de réflectance	14
2.1	Domaines spectraux	20
2.2	Spectre électromagnétique d'un corps noir	21
2.3	Interactions entre un rayonnement électromagnétique et une surface.	22
2.4	Angle solide	23
2.5	Principe d'une transition électronique	25
2.6	Spectres de réflectance d'hématite et de goethite	26
2.7	Modes de vibration d'une molécule d'eau	27
2.8	Spectre de réflectance de montmorillonite	28
2.9	Spectres de réflectance de kaolinite, de Fe-Chlorite et de talc	28
2.10	Spectres de réflectance de calcite et de dolomite	29
2.11	Spectres de réflectance d'alunite et de gypse	29
2.12	Spectres de réflectance de muscovite	31
2.13	Spectres de réflectance de kaolinite	32
2.14	Mélanges de minéraux	33
2.15	Spectres de réflectance des minéraux étudiés	36
2.16	Modes d'acquisitions d'une image hyperspectrale	38
2.17	Schéma optique d'un spectro-imageur <i>pushbroom</i>	38
3.1	Modèle descriptif d'une absorption	44
3.2	Asymétrie et saturation du modèle EGO	46
3.3	Illustration du modèle EGO	46
3.4	Effets du paramètre d'asymétrie du modèle EGO	48
4.1	Architecture de la procédure greedy-AGM	57

4.2	Initialisation des paramètres du continuum	59
4.3	Illustration du modèle EGO	63
5.1	Résultats de la procédure greedy-AGM appliquée aux spectres synthétiques	70
5.2	Résultats de l'étape de pré-estimation des absorptions (présence d'artéfacts)	71
5.3	Comparaison derivative-AGM et greedy-AGM	73
5.4	Résultat de la procédure greedy-AGM pour un spectre de Goethite	76
5.5	Résultat de la procédure greedy-AGM pour un spectre de Kaolinite	76
5.6	Résultat de la procédure greedy-AGM pour un spectre de Nontronite	77
5.7	Résultat de la procédure AGM pour un spectre de gypse	78
5.8	Résultat de la procédure AGM pour des spectres de calcite et dolomite	79
6.1	Spectres de réflectance de kaolinite et de nontronite	82
6.2	Spectres des absorptions d'illite	83
6.3	Architecture de la procédure d'identification	85
6.4	Fonction de coïncidence	86
6.5	Système de logique floue	87
6.6	Synthèse de l'étape de discrimination	89
7.1	Carrière de Cherves-Richemont	97
7.2	Carrière de Chevanceaux	98
7.3	Spectres de gypse et calcite - Carrière de Cherves-Richemont	99
7.4	Procédure greedy-AGM appliquée aux spectres de Cherves-Richemont	101
7.5	Positions estimées pour l'identification - Cherves-Richemont	101
7.6	Spectres de kaolinite - Carrière de Chevanceaux	102
7.7	Procédure greedy-AGM appliquée aux spectres de Chevanceaux	103
7.8	Cartographies - Carrière de Chevanceaux	104
7.9	Positions estimées pour l'identification - Carrière de Chevanceaux	105
9.1	Validation de l'hypothèse S^{atm} faible	111
9.2	Bruits définis à partir des caractéristiques du capteur	112
9.3	Comparaison des bruits calculés et estimés	113
9.4	Lunar Lake (AVIRIS) - Bruits totaux estimés sur plusieurs années.	113
9.5	Paramètres bruits estimés - Lunar Lake (1992 - 2009)	114

Liste des tableaux

2.1	Minéraux étudiés et positions des absorptions diagnostiques et secondaires associées	35
5.1	Paramètres EGO utilisés pour la génération des spectres synthétiques	68
5.2	Minéraux choisis pour la validation de la procédure greedy-AGM	74
6.1	Règles "Si-Alors" (absorptions diagnostiques et secondaires)	88
6.2	Règles "Si-Alors" (absorptions diagnostiques seules)	89
6.3	Base de données des positions des absorptions	90
6.4	Positions des absorptions des trois spectres synthétiques	91
6.5	Résultats de la procédure d'identification pour le spectre 1	91
6.6	Résultats de la procédure d'identification pour le spectre 2	92
6.7	Résultats de la procédure d'identification pour le spectre 3	92
7.1	Procédure d'identification appliquée aux spectres de Cherves-Richemont	102
7.2	Procédure d'identification appliquée aux spectres de Chevanceaux	105

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	Contexte et généralités	13
1.2	Objectifs et contributions	15
1.3	Organisation du manuscrit	17

1.1 Contexte et généralités

L'imagerie hyperspectrale ou spectro-imagerie dans le domaine réfléctif est une technologie de télédétection passive permettant l'observation de larges zones à la surface de la Terre ou d'autres objets du système solaire, voir Fig. 1.1. Elle peut être de laboratoire, de terrain, aérienne ou satellitaire et consiste en l'enregistrement de la lumière du Soleil réfléchie par une surface. En pratique, chaque pixel de l'image acquise par l'instrument de mesure est associé à un spectre de luminance sur les domaines spectraux du VNIR et du SWIR (*Visible Near-InfraRed* et *Short-Wave InfraRed*), soit respectivement [400 – 1300] nm et [1300 – 2500] nm. Une étape de correction atmosphérique permet ensuite d'obtenir un spectre de réflectance.

Un spectre de réflectance dépend des propriétés physico-chimiques du milieu observé (composition et concentration chimique, état de surface, etc.). Dans le cadre de l'observation de la Terre, il est possible de distinguer divers milieux comme par exemple la végétation, l'eau et les minéraux. En particulier, ce travail de thèse s'intéresse **à l'identification et à la caractérisation des minéraux**. En effet, il est possible d'accéder à leurs propriétés physico-chimiques à partir de leurs caractéristiques spectrales (la forme générale du spectre, nommée continuum, et les absorptions), représentées Fig. 1.2 pour des spectres de goethite, un hydroxyde de fer, et de gypse, un sulfate. Ces caractéristiques sont associées à divers phénomènes physiques (processus électroniques et vibrationnels, etc.) et sont décrites dans la littérature, voir par exemple [Clark, 1999] pour une synthèse. Dans le cadre d'analyses en laboratoire effectuées sur des échantillons de minéraux en poudre (ex : base de données de l'USGS (*United States Geological Survey*) [Kokaly et al., 2017]), les spectres sont mesurés avec une grande résolution spectrale (< 1 nm pour des instruments de mesure utilisés en laboratoire) ce qui permet une description précise de leurs caractéristiques spectrales, en particulier sur les positions des absorptions. Ainsi, l'identification d'un minéral inconnu se base sur ses absorptions (le nombre d'absorptions et les positions associées). La caractérisation (c.-à-d. la description des propriétés physico-chimiques du minéral) est plus complexe et nécessite l'utilisation de tout ou partie des caractéristiques spectrales (continuum, nombre d'absorptions, positions, amplitudes et formes des absorptions) en fonction du minéral et de la propriété physico-chimique à analyser.

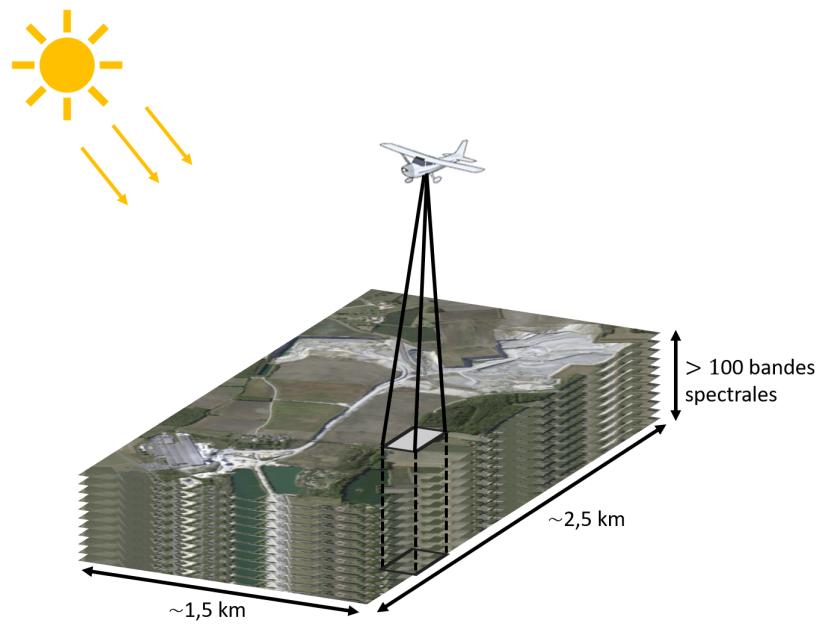


FIGURE 1.1 – Principe d’acquisition d’une image hyperspectrale. La lumière du Soleil sur les domaines spectraux du VNIR et du SWIR est réfléchie par la surface puis mesurée par un capteur embarqué à bord d’un avion ou d’un satellite. Le nombre de bandes spectrales est généralement supérieur à 100.

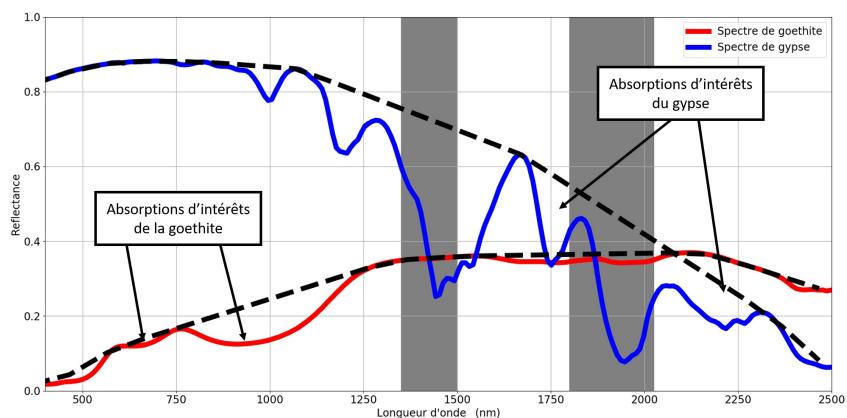


FIGURE 1.2 – Spectres de réflectance de goethite et de gypse issus de la base de données de l’USGS [Kokaly et al., 2017]. Les valeurs d’un spectre de réflectance sont comprises entre 0 et 1. Les spectres sont composés d’une forme générale sur l’ensemble des domaines du VNIR et du SWIR (continuum, représenté en pointillé noir) et d’absorptions ayant des amplitudes négatives. Les absorptions permettant l’identification et la caractérisation de la goethite et du gypse sont indiquées par des flèches. Les masques spectraux dus à la vapeur d’eau atmosphérique sont représentés par les zones grisées.

L'imagerie hyperspectrale aérienne ou satellitaire a connu de nombreuses évolutions au cours des dernières décennies et dispose aujourd'hui d'instruments de mesure permettant de réaliser des analyses minéralogiques. On peut citer par exemple le capteur aéroporté AVIRIS [Vane et al., 1993, Green et al., 1998] (*Airborne Visible-InfraRed Imaging Spectrometer*) dont les plus anciennes images ont été acquises en 1986. Une nouvelle génération (AVIRIS-NG [Hamlin et al., 2011], *AVIRIS Next Generation*) a été mise en service en 2012. De nombreux autres capteurs aéroportés ont été développés pour l'acquisition d'images sur tout ou partie des domaines spectraux du VNIR et du SWIR (ex : capteurs HySpex (<https://www.hyspex.com>)). Également, la mission du capteur HYPERION [Pearlman et al., 2001], entre 2000 et 2017, a servi de preuve de concept pour la technologie et le potentiel applicatif de l'imagerie hyperspectrale satellitaire. Ainsi, depuis 2019, le capteur PRISMA [Loizzo et al., 2018] (*PRecursor IperSpettrale della Missione Applicativa*) permet d'acquérir des images hyperspectrales depuis l'espace et de nombreuses autres missions sont en préparation (ex : EnMAP [Guanter et al., 2015] (*Environmental Monitoring and Analysis Program*)).

De manière générale, **la résolution spectrale** des capteurs aériens ou satellitaires est de l'ordre de quelques nanomètres, en particulier pour les plus modernes (5 nm pour AVIRIS-NG, 10 nm pour PRISMA, etc.). Cette résolution, bien que moins bonne que celle des instruments utilisés en laboratoire ou sur le terrain, permet tout de même l'identification, via la position des absorptions, et la caractérisation des minéraux. **La résolution spatiale** du capteur dépend principalement de son altitude. Ainsi, elle est d'environ 5 m pour les capteurs aéroportés et d'environ 30 m pour les capteurs satellitaires. Ces valeurs relativement grandes impliquent la présence éventuelle de plusieurs milieux (eau, végétation, etc.) pour un même pixel de l'image. Le spectre de réflectance résultant correspond ainsi à un **mélange**, généralement non-linéaire. Dans le cadre de l'observation de la Terre, il est nécessaire de distinguer les mélanges entre des minéraux et d'autres milieux et les mélanges entre minéraux. **Les sources de bruit** dans une image hyperspectrale sont nombreuses (bruits thermiques, bruit photonique, etc.) et la statistique du bruit dépend des caractéristiques du capteur. Cependant, les rapports signal sur bruit (RSB) sont suffisamment élevés ($RSB > 400 : 1$ et $RSB > 170 : 1$ annoncé pour EnMAP dans respectivement le VNIR et le SWIR, etc.) pour permettre l'observation et l'analyse de caractéristiques spectrales peu marquées (les absorptions de faibles amplitudes et largeurs). Enfin, **les effets de l'atmosphère** entre le capteur et le sol modifient les images acquises et doivent être corrigés. En particulier, des zones spectrales, autour de 1400 nm et 1900 nm, ne sont pas exploitables en raison de larges bandes d'absorption dues à la vapeur d'eau atmosphérique. On parlera ici de "masques spectraux".

1.2 Objectifs et contributions

Pour résoudre le problème complexe d'identification et de caractérisation des minéraux par imagerie hyperspectrale, une procédure permettant d'extraire l'information minéralogique des spectres de réflectance de manière automatique est nécessaire. Une solution en deux étapes est proposée, développée et validée dans ce travail de thèse. Elle s'articule autour de :

- l'extraction des caractéristiques spectrales des spectres de réflectance des minéraux,
- l'identification et la caractérisation des minéraux à partir de ces caractéristiques spectrales.

Cette approche a pour objectif de séparer la partie analyse de spectre de la partie identification et caractérisation. En effet, la solution devant être appliquée à des images hyperspectrales (où chaque pixel est associé à un spectre de réflectance après correction des effets atmosphériques), la procédure d'extraction des caractéristiques spectrales doit être automatique et limiter l'utilisation de connaissances *a priori*, qu'elles soient sur les caractéristiques spectrales (nombre d'absorptions, positions des absorptions, etc.) ou sur le contexte minéralogique de la surface

observée (minéraux présents, propriétés physico-chimiques des minéraux, etc.). Cette procédure d'extraction doit également pouvoir être adaptée aux différents capteurs utilisés pour l'acquisition d'images (différentes résolutions spectrales et spatiales, bruit, etc.) et gérer les effets de l'atmosphère. La partie identification et caractérisation des minéraux fait ensuite le lien entre les caractéristiques spectrales extraites et les connaissances minéralogiques. Ces connaissances sont issues de l'expérience des spécialistes et d'études préalables sur des échantillons analysés en laboratoire. Dans la suite, les deux principales contributions de ce travail de thèse, chacune correspondant à une étape de la solution proposée, sont introduites.

La première contribution de ce travail de thèse est la mise en place d'une **procédure de déconvolution de spectre de réflectance de minéraux** pour extraire les caractéristiques spectrales (continuum et absorptions). Elle se base sur un modèle physique paramétrique représentant le logarithme du spectre de réflectance d'un minéral comme la somme d'un continuum (la forme générale du spectre sur les domaines VNIR et SWIR) et d'absorptions (dont le nombre est inconnu ainsi que les positions et formes associées). Dans cette étude, le terme déconvolution correspond ainsi à la décomposition d'un spectre en un continuum et plusieurs absorptions dont on cherche à estimer les paramètres. La procédure proposée se décompose en trois étapes :

- pré-estimation et retrait du continuum,
- pré-estimation des absorptions,
- ajustement conjoint du continuum et des absorptions.

Tout d'abord, la pré-estimation et le retrait du continuum se basent sur la résolution d'un problème des moindres carrés non-linéaires sous contraintes. L'objectif est d'estimer les paramètres du modèle associés au continuum et de ne conserver que le spectre des absorptions. Ensuite, la pré-estimation des absorptions est l'étape clé de la procédure, où les paramètres (positions, paramètres de forme) des absorptions sont estimés par un algorithme inspiré d'Orthogonal Matching Pursuit [Bruckstein et al., 2008] modulo le choix d'une fonction paramétrique pour les motifs d'absorption. Cette étape fournit des décompositions du spectre pour un nombre variable de formes d'absorption, rendant possible l'utilisation d'un critère de sélection d'ordre pour estimer leur nombre. Enfin, un ajustement conjoint du continuum et des absorptions permet de réajuster simultanément les paramètres du continuum et des absorptions. Cette procédure de déconvolution de spectre est automatique et utilise peu de connaissances *a priori*, autres que, le modèle physique et des contraintes classiquement admises sur le continuum. Elle est indépendante de la résolution spectrale, peut être utilisée sur tout ou partie des domaines spectraux VNIR et SWIR et s'adapte donc à divers instruments de mesure (laboratoire, aérien et satellitaire). Également, elle tient compte du bruit instrumental. Ainsi, la procédure permet d'accéder à toutes les caractéristiques spectrales (continuum et absorptions) du spectre y compris en présence de mélanges spectraux.

La deuxième contribution de ce travail de thèse concerne l'**identification des minéraux** à partir des paramètres des caractéristiques spectrales estimés par la procédure de déconvolution. La procédure proposée est inspirée d'une méthode de logique floue et se base sur la comparaison des paramètres estimés à ceux d'une base de données prédéfinie. La méthode de logique floue permet de prendre en compte des incertitudes sur les paramètres associées soit à leur estimation soit à des variations intrinsèques des spectres de réflectance des minéraux. La base de données des paramètres est définie à partir de connaissances expertes. Ainsi, dans le but d'identifier les minéraux, les positions des absorptions estimées et celles de la base de données sont comparées via un ensemble de règles Si-Alors. Un score d'identification est alors obtenu pour chaque minéral dont les caractéristiques spectrales sont décrites dans la base de données. Cette procédure est automatique dans sa résolution mais nécessite des connaissances expertes lors de la définition de la base de données et des règles Si-Alors. Il pourrait être possible par la suite d'améliorer les résultats de l'identification en prenant en compte les autres paramètres des absorptions (par

exemple les amplitudes et les largeurs) et de caractériser les propriétés physico-chimiques des minéraux en ajoutant des règles spécifiques.

Ces deux procédures sont validées sur de nombreuses données synthétiques et réelles issues de mesures en laboratoire, posant des difficultés d'analyse du fait d'absorptions de formes variées, possiblement superposées, et positionnées sur une plage très étendue de longueurs d'onde. Dans le cadre de la thèse, une **campagne d'acquisitions d'images hyperspectrales** a également été menée sur deux carrières en France : une de gypse et une d'argiles kaoliniques. En parallèle, une campagne de mesures terrain a permis l'acquisition de spectres pour assurer une vérité terrain. Une validation extensive a ainsi été effectuée sur ces données et a permis de montrer le potentiel des procédures pour l'identification de minéraux à partir d'images hyperspectrales.

1.3 Organisation du manuscrit

Le Chap. 2 est consacré à la spectroscopie des minéraux et à l'imagerie hyperspectrale. Tout d'abord, la spectroscopie de réflectance sur les domaines du visible et proche-infrarouge (VNIR et SWIR) est présentée. Puis, les processus physiques associés aux spectres de réflectance des minéraux sont détaillés. Une description des signatures spectrales des principaux minéraux d'intérêt pour la thèse est également donnée. Enfin, l'acquisition d'images hyperspectrales par des capteurs aériens et satellitaires est décrite.

Le Chap. 3 s'intéresse à la modélisation d'un spectre de réflectance de minéral et à la modélisation du bruit dans une image hyperspectrale. Un modèle physique paramétrique décomposant le spectre de réflectance des minéraux en la somme d'un continuum et d'absorptions est présenté. Également, les capteurs aériens et satellitaires évoluant rapidement, les modèles statistiques du bruit instrumental sont discutés et modifiés pour pouvoir être appliqués à des données en réflectance.

Le Chap. 4 présente la procédure de déconvolution spectrale mise en place au cours de la thèse. Tout d'abord, un état de l'art des méthodes de déconvolution spectrale est présenté et permet de définir l'architecture de la procédure proposée. Puis, chaque étape de cette procédure est décrite. Enfin, le réglage automatique des paramètres algorithmiques associés aux différentes étapes est discuté. Cette procédure de déconvolution utilise le modèle de spectre de réflectance défini au Chap. 3 et tient compte du bruit instrumental.

Le Chap. 5 a pour objectif d'évaluer les performances de la procédure de déconvolution spectrale proposée au Chap. 4. Dans un premier temps, la procédure est validée sur des données synthétiques. Puis, elle est appliquée à des spectres de laboratoire présentant des difficultés d'analyse.

Le Chap. 6 traite de la procédure d'identification des minéraux à partir des paramètres estimés et d'incertitudes liées à leur estimation et à la constitution de la base de données de référence. Dans un premier temps, chaque étape de la procédure est détaillée. Puis, la procédure est validée sur des données synthétiques et évaluée sur des mélanges.

Le Chap. 7 est consacré à la campagne d'acquisitions d'images hyperspectrales et des données terrain. Les données de la campagne sont présentées en détail ainsi que les pré-traitements effectués. Les deux procédures sont appliquées à des spectres issus des images et permettent de conclure quant à la possibilité d'identifier automatiquement des minéraux à partir d'images hyperspectrales.

Au cours de la thèse, les travaux réalisés ont été présentés lors d'un colloque international [Rialland et al., 2019a] et de deux colloques nationaux [Rialland et al., 2018, Rialland et al.,

2019b] sans actes. De plus deux actes de conférences internationales et un article de journal ont été publiés. Les Chap. 4 et 5 font référence à l'acte [Rialland et al., 2020] et à l'article [Rialland et al., 2021b]. Le Chap. 6 se base sur l'acte [Rialland et al., 2021a]. Également, les images de la campagne, présentées au Chap. 7, sont utilisées dans ces trois derniers documents.

Chapitre 2

Spectroscopie et imagerie hyperspectrale pour l'étude des minéraux

Sommaire

2.1	Introduction	19
2.2	Spectroscopie visible et proche-infrarouge	20
2.2.1	La lumière, un rayonnement électromagnétique	20
2.2.2	Interaction rayonnement-matière	20
2.3	Spectre de réflectance des minéraux	24
2.3.1	Processus électroniques et absorptions associées	24
2.3.2	Processus vibrationnels et absorptions associées	25
2.3.3	Variabilité des spectres de réflectance des minéraux	30
2.3.4	Signatures spectrales des principaux minéraux	33
2.4	Imagerie hyperspectrale aérienne et satellitaire	34
2.4.1	Caractéristiques des capteurs	37
2.4.2	Principe d'acquisition	37
2.4.3	Équation du transfert radiatif	39
2.4.4	Masques spectraux et correction atmosphérique	39
2.4.5	Cas des mélanges de minéraux et avec d'autres matériaux	40
2.5	Conclusion	40

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons les notions et principes physiques utiles à la compréhension de ce travail de thèse. Dans un premier temps, nous introduisons le concept de spectroscopie. Cette discipline étudie les interactions de la lumière avec la matière et permet d'accéder aux propriétés physico-chimiques de divers matériaux (végétation, eau, minéraux, etc.). Ensuite, nous présentons les propriétés spectrales associées aux grandes familles de minéraux en nous attardant particulièrement sur les principes physiques (processus électroniques, vibrationnels, etc.) mis en jeu et sur leurs caractéristiques (forme générale ou continuum, absorptions). Enfin, nous présentons l'imagerie hyperspectrale, aérienne et satellitaire, et décrivons son potentiel pour l'étude minéralogique de grandes zones d'intérêt (mines, carrières, usines, etc.).

2.2 Spectroscopie visible et proche-infrarouge

2.2.1 La lumière, un rayonnement électromagnétique

La lumière est un rayonnement électromagnétique ayant un comportement corpusculaire (photons) et ondulatoire (onde électromagnétique). Ces deux modèles sont complémentaires et il est possible de lier l'énergie d'un photon E (J) à la fréquence f (Hz) de l'onde associée par $E = hf$ avec h la constante de Planck. On note également λ la longueur d'onde (m) par $\lambda = c/f$ où c est la vitesse de la lumière dans le vide (m/s).

Un rayonnement électromagnétique se décompose en ondes monochromatiques, formant le spectre électromagnétique. Ainsi, plusieurs domaines spectraux, représentés en Fig. 2.1, sont définis allant, en partant des longueurs d'onde les plus faibles, des rayons X et Gamma aux ondes radio et micro-ondes. En particulier, les domaines spectraux de l'ultraviolet (UV), du visible (V) et de l'infrarouge (IR) se situent entre 10 et 14000 nm. L'infrarouge se décompose en quatre zones : le proche-infrarouge (NIR, *Near-InfraRed*), l'infrarouge à longueurs d'onde courtes (SWIR, *Short-Wave InfraRed*), l'infrarouge à longueurs d'onde moyennes (MWIR, *Mid-Wave InfraRed*) et l'infrarouge à longueurs d'onde longues (LWIR, *Long-Wave InfraRed*).

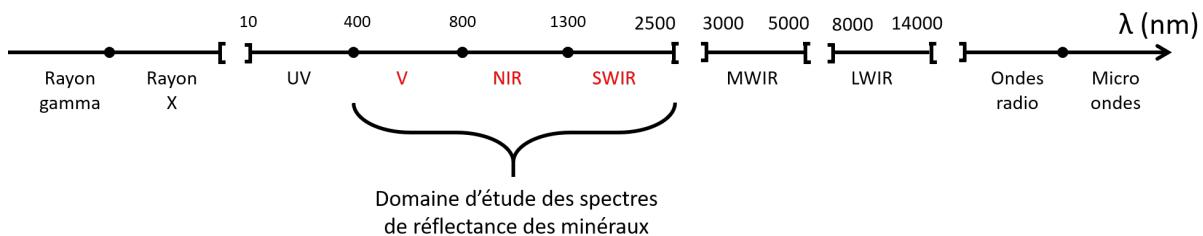


FIGURE 2.1 – Principaux domaines spectraux. Ici, seuls les minéraux ayant des caractéristiques spectrales dans les domaines du VNIR et du SWIR sont considérés.

Dans cette thèse, nous nous intéressons aux plages de longueurs d'onde du visible et proche-infrarouge (classiquement regroupées sous l'acronyme VNIR) et du SWIR, allant de 400 à 2500 nm. En effet, le Soleil est une source idéale de lumière pour l'observation passive de la Terre et le maximum de son spectre électromagnétique, voir Fig. 2.2, correspond aux longueurs d'onde associées à la lumière visible.

2.2.2 Interaction rayonnement-matière

La spectroscopie consiste à étudier un milieu (végétation, minéral, liquide, etc.) à partir du spectre qu'il réfléchit (ou transmet et émet) lorsqu'il est soumis à un rayonnement électromagnétique passif ou actif. Plusieurs grandeurs (réflectance, transmittance, émissivité) peuvent être mesurées et permettent d'accéder aux propriétés physiques et chimiques du milieu. La Fig. 2.3 illustre ces différents phénomènes.

Réflexion, absorption et transmission

Comme synthétisé Fig. 2.3.a, un rayonnement incident (dans notre cas issu du Soleil) est séparé en trois composantes lors d'un changement de milieu :

- une partie est réfléchie,
- une partie est absorbée,

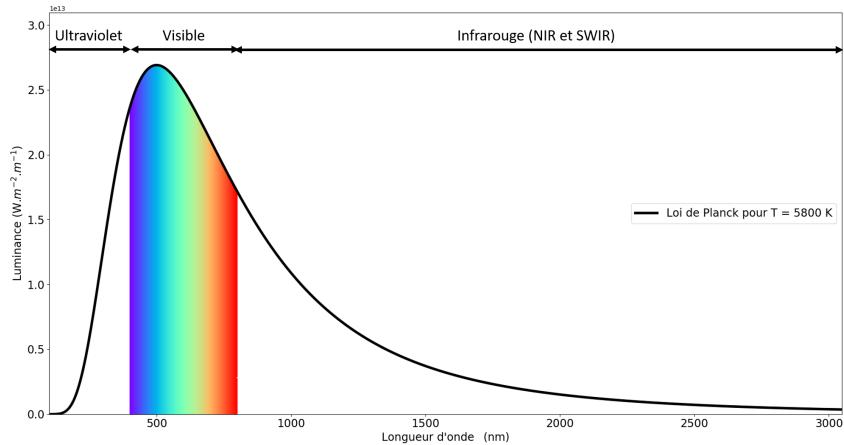


FIGURE 2.2 – Rayonnement électromagnétique d'un corps noir donné par la loi de Planck pour une température de 5800 Kelvin (K). Le spectre électromagnétique émis par le Soleil suit la loi de Planck.

- une partie est transmise.

Ainsi, un détecteur placé au-dessus de la scène acquiert le spectre électromagnétique réfléchi alors qu'un détecteur placé au-dessous acquiert celui transmis. Le rayonnement absorbé n'est pas directement observable. Les rapports entre l'énergie du rayonnement incident, supposée fixe au cours de la mesure, et celles des rayonnements réfléchis, absorbés et transmis sont notés respectivement : réflectance ρ , absorption a et transmittance τ . Ils sont sans unités, s'expriment entre 0 et 1 (ou 0% et 100%) et dépendent de la longueur d'onde. La relation entre ces trois grandeurs s'exprime par :

$$\rho + a + \tau = 1. \quad (2.1)$$

Les phénomènes d'absorption sont donc observables dans les spectres de réflectance et de transmittance.

Dans le cadre de l'observation de la Terre par des capteurs aériens et satellitaires, seul le rayonnement réfléchi peut être acquis. Ainsi, le spectre de réflectance d'un milieu dépend :

- de ses propriétés diffusantes (rugosité, humidité, etc.),
- des différents phénomènes d'absorption liés à ses propriétés physiques et chimiques,
- des conditions d'acquisitions spécifiques à l'imagerie aérienne et satellitaire (capteur, source d'éclairement, présence de l'atmosphère, etc.).

Réflectance diffuse

Dans le cadre de la télédétection, deux types de réflexion peuvent être distinguées en fonction de la rugosité de la surface (irrégularités des surfaces naturelles) et de la longueur d'onde du rayonnement :

- la réflexion spéculaire,
- la réflexion diffuse.

La réflexion est dite spéculaire, Fig. 2.3.a, lorsque la rugosité de la surface est inférieure à la longueur d'onde d'observation. Le rayonnement incident est alors réfléchi selon le même angle que celui d'incidence et la surface apparaît donc lisse. C'est le cas par exemple pour une surface d'eau calme.

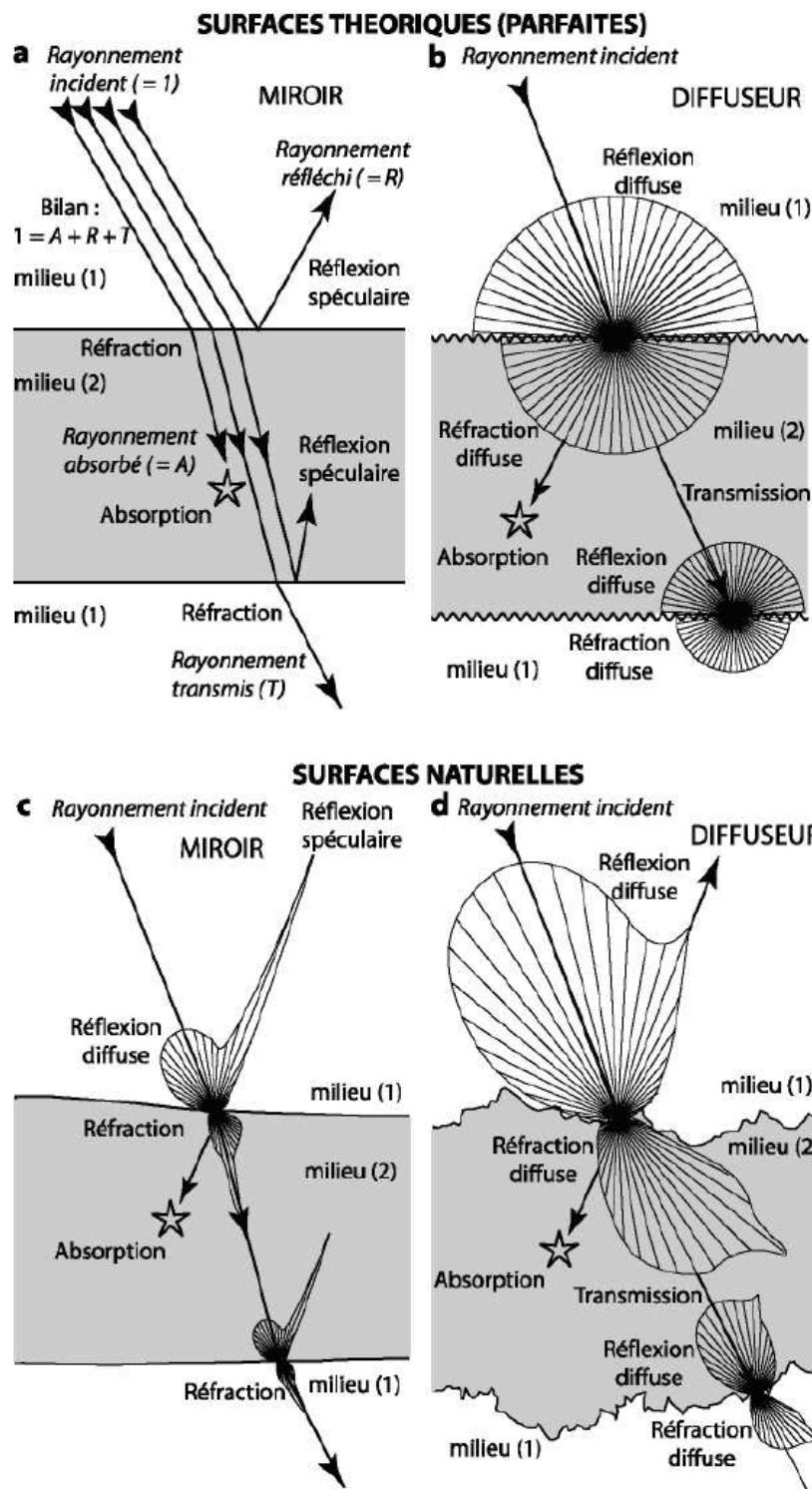


FIGURE 2.3 – Illustration des interactions entre un rayonnement électromagnétique incident et un milieu [Combe, 2005]. (a) Surface parfaitement lisse : réflexion spéculaire. (b) Surface parfaitement rugueuse : réflexion lambertienne. (c) Surface naturelle réfléchissante : réflexion spéculaire dominante. (d) Surface naturelle rugueuse : réflexion diffuse dominante.

La réflexion est dite diffuse, Fig. 2.3.b, lorsque la surface présente des aspérités de tailles supérieures à la longueur d'onde d'observation. Le rayonnement incident est alors réfléchi dans toutes les directions. Dans le cas où la rugosité est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde, la surface est parfaitement diffusante (c.-à-d. lambertienne) et le rayonnement est réfléchi avec la même intensité dans toutes les directions (hémisphérique). Dans les domaines du VNIR et du SWIR, les surfaces observées ne sont généralement pas homogènes et n'ont donc pas un comportement du diffuseur lambertien. Ainsi, il existe une direction privilégiée de réflexion ce qui conduit à des effets directionnels. Également, le rayonnement réfléchi est un mélange de réflexion spéculaire et de réflexion diffuse Fig. 2.3.c et 2.3.d.

Pour définir la part du rayonnement hémisphérique réfléchi dans la direction du détecteur, il est nécessaire de définir la notion d'angle solide, représentée en Fig. 2.4. Il s'agit d'une portion de l'espace délimitée par un cône suivant la direction d'observation du détecteur à travers laquelle est transporté le rayonnement. Il s'exprime tel que :

$$\Omega = \frac{s}{r^2} \quad (2.2)$$

où s (m^2) est l'aire du cône à la distance r (m).

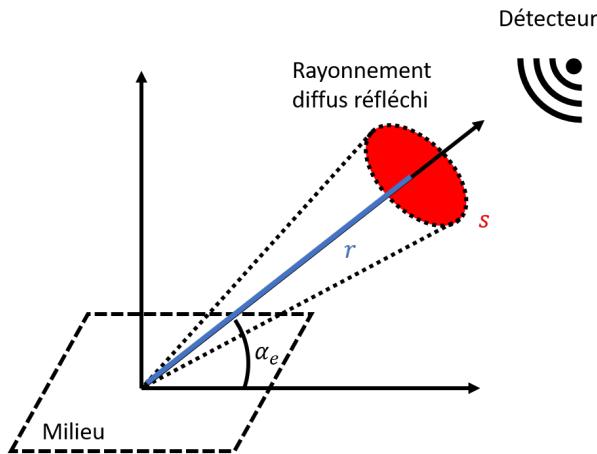


FIGURE 2.4 – Représentation d'un angle solide.

Expressions de la luminance et de la réflectance

L'énergie transportée par un rayonnement électromagnétique est un flux F , exprimé en Watts (W), qui varie en fonction de la longueur d'onde λ . Il correspond au nombre de photons acquis par le détecteur pendant une observation. La luminance est alors définie comme la quantité d'énergie (W) par unité de surface (m^2), par longueur d'onde (μm) et par unité d'angle solide (stéradian), acquise par le détecteur. Elle s'exprime par :

$$L(\lambda) = \frac{d^2F(\lambda)}{dSd\Omega \cos \alpha_e}. \quad (2.3)$$

La réflectance ρ est le rapport entre le flux d'énergie réfléchie par une surface donnée (luminance L) et le flux d'énergie reçue par cette même surface (éclairement E) pour une longueur d'onde donnée. C'est un terme sans dimension, compris entre 0 et 1. Elle s'exprime par :

$$\rho(\lambda) = \frac{\pi L(\lambda)}{E(\lambda)}. \quad (2.4)$$

Un spectre de réflectance permet d'accéder aux informations caractéristiques (absorptions) de la surface. Ainsi, il est utilisé dans la suite pour l'étude des minéraux (Sect. 2.3).

2.3 Spectre de réflectance des minéraux

Dans le cadre de l'observation de la Terre par des capteurs aériens et satellitaires, de nombreux milieux peuvent être observés. Les applications sont nombreuses et vont de l'étude de la végétation à la recherche de polluants dans les sols, en passant par l'analyse des propriétés de la neige et la caractérisation d'aérosols. En effet, chaque milieu comme la végétation, les minéraux et l'eau a une signature spectrale (c.-à-d. des spectres de réflectance) caractéristique, en raison de la diversité de leur composition chimique et de leurs propriétés physiques. Ce travail de thèse ayant pour objectif l'identification et la caractérisation de minéraux, seuls leurs spectres de réflectance sont décrits dans la suite.

Le spectre de réflectance d'un minéral résulte de ses propriétés d'absorption et de diffusion. D'une part, l'absorption d'un photon par un milieu engendre des processus électroniques (dans le VNIR) et vibrationnels (dans le SWIR) qui créent diverses bandes d'absorption et modifient la forme générale du spectre [Clark, 1999]. La compréhension des causes de ces processus est importante pour identifier les bandes d'absorption produites et permettre l'identification des minéraux. D'autre part, les propriétés de diffusion de la surface observée (humidité, granulométrie, etc.) impactent la forme générale du spectre. Ces propriétés ne sont pas toujours bien déterminées ou sont difficiles à définir [Clark and Roush, 1984]. Ainsi, un spectre de réflectance de minéral se décompose en une forme générale, nommée continuum, et en plusieurs absorptions, dépendantes des propriétés d'absorption du minéral.

Dans la suite, les propriétés d'absorption des minéraux (processus électroniques [Burns, 1993] Sect. 2.3.1 et processus vibrationnels [Farmer, 1974] Sect. 2.3.2) sont décrites et une liste des absorptions associées les plus couramment rencontrées est donnée. Les principales sources de variabilité des spectres de réflectance sont introduites Sect. 2.3.3. En particulier, les propriétés de diffusion et leurs effets sur le continuum sont présentés. Enfin, les spectres de réflectance des principaux minéraux étudiés sont décrits Sect. 2.3.4. En particulier, leurs caractéristiques spectrales d'intérêt (continuum, absorptions principales et secondaires) sont présentées dans le but de pouvoir les identifier et les caractériser.

2.3.1 Processus électroniques et absorptions associées

Un atome est composé d'un noyau et de plusieurs électrons situés sur des orbitales (c.-à-d. des niveaux d'énergie). L'absorption d'un photon par un atome provoque une transition électronique [Hunt, 1977, Burns, 1993, Clark, 1999], comme représenté en Fig. 2.5. En effet, l'absorption d'un photon, qui possède l'énergie suffisante, entraîne l'excitation des électrons de l'atome qui passent à une orbite plus externe. Comme cet état excité n'est pas stable, l'atome revient à son état d'équilibre en libérant un photon dont l'énergie est généralement supérieure à celle nécessaire pour passer à l'état excité (étape d'émission). Ces transitions électroniques entre niveaux d'énergie reposent principalement sur :

- les effets du champ cristallin (ion inclus dans un réseau cristallin),
- les transferts de charge (interaction avec les ions voisins),
- les effets liés aux bandes de conduction.

Les effets du champ cristallin correspondent à l'influence des anions, des groupes dipolaires et des ligands (molécules pouvant se lier à un ou plusieurs atomes) qui entourent un ion [Burns,

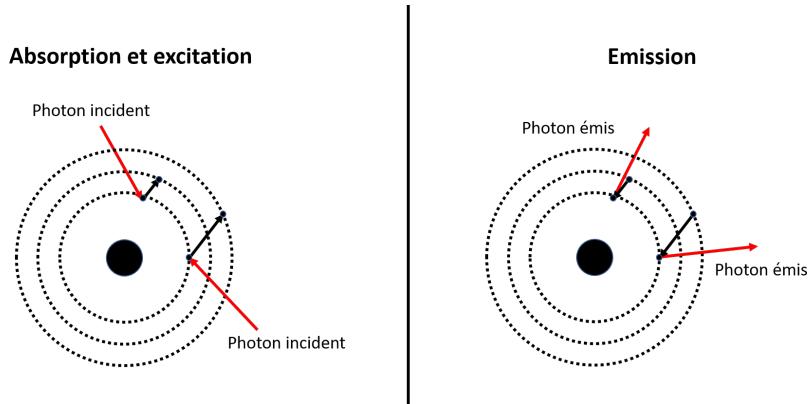


FIGURE 2.5 – Principe d'une transition électronique pour un ion formé d'un noyau et de trois orbitales. Un photon incident est absorbé, provoquant l'excitation de l'atome et le passage d'un électron d'un niveau d'énergie à un niveau supérieur. Le retour à l'équilibre conduit à l'émission d'un photon.

1970]. L'intensité de ces effets dépend ainsi de la nature, de la position et de la symétrie du ligand. Les métaux de transition (ex : Fe, Ni, Cu, Mn, Cr, Co, etc.) sont particulièrement vulnérables à ces effets car leurs orbitales externes 3d ne sont pas protégées.

Un transfert de charges correspond au déplacement des électrons entre des cations voisins ou entre des cations et des ligands. Par exemple, le transfert de charge $Fe - O$ donne la couleur rouge-orangée dans les spectres de minéraux d'altération telles que la goethite et l'hématite. [Hunt et al., 1971a, Adams, 1975]

Dans le cas des cristaux métalliques (ex : Fe), où la différence d'énergie entre une bande de valence et la bande de conduction est très petite, les électrons peuvent se déplacer dans le réseau cristallin leur procurant ainsi une forte conductivité. Par exemple pour certains oxydes de fer, il en résulte une intense absorption dans l'ultraviolet [Hunt et al., 1971a] qui peut s'étendre dans le domaine spectral du visible et proche-infrarouge (VNIR).

Les transitions électroniques et les processus associés s'appliquent principalement à des éléments métalliques de transition [Hunt, 1977]. Dans le cas des minéraux, les ions ferreux Fe^{2+} et ferriques Fe^{3+} sont souvent présents et il en résulte des absorptions situées dans le VNIR. Les positions exactes en longueur d'onde des absorptions sont prédites en calculant les niveaux d'énergie séparant les orbitales. La Fig. 2.6 présente ainsi des spectres de réflectance d'hématite (Fe_2O_3) et de goethite ($FeO(OH)$) qui contiennent des oxydes ferriques. Leurs absorptions sont proches et de forme similaire. L'hématite possède une absorption large autour de 860 nm et une petite à 660 nm alors que la goethite se caractérise par une absorption large autour de 960 nm et une plus petite à 660 nm. La largeur des absorptions est due à la multiplicité des atomes constitutifs du minéral qui peut provoquer l'élargissement énergétique (par effet Doppler ou effet de collision).

2.3.2 Processus vibrationnels et absorptions associées

Phénomène physique

Une molécule, ou une liaison atomique, de N atomes possède $3N$ mouvements de liberté. Ces mouvements sont associés à la disposition des éléments liés (longueurs des liaisons et angles entre les liaisons). Ainsi, l'excitation d'une molécule ou d'une liaison atomique par un photon se

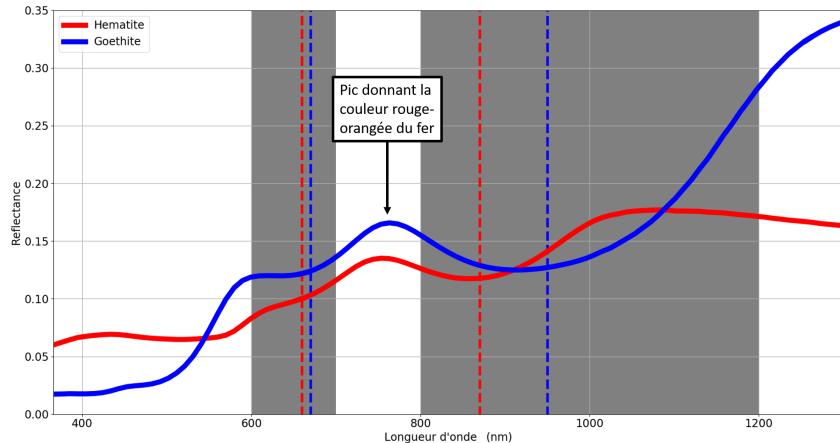


FIGURE 2.6 – Spectres de réflectance d’hématite (rouge) et de goethite (bleu) issus de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017] entre 400 et 1300 nm. Les zones grisées correspondent aux absorptions autour de 660 nm et 900 nm (860 nm pour l’hématite et 960 nm pour la goethite). Les centres des absorptions sont représentés par les lignes verticales pointillées. Le pic vers 760 nm donne la couleur rouge-orangée du fer.

caractérise par des mouvements de translation et rotation. Il en résulte une vibration moléculaire dépendant à la fois de la force des liaisons atomiques et de leurs masses [Wilson et al., 1955, Clark, 1999]. Ces vibrations sont communément subdivisées en deux modes :

- les modes de vibration de valence ou d’elongation qui peuvent être symétriques ou asymétriques. Ils consistent en la variation des longueurs des liaisons tout en conservant les angles entre les liaisons.
- les modes de déformation. Ils consistent en la variation des angles entre les liaisons atomiques tout en conservant les longueurs des liaisons.

Une illustration de ces modes de vibration est donnée Fig. 2.7 pour une molécule d’eau H_2O . Ainsi, il existe quatre modes de déformation (cisaillement, rotation pure, balancement et torsion) et deux modes de vibration (symétrique et asymétrique) pour une molécule d’eau.

Les vibrations moléculaires sont définies par leurs fréquences fondamentales, noté ν_i où i est l’indice de la fréquence fondamentale. De plus, chaque fréquence fondamentale peut avoir des modes harmoniques (*overtones*, en anglais), notées $j\nu_i$ où j est un multiple de la fréquence fondamentale.

Les fréquences fondamentales de ces vibrations, situées dans l’infrarouge, génèrent des absorptions visibles dans les spectres de réflectance des minéraux [Hunt, 1977, Clark, 1999]. Dans le SWIR, les absorptions observées sont généralement dues aux combinaisons de vibrations fondamentales et harmoniques. En effet, plusieurs vibrations différentes (fondamentales ou harmoniques) peuvent avoir lieu à la même fréquence. On parle alors de combinaisons.

Dans la suite, les principales bandes d’absorption générées par des processus vibrationnels sont décrites. Ce travail a été plusieurs fois réalisé dans la littérature et de nombreuses synthèses existent comme par exemple [Clark, 1999, Pontual et al., 2010]. Ici, nous nous attardons plus particulièrement sur les bandes d’absorption associées aux minéraux d’intérêt décrits Sect. 2.3.4. Il est cependant à noter que certaines liaisons chimiques, pourtant fréquentes dans les minéraux, ne sont pas détectables en spectroscopie VNIR-SWIR (ex : Si-O, Al-O, Mg-O, etc.) [Hunt, 1977]. En effet, leurs fréquences fondamentales sont observables dans le LWIR et leurs harmoniques sont inexistantes ou d’amplitudes trop faibles dans les domaines du VNIR et du SWIR.

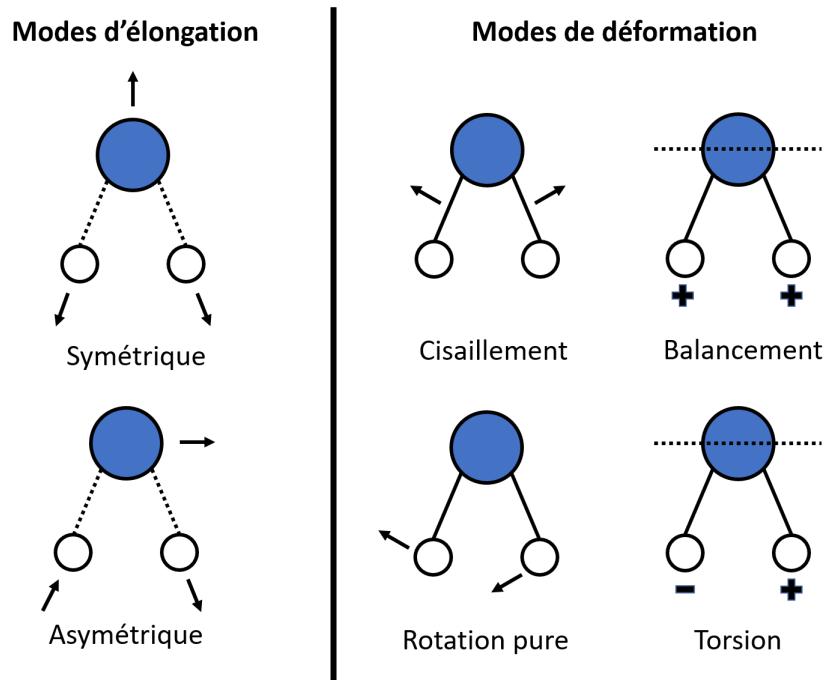


FIGURE 2.7 – Modes de vibration d'une molécule d'eau.

Bandes d'absorption associées à l'eau

Une molécule d'eau possède trois modes de vibration fondamentaux [Hunt and Salisbury, 1970] dus :

- à l'étirement symétrique des liaisons O-H ($\nu_1 = 3100$ nm),
- au pliage de l'ensemble H-O-H ($\nu_2 = 6000$ nm),
- à l'étirement asymétrique des liaisons O-H ($\nu_3 = 6000$ nm).

Parmi les trois absorptions résultantes, seul le bord de celle centrée vers 3000 nm est visible sur les domaines du VNIR et du SWIR. Cette absorption est, de plus, particulièrement sensible à l'eau adsorbée en surface du minéral [Whiting et al., 2004]. Ainsi, de par son influence sur le spectre, cette absorption est prise en compte dans le continuum. La Fig. 2.8 présente un spectre de réflectance de montmorillonite entre 1370 et 7000 nm où les absorptions associées à l'eau sont visibles.

Plusieurs modes de vibration harmoniques sont également visibles sur les domaines du VNIR et du SWIR [Hunt and Salisbury, 1970]. En particulier, les minéraux hydratés présentent des bandes d'absorption centrées à 1400 nm ($2\nu_3$) et 1900 nm ($\nu_2 + \nu_3$). La présence de ces deux absorptions indique que l'eau présente dans le minéral n'est pas dissociée (eau d'hydratation ou eau piégée dans une maille cristalline) alors que l'absence de l'absorption à 1900 nm est indicative de la présence de groupes hydroxyles (OH) autres que ceux de la molécule H_2O [Hunt and Salisbury, 1970]. Dans le cadre de l'acquisition de spectres par imagerie aéroportée ou satellitaire, ces deux absorptions ne sont pas exploitables en raison de la présence de vapeur d'eau atmosphérique qui les sature fortement, voir Sect. 2.4.4.

Bandes d'absorption associées aux liaisons hydroxyles

Les liaisons hydroxyles sont des liaisons métal-OH. Dans le cadre de l'étude des minéraux, les principaux éléments associés à ces liaisons et formant des absorptions entre 2000 et 2500 nm sont

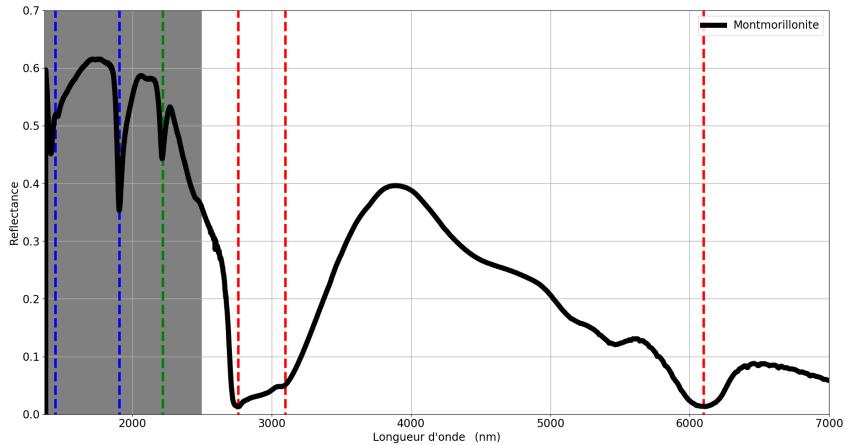


FIGURE 2.8 – Spectre de réflectance de montmorillonite issu de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017] entre 1370 et 7000 nm. La zone grisée correspond aux longueurs d’onde inférieures à 2500 nm. Les absorptions associées aux vibrations fondamentales (rouge) et harmoniques (bleu) de l’eau ainsi que l’absorption caractéristique de la montmorillonite (vert) sont indiquées.

l’aluminium, le fer et le magnésium [Pontual et al., 2010]. Ils forment ainsi les liaisons Al-OH, Fe-OH et Mg-OH.

Les absorptions formées par les modes vibratoires de ces liaisons sont dues à la combinaison de l’étirement du groupe hydroxyle et du pliage de la liaison métal-OH [Clark, 1999]. Il en résulte des absorptions étroites et profondes comme pour la kaolinite (Al-OH), la Fe-Chlorite ou le talc (Mg-OH), représentés en Fig. 2.9. Ces absorptions sont positionnées à des longueurs d’onde proches ([2160 – 2228] nm pour Al-OH, [2230 – 2295] nm pour Fe-OH et [2300 – 2370] nm pour Mg-OH) [Pontual et al., 2010].

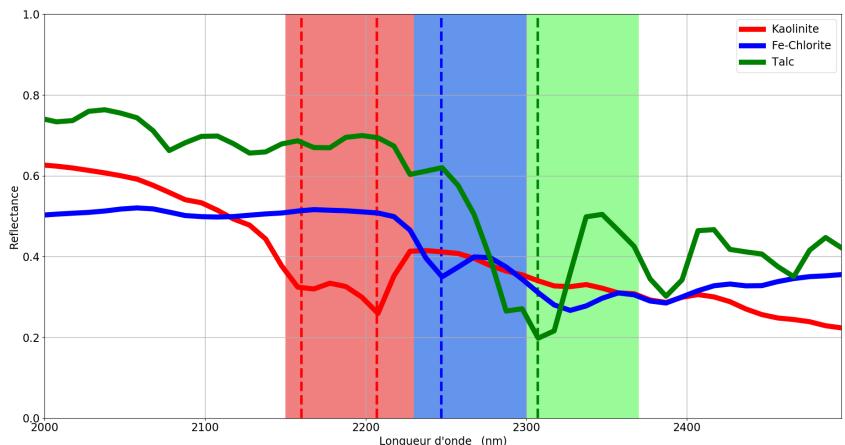


FIGURE 2.9 – Spectres de réflectance de kaolinite (rouge), de Fe-Chlorite (bleu) et de talc (vert) issus de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017]. Les zones de couleurs rouge, bleue et verte correspondent respectivement aux bandes théoriques des centres des absorptions associées aux liaisons Al-OH, Fe-OH et Mg-OH. Les centres des absorptions hydroxyles des trois minéraux sont indiqués par les lignes verticales.

Bandes d'absorption associées aux carbonates

En raison de la structure plane de l'ion CO_3^{2-} , les carbonates présentent quatre modes vibratoires fondamentaux générant chacun des absorptions au-delà de 14700 nm [Clark, 1999]. Ainsi, les absorptions visibles dans les domaines du VNIR et du SWIR sont dues à des vibrations harmoniques et à des combinaisons. En particulier, une profonde absorption, associée au mode vibratoire $2\nu_3$, apparaît entre 2300 et 2350 nm, comme illustré en Fig. 2.10 pour deux spectres de calcite ($CaCO_3$) et de dolomite ($CaMg(CO_3)_2$). Des absorptions plus faibles, dues à des combinaisons, s'observent également entre 2120 et 2160 nm et entre 1970 et 2000 nm.

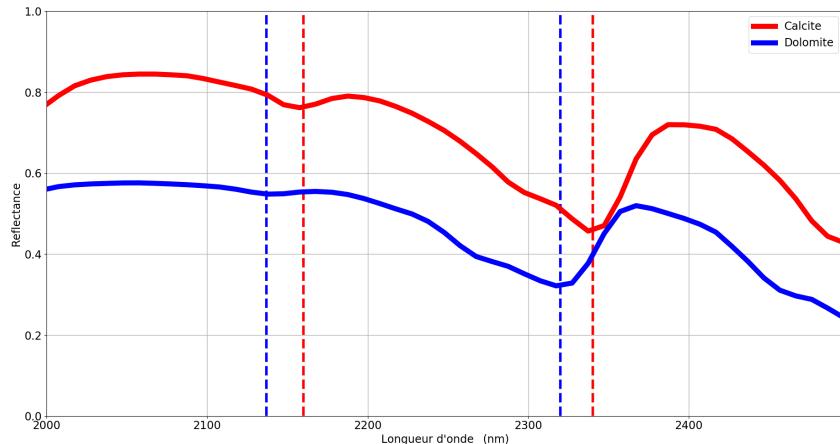


FIGURE 2.10 – Spectres de réflectance de calcite (rouge) et de dolomite (bleu) issus de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017]. Les centres des absorptions des deux minéraux sont indiqués par les lignes verticales.

Bandes d'absorption associées aux sulfates

Les sulfates (associés à la molécule (SO_4^{2-})) présentent plusieurs absorptions entre 300 et 26000 nm [Cloutis et al., 2006]. Ainsi, dans les domaines du VNIR et du SWIR, les absorptions d'intérêt se situent autour de 1800 nm et dans l'intervalle allant de 2100 à 2700 nm, voir Fig. 2.11.

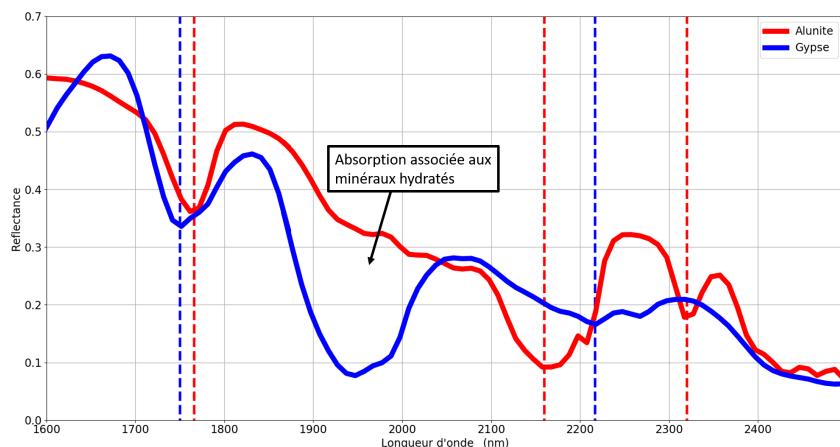


FIGURE 2.11 – Spectres de réflectance d'alunite (rouge) et de gypse (bleu) issus de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017]. Les centres des absorptions des deux minéraux sont indiqués par les lignes verticales.

L'absorption peu profonde autour de 1800 nm se retrouve pour de nombreux sulfates (ex : alunite ($KAl_3(SO_4)_2(OH)_6$), gypse ($CaSO_4 \bullet 2H_2O$), etc.) à l'exception notable des sulfates contenant du fer (ex : jarosite ($KFe_3(SO_4)_2(OH)_6$), etc.) [Crowley et al., 2003]. Pour le gypse, elle est associée à la combinaison des vibrations, étirements et courbures des liaisons OH/ H_2O [Hunt et al., 1971b] alors que pour l'alunite, elle est attribuée à la combinaison de l'étirement fondamental de la liaison OH avec le premier mode harmonique de la courbure de la liaison Al-OH [Cloutis et al., 2006].

Dans l'intervalle allant de 2100 à 2700 nm, les absorptions sont principalement dues à des harmoniques de la liaison S-O ainsi qu'à des combinaisons et harmoniques des liaisons H-O-H/O-H [Cloutis et al., 2006]. Ainsi, les absorptions à 2170, 2200 et 2280 nm sont associées à des harmoniques de la liaison S-O. Leur nombre ainsi que leurs largeurs et profondeurs dépendent de la présence de liaison H_2O [Bishop and Murad, 2005, Cloutis et al., 2006]. On note également pour l'alunite une absorption à 2330 nm qui est attribuée soit à une combinaison des bandes fondamentales de la courbure de la liaison Al-O-H et à une fondamentale basse fréquence de l'étirement de la liaison O-H [Hunt et al., 1971b] soit à un étirement de la liaison O-H combiné à la courbure dans le plan de la liaison OH [Bishop and Murad, 2005, Cloutis et al., 2006].

2.3.3 Variabilité des spectres de réflectance des minéraux

Un spectre de réflectance de minéral présente plusieurs sources de variabilité liées à ses propriétés d'absorption et de diffusion. Ces variabilités limitent les possibilités de comparaison d'un spectre inconnu avec ceux de librairies spectrales volumineuses pour identifier le minéral associé [Marion and Carrère, 2018]. Cependant, ces variabilités informent sur les variations de certaines caractéristiques minéralogiques.

Dans la suite, les principales sources de variabilité (continuum, absorption, mélanges) rencontrées lors de l'étude de spectres de réflectance de minéraux sont présentées.

Le continuum : diffusion et absorptions

Le continuum correspond à la forme générale du spectre sur l'ensemble du domaine spectral considéré. Dans les domaines du VNIR et du SWIR, il correspond à une fonction ne présentant pas de minima locaux et généralement convexe [Clark and Roush, 1984]. Les absorptions spécifiques des minéraux, décrites précédemment, viennent s'y superposer.

Le continuum dépend de différents phénomènes et de propriétés des minéraux dont la combinaison des effets est encore mal comprise [McCord et al., 1981, Clark and Roush, 1984, Sunshine et al., 1990, Clark, 1999, Clenet, 2009, Marion and Carrère, 2018]. On peut citer :

- les phénomènes de diffusion associés à la taille des grains (granulométrie),
- les propriétés optiques du milieu dans les domaines du VNIR et du SWIR,
- les conditions d'éclairement,
- les absorptions "à grande échelle" (larges et profondes) centrées à l'extérieur des domaines du VNIR et du SWIR mais dont les bords sont "visibles".

Par exemple, la granulométrie d'un minéral impacte le spectre de réflectance associé en augmentant ou diminuant la valeur du continuum. Cependant, il est complexe de définir une relation simple entre granulométrie et continuum [Bishop et al., 1996, Combe et al., 2005, Clenet, 2009, Verpoorter, 2009].

Deux absorptions, observables dans la plupart des cas, influencent les deux extrémités des spectres mesurés entre 350 et 2500 nm. Dans le VNIR, la large absorption centrée dans l'ultravio-

let, associée à des bandes de conduction dans le fer, peut être prise en compte dans le continuum (Sect. 2.3.1). Dans le SWIR, l'absorption large centrée vers 3000 nm, issue des phénomènes de vibration de l'eau, est également visible (Sect. 2.3.2). De plus, les bords du spectre peuvent être impactés par des absorptions moins larges et profondes mais spécifiques à un minéral donné.

Ainsi, le continuum est une source importante de variabilité des spectres de réflectance des minéraux. Dans la littérature, il est souvent retiré avant une possible exploitation des absorptions pour une étude du minéral [Clark and Roush, 1984, Clark, 1999, Pontual et al., 2010].

Variabilités des bandes d'absorption

Les absorptions dans les domaines du VNIR et du SWIR peuvent également présenter des variations en fonction de la taille des grains, de la composition chimique (effets de substitution, concentration) et de propriétés spécifiques à chaque minéral.

Ainsi, la taille des grains, en plus d'influencer le continuum, peut modifier la profondeur des bandes d'absorption [Bishop et al., 1996, Combe et al., 2005]. Aucune généralisation n'est possible même si certains auteurs avancent que si la taille des grains diminue, la profondeur des absorptions dans le VNIR tend à augmenter [Pieters, 1983, Bishop et al., 1996] alors qu'elle diminue dans le SWIR [Salisbury et al., 1987, Bishop et al., 1996].

D'autre part, la composition chimique exacte du minéral est à prendre en compte. En effet, les centres des absorptions peuvent être légèrement décalés lors de la substitution de certains de leurs cations. C'est le cas par exemple de l'absorption à 2200 nm de la muscovite qui se décale en fonction de la substitution de l'aluminium, Fig. 2.12 [Swayze et al., 2014, Clark, 1999]. De plus, certains auteurs avancent que les profondeurs des absorptions associées aux liaisons hydroxyles dépendent de la concentration des composés dans le minéral [Clark, 1999].

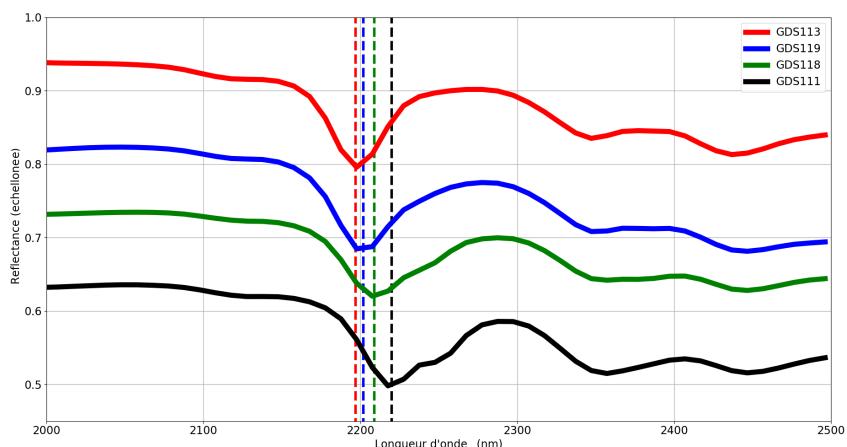


FIGURE 2.12 – Spectres de réflectance de muscovite issus de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017] entre 2000 et 2500 nm. Les centres de l'absorption à 2200 nm varient en fonction des substitutions d'aluminium [Swayze et al., 2014] (décalage vers la droite lorsque l'aluminium est substitué par du fer et/ou du magnésium).

Enfin, les propriétés physiques de certains minéraux peuvent avoir un impact sur les spectres de réflectance. Par exemple, le doublet de la kaolinite, représenté en Fig. 2.13, et plus particulièrement l'absorption à 2160 nm, est atténuée en fonction du taux de cristallinité de la kaolinite.

Ainsi, les absorptions présentent de nombreuses variabilités, spécifiques à chaque minéral. Lors de l'étude d'un spectre d'une surface de composition minéralogique inconnue, la position

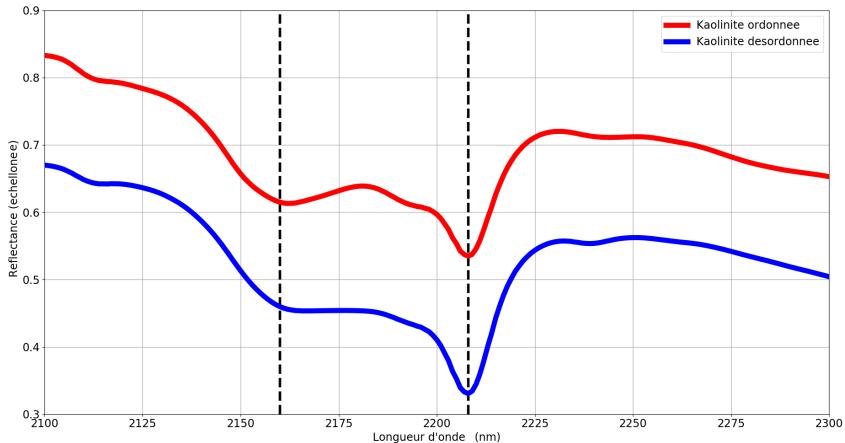


FIGURE 2.13 – Spectres de réflectance de kaolinite issus de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017] entre 2000 et 2500 nm. La forme du doublet d'absorption à 2160 et 2206 nm évolue avec la cristalinité de l'échantillon [Cudahy, 1997, Swayze et al., 2014].

et la forme des absorptions renseignent sur la composition chimique précise du ou des minéraux présents et sur la possibilité de mélanges, leur profondeur se rapportant à la concentration du constituant et/ou à la granulométrie du milieu selon ses propriétés optiques. S'il existe de nombreux travaux de références permettant d'établir ces relations, il est cependant parfois nécessaire d'effectuer des études plus spécifiques selon des domaines d'application et les contextes géologiques.

Cas des mélanges entre minéraux

Dans certaines études (fonction de l'échelle d'observation), les spectres de réflectance peuvent correspondre à des mélanges de minéraux. Trois types de mélanges sont souvent observés [Clark, 1999, Bioucas-Dias et al., 2013] :

- les mélanges surfaciques,
- les mélanges intimes,
- les mélanges de couches multiples.

Ils sont représentés en Fig. 2.14.

Tout d'abord, un mélange surfacique, Fig. 2.14a, s'observe à macro-échelle et correspond au cas où les minéraux sont optiquement séparés du point de vue du détecteur. Ainsi, les photons enregistrés n'interagissent qu'avec un seul minéral à la fois. Le spectre de réflectance résultant est ainsi un mélange linéaire où les coefficients de chaque minéral correspondent à la proportion de surface recouverte par ces derniers.

Ensuite, un mélange est intime, Fig. 2.14b, lorsqu'un même photon interagit successivement, par diffusion multiple, avec les différents minéraux du mélange. Ces mélanges sont fréquents lors de l'étude d'une roche ou d'un sol et se produisent à l'échelle du grain (micro-échelle). Il en résulte un spectre de réflectance non-linéaire, composé des différents spectres des minéraux du mélange.

Enfin, dans le cas où un minéral en recouvre un autre, le mélange est dit sur couches multiples, Fig. 2.14c. Chaque couche constitue une interface qui, selon sa composition et donc ses propriétés optiques, pourra affecter la diffusion et la transmission en fonction de la profondeur de pénétration du rayonnement et de la longueur d'onde. Le spectre de réflectance résultant dépend alors de la

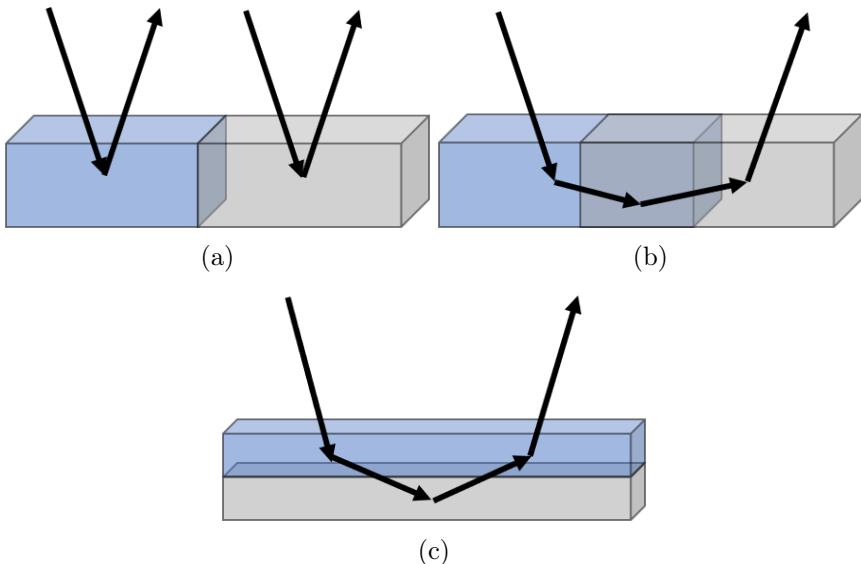


FIGURE 2.14 – Mélanges classiquement observés lors de l'étude des minéraux. (a) Mélange superficiel, le spectre résultant est une combinaison linéaire des spectres des composants (les photons n'interagissent qu'avec un seul type de surface). (b) Mélange intime, le spectre résultant est une combinaison non-linéaire des spectres des composants (les photons interagissent avec plusieurs types de surfaces). (c) Mélange de couches multiples, cas assez rare mais comparable au mélange intime.

profondeur de pénétration des photons dans la couche supérieure du mélange et des propriétés de réfraction de chaque couche traversée. Ce type de mélange est fréquent dans l'étude des roches présentant une altération de surface, nommée patine [Roy et al., 2009, Carmina, 2012].

A ce jour, l'essentiel des méthodes de démélange font l'hypothèse de mélanges de type superficiel plus faciles à modéliser et qui donnent, dans le cas d'observation à macro-échelle de surfaces planes, des résultats relativement satisfaisants, la contribution de mélange intime étant minoritaire dans le spectre de réflectance observé (voir [Bioucas-Dias et al., 2012] pour un synthèse des méthodes de démélange linéaire). Lorsqu'il s'agit d'observations à plus petite échelle comme dans le cas de mesures en laboratoire ou sur le terrain, les spectres de réflectance résultants contiennent alors une contribution de mélange intime non-linéaire des spectres des minéraux présents qui peut être plus ou moins importante. En particulier, les propriétés de diffusion du mélange changent (grains pour les mélanges intimes, etc.) en fonction de la quantité de chaque minéral ce qui peut impacter la forme du continuum et de certaines absorptions. De plus, les profondeurs de certaines absorptions varient de manière non-linéaire et de nouvelles absorptions peuvent se former en fonction des processus électroniques et vibrationnels des éléments constituant le mélange. Cependant, plusieurs absorptions, permettant l'identification et la caractérisation des minéraux, persistent généralement dans les mélanges [Pontual et al., 2010]. Ce sont ces absorptions que nous exploiterons au cours de ce travail de thèse.

2.3.4 Signatures spectrales des principaux minéraux

Les spectres de réflectance permettent d'identifier et de caractériser les minéraux associés. Ces études se basent sur les caractéristiques spectrales décrites précédemment (continuum et absorptions) et sur l'analyse de leurs variabilités.

Ainsi, le nombre d'absorptions et leurs positions dans le spectre permettent d'identifier le

minéral car elles sont associées à sa composition chimique (voir processus électroniques et vibrationnels, Sect. 2.3.1 et 2.3.2). Cependant, en raison des différentes sources de variabilité des spectres de réflectance de minéraux (Sect. 2.3.3), toutes les absorptions ne sont pas exploitables. Les absorptions sont donc classées, via des connaissances expertes, en deux catégories : diagnostiques et secondaires [Pontual et al., 2010]. Les absorptions diagnostiques permettent d'identifier la présence d'un minéral et sont généralement des absorptions principales. Elles persistent dans les mélanges. A l'inverse, les absorptions secondaires sont généralement peu profondes et tendent à disparaître dans les mélanges. Également, en fonction de la résolution spectrale du capteur et de son rapport signal sur bruit, elles peuvent ne pas être discernables.

Ensuite, les formes des absorptions (largeur, profondeur, asymétrie) sont utiles soit pour accroître la confiance sur l'identification du minéral soit pour caractériser certaines de ses propriétés physiques et chimiques.

Dans les domaines spectraux du VNIR et du SWIR, seuls certains minéraux sont identifiables via leurs absorptions principales et secondaires. Une liste de plusieurs minéraux d'intérêt et les positions de leurs absorptions diagnostiques et secondaires sont données Tab. 2.1. Également pour chaque minéral, un spectre de réflectance, mesuré en laboratoire sur un échantillon supposé "pur", est représenté en Fig. 2.15.

2.4 Imagerie hyperspectrale aérienne et satellitaire

L'imagerie hyperspectrale ou spectro-imagerie est une technologie de télédétection passive permettant l'observation de larges zones à la surface de la Terre. Elle consiste en l'enregistrement simultané dans un grand nombre de longueurs d'onde (généralement plus d'une centaine) de la lumière du Soleil réfléchie par la surface observée. Au cours des dernières décennies, de nombreuses évolutions technologiques ont permis le développement de capteurs permettant notamment de réaliser des analyses minéralogiques.

Plusieurs capteurs existent ou sont en cours de développement. On peut citer les capteurs aéroportés AVIRIS (*Airborne Visible-InfraRed Imaging Spectrometer*, [Vane, 1987, Green et al., 1998]), AVIRIS-NG (*Airborne Visible-InfraRed Imaging Spectrometer - Next Generation*, [Hamlin et al., 2011]) et ceux de la société HySpex (<https://www.hyspex.com>) ainsi que les capteurs satellitaires HYPERION [Pearlman et al., 2001], PRISMA (*PRecursor IperSpettrale della Missione Applicativa*, [Loizzo et al., 2018]) et EnMAP (*Environmental Monitoring and Analysis Program*, [Guanter et al., 2015]). La multiplication de ces capteurs implique l'acquisition d'un nombre toujours plus important d'images hyperspectrales. Des procédures de traitement non supervisées doivent donc être mises en place pour extraire de manière automatique l'information minéralogique présente dans les images. De plus, chaque capteur possède des caractéristiques différentes (résolution spectrale, résolution spatiale et rapport signal sur bruit (RSB)). Ces caractéristiques sont décrites Sect. 2.4.1.

Les images acquises par les capteurs hyperspectraux sont des images en luminance. Ainsi, pour permettre l'étude de la composition minéralogique des surfaces, il est nécessaire de définir la relation entre la luminance acquise par les capteurs et la réflectance de la surface observée. Pour cela, la physique du capteur est décrite en Sect. 2.4.2 et les effets de l'atmosphère sont présentés Sect. 2.4.3. Puis, des solutions permettant de réaliser une correction atmosphérique sont présentées Sect. 2.4.4. Enfin, la Sect. 2.4.5 discute des cas de mélanges entre des minéraux et d'autres matériaux, cas souvent rencontrés en pratique.

Minéral (Groupe)	Absorptions diagnostiques (nm)	Absorptions secondaires (nm)	Références
Alunite (Sulfate)	1760, 2165	2324	[Cloutis et al., 2006] [Pontual et al., 2010]
Buddingtonite (NH ₄ -Minéral)	2013, 2112	-	[Pontual et al., 2010] [Berg et al., 2016]
Calcite (Carbonate)	2342	2156	[Gaffey, 1986] [Cloutis et al., 2010] [Pontual et al., 2010]
Chlorite (Chlorite)	750, 928, 1130, 2248, 2340	-	[Pontual et al., 2010]
Dolomite (Carbonate)	2324	2140	[Gaffey, 1986] [Cloutis et al., 2010] [Pontual et al., 2010]
Gibbsite (Al-hydroxyde)	2268	2356	[Pontual et al., 2010]
Goethite (Fe-hydroxyde)	660, 960	500	[Bishop et al., 1993] [Crowley et al., 2003] [Pontual et al., 2010] [Bedini, 2011]
Gypse (Sulfate)	1750	1538, 2215	[Cloutis et al., 2006] [Pontual et al., 2010] [Bishop et al., 2014]
Hématite (Fe-oxyde)	875	660	[Bishop et al., 1993] [Crowley et al., 2003] [Pontual et al., 2010]
Illite (Mica)	2204, 2347, 2440	-	[Kruse and Hauff, 1991] [Pontual et al., 2010]
Jarosite (Sulphate)	435, 2206, 2269	952, 1849	[Crowley et al., 2003] [Cloutis et al., 2006] [Pontual et al., 2010] [Bedini, 2011]
Kaolinite (Phyllosilicate)	2162, 2206	2312, 2355, 2380	[Bishop et al., 2008] [Pontual et al., 2010] [Dalm et al., 2017]
Montmorillonite (Smectite)	2217	-	[Bishop et al., 1994] [Bishop et al., 2008] [Pontual et al., 2010]
Muscovite (Mica)	2204, 2342, 2435	-	[Pontual et al., 2010]
Nontronite (Smectite)	660, 960, 2283	2378	[Bishop et al., 2008] [Pontual et al., 2010] [Flahaut et al., 2017] [Dalm et al., 2017]
Talc (Mg-phyllosilicate)	2288, 2390	2075, 2135, 2175, 2466	[Pontual et al., 2010]

TABLE 2.1 – Minéraux d'intérêt étudiés. Les positions des absorptions diagnostiques et secondaires de chaque minéral sont indiquées.

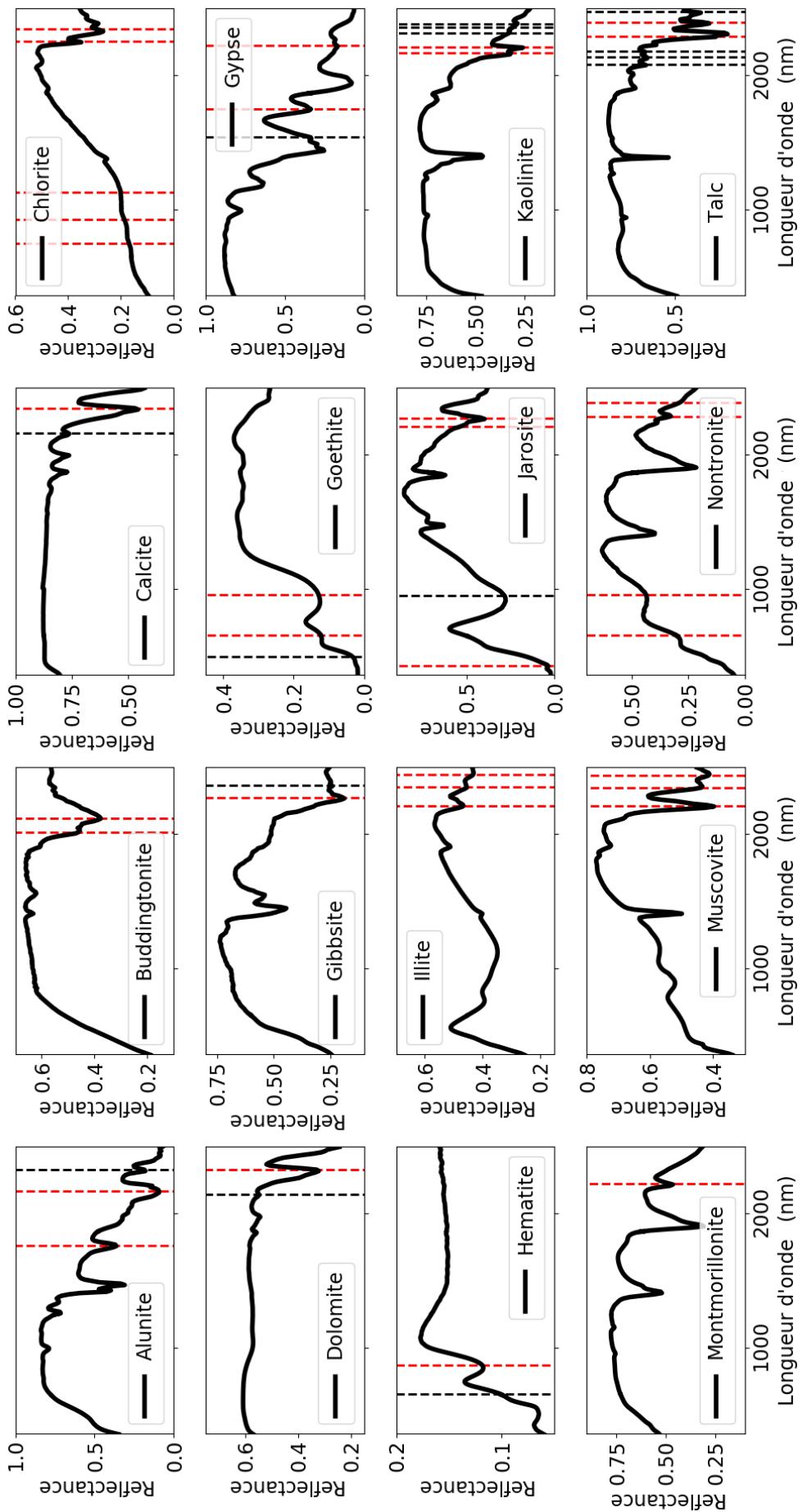


FIGURE 2.15 – Spectres de réflectance (issus de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017]) des minéraux étudiés au cours de la thèse. Les positions des absorptions diagnostiques sont indiquées par les lignes verticales rouges et celles des absorptions secondaires par les lignes verticales noires.

2.4.1 Caractéristiques des capteurs

Une image hyperspectrale se compose d'une pile d'images, chacune associée à une bande spectrale donnée. Ces bandes spectrales ainsi que leur nombre sont choisis de manière à couvrir l'ensemble des domaines spectraux du VNIR et du SWIR de manière contiguë. La résolution spectrale correspond à la largeur de chaque bande spectrale. De manière générale, la résolution spectrale des capteurs aériens et satellitaires est de l'ordre de quelques nanomètres, ce qui correspond à un nombre de bandes spectrales supérieur à 100. Les capteurs les plus récents comme AVIRIS-NG possèdent plus de 400 bandes spectrales, et donc une résolution spectrale d'environ 5 nm. Ainsi, un pixel d'une image hyperspectrale est associé à un spectre finement échantillonné, ce qui permet d'envisager des analyses spectrales. Dans le cadre de l'étude des minéraux, cette résolution est suffisante pour extraire les caractéristiques spectrales d'intérêt (absorptions et continuum).

Une image hyperspectrale aérienne ou satellitaire est acquise sur de larges zones, pouvant couvrir plusieurs dizaines voire centaines de km^2 en fonction de l'altitude du capteur, de ses caractéristiques instrumentales (champs de vue, etc.) et des conditions de la mesure (temps d'intégration, etc.). La taille du pixel dépend ainsi de l'altitude du capteur. De manière générale, la résolution spatiale (c.-à-d. la taille du pixel) est d'environ 5 m pour les capteurs aériens et 30 m pour les capteurs satellitaires. Cette relativement faible résolution s'explique par le fait que la luminance en entrée du capteur est fixe pour un temps d'exposition donné et qu'elle est divisée par le nombre de bandes spectrales du capteur. Un compromis est donc trouvé entre résolution spectrale et spatiale afin de disposer d'un RSB suffisant. Dans le cadre de l'étude de larges zones d'intérêt minéralogique, cette résolution implique la présence dans un pixel de mélanges spectraux entre des minéraux et d'autres matériaux et de mélanges spectraux entre minéraux. Ces mélanges sont discutés Sect. 2.4.5.

Le RSB est une caractéristique des capteurs qui quantifie le niveau de bruit dans l'image. Il varie en fonction des conditions d'éclairement, de la surface observée et de la longueur d'onde. Une description des principales sources de bruit ainsi qu'une présentation des modèles de bruit et des méthodes pour l'estimer à partir des images sont réalisées Chap. 3. Cette description du bruit pourra ensuite être prise en compte dans la méthode d'inversion proposée Chap. 4. On note cependant, que pour les capteurs hyperspectraux aériens et satellitaires, les RSB sont suffisamment élevés pour permettre l'observation de caractéristiques spectrales (absorptions) de faibles amplitudes et largeurs.

2.4.2 Principe d'acquisition

L'acquisition d'une image hyperspectrale nécessite d'enregistrer à la fois les informations spectrales et spatiales de la surface observée. Ainsi, quatre modes d'acquisition existent [Wu and Sun, 2013, Li et al., 2013, Adão et al., 2017] :

- le mode *whiskbroom* consiste à acquérir l'information spectrale d'un pixel puis de passer au suivant,
- le mode *pushbroom* consiste à acquérir l'information spectrale d'une ligne de pixels puis de passer à la suivante,
- le mode *scanning* consiste en l'acquisition indépendante de chaque bande spectrale,
- le mode *snapshot* consiste en l'acquisition simultanée de l'information spatiale et spectrale.

Ces quatre modes d'acquisition sont représentés en Fig. 2.16. Dans le cadre de l'imagerie hyperspectrale aérienne ou satellitaire, les modes *whiskbroom* et *pushbroom* sont généralement utilisés car ils permettent de balayer de larges zones à la surface de la Terre. Également, acquérir l'image

pixel par pixel ou par bande de pixels permet d'obtenir une plus grande quantité d'énergie et donc d'améliorer les performances des capteurs (résolution spectrale, résolution spatiale, RSB). Ainsi, le capteur AVIRIS utilise une technologie basée sur le mode *whiskbroom* alors que le capteur AVIRIS-NG [Chapman et al., 2019] et les capteurs spatiaux HYPERION, PRISMA et EnMAP utilisent une technologie *pushbroom*.

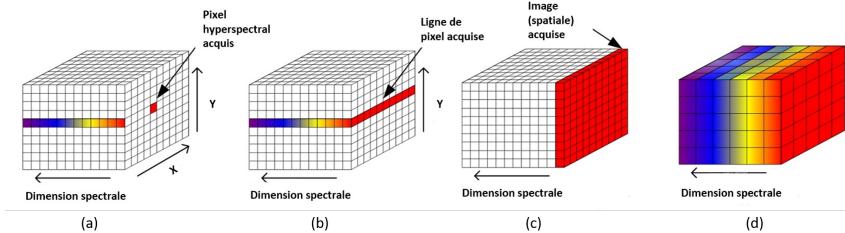


FIGURE 2.16 – Modes d'acquisition d'une image hyperspectrale [Li et al., 2013]. (a) *Whiskbroom*. (b) *Pushbroom*. (c) *Scanning*. (d) *Snapshot*.

Les schémas optiques des capteurs *whiskbroom* et *pushbroom* sont similaires et se composent de quatre étapes principales [Foi et al., 2008, Meola et al., 2011, Skauli, 2011, Skauli, 2017]. La Fig. 2.17 représente le schéma théorique d'un capteur *pushbroom*. La lumière en entrée du capteur est d'abord collectée, à l'aide d'un objectif, puis focalisée, via des fentes et des collimateurs vers un élément dispersif (un prisme ou une matrice dispersive) qui sépare la lumière en plusieurs longueurs d'onde. Un ensemble de photo-détecteurs, CCD [Schäfer et al., 2013] (*Charge Coupled Device*) ou CMOS [Guanter et al., 2015] (*Complementary Metal Oxide Semiconductor*), mesure ensuite le nombre de photons associés au flux lumineux. La sensibilité de ces photo-détecteurs dépend des matériaux qui les composent ainsi que de la longueur d'onde. Les photo-détecteurs sont donc rassemblés en fonction des plages de longueurs d'onde acquises. Par exemple, le capteur AVIRIS est composé de quatre spectromètres. Enfin, l'information du nombre de photons acquis par les photo-détecteurs est numérisée pour obtenir un spectre de luminance.

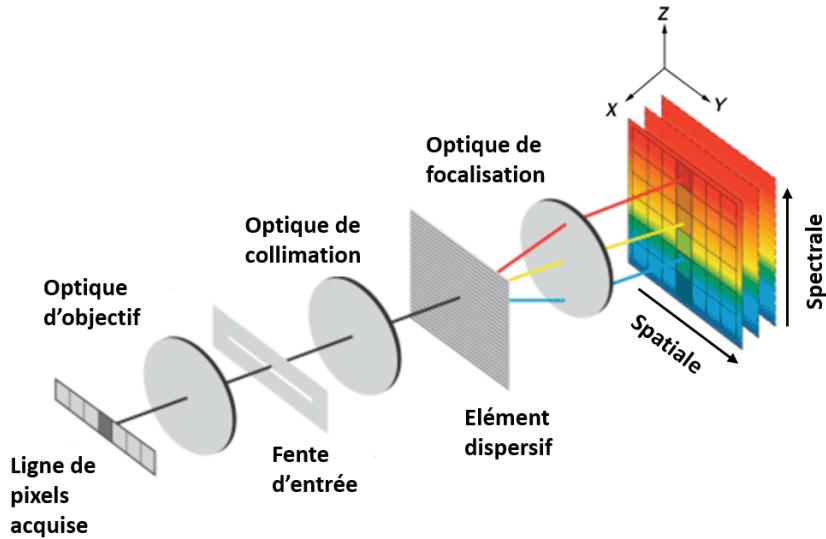


FIGURE 2.17 – Schéma optique d'un spectro-imageur *pushbroom* [Schäfer et al., 2013].

Les caractéristiques des capteurs sont associées à ce schéma optique. Ainsi, la résolution spectrale dépend de l'élément dispersif. Cet élément impose le nombre de bandes spectrales acquises ainsi que les longueurs d'onde associées. La décomposition spectrale n'étant pas parfaite, une gaussienne, définie par sa largeur à mi-hauteur, FWHM (*Full Width at Half Maximum*), est associée à chaque longueur d'onde. Elle représente la largeur de la bande spectrale acquise. La

résolution spatiale du capteur est quant à elle définie par le champs de vue, FOV (*Field Of View*), qui dépend des éléments optiques du système et de la taille des photo-détecteurs.

A partir de ce schéma optique, il est possible de lier le nombre de photons acquis par un photo-détecteur, noté N^{ph} , à la luminance en entrée du capteur, noté L^{inst} . La relation s'exprime, pour un pixel de l'image ayant les coordonnées (i, j) , à une longueur d'onde donnée λ_k , par :

$$N^{ph}(i, j, \lambda_k) = \frac{A \cdot \Omega \cdot \Delta_{\lambda_k} \cdot \lambda_k \cdot \eta(i, j, \lambda_k) \cdot t}{h \cdot c} \cdot L^{inst}(i, j, \lambda_k). \quad (2.5)$$

Cette relation tient compte des caractéristiques optiques (l'ouverture A , l'angle solide Ω), des caractéristiques spectrales (la FWHM, notée Δ_{λ_k}), de l'efficacité quantique des photo-détecteurs η ainsi que du temps d'exposition t . Ces grandeurs sont définies plus en détail dans la littérature [Foi et al., 2008, Meola et al., 2011, Skauli, 2011, Skauli, 2017]. Il est à noter que d'autres paramètres peuvent être intégrés à ce modèle comme par exemple un facteur de transmission optique τ_{opt} [Meola et al., 2011] si des pertes sont supposées dans la partie optique du système.

Enfin, la luminance en sortie du capteur, notée L^{num} , s'exprime par :

$$L^{num}(i, j, \lambda_k) = G \cdot N^{ph}(i, j, \lambda_k) \quad (2.6)$$

où G est le gain associé à l'étape de numérisation.

Le modèle décrit ici est sans bruit et chaque capteur possède sa propre technologie. La relation entre la luminance en entrée du capteur et celle en sortie du capteur est donc à adapter en fonction du capteur utilisé. Les sources de bruit ne sont pas décrites ici (voir Chap. 3).

2.4.3 Équation du transfert radiatif

La relation entre la luminance et la réflectance a déjà été décrite par l'équation (2.4). Cependant, dans le cadre de l'imagerie hyperspectrale aérienne ou satellitaire, les effets de l'atmosphère sont à prendre en compte. Ainsi, dans le cas idéal d'une surface homogène, plane et lambertienne (c.-à-d. quand la lumière est réfléchie avec la même intensité dans toutes les directions), il est possible de définir l'équation du transfert radiatif [Chandrasekhar, 1960] :

$$L^{inst}(\lambda_k) = L^{atm}(\lambda_k) + \frac{E^{sol}(\lambda_k)}{\pi} \cdot \frac{\rho(\lambda_k)}{1 - \rho(\lambda_k) \cdot S^{atm}(\lambda_k)} \cdot T^{atm}(\lambda_k) \quad (2.7)$$

avec L^{atm} , la luminance atmosphérique (c.-à-d. la diffusion propre à l'atmosphère), E^{sol} , l'éclairement solaire au niveau de la surface, T^{atm} , la transmission atmosphérique totale (directe et diffuse) et S^{atm} l'albédo sphérique de l'atmosphère.

Il est ainsi possible d'exprimer la réflectance du sol en fonction de la luminance en entrée du capteur :

$$\rho(\lambda_k) = \frac{\pi \cdot (L^{inst}(\lambda_k) - L^{atm}(\lambda_k))}{E^{sol}(\lambda_k) \cdot T^{atm}(\lambda_k) + S^{atm}(\lambda_k) \cdot (L^{inst}(\lambda_k) - L^{atm}(\lambda_k))}. \quad (2.8)$$

2.4.4 Masques spectraux et correction atmosphérique

L'équation eq. (2.7) décrit les effets de l'atmosphère. En pratique, le rayonnement électromagnétique traverse l'atmosphère à deux reprises : une première fois avant d'arriver à la surface et une seconde fois après avoir été réfléchi. Certains rayonnements en entrée du capteur sont directement diffusés par l'atmosphère sans avoir atteint la surface. Ainsi, les absorptions associées aux gaz composant l'atmosphère et aux aérosols potentiellement présents sont observables

dans les images en luminance en entrée du capteur. En particulier, les zones autour de 1400 et 1900 nm correspondent à des bandes d'absorption de la vapeur d'eau atmosphérique ce qui rend opaque l'atmosphère à ces longueurs d'onde. En conséquence, les zones autour de 1400 et 1900 nm ne sont pas observables dans les spectres de réflectance de minéraux issus de capteurs aériens et satellitaires. Ces zones sont nommées masques spectraux et seront grisées dans les figures du reste du manuscrit.

L'inversion de l'équation du transfert radiatif pour obtenir une image en réflectance nécessite la connaissance des propriétés de l'atmosphère ainsi que des conditions d'éclairage et de la surface. Ces paramètres ne sont pas tous connus et certains nécessitent d'être estimés. Ainsi, il existe plusieurs logiciels ayant pour objectif de réaliser la correction atmosphérique. On peut citer la méthode empirique QUAC (*QUick Atmospheric Corrections*) [Bernstein et al., 2005, Bernstein et al., 2005] ou les logiciels ATCOR-2/3 et ATCOR-4 [Richter and Schlapfer, 2012]. Ces deux derniers se basent sur le code de transfert radiatif MODTRAN® [Berk et al., 2005]. Les images satellitaires utilisées dans ce document ont été corrigées avec le logiciel ATCOR-2/3 et les images aéroportées avec le logiciel ATCOR-4.

2.4.5 Cas des mélanges de minéraux et avec d'autres matériaux

La résolution spatiale d'une image hyperspectrale est relativement faible. Ainsi, le spectre de réflectance d'un pixel correspond généralement à un mélange de plusieurs milieux (minéraux, végétation, eau, etc.). Le cas des mélanges entre minéraux a déjà été traité Sect. 2.3.3. L'identification des minéraux d'un mélange se base sur les absorptions diagnostiques et secondaires persistantes. Dans la suite de ce travail de thèse, l'approche proposée extrait les absorptions (voir Chap. 4) puis identifie les minéraux en tenant compte des possibles mélanges entre minéraux (voir Chap. 6).

Le cas de mélange avec d'autres matériaux est plus complexe à traiter. En effet, les absorptions diagnostiques et secondaires des minéraux peuvent être masquées et des absorptions associées à d'autres matériaux (végétation sèche, etc.) peuvent apparaître dans le spectre. La procédure proposée extrait alors toutes les absorptions sans distinction. L'identification du minéral est donc perturbée dans le cas où les absorptions sont masquées. Pour s'affranchir au mieux de ce problème seuls les pixels associés à des surfaces minérales (sols nus) sont étudiés dans la suite. Des indices spectraux comme ceux proposés dans la méthode HYSOMA [Chabriat et al., 2011] peuvent être utilisés pour ne conserver que les pixels de sol nu.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, la spectroscopie des minéraux et l'imagerie hyperspectrale ont été présentées. Ainsi, les spectres de réflectance de minéraux sont composés de caractéristiques spectrales (continuum et absorptions) permettant leur identification et leur caractérisation. En particulier, les positions des absorptions sont associées à la composition chimique du minéral. L'analyse de ces caractéristiques spectrales est envisageable à partir de spectres issus d'images aériennes et satellitaires. En effet, les capteurs évoluant régulièrement, leurs caractéristiques (résolution spatiale, résolution spectrale, RSB) ne cessent de s'améliorer.

L'objectif de cette thèse est de proposer une solution permettant d'extraire automatiquement ces caractéristiques spectrales des spectres de réflectance pour identifier puis caractériser les minéraux sur de larges zones d'intérêt à la surface de la Terre. Pour cela, il est nécessaire de décrire les spectres de réflectance à l'aide d'un modèle mathématique associant les caractéristiques

spectrales aux propriétés physiques et chimiques des minéraux. Également, les sources de bruit dues à l'instrument de mesure doivent être prises en compte.

Dans le chapitre suivant, un modèle mathématique décrivant les spectres de réflectance de minéraux comme la somme d'un continuum et d'absorptions est présenté et discuté. Il sera à la base de la méthode développée Chap. 4. Puis, les différentes sources de bruit associées à l'instrument de mesure sont décrites. Il en résulte un modèle permettant d'estimer le bruit instrumental dans les images hyperspectrales en réflectance. La connaissance du bruit est intégrée à la méthode développée ce qui permet d'améliorer la détection des faibles absorptions.

Chapitre 3

Modélisation d'un spectre de réflectance de minéral et prise en compte du bruit dans une image hyperspectrale

Sommaire

3.1	Introduction	43
3.2	Modélisation d'un spectre de réflectance de minéral	44
3.2.1	État de l'art des modèles	44
3.2.2	Modèle retenu	45
3.2.3	Identifiabilité et limites du modèle EGO	47
3.3	Modélisation du bruit dans une image hyperspectrale	48
3.3.1	Sources du bruit instrumental	48
3.3.2	Modèles de bruit sur la luminance	49
3.3.3	Modèles de bruit sur la réflectance	50
3.3.4	Méthodes d'estimation du bruit dans une image hyperspectrale	51
3.4	Conclusion	52

3.1 Introduction

Ce chapitre se divise en deux parties distinctes. D'une part, un modèle physique paramétrique décrivant les spectres de réflectance de minéraux sur les domaines du VNIR et du SWIR est présenté (Sect. 3.2). Ce modèle permet d'accéder aux caractéristiques spectrales d'intérêt (continuum et absorptions). Les paramètres de ce modèle peuvent ensuite être utilisés pour identifier et caractériser les minéraux. Une attention particulière est portée aux problèmes d'identifiabilité de ce modèle. D'autre part, les sources de bruit associées aux capteurs hyperspectraux sont décrites (Sect. 3.3). Il en résulte des modèles dont les paramètres peuvent être estimés par différentes méthodes.

3.2 Modélisation d'un spectre de réflectance de minéral

3.2.1 État de l'art des modèles

Un premier modèle consiste à ne décrire que les formes des absorptions à partir des spectres en réflectance. En effet, l'information associée aux absorptions est facilement exploitable et décrite dans la littérature contrairement à celle du continuum. Ainsi, le continuum est retiré en pré-traitement (par exemple via [Clark and Roush, 1984]) pour ne conserver que le spectre des absorptions. Les formes des absorptions peuvent alors être décrites à partir de paramètres simples que sont la position, l'amplitude, la largeur à mi-hauteur et l'asymétrie [Kruse et al., 1993, Hecker et al., 2019]. Ces paramètres sont représentés Fig. 3.1 pour un spectre de calcite.

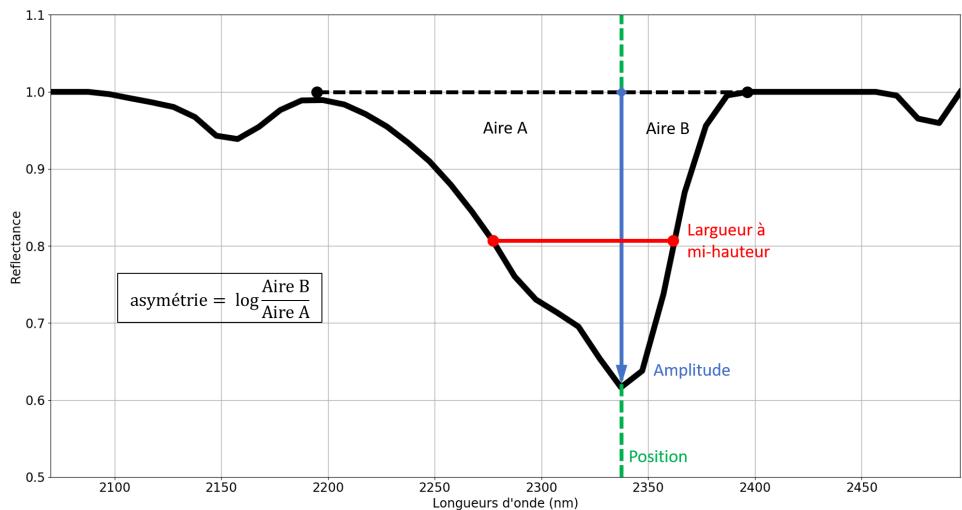


FIGURE 3.1 – Spectre des absorptions de calcite (continuum retiré [Clark and Roush, 1984]). Les paramètres décrivant l'absorption à 2340 nm sont illustrés.

Également, une méthode classiquement utilisée en spectroscopie pour déterminer la position des absorptions repose sur l'hypothèse d'un modèle de forme d'absorption gaussienne (ex : le programme GFIT (*Gaussian Fitting Program*) [Kaper et al., 1966, Farr et al., 1980, Clark, 1981, Gaffey, 1986] calcule la position, la largeur et la profondeur des absorptions à partir d'un modèle gaussien d'absorption).

Le modèle MGM (*Modified Gaussian Model*) [Sunshine et al., 1990, Gallie et al., 2008] est un modèle représentant les absorptions associées aux processus de transition électronique dans le VNIR par des gaussiennes, Eq. (3.1) (définies par leurs positions μ , amplitudes s et largeurs σ). Cependant, ce modèle s'applique au logarithme du spectre de réflectance.

$$G(\lambda, s, \mu, \sigma) = s \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(\lambda - \mu)^2}{\sigma^2} \right). \quad (3.1)$$

Le modèle d'absorption MGM [Sunshine et al., 1990] est couplé à une modélisation du continuum dans le VNIR. Ainsi, le modèle de continuum classiquement utilisé avec MGM s'exprime par :

$$c(\lambda, c_0, c_1) = c_0 + c_1 \lambda^{-1}. \quad (3.2)$$

Il en résulte le modèle suivant décrivant le logarithme d'un spectre de réflectance dans le VNIR

comme la somme d'un continuum et d'absorptions MGM :

$$\ln \rho(\lambda, \boldsymbol{\theta}_c, N, \boldsymbol{\theta}_G) = c(\lambda, \boldsymbol{\theta}_c) - \sum_{i=1}^N G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i}); \quad (3.3)$$

avec N le nombre d'absorptions, $\boldsymbol{\theta}_c = \{c_0, c_1\}$ les paramètres du continuum et $\boldsymbol{\theta}_{G_i} = \{s_i, \mu_i, \sigma_i\}$ les paramètres des absorptions.

Ce modèle (continuum et absorptions MGM) a été appliqué à divers spectres de minéraux et roches [Sunshine and Pieters, 1993, McFadden and Cline, 2005, Pinet et al., 2009]. Il est donc indépendant du site étudié et des conditions de mesures. Appliqué à une image, il traite les pixels (c.-à-d. les spectres) indépendamment les uns des autres et permet d'accéder à des paramètres utiles à l'identification et la caractérisation des minéraux. Plusieurs évolutions de ce modèle (continuum et absorptions MGM) ont été proposées pour traiter des cas plus variés (autres que les absorptions associées aux processus électroniques).

Ainsi, le modèle de continuum peut être adapté pour inclure plus de flexibilité dans la modélisation de la pente spectrale des sols lunaires [Hiroi et al., 2000]. La décroissance dans le VNIR peut également être modélisée par une gaussienne "classique" large et centrée avant 400 nm [Brossard et al., 2016, Marion and Carrère, 2018]. Dans le SWIR, la décroissance s'ajuste par un polynôme d'ordre 2 [Clénet et al., 2011] ou par une gaussienne classique large centrée autour de 2800 nm [Whiting et al., 2004, Brossard et al., 2016, Marion and Carrère, 2018].

Le modèle d'absorption MGM ne s'applique pas aux absorptions du SWIR causées par des phénomènes physiques différents (processus vibrationnels). Ces absorptions sont généralement plus étroites et potentiellement asymétriques. Le modèle d'absorption EGO (*Exponential Gaussian Optimization*) [Pompilio et al., 2009, Pompilio et al., 2010] a donc été proposé. Il décrit une absorption par une gaussienne modifiée qui tient compte d'un paramètre d'asymétrie k et d'un paramètre de saturation t , illustrés Fig. 3.2. A noter que le modèle EGO équivaut au modèle MGM lorsque les paramètres d'asymétrie k et de saturation t sont nuls. Plusieurs études [Makarewicz et al., 2009, Mulder et al., 2013, Brossard et al., 2016, Marion and Carrère, 2018] ont utilisé le modèle EGO et ont démontré son potentiel pour la déconvolution de spectre de réflectance de minéraux dans les domaines du VNIR et du SWIR. Le modèle EGO s'exprime par :

$$G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i}) = \frac{s_i}{1 - \exp\left(-\frac{t_i}{2}\right)} \left[1 - \exp\left(-\frac{t_i}{2} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(\lambda - \mu_i)^2}{(\sigma_i - k_i(\lambda - \mu_i))^2}\right)\right) \right], \quad (3.4)$$

avec s_i l'amplitude, μ_i la position, σ_i la largeur, k_i l'asymétrie et t_i la saturation de i ème la gaussienne. Ainsi, $\boldsymbol{\theta}_{G_i} = \{s_i, \mu_i, \sigma_i, k_i, t_i\}$ rassemble l'ensemble des paramètres de i ème la gaussienne. Il est à noter que l'amplitude est supposée strictement positive car le modèle s'applique au logarithme du spectre qui est strictement négatif.

3.2.2 Modèle retenu

Dans ce manuscrit, le modèle choisi décompose le logarithme d'un spectre de réflectance d'un minéral en un continuum et une somme d'absorptions. Il s'exprime par :

$$\ln \rho(\lambda, \boldsymbol{\theta}) = c(\lambda, \boldsymbol{\theta}_c) - \sum_{i=1}^N G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i}) + n(\lambda) \quad (3.5)$$

où λ sont les longueurs d'onde et n le bruit additif théorique associé à l'instrument de mesure. Plusieurs modèles de bruit sont discutés dans la suite (Sect. 3.3). On note $\boldsymbol{\theta}_c$ les paramètres

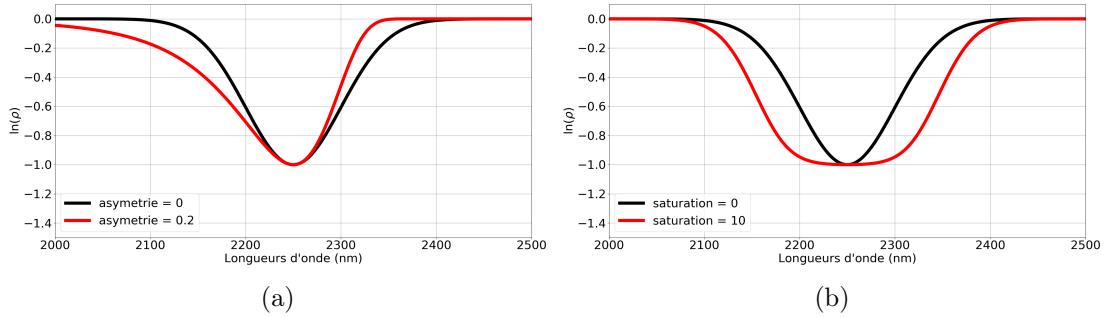


FIGURE 3.2 – Représentation de gaussiennes EGO synthétiques ($\mu = 2250$ nm, $\sigma = 50$ nm, $s = -1$). (a) Gaussiennes asymétriques pour des valeurs de k égales à 0 et 0,2 ($t = 0$). (b) Gaussiennes saturées pour des valeurs de t égales à 0 et 10 ($k = 0$).

associés au continuum et $\boldsymbol{\theta}_G = \{\boldsymbol{\theta}_{G_1}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{G_N}\}$ ceux associés aux N gaussiennes. Dans un but illustratif, la décomposition, avec ce modèle, de deux spectres de minéraux est présentée Fig. 3.3 (procédure détaillée Chap. 4). Sont représentés un spectre de goethite et un spectre de kaolinite ainsi que leurs continuums et absorptions estimées. Il est à noter que seules les absorptions permettant d'identifier le minéral sont tracées.

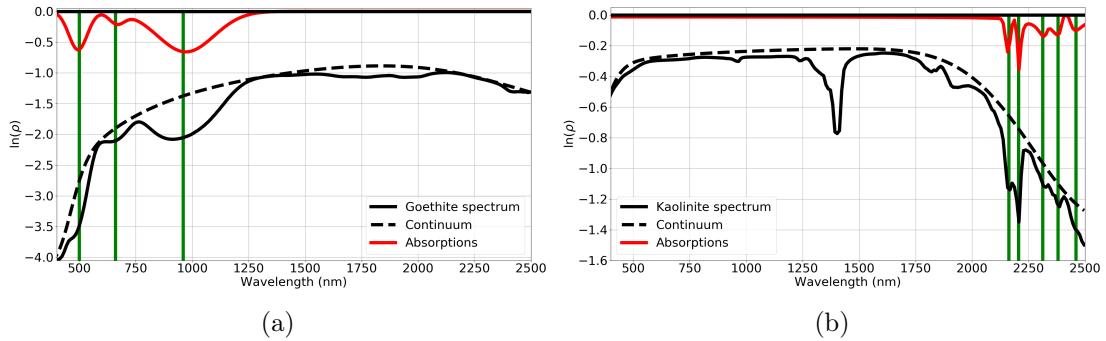


FIGURE 3.3 – Logarithme de spectres de reflectance de goethite (a) et kaolinite (b) issus de la base de données de l'USGS [Kokaly et al., 2017]. Les continuums estimés sont représentés en pointillés et les absorptions estimées en rouge. Les lignes vertes indiquent les positions théoriques des absorptions utiles à l'identification du minéral via son spectre.

Les absorptions sont modélisées par des gaussiennes EGO [Pompilio et al., 2009, Pompilio et al., 2010] pour permettre l'étude des absorptions sur les domaines du VNIR et du SWIR simultanément. En effet, le modèle EGO permet de décrire diverses formes d'absorptions souvent rencontrées dans le SWIR. Dans cette étude, le paramètre de saturation t est supposé nul pour réduire le nombre de paramètres et limiter les problèmes d'identifiabilité, décrits en détails dans la section suivante. Ainsi, à partir d'un développement limité de l'Eq. (3.4) et en supposant $t_i = 0$, le modèle EGO simplifié s'exprime par :

$$G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i}) = s_i \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(\lambda - \mu_i)^2}{(\sigma_i - k_i(\lambda - \mu_i))^2} \right) \quad (3.6)$$

avec s_i l'amplitude, μ_i la position, σ_i la largeur et k_i l'asymétrie de la i ème gaussienne. Ainsi, $\boldsymbol{\theta}_{G_i} = \{s_i, \mu_i, \sigma_i, k_i\}$ rassemble l'ensemble des paramètres de la i ème gaussienne. Il est à noter que l'amplitude est supposée strictement positive car le modèle s'applique au logarithme du spectre qui est strictement négatif.

Le continuum ajuste la forme générale du spectre. En particulier il prend en compte les décroissances sur les bords du spectre dues essentiellement à la présence de fer dans le VNIR

[Clark and Roush, 1984] (noté avec l'indice uv pour ultraviolet) et à des absorptions relatives à l'eau et à des liaisons OH [Whiting et al., 2004] situées à des longueurs d'onde supérieures à 2500 nm (noté avec l'indice eau). Ainsi, le continuum s'exprime par :

$$c(\lambda, \boldsymbol{\theta}_c) = -c_0 - c_1 \lambda^{-1} - G_{uv}(\lambda, s_{uv}, \mu_{uv}, \sigma_{uv}) - G_{eau}(\lambda, s_{eau}, \mu_{eau}, \sigma_{eau}). \quad (3.7)$$

D'une part, G_{uv} et G_{eau} sont des gaussiennes "classiques", Eq. (3.1) (c.-à-d. décrites par leurs positions μ_{uv} et μ_{eau} , leurs largeurs σ_{uv} et σ_{eau} et leurs amplitudes s_{uv} et s_{eau}). Elles ajustent respectivement les bords VNIR et SWIR du spectre et sont centrées à l'extérieur du domaine spectral d'étude (respectivement autour de 200 et 2800 nm). D'autre part, les paramètres de seuil c_0 et de pente c_1 modélisent les autres effets de forme du continuum. Ainsi, $\boldsymbol{\theta}_c = \{c_0, c_1, s_{uv}, \mu_{uv}, \sigma_{uv}, s_{eau}, \mu_{eau}, \sigma_{eau}\}$ rassemble l'ensemble des paramètres associés au continuum. Il est à noter que les paramètres c_0 , c_1 , s_{uv} et s_{eau} sont positifs ou nuls car le modèle s'applique au logarithme du spectre qui est strictement négatif.

En conclusion, les principaux éléments caractéristiques (continuum et absorptions) d'un spectre de reflectance de minéral sont représentés dans le modèle EGO et une interprétation minéralogique de leurs paramètres est possible. Cependant, plusieurs problèmes d'identifiabilité (lorsque plusieurs ensembles de paramètres ajustent avec une précision similaire un même spectre) existent. Ils sont décrits dans la suite.

3.2.3 Identifiabilité et limites du modèle EGO

Le modèle choisi est un modèle non-linéaire de $8+4N$ paramètres (8 paramètres pour le continuum et 4 paramètres par gaussienne EGO). Ainsi, un spectre de réflectance de minéral peut, dans certains cas, être ajusté de manière satisfaisante (ex : par rapport à l'erreur de reconstruction) pour plusieurs ensembles de paramètres $\boldsymbol{\theta}$. Dans la suite, ces problèmes d'identifiabilité sont décrits.

Tout d'abord, le continuum dépend de G_{uv} et de c_1 qui modélisent la décroissance sur le bord VNIR du spectre. Ces deux termes ajustant la même zone du spectre, il peut être compliqué de discerner leurs effets respectifs. Ainsi, pour des spectres bruités ou ayant des absorptions larges dans le VNIR, plusieurs ensembles de paramètres $\boldsymbol{\theta}_c$ peuvent conduire à des erreurs de reconstruction proches. Cette difficulté sera discutée sur différents cas applicatifs dans la suite du document.

Ensuite, la séparation du continuum et des absorptions est une tâche complexe. Par exemple, les amplitudes des absorptions dépendent à la fois du paramètre c_0 du continuum et du paramètre d'amplitude s des gaussiennes EGO. Cet exemple théorique n'a pas été observé directement dans les cas traités dans ce document. Cependant, un phénomène fréquemment observé est la sélection de fausses gaussiennes EGO larges et peu profondes compensant le continuum à certaines longueurs d'onde. Cette difficulté est prise en compte lors de la création du dictionnaire de la méthode de déconvolution (voir Chap. 4).

Le modèle choisi ici fait l'hypothèse qu'une unique gaussienne EGO est nécessaire à l'ajustement d'une absorption. En pratique, on constate que certaines absorptions peuvent être ajustées de manière satisfaisante (en termes d'erreur de reconstruction) par la somme de plusieurs gaussiennes EGO. Cela s'explique par la présence d'absorptions proches en position qui se superposent. Également, cette difficulté s'observe pour des spectres bruités. Il conviendra de tenir compte de ce point dans la procédure d'identification (voir Chap. 6).

Également, le paramètre de saturation t , défini dans le modèle EGO, peut entraîner des problèmes d'identifiabilité [Pompilio et al., 2009]. En effet, une gaussienne EGO saturée peut

être confondue avec la somme de deux gaussiennes EGO sans saturation. Ce paramètre n'a pas été retenu dans notre modèle. La suppression de ce paramètre de saturation permet également de diminuer le nombre de paramètres θ qui sera à estimer. Cela simplifie donc la procédure d'estimation et réduit le temps de calcul.

Enfin, le paramètre d'asymétrie k du modèle EGO peut entraîner des erreurs de modélisation. En particulier, pour des valeurs élevées de k , les gaussiennes EGO n'ajustent plus localement les absorptions mais également le reste du spectre, voir Fig. 3.4. Pour limiter ce phénomène des bornes sur le paramètre k sont fixées par l'expérimentateur. Ainsi k varie entre $-0,2$ et $0,2$ dans la suite du document.

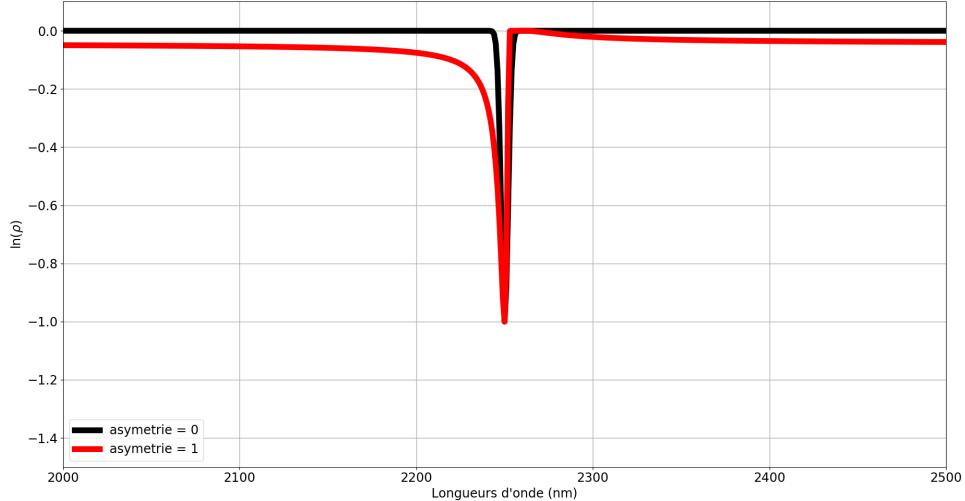


FIGURE 3.4 – Représentation de deux gaussiennes EGO synthétiques ($\mu = 2250$ nm, $\sigma = 2$ nm, $s = -1$). Les asymétries sont fixées à $k = 0$ et $k = 1$.

3.3 Modélisation du bruit dans une image hyperspectrale

3.3.1 Sources du bruit instrumental

Dans cette section, nous nous intéressons à la modélisation du bruit instrumental (c.-à-d. au bruit associé aux caractéristiques de l'instrument). Pour rappel, le principe d'acquisition de la luminance est décrit à la Sect. 2.4. Ainsi, la dépendance entre la luminance acquise par le capteur L^{num} et la luminance en entrée du capteur L^{inst} est linéaire et s'exprime par :

$$L^{num}(\lambda) = G\alpha(\lambda)L^{inst}(\lambda) \quad (3.8)$$

avec α une fonction dépendante des caractéristiques du capteur (optique, spectrale, photodéTECTeur, etc.) et G le paramètre de numérisation. Les caractéristiques à prendre en compte dans α diffèrent en fonction du capteur et des auteurs [Foi et al., 2008, Meola et al., 2011, Skauli, 2011, Skauli, 2017].

Trois principales sources de bruit sont classiquement prises en compte lors de l'acquisition de la luminance par un capteur [Meola et al., 2011, Skauli, 2011] :

- le courant d'obscurité (*dark current*) noté D_c ,
- le bruit de lecture (*readout noise*) noté R_n ,
- le bruit photonique (*shot noise*) noté Ph .

Le courant d'obscurité correspond à la création de charges électriques par agitation thermique. Il est modélisé ici par un bruit additif gaussien de moyenne μ_{Dc} et de variance σ_{Dc}^2 :

$$Dc \sim \mathcal{N}(\mu_{Dc}(\lambda), \sigma_{Dc}^2(\lambda)). \quad (3.9)$$

Ensuite, le bruit de lecture correspond à la variabilité totale du signal dans le transfert et l'amplification du signal photoélectrique. Il est modélisé ici par un bruit additif gaussien de moyenne nulle et de variance σ_{Rn}^2 :

$$Rn \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{Rn}^2(\lambda)). \quad (3.10)$$

Enfin, le bruit de photons est dû à la quantification de la lumière en photons. Ainsi, l'arrivée des photons sur le photo-détecteur est un processus aléatoire qui suit une distribution de Poisson. Généralement, ce bruit est négligeable par rapport au courant d'obscurité. Cependant, pour des capteurs récents, il est à prendre en compte (voir annexe). Le bruit photonique est donc un processus poissonien associé au nombre de photons N acquis par un photo-détecteur.

3.3.2 Modèles de bruit sur la luminance

En fonction des sources de bruit considérées, deux modèles de bruit sont envisagés. Ils supposent que la matrice de covariance du bruit, notée Σ , est diagonale c'est-à-dire que le bruit est indépendant entre chaque longueur d'onde λ . Le premier modèle considère que le bruit photonique est négligeable par rapport au courant d'obscurité. Ainsi, la variance du bruit $\sigma(\lambda)$ (la diagonale de Σ) correspond à un bruit additif gaussien. Le second modèle de bruit, où le bruit photonique est pris en compte, est défini comme étant signal dépendant, c'est-à-dire que $\sigma(\lambda)$ dépend de la luminance. Il est à noter que ces deux modèles s'appliquent sur la luminance et non sur la réflectance.

Le premier modèle est classiquement utilisé en imagerie hyperspectrale [Bioucas-Dias and Nascimento, 2008]. Il est signal indépendant, c'est-à-dire que la variance du bruit ne dépend pas du signal en entrée du capteur. Ainsi, la variance du bruit $\sigma_{L^{num}}$ s'exprime par

$$\sigma_{L^{num}}^2(\lambda) = \sigma_{Dc}^2(\lambda) + \sigma_{Rn}^2(\lambda). \quad (3.11)$$

L'annexe 9.1.1 décrit plus en détail ce modèle.

Le second modèle [Acito et al., 2011] prend en compte le bruit photonique. En effet, l'évolution des performances des capteurs hyperspectraux aériens et satellitaires ne permet plus de négliger ce terme [Foi et al., 2008, Meola et al., 2011]. Ainsi, il est possible de réécrire la variance du bruit $\sigma_{L^{num}}^2$ telle que :

$$\sigma_{L^{num}}^2(\lambda) = \gamma_{SD}(\lambda)L^{inst}(\lambda) + \gamma_{SI}(\lambda) \quad (3.12)$$

avec :

$$\begin{cases} \gamma_{SD}(\lambda) &= G\alpha(\lambda) \\ \gamma_{SI}(\lambda) &= \sigma_{Dc}^2(\lambda) + \sigma_{Rn}^2(\lambda) \end{cases} \quad (3.13)$$

On nomme dans la suite γ_{SD} le paramètre signal dépendant et γ_{SI} le paramètre signal indépendant. L'annexe 9.1.2 décrit plus en détail ce modèle.

Dans la suite du manuscrit, ces deux modèles de bruit peuvent être utilisés. En effet, les méthodes développées et présentées Chap. 4 ne font appel qu'à la matrice de covariance Σ qui doit être diagonale. Cependant, ces méthodes s'appliquent sur les spectres en réflectance et non en luminance. La section suivante discute ainsi des modèles de bruit sur la réflectance.

3.3.3 Modèles de bruit sur la réflectance

Dans cette étude, la grandeur utilisée pour l'étude des minéraux est la réflectance. Or les modèles de bruit présentés précédemment s'expriment sur des spectres en luminance. Ainsi, il est nécessaire de propager la variance du bruit de la luminance à la réflectance. Cette propagation se base sur l'équation du transfert radiatif présentée Sect. 2.4 et réécrite ci-dessous :

$$L^{inst}(\lambda) = L^{atm}(\lambda) + \frac{E^{sol}(\lambda)}{\pi} \cdot \frac{\rho(\lambda)}{1 - \rho(\lambda) \cdot S^{atm}(\lambda)} \cdot T^{atm}(\lambda). \quad (3.14)$$

Nous supposons ici un modèle de bruit signal dépendant, Eq. (3.13), mais un raisonnement similaire peut être appliqué au modèle de bruit signal indépendant. Également, nous supposons que le terme S^{atm} (l'albédo sphérique de l'atmosphère) est négligeable sur les domaines du VNIR et du SWIR (voir Annexe 9.2 pour une discussion de cette hypothèse).

A partir de l'équation du transfert radiatif et de la fonction de transfert du capteur, Sect. 2.4, il est possible de définir une fonction f reliant la réflectance ρ à la luminance acquise par le capteur L^{num} . Ainsi, en faisant l'hypothèse que le terme S^{atm} est négligeable dans l'équation du transfert radiatif, la fonction f est linéaire et s'exprime par :

$$\begin{aligned} \rho(\lambda) &= f(L^{num}(\lambda)) \\ &= \frac{\pi}{E^{sol}(\lambda)T^{atm}(\lambda)} \left(\frac{1}{G\alpha(\lambda)} L^{num}(\lambda) - L^{atm}(\lambda) \right). \end{aligned} \quad (3.15)$$

En utilisant la théorie de propagation analytique des erreurs [Bevington et al., 1993], il est possible d'écrire l'approximation suivante :

$$\sigma_{\rho}^2(\lambda) = \left(\frac{df(\lambda)}{dL^{num}(\lambda)} \right)^2 \sigma_{L^{num}}^2(\lambda) \quad (3.16)$$

avec σ_{ρ}^2 la variance du bruit sur la réflectance. L'Eq. 3.15 étant linéaire, on en déduit que $\sigma_{\rho}^2(\lambda) \propto \sigma_{L^{num}}^2(\lambda)$. Ainsi, à partir de l'équation du transfert radiatif reliant L^{inst} à ρ , il est possible d'écrire, pour le modèle signal dépendant (3.12) :

$$\sigma_{\rho}^2(\lambda) = \gamma'_{SD}(\lambda)\rho(\lambda) + \gamma'_{SI}(\lambda), \quad (3.17)$$

avec :

$$\begin{cases} \gamma'_{SD}(\lambda) &= \gamma_{SD}(\lambda) \frac{E^{sol}(\lambda)T^{atm}(\lambda)}{\pi} \\ \gamma'_{SI}(\lambda) &= \gamma_{SD}(\lambda)L^{atm}(\lambda) + \gamma_{SI}(\lambda). \end{cases} \quad (3.18)$$

Un raisonnement similaire (sans γ'_{SD}) peut être effectué sur le modèle signal indépendant (3.11). Ainsi, les deux modèles peuvent être utilisés pour modéliser le bruit dans des spectres de réflectance. On nomme dans la suite γ'_{SD} le paramètre signal dépendant et γ'_{SI} le paramètre signal indépendant.

En conclusion, ces modèles de bruit sur la réflectance correspondent à un facteur multiplicatif prêt aux modèles de bruit sur la luminance. Ainsi, la matrice de covariance du bruit exprimée sur la réflectance est diagonale. Également, les méthodes d'estimation du bruit pour les modèles en luminance peuvent s'appliquer directement aux données en réflectance. Dans la suite, un résumé des méthodes d'estimation du bruit est présenté. Il a pour objectif de donner un aperçu des méthodes d'estimation de σ_{ρ}^2 ainsi que des paramètres γ'_{SD} et γ'_{SI} pour le modèle de bruit signal dépendant.

3.3.4 Méthodes d'estimation du bruit dans une image hyperspectrale

Cette section a pour objectif de résumer quelques méthodes d'estimation du bruit dans les images hyperspectrales. Dans un premier temps, les méthodes d'estimation de σ_ρ^2 sont présentées. Puis, des méthodes permettant d'estimer les paramètres signal dépendant et signal indépendant du modèle de bruit signal dépendant sont détaillées. En pratique, nous utiliserons dans le Chap. 4 uniquement la méthode d'estimation de σ_ρ^2 . En effet, la procédure décrite dans ce chapitre fait appel à Σ et ne nécessite pas d'estimer γ'_{SD} et γ'_{SI} . Il est cependant envisageable d'estimer ces deux paramètres pour caractériser les sources de bruit.

Estimation de σ_ρ^2

Le modèle signal indépendant suppose un bruit additif gaussien de moyenne nulle. C'est un modèle classiquement utilisé et plusieurs procédures ont été développées pour l'estimer à partir d'une image hyperspectrale. Un état de l'art de ces méthodes est proposé par [Meola et al., 2011].

Tout d'abord, une première méthode [Green et al., 1998] estime la variance du bruit pour chaque bande spectrale en considérant des zones homogènes dans l'image. D'autres [Roger and Arnold, 1996] exploitent la décorrélation spectrale et spatiale dans les images hyperspectrales en estimant des coefficients de corrélation via une régression linéaire multiple. Les réalisations du bruit obtenues pour chaque bande spectrale sont alors soustraites du signal et la variance du bruit peut être calculée. Plusieurs approches similaires ont été proposées [Aiazzi et al., 2006, Gao et al., 2008] et nous choisissons d'utiliser dans la suite l'implémentation proposée par l'algorithme HySime (*Hyperspectral Subspace Identification by Minimum Error*) [Bioucas-Dias and Nascimento, 2008] qui donne de bons résultats [Terreaux, 2018].

HySime est un algorithme de réduction de dimensionnalité pour l'identification de sous-espaces dans des images hyperspectrales [Leon et al., 2019]. Pour cela, une solution permettant d'estimer le bruit dans une image hyperspectrale est proposée par Hysime. Dans un premier temps une régression linéaire de chaque bande spectrale sur toutes les autres bandes est effectuée. Ainsi, pour une image, un pixel à une bande spectrale donnée correspond à la combinaison linéaire des autres pixels à toutes les autres bandes spectrales [Drumetz, 2016]. La différence entre le signal observé et la régression ainsi obtenue correspond alors au bruit dont la matrice de covariance est supposée diagonale.

Estimation des paramètres signal dépendant et indépendant

Plusieurs méthodes sont proposées dans la littérature pour estimer les paramètres signal dépendant γ'_{SD} et indépendant γ'_{SI} . Un état de l'art de ces méthodes est proposé par [Bourennane et al., 2018]. Tout d'abord, ce problème d'estimation n'est pas spécifique à l'imagerie hyperspectrale. Ainsi, des solutions existent pour des images ne possédant qu'une seule bande spectrale [Foi et al., 2008]. Elles se basent sur l'estimation de σ_ρ^2 puis sur la définition d'un maximum de vraisemblance pour retrouver les paramètres. Cette approche en deux étapes a été adaptée aux images hyperspectrales [Alparone et al., 2009, Uss et al., 2011, Acito et al., 2011]. En particulier, la procédure proposée par [Acito et al., 2011] estime σ_ρ^2 via HySime puis définit un estimateur basé sur le maximum de vraisemblance. Les paramètres sont alors estimés à partir de valeurs initiales calculées par une méthode des moments.

3.4 Conclusion

Ce chapitre présente deux modèles associés à l'étude des minéraux par imagerie hyperspectrale. Le premier représente le logarithme du spectre de réflectance par la somme d'un continuum et de gaussiennes EGO. Ce modèle permet de décrire les diverses formes des absorptions dans le VNIR et le SWIR (larges, asymétriques, proches en positions, etc.). Cependant, plusieurs problèmes d'identifiabilité se posent. Ainsi, le modèle est simplifié par le retrait d'un paramètre (la saturation). Dans le Chap. 4, une procédure d'estimation des paramètres de ce modèle est proposée. Une validation sur de nombreuses données synthétiques et de laboratoire est également réalisée pour discuter des problèmes d'identifiabilité (voir Chap. 5). *In fine*, les paramètres estimés du modèle sont utilisés pour identifier et caractériser les minéraux.

La seconde partie de ce chapitre décrit le bruit instrumental associé à l'acquisition d'images hyperspectrales. Il suppose que la matrice de covariance du bruit Σ est diagonale. La variance du bruit peut alors être signal dépendante ou indépendante en fonction des sources de bruit considérées. Ces modèles peuvent être appliqués directement aux données en réflectance. Enfin, parmi les méthodes d'estimation du bruit de la littérature, la méthode HySime est utilisée pour notre étude.

Dans le Chap.4, une procédure d'estimation des paramètres du modèle retenu, Eq. (3.5), est présentée. Cette équation fait intervenir un terme de bruit $n(\lambda)$. La statistique de ce bruit a été modélisée dans ce chapitre via la matrice de covariance Σ . Ceci nous permet de définir une fonction de vraisemblance et d'estimer les paramètres à partir des données expérimentales au sens du maximum de vraisemblance.

Chapitre 4

Déconvolution d'un spectre de réflectance de minéral : procédure greedy-AGM

Sommaire

4.1	Introduction	53
4.2	État de l'art	54
4.2.1	Choix de la déconvolution spectrale	54
4.2.2	Approche AGM et méthodes associées	55
4.3	Procédure greedy-AGM	57
4.3.1	Principe de fonctionnement	57
4.3.2	Pré-estimation et retrait du continuum	58
4.3.3	Pré-estimation des absorptions	59
4.3.4	Optimisation conjointe du continuum et des absorptions	63
4.3.5	Paramétrisation de la procédure	63
4.4	Conclusion	65

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, une procédure de déconvolution de spectres de réflectance de minéraux est présentée. Elle est adaptée des travaux introduits à la conférence IGARSS 2020 [Rialland et al., 2020] et détaillés dans l'article soumis et récemment publié dans la revue IEEE JSTARS [Rialland et al., 2021b].

Cette procédure de déconvolution spectrale se base sur les modèles présentés et discutés Sect. 3.2. Pour rappel, un spectre de réflectance de minéral se décompose en un continuum et un nombre N d'absorptions. Ainsi, le logarithme d'un spectre de réflectance $\rho(\lambda)$ est modélisé par :

$$\ln \rho(\lambda, \boldsymbol{\theta}) = c(\lambda, \boldsymbol{\theta}_c) - \sum_{i=1}^N G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i}) + n(\lambda), \quad (4.1)$$

avec c le continuum, G les absorptions et n un bruit additif. Le modèle de continuum choisi ici s'exprime par :

$$c(\lambda, \boldsymbol{\theta}_c) = -c_0 - c_1 \lambda^{-1} - G_{uv}(\lambda, s_{uv}, \mu_{uv}, \sigma_{uv}) - G_{eau}(\lambda, s_{eau}, \mu_{eau}, \sigma_{eau}), \quad (4.2)$$

avec $\boldsymbol{\theta}_c = \{c_0, c_1, s_{uv}, \mu_{uv}, \sigma_{uv}, s_{eau}, \mu_{eau}, \sigma_{eau}\}$. Les gaussiennes G_{uv} et G_{eau} sont des gaussiennes "classiques". Les absorptions sont modélisées par des gaussiennes EGO :

$$G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i}) = s_i \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(\lambda - \mu_i)^2}{(\sigma_i - k_i(\lambda - \mu_i))^2} \right), \quad (4.3)$$

avec $\boldsymbol{\theta}_{G_i} = \{s_i, \mu_i, \sigma_i, k_i\}$. Ainsi, $\boldsymbol{\theta} = \{\boldsymbol{\theta}_c, N, \boldsymbol{\theta}_G\}$ regroupe l'ensemble des paramètres des modèles.

Comme détaillé Sect. 3.3, le bruit n est supposé gaussien de moyenne nulle et indépendant d'une bande spectrale à l'autre. Cependant, sa variance σ_λ^2 dépend de la longueur d'onde λ . On note $\boldsymbol{\Sigma}$ la matrice de covariance tel que $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_\lambda^2)$.

L'objectif de la procédure de déconvolution spectrale proposée dans ce chapitre est d'estimer automatiquement l'ensemble des paramètres $\boldsymbol{\theta}$. Elle doit être flexible pour pouvoir être appliquée à des minéraux présentant des caractéristiques spectrales diverses (absorptions variées). Également, elle doit tenir compte du bruit instrumental, qui est supposé connu (calculé à partir des caractéristiques du capteur ou estimé préalablement avec la méthode HySime [Bioucas-Dias and Nascimento, 2008]). Si $\boldsymbol{\Sigma}$ est inconnu, on prend $\boldsymbol{\Sigma} = \text{Id}$.

Dans la suite, le choix d'une approche de déconvolution spectrale est justifié vis-à-vis des différentes solutions permettant d'accéder à l'information spectrale contenue dans les spectres de réflectance. Un état de l'art des méthodes de déconvolution spectrale est également présenté (Sect. 4.2). Dans un second temps, la procédure proposée est présentée et chacun des algorithmes mis en place est décrit et discuté (Sect. 4.3). Une attention particulière est également portée à la paramétrisation algorithmique de la procédure dans le but de pouvoir l'appliquer sans connaissances *a priori* sur les minéraux étudiés.

4.2 État de l'art

4.2.1 Choix de la déconvolution spectrale

Dans la littérature, de nombreuses méthodes d'analyse sont proposées pour extraire tout ou partie de l'information contenue dans un spectre de réflectance donné. Ces approches peuvent être catégorisées en deux grands groupes : celles guidées par les données (*data-driven approaches*) et celles basées sur des connaissances (*knowledge-based approaches*) [Asadzadeh and de Souza Filho, 2016].

Les approches guidées par les données sont des méthodes n'utilisant pas de modèles physiques. Elles se basent généralement sur un large ensemble de données pour identifier et caractériser les minéraux. Parmi ces méthodes, les algorithmes de classification [Van der Meer, 2006] peuvent utiliser des librairies de spectres de réflectance telles que celles d'ASTER [Baldridge et al., 2009] ou de l'USGS [Kokaly et al., 2017]. Cependant, ces librairies ne possèdent qu'un faible nombre (généralement inférieur à 10) de spectres de réflectance par minéraux. Ainsi, la variabilité spectrale est difficilement prise en compte. Cette limitation se retrouve également pour les méthodes d'apprentissage qui nécessitent un grand nombre de données labellisées. Pour pallier cette difficulté, des techniques de réduction de dimensionnalité peuvent être appliquées préalablement aux méthodes de classification et d'apprentissage [Pompilio et al., 2014, Kodikara and McHenry, 2020] même si cela implique une perte d'information. Les méthodes de démélange (*unmixing*) sont également des approches guidées par les données. Elles ont pour objectif de retrouver, pour chaque spectre d'un ensemble de spectres, les composantes (*endmembers*) et leurs abondances [Bioucas-Dias et al., 2012]. Ces méthodes ne nécessitent pas de données d'apprentissage mais

sont limitées lorsqu'aucun spectre "pur" n'est présent dans les données. De plus, les méthodes classiques de démélange sont basées sur des modèles de mélanges linéaires et ne tiennent pas compte de la variabilité des spectres [Somers et al., 2011, Asadzadeh and de Souza Filho, 2016]. Ainsi, des méthodes utilisant des modèles de mélanges non-linéaires [Dobigeon et al., 2014] ou des modèles linéaires adaptés aux variabilités spectrales [Hong et al., 2019, Uezato et al., 2019] sont développées.

Les approches basées sur des connaissances utilisent des *a priori* sur l'information spectrale contenue dans un spectre de réflectance de minéral. En effet, la description des absorptions diagnostiques et secondaires dans la littérature [Adams, 1975, Hunt, 1977, Clark et al., 1990, Pontual et al., 2008] permet d'envisager l'identification et la caractérisation des minéraux sans utiliser des données d'apprentissage. De nombreuses approches ont été envisagées pour accéder à ces informations. Tout d'abord, des approches directes telles que les rapports entre bandes (*band ratio*), voir par exemple les références dans [Mustard and Sunshine, 1999], et les indices spectraux [Chabrillat et al., 2011] se basent sur les valeurs du spectre de réflectance à certaines longueurs d'onde. De nombreux rapports et indices peuvent être calculés en fonction du minéral et de la caractéristique spectrale étudiée. Ces méthodes sont donc complètement dépendantes des connaissances d'un expert et ne prennent pas en compte la totalité de l'information spectrale contenue dans le spectre. Pour mieux prendre en compte l'information associée aux absorptions, il est possible d'utiliser des modèles paramétriques [Sunshine et al., 1990, Pompilio et al., 2009, Hecker et al., 2019]. Les paramètres de ces modèles (position, amplitude et forme) sont alors utilisés comme "proxy" pour identifier et caractériser les minéraux [van der Meer et al., 2018]. Plusieurs algorithmes tels que Tetracorder [Clark et al., 2003] et EnGeoMAP [Mielke et al., 2016] utilisent ces modèles, couplés à différents rapports de bandes et indices de similarité, pour extraire la totalité de l'information contenue dans le spectre. Cependant, les paramètres de ces modèles peuvent être difficiles à estimer et le nombre d'absorptions est rarement connu.

Les procédures de déconvolution spectrales ont pour objectif de décomposer la totalité du spectre en la somme d'un continuum et d'absorptions. Ces méthodes permettent ainsi d'accéder à l'ensemble de l'information contenue dans les spectres de réflectance de minéraux. Elles se basent sur des modèles physiques et paramétriques tel que celui décrit Sect. 4.1. Dans la suite, un état de l'art des méthodes permettant d'estimer les paramètres de ces modèles est présenté.

4.2.2 Approche AGM et méthodes associées

Les procédures de déconvolution de spectres de réflectance de minéraux font face à plusieurs difficultés :

- le nombre inconnu d'absorptions dans un spectre,
- les formes variées des absorptions dans le VNIR et dans le SWIR,
- l'identifiabilité de certains modèles (ex : asymétrie des gaussiennes EGO, etc.),
- la prise en compte du bruit,
- la présence de masques spectraux pour les spectres issus d'images aériennes et satellitaires,
- le paramétrage algorithmique empirique.

Ainsi, plusieurs procédures ont été proposées au cours des années [Makarewicz et al., 2009, Clénet et al., 2011, Verpoorter et al., 2014, Brossard et al., 2016, McCraig et al., 2017, Hecker et al., 2019]. Elles se basent sur différents modèles mais respectent généralement l'architecture suivante :

1. retrait du continuum,
2. pré-estimation des paramètres associés aux absorptions,
3. ajustement des paramètres du continuum (si pré-estimé) et des absorptions.

Cette architecture en trois étapes, appliquée au modèle (4.1), a été nommée AGM (*Automatized Gaussian Model*) [Brossard et al., 2016, Marion and Carrère, 2018]. Diverses solutions algorithmiques ont alors été proposées pour rendre automatique l'estimation des paramètres θ .

L'information associée au continuum est plus difficilement exploitable que celle des absorptions. Ainsi, plusieurs procédures proposent de retirer le continuum du spectre sans en estimer les paramètres θ_c . Ces approches se basent généralement sur l'hypothèse d'un continuum convexe et utilisent une approche géométrique [Clark and Roush, 1984, Makarewicz et al., 2009]. Cette solution est facile à implémenter mais est très sensible au bruit. En effet, l'hypothèse convexe impose que le continuum soit strictement supérieur au spectre, ce qui crée des artéfacts (fausses absorptions) dans le spectre des absorptions. D'autre part, plusieurs modèles de continuum ont été proposés dans la littérature : des polynômes de second ordre [Clénet et al., 2011], des modèles physiques pour les bords VNIR [Clark and Roush, 1984] et SWIR [Whiting et al., 2004]. Cependant, ces modèles physiques sont non-linéaires et choisir des paramètres initiaux est complexe [Clénet et al., 2011, Pompilio et al., 2009, Brossard et al., 2016]. Une solution peut être de retirer préalablement le continuum avec une approche géométrique puis d'ajuster le modèle au continuum retiré [Brossard et al., 2016].

L'étape de pré-estimation des absorptions consiste à déterminer le nombre N d'absorptions dans le spectre et à pré-estimer leurs paramètres θ_G . Plusieurs solutions, utilisant des dérivées spectrales [Verpoorter et al., 2014, Brossard et al., 2016] ou des transformations par ondelettes continues [Du et al., 2006, Rivard et al., 2008], ont été proposées pour automatiquement déterminer le nombre d'absorptions et pré-estimer leurs positions. La première solution retrouve les minima locaux du spectre mais est sensible au bruit. Un filtre [Savitzky and Golay, 1964] peut être appliqué préalablement pour retirer le bruit du spectre au risque d'atténuer les absorptions de faibles amplitudes et largeurs. De manière générale, le nombre d'absorptions retrouvé par la méthode des dérivées spectrales est surestimé pour des spectres bruités. La seconde solution a pour objectif de séparer les absorptions du bruit avant d'en estimer le nombre. Cependant, des seuils, difficiles à régler, sont nécessaires et le nombre d'absorptions est souvent sous ou surestimé. Une fois le nombre d'absorptions estimé, les autres paramètres (amplitudes et formes) sont déduits du spectre [Guo, 2011, Hecker et al., 2019]. Il est à noter que le paramètre d'asymétrie n'est pas toujours pré-estimé à cette étape [Brossard et al., 2016].

L'étape d'ajustement a pour objectif d'estimer les paramètres θ_c et θ_G en résolvant un problème des moindres carrés non-linéaires (entre le modèle physique et le spectre). Les paramètres pré-estimés aux deux étapes précédentes sont ainsi utilisés comme valeurs initiales. Plusieurs algorithmes [Moré, 1978, Tarantola and Valette, 1982] peuvent être appliqués pour résoudre ce problème. Cependant, la présence de minima locaux est possible et le choix des valeurs initiales est cruciale. Il est à noter que le nombre d'absorptions n'est généralement pas ré-évalué à cette étape même si certaines procédures essaient de retirer les absorptions surestimées [Brossard et al., 2016].

Ainsi, les approches existantes souffrent de nombreuses limitations (sensibilité au bruit, création d'artéfact, paramétrage algorithmique empirique, nombre d'absorptions difficile à estimer) ce qui justifie le développement d'une méthode avancée de traitement du signal permettant d'estimer les paramètres du modèle EGO. Dans la suite, une procédure de déconvolution spectrale basée sur le modèle (4.1) est présentée. Cette procédure, nommée greedy-AGM, reprend l'architecture classique en trois étapes mais plusieurs évolutions algorithmiques sont proposées pour répondre aux difficultés rencontrées par les méthodes de l'état de l'art. Ainsi, les principales contributions de greedy-AGM, que nous allons détailler dans la suite, sont :

- l'approche de retrait du continuum,
- la réduction de la sensibilité au bruit par rapport à d'autres méthodes de la littérature,
- la limitation de la création d'artéfacts dans les cas bruités,

- l'estimation automatique du nombre d'absorptions,
- la paramétrisation algorithmique indépendante des minéraux étudiés.

4.3 Procédure greedy-AGM

4.3.1 Principe de fonctionnement

Dans cette section, la procédure greedy-AGM, mise en place au cours de la thèse, est présentée. Elle prend en entrée le spectre de réflectance d'un minéral $\rho(\lambda)$ et la matrice de covariance du bruit Σ associée. Dans le cas d'un signal non bruité ou d'une matrice de covariance inconnue, Σ est la matrice identité. Son objectif est d'estimer les paramètres θ du modèle (4.1). Comme les procédures classiques de déconvolution spectrale, elle se base sur une architecture en trois étapes, représentée Fig. 4.1.

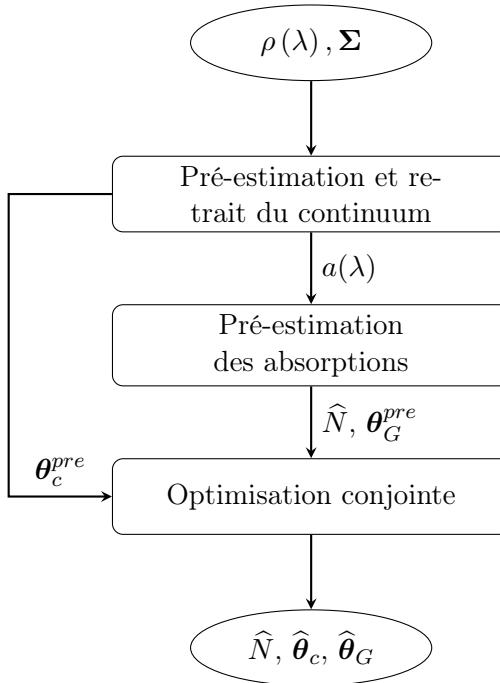


FIGURE 4.1 – Architecture de la procédure greedy-AGM proposée.

L'étape de pré-estimation des paramètres du continuum se base sur la résolution d'un problème des moindres carrés non-linéaires avec des valeurs initiales θ_c^{init} calculées préalablement. La méthode proposée tient compte de la statistique du bruit ainsi que de contraintes sur la forme du continuum. Le continuum ainsi pré-estimé est soustrait au logarithme du spectre pour en déduire le spectre des absorptions noté $a(\lambda)$:

$$a(\lambda) = c(\lambda, \theta_c^{pre}) - \ln \rho(\lambda). \quad (4.4)$$

Ainsi, d'après le modèle (4.1), ce spectre correspond idéalement à la somme de gaussiennes EGO G :

$$a(\lambda) = \sum_{i=1}^N G(\lambda, \theta_{G_i}). \quad (4.5)$$

L'étape de pré-estimation des absorptions détermine automatiquement le nombre N de gaussiennes EGO dans $a(\lambda)$ et les paramètres associés θ_G^{pre} . Pour cela, elle utilise un algorithme

glouton (d'où le nom de la procédure greedy-AGM) et un critère permettant de sélectionner automatiquement le nombre de gaussiennes EGO. Cette solution tient compte de la statistique du bruit et s'adapte aux nombreuses formes d'absorptions rencontrées dans les spectres de réflectance de minéraux.

Enfin, l'étape d'optimisation conjointe se base sur la résolution d'un problème des moindres carrés non-linéaires avec comme initialisation les valeurs pré-estimées des paramètres du continuum et des absorptions. Le nombre N d'absorptions n'est pas réévalué à cette étape. Il en résulte une estimation de l'ensemble des paramètres $\boldsymbol{\theta}$ tenant compte de la matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$.

Cette procédure ne nécessite pas de pré-traitement des spectres et peut être utilisée sans connaissance minéralogique *a priori*. Également, la prise en compte de la statistique du bruit n'est pas nécessaire mais améliore significativement les performances lors de la déconvolution de spectres bruités. Dans la suite, les trois étapes de la procédure greedy-AGM sont détaillées dans les Sect. 4.3.2, 4.3.3 et 4.3.4. Enfin, la Sect. 4.3.4 regroupe les réglages et paramétrisations nécessaires aux algorithmes utilisés.

Dans la suite, les vecteurs colonnes $\boldsymbol{\rho}$, \mathbf{c} et \mathbf{a} réfèrent respectivement aux spectres de réflectance, au continuum et au spectre des absorptions tel que $\boldsymbol{\rho} \in \mathbb{R}^{N_\lambda}$ contient les valeurs de $\rho(\lambda)$ pour chaque λ . N_λ est le nombre de longueurs d'onde.

4.3.2 Pré-estimation et retrait du continuum

La pré-estimation des paramètres $\boldsymbol{\theta}_c$ du continuum est réalisée par la résolution du problème des moindres carrés non-linéaires suivant :

$$\boldsymbol{\theta}_c^{pre} = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}_c} \|\boldsymbol{\Sigma}^{-\frac{1}{2}}(\ln \boldsymbol{\rho} - \mathbf{c}(\boldsymbol{\theta}_c))\|^2 \text{ s.c. } \begin{cases} \mathbf{c}(\boldsymbol{\theta}_c) - \ln \boldsymbol{\rho} \geq \alpha \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\theta}_c^{min} \leq \boldsymbol{\theta}_c \leq \boldsymbol{\theta}_c^{max} \end{cases} \quad (4.6)$$

Cette formulation permet de minimiser l'erreur résiduelle entre le logarithme du spectre et le continuum pour chaque λ en tenant compte de la matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$.

Pour assurer la forme du continuum par rapport au spectre (voir Fig. 3.3 pour des spectres de goethite et de kaolinite), plusieurs contraintes sont définies. D'une part, l'expression $\mathbf{c}(\boldsymbol{\theta}_c) - \ln \boldsymbol{\rho} \geq \alpha \boldsymbol{\sigma}$ rassemble N_λ contraintes, une par longueur d'onde. Ces contraintes imposent que la courbe du continuum soit située au-dessus du logarithme du spectre de réflectance pour chaque λ . Pour des cas non bruités, le coefficient α est fixé à 0 et impose que le continuum soit strictement supérieur au spectre. A l'inverse pour des cas bruités, α permet une tolérance, fonction de l'écart-type du bruit $\boldsymbol{\sigma}$. Le continuum sera ainsi au-dessus du spectre moins $\alpha \boldsymbol{\sigma}$. D'autre part, des bornes sur $\boldsymbol{\theta}_c$, notées $\boldsymbol{\theta}_c^{min}$ et $\boldsymbol{\theta}_c^{max}$, sont imposées. Elles sont peu contraignantes sur les valeurs de $\boldsymbol{\theta}_c^{pre}$ mais assurent des résultats cohérents avec une interprétation minéralogique. Par exemple, elles assurent que les paramètres c_0 , c_1 , s_{uv} et s_{eau} soient positifs. Ces bornes ainsi que la valeur du coefficient α sont définis en Sect. 4.3.5.

D'autres contraintes peuvent également être utilisées pour imposer des formes de continuum spécifiques (ex. contrainte de concavité). Cependant, de telles contraintes ne sont pas adaptées pour l'étude d'une large variété de minéraux dont la forme du continuum varie en fonction de ses propriétés de diffusion.

Pour résoudre le problème des moindres carrés non-linéaires sous contraintes, Eq. (4.6), l'algorithme COBYLA (*Constrained Optimization BY Linear Approximation*) [Powell, 1998] est utilisé. Cependant, la solution $\boldsymbol{\theta}_c^{pre}$ est un minimum local qui dépend du choix des valeurs ini-

tiales, notées θ_c^{init} . Une stratégie automatique, permettant de calculer des valeurs cohérentes de θ_c^{init} , est illustrée Fig. 4.2 pour un spectre de goethite et détaillée ci-dessous.

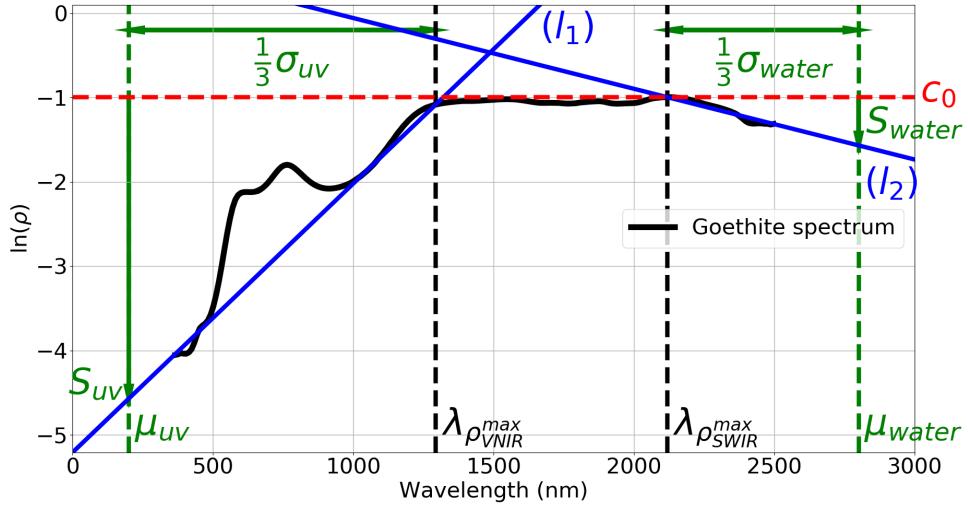


FIGURE 4.2 – Calcul des paramètres initiaux du continuum θ_c^{init} pour le logarithme d'un spectre de réflectance de goethite (noir) issu de la base de données USGS [Kokaly et al., 2017] (échantillon `splib07b_Goethite_GDS134_ASDFRb_AREF`). Les lignes l_1 et l_2 sont tracées en bleu et le maximum du spectre c_0 en rouge pointillé. Les longueurs d'onde $\lambda_{\rho_{VNIR}^{max}}$ et $\lambda_{\rho_{SWIR}^{max}}$ associées aux maxima du spectre dans le VNIR et le SWIR sont représentées en pointillé noir. Les paramètres de G_{uv} et G_{eau} sont en vert.

Tout d'abord, c_0 est fixé à la valeur maximale de $\ln \rho$ et c_1 à 0 [Brossard et al., 2016]. Ensuite, les paramètres de G_{uv} et G_{eau} sont fixés de manière similaire pour respectivement les domaines spectraux du VNIR et du SWIR. Leurs positions sont fixées à des valeurs prédéfinies, à savoir $\mu_{uv} = 200$ nm et $\mu_{eau} = 2800$ nm [Whiting et al., 2004]. Les droites l_1 et l_2 permettent quant à elles de calculer les valeurs de largeur et d'amplitude de G_{uv} et G_{eau} . La droite l_1 est ainsi tracée entre la valeur du spectre à la longueur d'onde minimale et celle au maximum dans le VNIR, notée $\lambda_{\rho_{VNIR}^{max}}$. De manière similaire, la droite l_2 est tracée entre la valeur maximale du spectre dans le SWIR et la valeur du spectre à la longueur d'onde maximale. Les amplitudes s_{uv} et s_{eau} sont alors fixées aux valeurs de l_1 et l_2 pour respectivement $\mu_{uv} = 200$ nm et $\mu_{eau} = 2800$ nm après avoir retiré c_0 . Enfin, les largeurs σ_{uv} et σ_{eau} sont calculées comme illustré Fig. 4.2.

Cette stratégie pour calculer des valeurs initiales de θ_c s'adapte aux différentes formes de continuum rencontrées car G_{uv} et G_{eau} influencent seulement leurs domaines spectraux respectifs (le VNIR pour G_{uv} et le SWIR pour G_{eau}). Elle est sensible au bruit mais permet d'obtenir des valeurs cohérentes pour une initialisation du problème (4.6).

4.3.3 Pré-estimation des absorptions

Une fois le continuum pré-estimé, l'équation (4.4) permet d'accéder au spectre des absorptions $a(\lambda)$. Puis, à partir du modèle des absorptions EGO (4.3) il est possible d'écrire :

$$a(\lambda) = \sum_{i=1}^N G(\lambda, \theta_{G_i}) - n(\lambda) + e(\lambda) \quad (4.7)$$

où $e(\lambda)$ correspond à l'erreur d'estimation lors de l'étape de pré-estimation du continuum.

Ainsi, la pré-estimation des absorptions consiste en la décomposition de $a(\lambda)$ en une somme de gaussiennes EGO dont les amplitudes sont positives.

Estimation des paramètres des gaussiennes EGO

Dans le but d'estimer les paramètres des gaussiennes EGO, il est possible d'écrire le problème de minimisation suivant à partir de l'équation (4.7) :

$$\boldsymbol{\theta}_G^{pre} = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}_G} \left\| \boldsymbol{\Sigma}^{-\frac{1}{2}} \left(\mathbf{a} - \sum_{i=1}^N G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i}) \right) \right\|^2. \quad (4.8)$$

Ce problème se base sur la minimisation de l'erreur résiduelle entre le spectre des absorptions \mathbf{a} et la somme de N gaussiennes EGO pour chaque λ en tenant compte de la matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$. Cependant, l'Eq. (4.8) est un problème de moindres carrés non-linéaires en raison de la dépendance non-linéaire de $G(\lambda, \boldsymbol{\theta}_{G_i})$ en fonction de $\boldsymbol{\theta}_{G_i}$. Ainsi, en grande dimension (c.-à-d. quand le nombre de gaussiennes N est grand) le problème est compliqué à optimiser il est possiblement multimodale (c.-à-d. qu'il peut exister de nombreux minima locaux).

Afin de proposer une mise en œuvre efficace de (4.8), on propose de reformuler ce problème en le problème équivalent suivant :

$$\min_{\mathbf{s}} \|\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{a} - \mathbf{Gs})\|^2 \quad \text{s.c.} \quad \begin{cases} \mathbf{s} \geq \mathbf{0} \\ \|\mathbf{s}\|_0 \leq N \end{cases} \quad (4.9)$$

où $\|\mathbf{s}\|_0$ compte le nombre d'éléments non-nuls dans le vecteur \mathbf{s} et N est le nombre d'absorptions dans le spectre de réflectance du minéral. La matrice $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times N_{atom}}$ est un dictionnaire de très grande taille contenant les possibles caractéristiques spectrales (ici les absorptions) du spectre. Ainsi, chaque colonne de \mathbf{G} correspond à une gaussienne EGO spécifique (nommée atome) dont les paramètres de forme (μ, σ, k) sont prédéfinis sur une grille de valeurs possibles et dont l'amplitude vaut 1 ($s = 1$). Ainsi, le modèle d'une gaussienne EGO, Eq. (4.3) s'écrit $s_i \mathbf{g}_i$ où \mathbf{g}_i correspond à la i -ème colonne de \mathbf{G} . La somme des gaussiennes EGO dans l'Eq. (4.8) s'écrit alors \mathbf{Gs} où $\mathbf{s} \in \mathbb{R}_+^{N_{atom}}$ sont les amplitudes non-négatives.

Le problème (4.9) correspond ainsi à un problème de programmation linéaire sous contraintes ayant pour objectif d'estimer le vecteur \mathbf{s} . La non-linéarité du problème (4.8) est transférée sur $\|\mathbf{s}\|_0$. (4.9) est un problème de nature essentiellement combinatoire. En effet, la difficulté du problème est de trouver le support de \mathbf{s} , c'est à dire d'identifier les N coefficients s_i non nuls. Résoudre (4.9) de façon optimale nécessiterait une recherche exhaustive, où tous les N -uplets seraient testés, et l'erreur quadratique associée serait calculée. Cette recherche exhaustive induit un temps de calcul explosif car il s'agit d'explorer tous les N -uplets parmi N atomes. Nous proposons de résoudre le problème (4.9) de façon sous-optimale, via les algorithmes gloutons rapides et empiriquement performants.

Approche parcimonieuse

La problème (4.9) peut être traité par une approche parcimonieuse. En effet, il consiste à chercher parmi les atomes du dictionnaire \mathbf{G} ceux ajustant le spectre des absorptions. Ainsi, le nombre d'éléments non-nul du vecteur \mathbf{s} est faible (idéalement une gaussienne EGO par absorption). La principale difficulté réside alors dans l'estimation du nombre N de gaussiennes EGO qui est supposé connu dans l'Eq. (4.9).

Les algorithmes gloutons sont particulièrement bien adaptés à ce genre de problème car ils permettent d'obtenir, de manière itérative, une solution pour N allant de 1 à N_{max} . Ainsi, N correspond à l'itération courante de l'algorithme et N_{max} au nombre total d'itérations. A noter que le résultat de la déconvolution à l'itération N est utilisé comme initialisation de la

Algorithme 1 Résolution du problème (4.9) pour $N = 1, \dots, N_{max}$. Le support S rassemble les indices des éléments non nuls de \mathbf{s} . \mathbf{g}_i correspond à la i -ème colonne de \mathbf{G} . \mathbf{G}_S correspond à la sous-matrice rassemblant les colonnes de \mathbf{G} indexées par S .

Entrées : $\mathbf{a}, \Sigma, \mathbf{G}, N_{max}$

Sorties : $\mathbf{s}^N, \mathbf{r}^N$ pour tout N

$\mathbf{r} \leftarrow \Sigma^{-1/2} \mathbf{a}$	1
$\mathbf{s} \leftarrow \mathbf{0}$	2
$S \leftarrow \emptyset$	3
Pour $N = 1$ à N_{max} :	
$\ell \leftarrow \arg \max_i \{ \langle \Sigma^{-1/2} \mathbf{r}, \mathbf{g}_i \rangle / \ \Sigma^{-1/2} \mathbf{g}_i\ , i \notin S \}$	5
$S \leftarrow S \cup \{\ell\}$	6
$\mathbf{s}(S) \leftarrow \arg \min_{\mathbf{z}} \{ \ \Sigma^{-1/2}(\mathbf{a} - \mathbf{G}_S \mathbf{z})\ ^2, \mathbf{z} \geq \mathbf{0} \}$	7
$\mathbf{s}^N \leftarrow \mathbf{s}$	8
$\mathbf{r}^N \leftarrow \Sigma^{-1/2}(\mathbf{a} - \mathbf{G} \mathbf{s}^N)$	9

déconvolution à l'itération $N + 1$. Un critère de sélection d'ordre est alors appliqué pour choisir un résultat de déconvolution parmi les N calculés. Ainsi, le nombre de gaussiennes est estimé automatiquement.

NNOMP, un algorithme glouton

L'algorithme NNOMP (*Non-Negative Orthogonal Matching Pursuit*) est une heuristique glouton adaptée à la résolution de problèmes d'approximation parcimonieuse de type (4.9) pour des valeurs consécutives de N allant de 1 à N_{max} [Bruckstein et al., 2008, Nguyen et al., 2019]. Plusieurs autres heuristiques peuvent être utilisées [Souussen et al., 2015] mais NNOMP est facilement implémentable et son exécution est rapide [Nguyen et al., 2019].

Le principe de fonctionnement de NNOMP est synthétisé dans l'algorithme 1 dans le cas où la matrice de covariance Σ intervient. Ainsi, NNOMP sélectionne itérativement les atomes dans \mathbf{G} dans le but de réduire l'erreur d'approximation $\|\mathbf{a} - \mathbf{G}\mathbf{s}\|$. Initialement aucun atome n'est sélectionné donc $\mathbf{s} = \mathbf{0}$. A chaque itération, un nouvel atome, d'indice ℓ , de \mathbf{G} est ajouté au support S rassemblant les atomes sélectionnés aux itérations précédentes. La règle de sélection de ℓ , définie ligne 5 de l'algorithme 1, cherche l'atome pour lequel le produit scalaire, noté $\langle \dots \rangle$, entre le spectre et l'atome est maximal. Puis, les amplitudes de tous les atomes du support S sont ajustées via la résolution d'un problème des moindres carrés linéaires positifs [Nguyen et al., 2019], ligne 7 de l'algorithme 1. Enfin, le résidu $\mathbf{r} = \Sigma^{-1/2}(\mathbf{a} - \mathbf{G}\mathbf{s})$ est mis à jour.

La règle de sélection des atomes dans NNOMP, ligne 5 de l'algorithme 1, a pour objectif de faire décroître le plus possible la norme du résidu \mathbf{r} . Ainsi, dans les cas avec peu de recouvrement entre absorptions, les absorptions principales des spectres de réflectance des minéraux sont retrouvées aux premières itérations et les plus petites (en amplitude et largeur) dans un second temps.

Sélection de l'ordre du modèle

L'algorithme NNOMP étant itératif, un critère d'arrêt est utilisé. Ce critère se base sur une règle de sélection d'ordre du modèle dont l'objectif est de sélectionner automatiquement une solution parmi les sorties \mathbf{s}^N de l'algorithme NNOMP, avec N allant de 1 à N_{max} .

Plusieurs critères de sélection d'ordre peuvent être utilisés comme le critère AIC (*Akaike Information Criterion*) [Akaike, 1974] ou le critère MDL (*Minimum Description Length*) [Rissanen, 1978]. En pratique, ces critères surestiment l'ordre du modèle car ils sont basés sur une analyse asymptotique de la théorie de l'information, où le nombre d'observations doit tendre vers l'infini [Stoica and Selén, 2004]. Cependant, le critère MDL est facilement adaptable aux algorithmes gloutons [Souussen et al., 2015]. De plus, il peut être appliqué à des études où le nombre de paramètres est relativement faible par rapport à la taille du signal observé [De Ridder et al., 2005]. C'est le cas ici où le nombre d'absorptions dans un spectre (en pratique pas plus de 10) est relativement faible par rapport au nombre de longueurs d'onde (ex : 224 pour le capteur AVIRIS). Enfin, une version corrigée du critère MDL, notée MDLc, peut être appliquée dans le cas où la statistique du bruit est inconnue [De Ridder et al., 2005].

Classiquement, le critère MDLc est appliqué pour un nombre fixé de sorties s^N trouvées par NNOMP (c.-à-d lorsque N_{max} est fixé). Il consiste alors à résoudre le problème de minimisation suivant :

$$\hat{N} = \arg \min_N \left(\ln \|\mathbf{r}^N\| + \frac{\ln N_\lambda (N+1)}{N_\lambda - N - 2} \right) \quad (4.10)$$

où \mathbf{r}^N correspond au résidu de NNOMP (voir Algo. 1) à l'itération N et N_λ au nombre de longueurs d'onde du spectre. Ainsi, le nombre d'absorptions estimé \hat{N} correspond à l'itération N pour laquelle $\ln \|\mathbf{r}^N\| + \frac{\ln N_\lambda (N+1)}{N_\lambda - N - 2}$ est minimale. Cette solution impose à un utilisateur de fixer N_{max} et donc le nombre d'itérations effectuées par NNOMP.

Pour retirer ce paramètre et estimer automatiquement le nombre de gaussiennes, le critère MDL est calculé à chaque itération. Ainsi, l'algorithme NNOMP ajoute des gaussiennes EGO tant que le critère MDLc décroît et s'arrête lorsque le critère MDLc croît. Le premier minimum rencontré correspond donc à \hat{N} . Avec cette solution, le nombre d'itérations est inférieur ou égal à N_{max} ce qui améliore le temps de calcul. Il est à noter qu'un nombre maximal d'itérations peut toujours être fixé pour assurer la convergence de la méthode.

Création du dictionnaire et pré-estimation de θ_G

Le dictionnaire \mathbf{G} regroupe les gaussiennes EGO calculées pour de nombreux ensembles de positions (μ), de largeurs (σ) et d'asymétries (k). Pour cela, chaque paramètre EGO est discrétilisé suivant une grille pré-définie dont la taille est arbitraire. Ainsi, une colonne du dictionnaire correspond à une unique gaussienne EGO, nommée atome. A noter que des grilles étroites impliquent une meilleure précision (plus de gaussiennes EGO dans le dictionnaire) au détriment d'une augmentation de la mémoire de stockage nécessaire, d'un temps de calcul plus élevé et de possibles problèmes numériques. Les grilles utilisées pour la validation et l'application de la procédure greedy-AGM sont présentées en Sect. 4.3.5.

En sortie de l'algorithme NNOMP sont estimés : le nombre N d'atomes sélectionnés, les indices des colonnes \mathbf{g}_i sélectionnées dans le dictionnaire \mathbf{G} et les amplitudes s_i . Ainsi, étant donné qu'un atome est une unique gaussienne EGO, les atomes sélectionnés correspondent aux gaussiennes EGO pré-estimées. De plus, les paramètres associés à la i -ème colonne du dictionnaire \mathbf{G} correspondent aux paramètres de la i -ème gaussienne EGO pré-estimée. On note donc $\theta_{G_i}^{pre} = \{s_i, \mu_i, \sigma_i, k_i\}$.

4.3.4 Optimisation conjointe du continuum et des absorptions

Une fois les paramètres du continuum $\boldsymbol{\theta}_c^{pre}$, le nombre \hat{N} de gaussiennes EGO et les paramètres associés $\boldsymbol{\theta}_G^{pre}$ pré-estimés, une étape d'optimisation conjointe est mise en place. Elle a pour objectif de réajuster les paramètres du continuum et des absorptions. En effet, les paramètres des absorptions dépendent des grilles définies pour la création du dictionnaire \mathbf{G} . Ainsi, leurs valeurs sont discrétisées suivant ces grilles et $\boldsymbol{\theta}_G^{pre}$ n'est pas défini sur un ensemble continu. Également, le modèle (4.1) présente des problèmes de recouvrement entre les paramètres du continuum et ceux des absorptions qui peuvent être réduits par un ajustement conjoint.

Ainsi, le problème des moindres carrés non-linéaires suivant est défini :

$$(\boldsymbol{\theta}_c^{est}, \boldsymbol{\theta}_G^{est}) = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}_c, \boldsymbol{\theta}_G} \left\| \boldsymbol{\Sigma}^{-\frac{1}{2}} \left(\ln \boldsymbol{\rho} - \mathbf{c}(\boldsymbol{\theta}_c) + \sum_{i=1}^N \mathbf{G}(\boldsymbol{\theta}_{G_i}) \right) \right\|^2 \quad (4.11)$$

Il consiste à minimiser l'erreur entre le logarithme du spectre de réflectance et le modèle (4.1) avec comme paramètres initiaux $\boldsymbol{\theta}_c^{pre}$ et $\boldsymbol{\theta}_G^{pre}$. Le nombre de gaussiennes EGO n'est pas réajusté et est fixé à sa valeur pré-estimée ($N = \hat{N}$). La matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$ est prise en compte si connue. Également, des bornes sur les paramètres $\boldsymbol{\theta}_c$ et $\boldsymbol{\theta}_G$ peuvent être définies pour assurer des valeurs cohérentes avec les spectres de réflectance des minéraux (amplitude positive des absorptions, etc.).

Ce problème étant non-linéaire, des minima locaux peuvent exister. Cependant, l'initialisation avec les paramètres pré-estimés est proche d'une solution satisfaisante (solution permettant l'identification et la caractérisation du minéral à partir des paramètres). Pour résoudre ce problème, un algorithme TRF (*Trust Region Reflective*) [Branch et al., 1999] est choisi.

4.3.5 Paramétrisation de la procédure

Cette section regroupe les réglages et paramétrisations nécessaires aux algorithmes utilisés dans la procédure greedy-AGM. Tout d'abord, les contraintes associées au problème de retrait du continuum sont présentées. Puis, les paramètres et contraintes imposés lors de l'étape de pré-estimation des absorptions sont décrits. A titre d'illustration, le continuum et les absorptions estimés par la procédure greedy-AGM sont représentés Fig. 4.3 pour des spectres de goethite et de kaolinite.

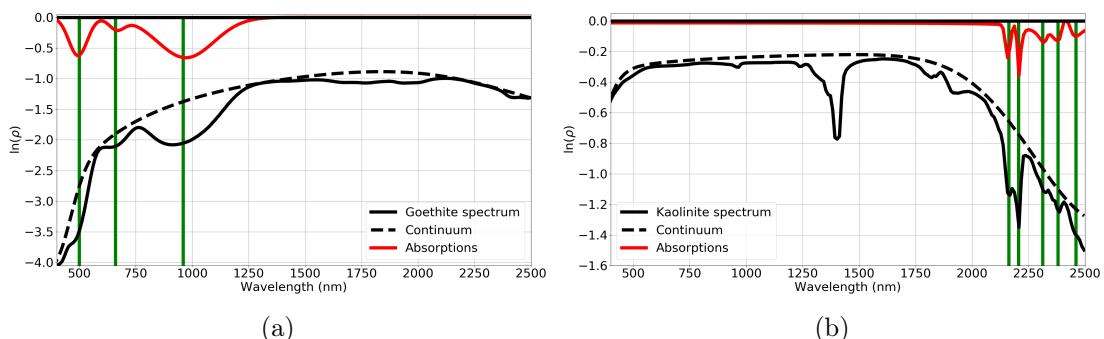


FIGURE 4.3 – Logarithme de spectres de réflectance de goethite (a) et kaolinite (b) issus de la base de données de l'USGS [Kokaly et al., 2017]. Les continuums estimés sont représentés en pointillés et les absorptions estimées en rouge. Les lignes verticales vertes indiquent les positions théoriques des absorptions utiles à l'identification du minéral via son spectre.

Retrait du continuum

Le problème de minimisation (4.6) tient compte de bornes sur les paramètres du continuum θ_c . Ces bornes permettent d'assurer que la plage de variation des paramètres est cohérente avec les spectres de réflectance des minéraux. Tout d'abord, les paramètres c_0 , c_1 , s_{uv} et s_{eau} sont imposés positifs. En effet, le logarithme d'un spectre de réflectance est strictement négatif ce qui se traduit par la soustraction de termes positifs dans le modèle de continuum (4.2). Puis, les gaussiennes G_{uv} et G_{eau} sont supposées centrées à l'extérieur du domaine spectral d'étude (hors de la plage de longueurs d'onde acquises par le capteur $[\lambda^{min} - \lambda^{max}]$) avec $\mu_{uv} \in [0 - \lambda^{min}]$ nm et $\mu_{eau} \in [\lambda^{max} - 3000]$ nm. Pour obtenir des valeurs cohérentes avec la littérature [Clark et al., 1990, Whiting et al., 2004], la borne minimale de μ_{uv} est fixée à 0 nm et la borne maximale de μ_{eau} à 3000 nm. Enfin, les largeurs de G_{uv} et G_{eau} ne sont pas contraintes.

D'autre part, la contrainte de supériorité du problème (4.6) nécessite de fixer le coefficient α . Cette valeur, identique pour chaque longueur d'onde permet d'augmenter la tolérance de la contrainte vis-à-vis de la variance du bruit σ . Ainsi, dans le cas où les données sont bruitées $\alpha = 3$ sinon $\alpha = 0$. Ces valeurs ont été déduites par l'expérimentation.

Pré-estimation des absorptions

Tout d'abord, le critère MDL est choisi pour estimer automatiquement le nombre d'atomes sélectionnés par l'algorithme NNOMP, Algo. 1. Pour assurer un nombre cohérent et restreint d'absorptions ainsi que la convergence de NNOMP, un nombre maximal N_{max} d'atomes à sélectionner est fixé. En pratique, un spectre de réflectance de minéral possède une à cinq absorptions d'intérêt (principale, diagnostique et secondaire) et N_{max} est fixé à 20. Cette valeur est supérieure à cinq pour pouvoir ajuster les fausses absorptions dues aux artefacts (étape de retrait du continuum) et gérer les mélanges spectraux.

Ensuite, la création du dictionnaire \mathbf{G} nécessite de définir des grilles de variation pour les paramètres de position, de largeur et d'asymétrie, des gaussiennes EGO. Ces grilles permettent de construire toutes les gaussiennes possibles et correspondantes à des absorptions. Cependant, les absorptions du VNIR et du SWIR ne sont pas dues aux mêmes phénomènes physiques (respectivement les processus électroniques et vibrationnels) et n'ont donc par les mêmes formes. Ainsi, deux grilles sont créées : une pour le VNIR et une pour le SWIR. Certaines valeurs présentées ici ont déjà été discutées Sect. 3.2.3 lors de la présentation du modèle EGO et de son étude de sensibilité.

Dans le VNIR, le paramètre d'asymétrie k est fixé à 0 car les absorptions sont généralement symétriques. Puis, la largeur σ varie entre 30 et 380 nm avec un pas de $\frac{p}{2}$, où p est la résolution spectrale (ex : pour AVIRIS, $p \sim 10$ nm). La borne inférieure des largeurs est fixée expérimentalement pour éviter la sélection d'atomes de faibles amplitudes et largeurs qui ne correspondent à aucune absorption. La borne supérieure des largeurs correspond à la largeur maximale de l'absorption en 920 nm, mesurée sur les spectres de goethite présents dans la base de données de l'USGS [Kokaly et al., 2017]. Enfin, la position μ varie entre λ^{min} et 1300 nm, avec un pas de $\frac{p}{2}$.

Dans le SWIR, le paramètre d'asymétrie k varie entre $-0,2$ et $0,2$ avec un pas de $0,05$ pour éviter la création de gaussiennes EGO non réalistes, voir Sect. 3.2.3. Puis, la largeur σ varie entre 5 et 45 nm avec un pas de $\frac{p}{2}$. La borne supérieure des largeurs est fixée expérimentalement à partir de l'application de la procédure greedy-AGM sur des spectres d'alunite. En effet, l'alunite possède une absorption relativement large en 2165 nm et une plus étroite en 2324 nm. Or, lorsque la largeur estimée de l'absorption en 2165 nm dépasse 45 nm, l'absorption en 2324 nm n'est plus retrouvée par la procédure greedy-AGM. Enfin, la position μ varie entre 1300 et λ^{max} nm, avec

un pas de $\frac{p}{10}$. On note que cette grille est plus fine que celle du VNIR car les absorptions dans le SWIR sont généralement plus nombreuses et leurs positions peuvent être proches.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre la procédure de déconvolution spectrale greedy-AGM a été présentée. Elle permet de retrouver automatiquement les caractéristiques spectrales (continuum et absorptions) des spectres de réflectance de minéraux. En particulier, le nombre d'absorptions est automatiquement estimé par une approche glouton couplée à un critère issu de la théorie de l'information. Également, la procédure de retrait et de pré-estimation du continuum, contrairement aux approches géométriques, tient compte de la matrice de covariance du bruit pour limiter la création d'artéfacts dans le spectre des absorptions. L'algorithme NNOMP et l'ajustement conjoint tiennent également compte de la matrice de covariance du bruit ; cela permet d'améliorer la détection des faibles absorptions.

La procédure greedy-AGM est utilisable sans connaissances *a priori* sur les minéraux étudiés grâce à la paramétrisation donnée Sect. 4.3.5. Un utilisateur expert peut cependant adapter ces paramètres pour des études de minéraux présentant des absorptions particulières. Également, contrairement aux méthodes de la littérature qui nécessitent généralement une initialisation empirique des paramètres à estimer ou le réglage de paramètres algorithmiques, la procédure greedy-AGM ne nécessite pas de pré-traitement (la connaissance de la matrice de covariance du bruit étant optionnelle).

Dans la suite, la procédure greedy-AGM est validée sur des données synthétiques et appliquée à divers spectres mesurés en laboratoire.

Chapitre 5

Applications de la procédure greedy-AGM

Sommaire

5.1	Introduction	67
5.2	Validation sur des données synthétiques	68
5.2.1	Génération des données	68
5.2.2	Résultats sur les données non bruitées	69
5.2.3	Comparaison sur les données bruitées	72
5.2.4	Conclusion des résultats sur données synthétiques	73
5.3	Application à des spectres de laboratoire	74
5.3.1	Description des spectres choisis et préparation des données	74
5.3.2	Absorptions ferriques de la goethite	75
5.3.3	Doublet de kaolinite et absorptions secondaires	76
5.3.4	Continuum et absorptions de la nontronite	77
5.3.5	Absorptions du gypse et effets des masques spectraux	78
5.3.6	Discrimination des absorptions de calcite et dolomite	79
5.4	Conclusion	79

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, les performances de la procédure greedy-AGM, présentée Chap. 4, sont évaluées. Dans un premier temps, la procédure est validée, étape par étape, sur des données synthétiques (Sect. 5.2). Pour cela, des métriques permettant de conclure quand à l'estimation des paramètres et à la qualité de reconstruction des spectres sont définies. Également, à partir des spectres synthétiques bruités, une comparaison de greedy-AGM à une autre procédure de déconvolution spectrale est réalisée. Dans un second temps, la procédure greedy-AGM est appliquée à des spectres mesurés en laboratoire, convolus à la résolution spectrale du capteur AVIRIS et prenant en compte les masques spectraux (Sect. 5.3). Les minéraux choisis présentent des caractéristiques spectrales difficiles à analyser.

5.2 Validation sur des données synthétiques

Dans cette section, la procédure greedy-AGM est validée sur des données synthétiques. Dans un premier temps, les données utilisées sont décrites (Sect. 5.2.1). Puis, les résultats de la procédure, appliquée à des données non bruitées, sont présentés (Sect. 5.2.2). Enfin, la procédure greedy-AGM est comparée à une procédure, nommée ici derivative-AGM, utilisant des méthodes de la littérature [Brossard et al., 2016]. Cette comparaison est intéressante car la procédure derivative-AGM suis la même architecture en trois étape que greedy-AGM. Ainsi, dans derivative-AGM, le continuum est retiré [Clark and Roush, 1984] avant une pré-estimation des paramètres (résolution d'un problème des moindres carrés non-linéaires). L'étape de pré-estimation se base sur les dérivés spectrales et l'étape d'ajustement est identique à celle proposée pour greedy-AGM. Cette comparaison est discutée sur les spectres synthétiques bruités (Sect. 5.2.3).

5.2.1 Génération des données

Trois spectres synthétiques sont générés à partir du modèle EGO dans le but de représenter diverses formes de continuum et d'absorption (amplitude, largeur, asymétrie). Ces spectres sont représentés Fig. 5.1 (a-c) et leurs paramètres EGO sont donnés Tab. 5.1. Les spectres 1 et 2 possèdent trois absorptions et le spectre 3 quatre. Ils sont convolus à la résolution spectrale du capteur AVIRIS avec $\lambda^{min} = 366$ nm et $\lambda^{max} = 2496$ nm.

Ces spectres permettent d'analyser les résultats de la procédure greedy-AGM sur des cas complexes avec des absorptions larges et peu profondes dans le VNIR (comme pour la goethite et l'hematite), proches et étroites dans le SWIR (comme pour la kaolinite) et asymétriques (comme pour l'alunite et la calcite). Également, le continuum est modélisé pour différentes valeurs de θ_c dans le but de discuter du problème recouvrement entre les formes de c_1 et de G_{uv} . Ainsi, le spectre 1 possède deux absorptions semblables aux absorptions de la goethite dans le VNIR et une correspondant à l'absorption diagnostique de la nontronite dans le SWIR. Dans le VNIR, son continuum dépend de c_1 et G_{uv} . Le spectre 2 possède des absorptions uniquement dans le SWIR similaires à celles du gypse et de l'alunite. Enfin, le spectre 3 s'inspire des absorptions diagnostiques et secondaires de la kaolinite avec un doublet et des absorptions de faibles amplitudes et largeurs.

	Paramètres du continuum				Paramètres des absorptions			
	c_0	c_1	G_{uv}	G_{eau}	Abs 1	Abs 2	Abs 3	Abs 4
spectre 1	0,50	500	$\mu = 200$ $\sigma = 250$ $s = 1,20$	$\mu = 2800$ $\sigma = 200$ $s = 1,00$	$\mu = 660$ $\sigma = 40$ $s = 0,10$ $k = 0,00$	$\mu = 960$ $\sigma = 125$ $s = 0,25$ $k = 0,00$	$\mu = 2283$ $\sigma = 7$ $s = 0,40$ $k = 0,20$	
spectre 2	0,50	0,01	$\mu = 200$ $\sigma = 250$ $s = 1,20$	$\mu = 2800$ $\sigma = 400$ $s = 0,80$	$\mu = 1760$ $\sigma = 12$ $s = 0,30$ $k = 0,00$	$\mu = 2165$ $\sigma = 45$ $s = 0,40$ $k = -0,25$	$\mu = 2324$ $\sigma = 10$ $s = 0,25$ $k = 0,00$	
spectre 3	0,20	0,01	$\mu = 200$ $\sigma = 250$ $s = 1,20$	$\mu = 2800$ $\sigma = 400$ $s = 1,00$	$\mu = 2162$ $\sigma = 15$ $s = 0,35$ $k = 0,00$	$\mu = 2206$ $\sigma = 17$ $s = 0,45$ $k = 0,00$	$\mu = 2312$ $\sigma = 10$ $s = 0,05$ $k = 0,00$	$\mu = 2380$ $\sigma = 10$ $s = 0,05$ $k = 0,00$

TABLE 5.1 – Paramètres EGO utilisés pour la génération des spectres synthétiques.

Pour évaluer l'erreur de reconstruction entre les spectres synthétiques (spectres de réflectance, continuums et spectres des absorptions), notés \mathbf{y}^{syn} , et leurs estimés, notés \mathbf{y}^{est} , la métrique

suivante est définie :

$$r = 10 \log_{10} \frac{\|\mathbf{y}^{syn}\|^2}{\|\mathbf{y}^{syn} - \mathbf{y}^{est}\|^2}. \quad (5.1)$$

Elle permet d'évaluer la qualité de l'ajustement et s'exprime en dB. Cette métrique, nommée dans la suite "rapport", est calculée à chaque étape de la procédure AGM (retrait du continuum, pré-estimation des absorptions, optimisation conjointe). Ainsi, les métriques r_1 , r_2 et r_3 correspondent respectivement aux erreurs entre :

- le continuum synthétique \mathbf{c}^{syn} et le continuum estimé \mathbf{c}^{est} ,
- le spectre des absorptions synthétiques \mathbf{a}^{syn} et le spectre des absorptions estimées \mathbf{a}^{est} ,
- les logarithmes du spectre de réflectance synthétique $\ln \rho^{syn}$ et du spectre de réflectance estimé $\ln \rho^{est}$.

D'autre part, une métrique permettant de comparer les paramètres synthétiques $\boldsymbol{\theta}^{syn}$ au paramètres estimés $\boldsymbol{\theta}^{est}$ est définie. Elle s'exprime via le rapport normalisé (en %) :

$$\Delta_{\theta_i} = 100 \left| \frac{\theta_i^{est} - \theta_i^{syn}}{\theta_i^{syn}} \right|. \quad (5.2)$$

A noter que pour les positions, la métrique $\delta_\mu = \mu_{est} - \mu_{syn}$ est considérée. Elle s'exprime en nm et permet d'informer, via son signe, sur la direction du décalage de l'absorption (vers la droite ou la gauche par rapport à la position synthétique).

5.2.2 Résultats sur les données non bruitées

Dans cette section, la procédure greedy-AGM est appliquée aux trois spectres synthétiques. Les résultats de chaque étape (retrait du continuum, pré-estimation des absorptions, optimisation conjointe) sont représentés Fig. 5.1. Dans ce cas sans bruit, la matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$ est la matrice identité et $\alpha = 0$.

Retrait du continuum

Les résultats pour l'étape de retrait du continuum sont représentés Fig.5.1 (d-f) et les rapports r_1 sont proches de 30 dB pour les trois spectres. Les bords des spectres sont ajustés correctement ($\Delta_{\theta_c} < 4\%$) quand il n'y a pas d'absorption proche (ex : ajustement de G_{uv} pour les spectres 2 et 3). De manière générale, les erreurs sur les paramètres pré-estimés du continuum sont inférieures à 10%. Ces erreurs sont dues :

- à la présence d'absorptions dans le spectre,
- à G_{uv} et G_{eau} qui sont centrées hors du domaine d'étude [400 – 2500] nm où aucune donnée n'est disponible,
- au problème de recouvrement entre les formes de c_1 et de G_{uv} ,
- à la définition du problème non-linéaire (4.6) et à son initialisation.

Ces erreurs génèrent des artefacts dans le spectre des absorptions résultant, Eq. (4.4). Ces artefacts peuvent avoir trois principaux effets sur les spectres, visibles Fig. 5.1 (g-i) :

- la réduction de l'amplitude et de la forme des absorptions larges proches des bords du spectre (ex : absorption dans le VNIR pour le spectre 1),
- l'apparition de fausses absorptions larges et peu profondes pour des longueurs d'onde proches du centre du spectre (ex : [1500 – 2100] nm pour le spectre 2),

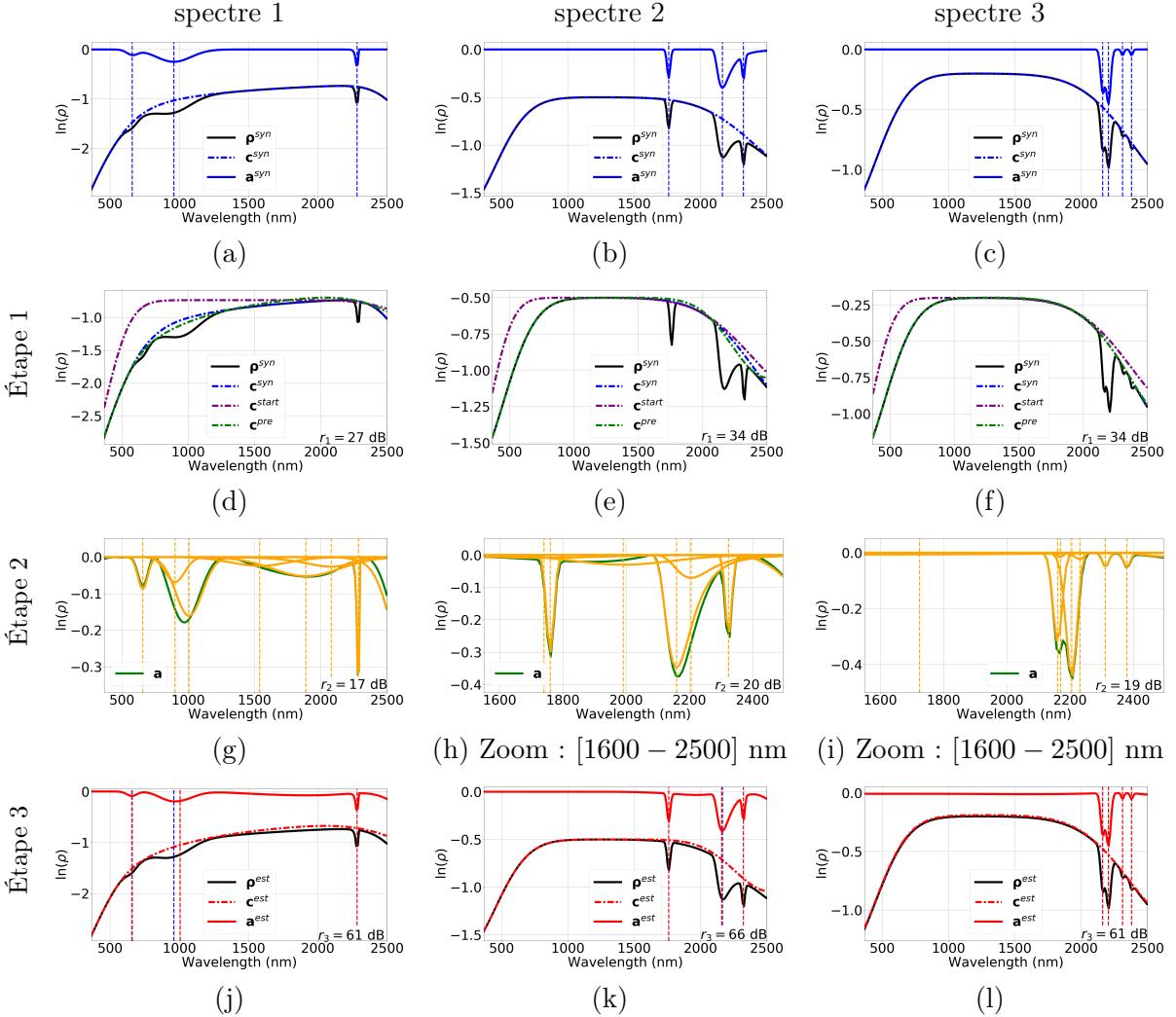


FIGURE 5.1 – Résultats (étape par étape) de la procédure greedy-AGM appliquée aux trois spectres synthétiques. (a,b,c) Spectre synthétique ρ^{syn} (trait plein noir), spectre des absorptions \mathbf{a}^{syn} (trait plein bleu) et continuum \mathbf{c}^{syn} (pointillé bleu). Les positions des absorptions synthétiques sont indiquées par les lignes verticales pointillées. (d,e,f) Continuum initial \mathbf{c}^{start} (pointillé violet) et pré-estimé \mathbf{c}^{pre} (pointillé vert). Le spectre synthétique et son continuum sont également tracés. (g,h,i) Gaussiennes sélectionnées par l’algorithme NNOMP (jaune) superposées aux spectres des absorptions après retrait du continuum \mathbf{a}^{syn} (vert). Les centres des gaussiennes sélectionnées sont indiqués par des lignes verticales pointillées jaunes. (j,k,l) Spectres des absorptions \mathbf{a}^{est} (traits pleins rouge) et continuum \mathbf{c}^{est} estimés (traits pointillés rouge) superposés aux spectres synthétiques. Pour chaque étape, le rapport (r_1 , r_2 , r_3) est donné en dB.

- l'apparition de fausses absorptions étroites proches des bords du spectre (ex : $\lambda > 2450$ nm pour le spectre 1).

Il est à noter que la présence d'artefact n'est pas spécifique à la procédure greedy-AGM. En effet, la procédure utilisée dans le GMEX (*Guide for Mineral EXploration*) [Clark and Roush, 1984, Pontual et al., 2010] génère également des artefacts.

Ainsi, la solution de retrait et de pré-estimation du continuum proposée dans la procédure greedy-AGM permet de retirer la forme générale du spectre et de pré-estimer les paramètres θ_c avec des erreurs faibles. Des artefacts peuvent cependant apparaître dans le spectre des absorptions résultant.

Pré-estimation des absorptions

Les résultats pour l'étape de pré-estimation des absorptions sont représentés Fig.5.1 (g-i) et les rapports r_2 sont proches de 20 dB pour les trois spectres. La Fig. 5.2 (a-c) présente les résultats de l'étape sans la présence des artefacts dues au retrait du continuum.

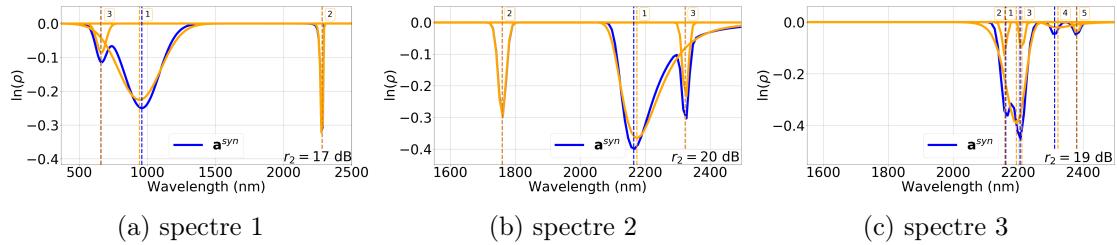


FIGURE 5.2 – Spectres des absorptions synthétiques a^{rem} (bleu) des trois spectres synthétiques et gaussiennes EGO sélectionnées par l'algorithme NNOMP (jaune). Les centres des absorptions synthétiques et des gaussiennes EGO sont représentés par des lignes verticales pointillées respectivement bleues et jaunes. La métrique r_2 est donnée en dB.

Pour les trois spectres des absorptions synthétiques, le rapport r_2 est environ de 20 dB et toutes les absorptions sont retrouvées proches de leurs positions synthétiques. En particulier, les erreurs sur les paramètres des absorptions isolées sont faibles (ex : $\Delta\theta < 0,5\%$ pour l'absorption asymétrique à 2283 nm du spectre 1 et celle à 1760 nm du spectre 2). Ces erreurs peuvent être dues à la discrétisation du dictionnaire \mathbf{G} utilisé dans l'algorithme NNOMP ou au retrait du continuum.

Pour les absorptions proches en position, l'algorithme NNOMP sélectionne d'abord des gaussiennes EGO ajustant l'ensemble du domaine spectral associé. Puis dans un second temps, des gaussiennes EGO de plus faibles largeurs et amplitudes sont ajoutées. Les positions de ces gaussiennes EGO sont alors proches des positions synthétiques. Dans la Fig. 5.2 (a-c), l'ordre de sélection des gaussiennes EGO par NNOMP est indiqué. Deux cas sont alors possibles :

- une absorption est prédominante par rapport aux autres, en termes de largeur et d'amplitude (ex : absorptions VNIR du spectre 1 et absorption à 2160 nm du spectre 2),
- les absorptions sont similaires en forme et amplitude (ex : doublet d'absorptions du spectre 3).

Ainsi dans le premier cas, le centre de l'absorption prédominante est décalé de quelques nanomètres (ex : $\delta_\mu \sim -20$ nm pour l'absorption à 960 nm du spectre 1 et $\delta_\mu \sim 10$ nm pour l'absorption à 2160 nm du spectre 2). Dans le second cas, trois gaussiennes EGO peuvent être sélectionnées : une large et profonde centrée entre les deux absorptions (qui ajuste la forme générale) et deux plus étroites positionnées proches des positions théoriques. Il est à noter que,

sans critères d'arrêt, d'autres gaussiennes EGO peuvent être sélectionnées. Cependant, leur influence sur le spectre des absorptions sera plus faible que pour les premières gaussiennes EGO sélectionnées.

Les fausses absorptions, dues aux artefacts générés lors de l'étape de retrait du continuum, sont ajustées par des gaussiennes EGO, visibles Fig. 5.1 (g-i). Elles sont cependant de faible amplitude par rapport aux absorptions diagnostiques des minéraux et sont généralement positionnées à des longueurs d'onde ne correspondant pas à des absorptions connues.

Optimisation conjointe

Les résultats pour l'étape d'optimisation conjointe sont représentés Fig. 5.1(j-l) et les rapports r_3 sont d'environ 60 dB pour les trois spectres. Ainsi, les spectres estimés ρ^{est} ajustent parfaitement les spectres synthétiques ρ^{syn} . En particulier, les formes générales des spectres sont retrouvées.

Les absorptions sont également toutes retrouvées avec des erreurs faibles sur leurs paramètres. D'une part, les positions sont estimées avec une erreur $|\delta_\mu| < 3$ nm inférieure à la résolution spectrale des capteurs hyperspectraux utilisés en imagerie aérienne et satellitaire (ex : ~ 10 nm pour AVIRIS). L'absorption à 960 nm du spectre 1 ($\delta_\mu = -40$ nm) est la seule à dépasser cette valeur. Elle est en effet difficile à ajuster du fait de sa largeur importante et de sa proximité avec l'absorption à 660 nm. Également, elle est proche du bord VNIR ajusté par c_1 et G_{uv} . D'autre part, les paramètres de forme des absorptions sont estimés de manière satisfaisante. Par exemple, l'asymétrie de l'absorption large à 2165 nm du spectre 2 est estimée à $k = -0,2$. Pour les absorptions isolées, les erreurs sur les paramètres d'amplitudes, de largeurs et d'asymétries sont inférieures à 1%.

5.2.3 Comparaison sur les données bruitées

Dans cette section, la procédure greedy-AGM est comparée à la procédure derivative-AGM. Les deux procédures sont appliquées aux trois spectres synthétiques avec un bruit additif gaussien. Dans un premier temps, la génération des données bruitées est détaillée. Puis les résultats des deux procédures sont comparés et discutés.

Génération des spectres synthétiques bruités

Pour cette comparaison, le bruit est supposé additif gaussien de moyenne nulle. Sa matrice de covariance Σ est diagonale. Elle est également indépendante du signal observé. Ainsi, la variance σ^2 s'exprime telle que :

$$\sigma^2 = 10^{-\frac{RSB}{10}} \ln(\bar{\rho}^2) \quad (5.3)$$

où $\bar{\rho}$ est la moyenne du spectre synthétique et RSB est le rapport signal à bruit, exprimé en dB. Une réalisation pour un RSB de 30 dB est représentée Fig. 5.3.

Comparaison et discussion

Les résultats des deux procédures appliquées aux trois spectres synthétiques (RSB = 30) sont présentés Fig. 5.3. Sans bruit, les performances des deux procédures sont équivalentes. Cependant, la procédure greedy-AGM, prenant en compte la statistique du bruit, est plus adaptée

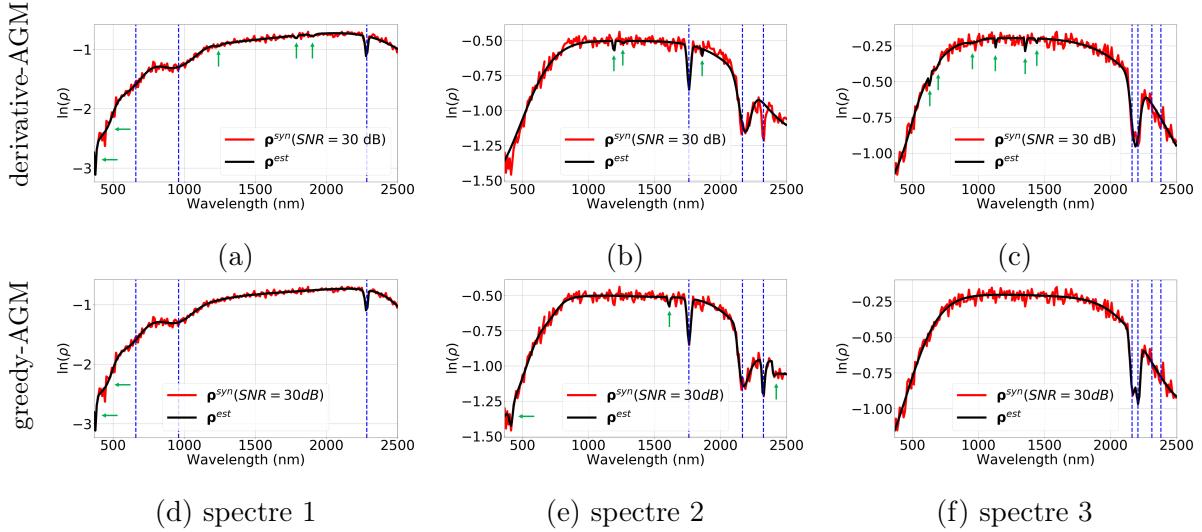


FIGURE 5.3 – Résultats des procédures derivative-AGM (a-c) et greedy-AGM (d-f) pour une réalisation des trois spectres synthétiques bruités ($RSB = 30$ dB). Le spectre synthétique bruité est en rouge et le spectre estimé en noir. Les positions synthétiques des absorptions sont indiquées par des lignes verticales pointillées. Les flèches vertes indiquent les positions des fausses absorptions retrouvées par les procédures.

au traitement des données bruitées. Ainsi, pour un RSB de 30 dB les absorptions profondes et larges sont systématiquement retrouvées. Seule exception, les absorptions du spectre 3 à 2312 et 2380 nm dont les amplitudes sont inférieures à la moyenne du bruit. Avec la procédure derivative-AGM, certaines absorptions peuvent ne pas être retrouvées (ex : absorption à 2324 nm du spectre 2). Également, le doublet autour de 2200 nm du spectre 3 est ajusté par une unique gaussienne EGO.

D'autre part, la surestimation du nombre d'absorptions, indiquée par des flèches vertes Fig. 5.3, est limitée pour la procédure greedy-AGM. En effet, les gaussiennes EGO ne correspondent pas à des absorptions se situant généralement sur les bords des spectres et leur nombre est faible. Elles ne sont donc pas un problème pour identifier et caractériser le minéral. A l'inverse, la surestimation du nombre d'absorptions est plus élevée pour la procédure derivative-AGM. Cela s'explique par la sensibilité au bruit des méthodes de retrait du continuum et de pré-estimation des absorptions.

La procédure greedy-AGM, utilisée avec les réglages et paramétrisations indiqués Sect. 4.3.5, échoue à retrouver toutes les absorptions larges et profondes pour des RSB inférieurs à 25 dB. Également, le nombre d'absorptions retrouvées tend à être sous estimé lorsque le RSB diminue. L'utilisation de connaissances expertes dans les réglages pourrait cependant permettre de retrouver les absorptions larges et profondes pour des RSB faibles.

Il est à noter que le paramètre d'asymétrie k des gaussiennes EGO est difficile à estimer à partir de données bruitées. En effet, plusieurs ensembles de paramètres $\theta_{\mathbf{G}}$ peuvent ajuster de manière similaire les absorptions bruitées. Ainsi, le paramètre k ne peut être retrouvé que pour des données sans bruit ou débruitées (empiriquement $RSB > 50$ dB).

5.2.4 Conclusion des résultats sur données synthétiques

Dans cette section, la procédure greedy-AGM a été appliquée à des données synthétiques. Dans les cas non-bruités elle permet de reconstruire les trois spectres de manière satisfaisante

$(r_3 \sim 60dB)$ et tous les paramètres sont retrouvés avec des erreurs faibles. En particulier, l'erreur sur les positions est inférieure à 20 nm et 5 nm pour les absorptions respectivement dans le VNIR et dans le SWIR.

Les résultats sur données synthétiques bruitées ont ensuite été comparés pour les procédures greedy-AGM et derivative-AGM. Il en ressort que la procédure greedy-AGM est plus adaptée aux cas bruités car elle prend en compte la matrice de covariance du bruit Σ . Également, à partir d'un *RSB* de 30 dB, les principales absorptions sont systématiquement retrouvées par greedy-AGM.

5.3 Application à des spectres de laboratoire

Dans cette section, la procédure greedy-AGM est appliquée à des spectres de laboratoire. L'objectif est d'identifier les avantages et limites de la procédure pour l'étude de spectres de réflectance de minéraux souvent rencontrés en imagerie hyperspectrale aérienne et satellitaire. Les minéraux choisis ici présentent des caractéristiques spectrales (continuum, absorptions) difficiles à déconvoluer et sont de parfaits cas tests pour la procédure. Également, la possibilité d'identifier ces minéraux à partir des paramètres EGO estimés est discutée.

5.3.1 Description des spectres choisis et préparation des données

Six spectres de réflectance de minéraux (calcite, dolomite, goethite, gypse, kaolinite et nontronite) sont choisis parmi ceux de la base de données de l'USGS [Kokaly et al., 2017]. Pour chacun, les caractéristiques spectrales permettant de les identifier et de les caractériser sont connues. En particulier, les positions de leurs absorptions diagnostiques et secondaires sont rappelées Tab. 5.2. De plus, ces minéraux appartenant à des familles minéralogiques différentes, leurs continuums et absorptions sont variés.

Minéral (Groupe)	Échantillon (résolution AVIRIS)	Absorptions diagnostiques (nm)	Absorptions secondaires (nm)
Calcite (Carbonate)	Calcite_GDS304_75-150um_ASDFRb_AREF	2342	2156
Dolomite (Carbonate)	Dolomite_HS102.4B_ASDNGb_AREF	2324	2140
Goethite (Fe-hydroxyde)	Goethite_GDS134_ASDFRb_AREF	660, 960	500
Gypse (Sulfate)	Gypsum_HS333.4B_(Selenite)_ASDFRa_AREF	1750	1538, 2215
Kaolinite (Phyllosilicate)	Kaolinite_CM9_ASDNGb_AREF	2162, 2206	2312, 2380
Nontronite (Smectite)	Nontronite_NG-1.a_ASDNGb_AREF	660, 960, 2283	2378

TABLE 5.2 – Minéraux choisis pour l'application de la procédure greedy-AGM. Les positions de leurs absorptions diagnostiques et secondaires sont données.

Le spectre de réflectance de goethite possède deux absorptions diagnostiques à 660 et 960 nm qui sont attribuées à des processus électroniques de l'ion Fe^{3+} [Hunt et al., 1971a, Bedini, 2011]. L'absorption secondaire à 550 nm est attribuée aux bandes de conductions, typiques des oxydes de fer. L'application de la procédure greedy-AGM à ce minéral permet d'évaluer sa capacité à estimer des absorptions associées au fer dans le VNIR.

Le spectre de réflectance de kaolinite possède un doublet, formé par deux absorptions diagno-

tiques à 2162 et 2206 nm. Ce doublet est associé à la liaison Al-OH et informe sur la cristalinité de la structure de la kaolinite [Hunt and Salisbury, 1970, Hunt et al., 1973, Bishop et al., 2008, Dalm et al., 2017]. Le spectre possède également deux absorptions secondaires dans le SWIR de faibles amplitudes. L'application de la procédure greedy-AGM à ce minéral permet d'évaluer sa capacité à estimer le doublet d'absorptions ainsi que les absorptions de faibles amplitudes dans le SWIR.

Le spectre de réflectance de nontronite possède trois absorptions diagnostiques à 660, 960 et 2283 nm. Comme pour la goethite, les absorptions dans le VNIR sont associées à des transitions électroniques de l'ion Fe^{3+} . L'absorption à 2283 nm est associée à la liaison Fe-OH [Bishop et al., 2008, Flahaut et al., 2017, Dalm et al., 2017]. L'application de la procédure greedy-AGM sur le spectre de ce minéral permet d'évaluer sa capacité à estimer simultanément des absorptions dans le VNIR et dans le SWIR.

Le spectre de réflectance du gypse possède une absorption diagnostique à 1750 nm, pouvant avoir diverses origines selon les auteurs. [Hunt et al., 1971b, Cloutis et al., 2006, Bishop et al., 2014]. Également, deux absorptions secondaires sont présentes à 1538 et 2215 nm. L'application de la procédure greedy-AGM sur ce minéral permet d'évaluer sa capacité à estimer des absorptions diagnostiques proches des masques spectraux.

Les spectres de réflectance de calcite et dolomite possèdent une absorption diagnostique, à respectivement 2342 et 2324 nm, et une absorption secondaire, à respectivement 2156 et 2140 nm. Ces absorptions sont associées à des processus vibrationnels de l'ion CO_3^{2-} [Hunt and Salisbury, 1971, Gaffey, 1986, Gaffey, 1987, Cloutis et al., 2010]. Le décalage entre les absorptions de ces deux minéraux est dû à la présence de Mg dans la dolomite. L'application de la procédure greedy-AGM sur ce minéral permet d'évaluer sa capacité à discriminer des minéraux ayant des absorptions diagnostiques proches en forme et position.

Dans le but d'obtenir des résultats comparables à ceux appliqués à des spectres issus d'images aéroportées et satellitaires, les spectres de réflectance des minéraux choisis sont convolus à la résolution spectrale du capteur AVIRIS. Également, les masques spectraux, dus à la vapeur d'eau atmosphérique, sont appliqués autour de 1400 et 1900 nm.

5.3.2 Absorptions ferriques de la goethite

Le résultat de la procédure greedy-AGM appliquée au spectre de goethite est représenté Fig. 5.4. Ce résultat est comparable à celui obtenu pour la partie SWIR du spectre synthétique 1 (Sect. 5.2.2).

D'une part, le continuum est correctement estimé et ajuste la forme générale du spectre sur les domaines du VNIR et du SWIR. Dans le VNIR, la résolution du problème (4.6) est complexe du fait de la présence d'absorptions larges. Ainsi, G_{uv} ajuste le bord immédiat du spectre ($\lambda < 700$ nm) et c_1 le reste de la partie VNIR. En effet, G_{uv} est estimé proche du bord VNIR du spectre ($\mu_{uv} = 402$ nm) et sa largeur est faible ($\sigma_{uv} = 65$ nm). A l'inverse, c_1 est grand ($c_1 = 1110$). Cet ajustement du continuum génère des artéfacts qui modifient la forme du spectre des absorptions autour de 500 et 900 nm.

D'autre part, l'absorption à 960 nm est ajustée par une large gaussienne EGO dont le centre est décalé de quelques nanomètres ($\mu = 971$ nm). Ce décalage s'explique par la présence de l'absorption à 660 nm qui est retrouvée par une unique gaussienne EGO. L'absorption à 500 nm est également retrouvée. Cependant, plusieurs gaussiennes EGO sont sélectionnées pour minimiser l'erreur due aux artéfacts. Ainsi, plusieurs gaussiennes EGO de faibles amplitudes par rapport aux absorptions sont retrouvées. Des seuils sur les amplitudes et largeurs permettent de les retirer facilement (non appliqués ici). Ainsi, les absorptions diagnostiques et secondaires de la

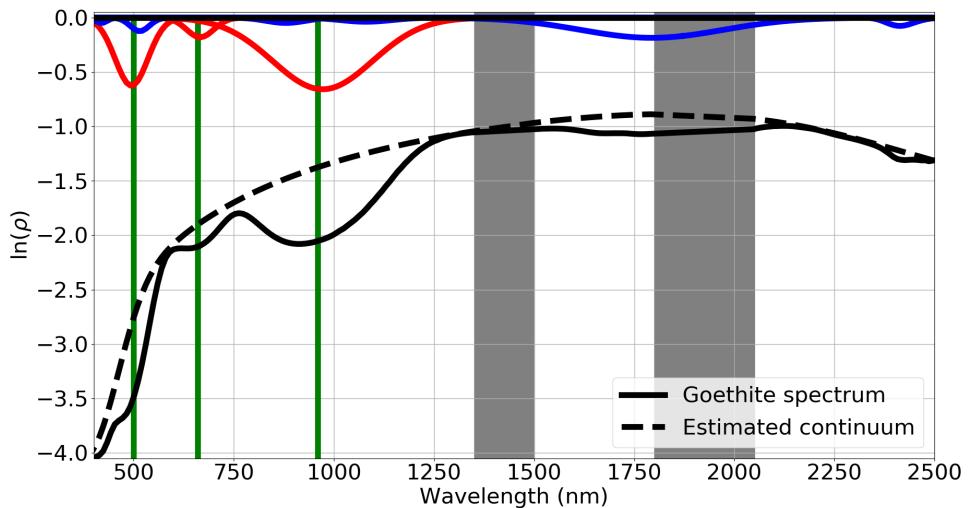


FIGURE 5.4 – Logarithme du spectre de goethite (noir), continuum estimé (noir pointillé), gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires (rouge), autres gaussiennes EGO (bleu). Les centres des gaussiennes EGO des absorptions diagnostiques et secondaires sont représentés par des lignes verticales (vert).

goethite sont toutes retrouvées et le décalage de l'absorption à 960 nm doit être pris en compte ultérieurement dans une procédure d'identification basée sur les positions des absorptions.

5.3.3 Doublet de kaolinite et absorptions secondaires

Le résultat de la procédure greedy-AGM appliquée au spectre de kaolinite est représenté Fig. 5.5. Pour des raisons de lisibilité, le continuum estimé par greedy-AGM est retiré et uniquement la partie SWIR du spectre des absorptions résultant est tracée. Ce résultat est comparable à celui obtenu pour la partie SWIR du spectre synthétique 3 (Sect. 5.2.2).

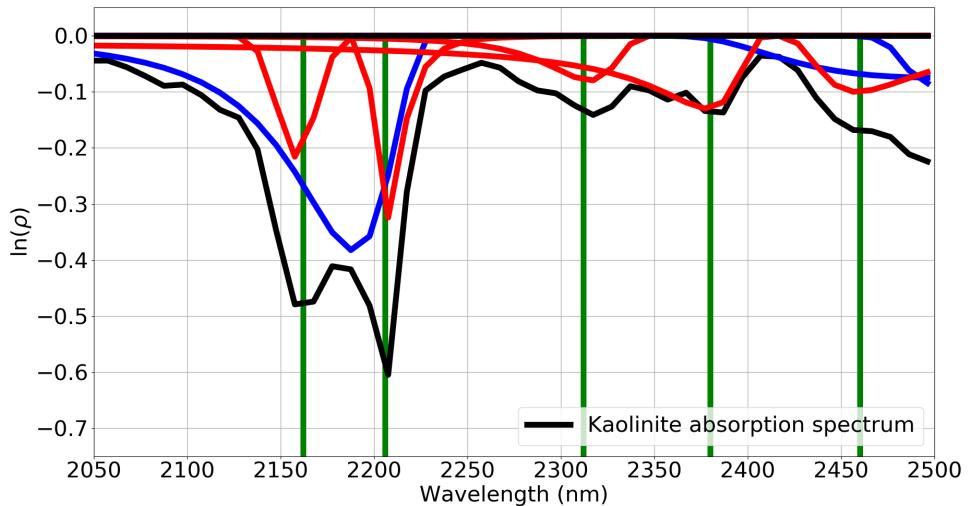


FIGURE 5.5 – Spectre des absorptions de kaolinite sur le domaine spectral du SWIR (noir), gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires (rouge), autres gaussiennes EGO (bleu). Les centres des gaussiennes EGO des absorptions diagnostiques et secondaires sont représentés par des lignes verticales (vert).

Tout d'abord, le doublet de kaolinite est ajusté par trois gaussiennes EGO. La gaussienne

EGO centrale ($\mu = 2189$ nm, en bleu) est large et ajuste la forme générale du doublet. Les deux autres gaussiennes EGO, étroites et profondes, sont positionnées proches des centres théoriques des absorptions du doublet ($\delta_\mu < 4$ nm, en rouge). Cette solution avec trois gaussiennes EGO permet l'identification de la kaolinite qui se base sur les positions des absorptions du doublet.

Puis, les absorptions secondaires à 2312 et 2380 nm sont retrouvées par deux gaussiennes EGO ($\delta_\mu < 3$ nm). Cependant, ces absorptions étant proches en position, la gaussienne EGO associée à l'absorption en 2380 nm tend à ajuster les deux. Ainsi, la gaussienne EGO à 2380 nm présente une forte asymétrie ($k = 0, 43$) qui réduit l'amplitude de celle à 2312 nm.

Enfin, trois gaussiennes EGO sont retrouvées proches du bord SWIR du spectre. Celle centrée à 2458 nm (en rouge) correspond à une absorption présente dans le spectre mais non caractéristique de la kaolinite. Elle peut ne pas être visible en fonction du capteur ayant acquis le spectre. Les deux autres gaussiennes EGO sélectionnées (en bleu) correspondent à des artefacts dus au retrait du continuum. Ainsi, de par leurs positions ne correspondant pas à des absorptions diagnostiques connues, ces gaussiennes EGO peuvent être ignorées pour l'identification et la caractérisation de la kaolinite.

5.3.4 Continuum et absorptions de la nontronite

Le résultat de la procédure greedy-AGM appliquée au spectre de nontronite est représenté Fig. 5.6. Ce résultat est comparable à celui obtenu pour le spectre synthétique 1 (Sect. 5.2.2).

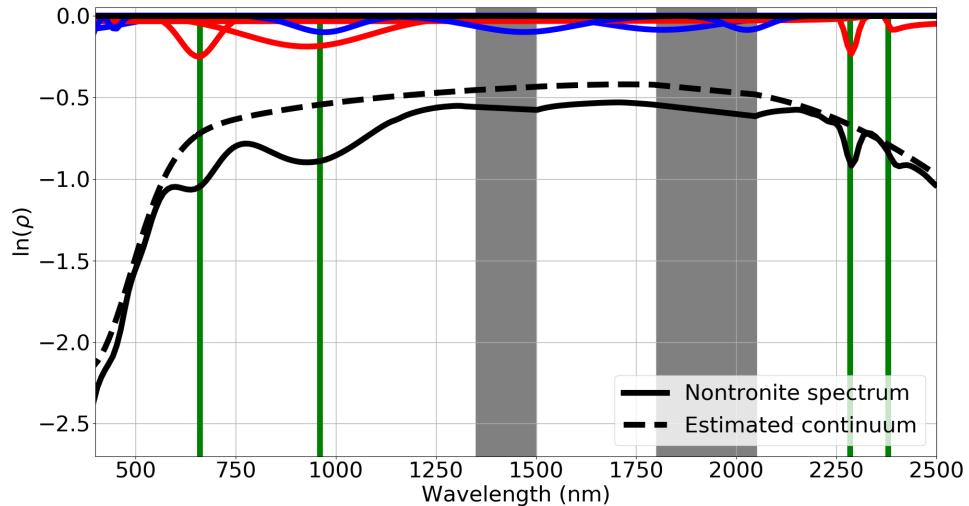


FIGURE 5.6 – Spectre de nontronite (noir), continuum estimé (noir pointillé), gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires (rouge), autres gaussiennes EGO sélectionnées (bleu). Les centres des gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires sont indiqués par des lignes vertes (vert).

D'une part, le continuum estimé ajuste la forme générale du spectre sur les domaines du VNIR et du SWIR. Cependant, l'ajustement par G_{uv} et c_1 de la partie VNIR est complexifié par la présence de l'absorption à 960 nm. Ainsi, un écart se crée entre le continuum et le spectre pour les longueurs d'onde allant de 700 à 2000 nm. Cet artefact génère alors de fausses absorptions et modifie la forme et l'amplitude de celle à 960 nm. On note également sur le bord SWIR du spectre un faible écart entre le continuum et le spectre.

D'autre part, toutes les absorptions diagnostiques et secondaires de la nontronite sont ajustées par une unique gaussienne EGO ce qui permet l'identification du minéral. Ainsi, les absorptions

du VNIR sont retrouvées à leurs positions théoriques même si la forme de celle à 960 nm est modifiée et que l'amplitude de celle à 660 nm est potentiellement augmentée. Dans le SWIR, les positions et largeurs des gaussiennes EGO sélectionnées correspondent aux attentes (étroites et peu profondes). Cependant, en raison de l'artefact dans le SWIR, la gaussienne EGO à 2283 nm présente une importante asymétrie ($k = -0,73$). Enfin, les fausses absorptions entre 700 à 2000 nm sont ajustées par des gaussiennes EGO larges et peu profondes. Également, leurs positions ne correspondent pas à des absorptions diagnostiques connues. Ainsi, il est possible de retirer les gaussiennes ajustant les artefacts en appliquant des seuils sur les largeurs et amplitudes des gaussiennes sélectionnées.

5.3.5 Absorptions du gypse et effets des masques spectraux

Le résultat de la procédure greedy-AGM appliquée au spectre de gypse est représenté Fig. 5.7. Pour des raisons de lisibilité, la Fig. 5.7 (a) représente les gaussiennes EGO positionnées dans les masques spectraux et la Fig. 5.7 (b) les gaussiennes EGO ajustant le spectre des absorptions (hors masque). Il est à noter que le continuum estimé par greedy-AGM est retiré et que le spectre est représenté entre 1050 et 2315 nm.

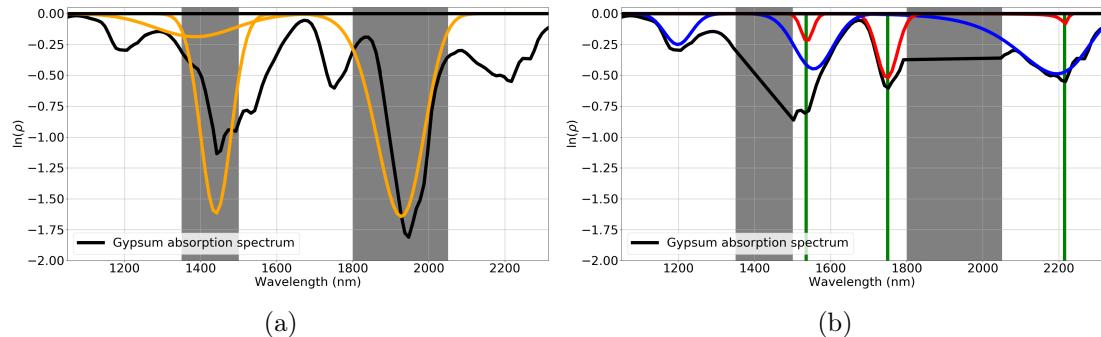


FIGURE 5.7 – Spectre des absorptions du gypse (noir). (a) Gaussiennes EGO positionnées dans les masques (orange). (b) Gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires (rouge), autres gaussiennes EGO sélectionnées (bleu). Les centres des gaussiennes ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires sont indiqués par des lignes verticales (vert).

Tout d'abord, l'absorption diagnostique à 1750 nm est retrouvée par une unique gaussienne EGO dont la position ($\delta_\mu = 2$ nm) et la forme sont peu impactées par la présence du masque spectral. Puis, l'absorption à 1538 nm est ajustée par deux gaussiennes EGO : une large et profonde qui ajuste la tendance du spectre et une plus faible positionnée à la valeur théorique. Enfin, l'absorption à 2215 nm est ajustée par une gaussienne EGO large modélisant la forme et une plus petite (en amplitude et largeur) positionnées proches de la valeur théorique ($\delta_\mu = 3$ nm). Ainsi, les positions estimées de ces trois absorptions permettent d'identifier le minéral. Il est à noter qu'une gaussienne EGO est sélectionnée à 1198 nm pour ajuster une absorption non caractéristique du gypse.

Les bords des masques spectraux à 1400 et 1900 nm sont ajustés respectivement par une et deux gaussiennes EGO. Pour chaque masque, une gaussienne est positionnée à proximité du centre. En effet, l'absence de données dans les masques empêche la reconstruction des absorptions dans ces zones et seuls les bords visibles des masques sont ajustés. La seconde absorption du masque à 1400 nm, positionnée à 1386 nm est due à un artefact généré lors du retrait du continuum.

5.3.6 Discrimination des absorptions de calcite et dolomite

Les résultats de la procédure greedy-AGM appliquée aux spectres de calcite et de dolomite sont représentés respectivement Fig. 5.8 (a) et Fig. 5.8 (b). Il est à noter que le continuum estimé par greedy-AGM est retiré et que le spectre est représenté entre 2050 et 2400 nm pour des raisons de lisibilité.

La calcite et la dolomite ont des absorptions proches en position (~ 18 nm d'écart pour les absorptions diagnostiques et ~ 16 nm pour les absorptions secondaires). Ces écarts sont supérieurs à la résolution spectrale des capteurs hyperspectraux et il est théoriquement possible de différentier les deux minéraux.

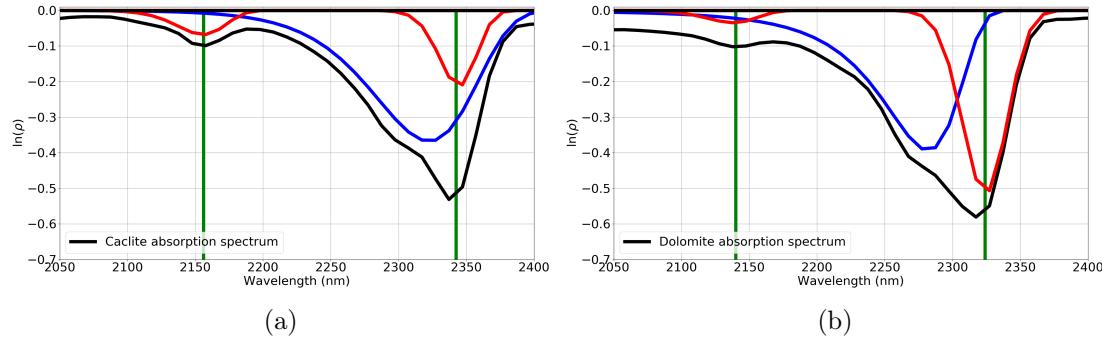


FIGURE 5.8 – Spectre des absorptions (noir) de calcite (a) et de dolomite (b), gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires (rouge), autres gaussiennes EGO sélectionnées (bleu). Les centres des gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires sont indiqués par des lignes verticales (vert).

Les absorptions des deux spectres sont ajustées avec des gaussiennes EGO comparables. Ainsi, leur absorption diagnostique est modélisée par deux gaussiennes EGO : une large et asymétrique (calcite : $\sigma = 37,5$ nm, $k = 0,13$ et dolomite : $\sigma = 27,8$ nm, $k = 0,22$) donnant la tendance et une plus étroite positionnée à la valeur théorique de l'absorption ($\delta_\mu < 2$ nm pour les deux). Également, leur absorption secondaire est retrouvée à proximité de la position théorique ($\delta_\mu < 2$ nm pour les deux). Ainsi, il est possible d'identifier les deux minéraux à partir des positions de leurs absorptions sans risque de confusion.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, la procédure greedy-AGM a été validée sur de nombreuses données synthétiques et de laboratoire associées à divers minéraux. Cela illustre le potentiel de la procédure pour extraire l'information minéralogique à partir des formes variées d'absorptions. Plusieurs cas difficiles peuvent ainsi être traités :

- les absorptions larges et profondes associées au fer dans le VNIR,
- les absorptions étroites dans le SWIR,
- les absorptions asymétriques,
- les absorptions proches en position comme le doublet de kaolinite,
- les absorptions proches des masques spectraux.

De manière générale, le nombre d'absorptions ainsi que les paramètres associés sont retrouvés avec des erreurs faibles. Par exemple, l'erreur sur les positions est inférieure à 20 nm et 5 nm pour les absorptions respectivement dans le VNIR et dans le SWIR. Également, la procédure

greedy-AGM permet ainsi d'envisager l'identification et la caractérisation des minéraux à partir des paramètres estimés. Enfin, contrairement à la plupart des méthodes de la littérature, elle prend en compte la statistique du bruit ce qui permet une meilleure détection des absorptions dans les cas bruités.

Dans la suite, une procédure d'identification automatique des minéraux utilisant les positions estimées par la procédure greedy-AGM est mise en place.

Chapitre 6

Procédure d'identification de minéraux

Sommaire

6.1	Introduction	81
6.2	Problématique et état de l'art	82
6.2.1	Problématique	82
6.2.2	Approches expertes pour l'identification	83
6.2.3	Principe de logique floue	84
6.3	Procédure d'identification proposée	85
6.3.1	Principe général	85
6.3.2	Étape 1 : calcul de coïncidence	86
6.3.3	Étape 2 : identification par logique floue	87
6.3.4	Étape 3 : gestion des mélanges et discrimination des minéraux	89
6.3.5	Base de données des positions des absorptions des minéraux	90
6.4	Validation sur des données synthétiques	90
6.4.1	Description des données	90
6.4.2	Identification de la montmorillonite	91
6.4.3	Mélanges d'alunite et de kaolinite	91
6.4.4	Discrimination de l'illite et de la muscovite	92
6.5	Conclusion	93

6.1 Introduction

Dans ce chapitre, une procédure d'identification des spectres de réflectance de minéraux est proposée. Ce chapitre est adapté des travaux introduits à la conférence SPIE *Defense and Commercial Sensing 2020* [Rialland et al., 2021a]. La procédure proposée ici s'appuie sur les paramètres $\boldsymbol{\theta}$ estimés par la procédure greedy-AGM (présentée Chap. 4). Pour rappel, les paramètres du continuum $\boldsymbol{\theta}_c$ et des N absorptions $\boldsymbol{\theta}_G$ sont retrouvés automatiquement à partir du logarithme d'un spectre de réflectance inconnu. Ainsi, dans un premier temps, les problématiques associées à l'identification des minéraux sont données ainsi qu'un état de l'art des méthodes (Sect. 6.2). Ensuite, la procédure proposée, basée sur un système de logique floue, est détaillée (Sect. 6.3). Elle permet de calculer un score d'identification pour chaque minéral d'une base de données à partir des positions estimées des absorptions et d'incertitudes. Enfin, la procédure est validée sur des données synthétiques (Sect. 6.4).

6.2 Problématique et état de l'art

6.2.1 Problématique

L'identification d'un minéral à partir de son spectre de réflectance se base sur ses absorptions diagnostiques et secondaires (Chap. 2). En effet, comme indiqué précédemment, il n'existe pas de consensus concernant le modèle physique à adopter pour le continuum qui dépend notamment des conditions d'éclairage et des propriétés diffusantes du milieu. Ceci limite l'efficacité de méthodes reposant sur une comparaison directe via des métriques entre le spectre d'une surface de composition inconnue et le spectre d'un minéral pur provenant d'une librairie de référence, souvent composée à partir de mesures en laboratoire. A l'inverse, les positions des absorptions renseignent sur la composition chimique du minéral ce qui permet d'identifier sa présence dans la surface étudiée. Les autres paramètres des absorptions (profondeur, largeur, asymétrie) sont alors utiles soit pour confirmer l'identification soit pour caractériser certaines propriétés physico-chimiques du minéral. Par exemple, la Fig. 6.1 représente un spectre de nontronite ($Na_{0.33}Fe^{3+}_2(Si,Al)_4O_{10} \bullet nH_2O$) et un spectre de kaolinite ($Al_2Si_2O_5(OH)_4$), issus de la base de données de l'USGS [Kokaly et al., 2017]. En raison des transitions électroniques associées à l'ion Fe^{3+} et de la liaison $Fe-OH$, la nontronite possède trois absorptions diagnostiques (deux dans le VNIR à 660 et 960 nm et une asymétrique dans le SWIR à 2283 nm) et une absorption secondaire (à 2378 nm). Un spectre de kaolinite présente quant-à-lui quatre absorptions. Le doublet formé par les absorptions diagnostiques à 2162 et 2206 nm est dû à la liaison $Al-OH$ et sa forme renseigne sur la cristalinité du minéral [Crowley and Vergo, 1988, Clark et al., 1990, Cudahy, 1997]. Deux absorptions secondaires, de faible amplitude, sont positionnées à 2312 et 2380 nm. Ainsi, pour qu'un minéral soit identifié, il faut, à minima, que toutes ses absorptions diagnostiques soient retrouvées, les absorptions secondaires permettant de conforter le résultat.

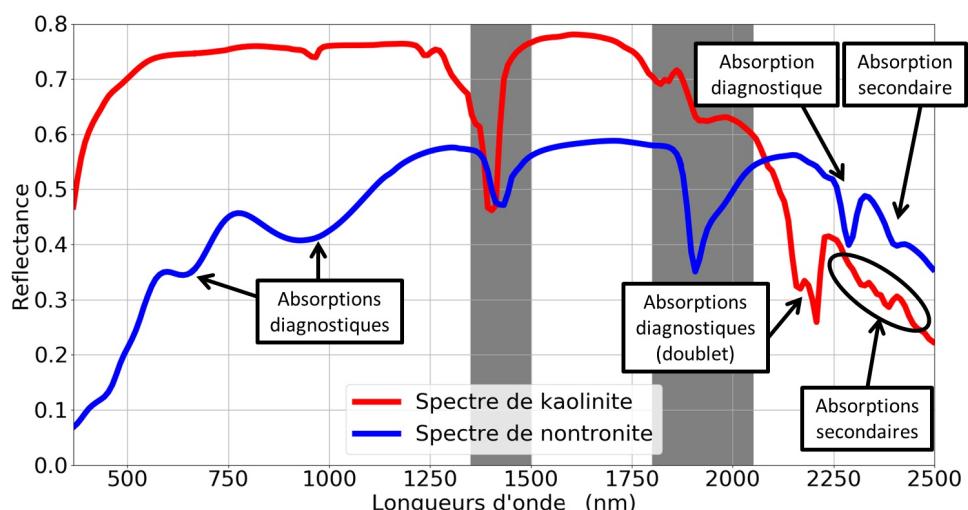


FIGURE 6.1 – Spectres de réflectance de kaolinite (rouge) et de nontronite (bleu) issus de la base de données de l'USGS [Kokaly et al., 2017]. Les masques spectraux dus aux bandes d'absorption de la vapeur d'eau atmosphérique sont représentés (zones grises).

Les positions des absorptions diagnostiques et secondaires sont définies dans la littérature pour de nombreux minéraux (ex : *Guide for Mineral EXploration GMEX* [Pontual et al., 2010]). Cependant, en fonction de l'échantillon et des conditions d'acquisition, les positions mesurées et donc théoriques peuvent être décalées de quelques nanomètres. Par exemple, la position de l'absorption diagnostique à 2204 nm de l'illite, Fig. 6.2, varie d'environ 20 nm en fonction de l'échantillon observé. Ainsi, il est important de pouvoir prendre en compte cette variabilité sur

les positions théoriques dans une procédure d'identification.

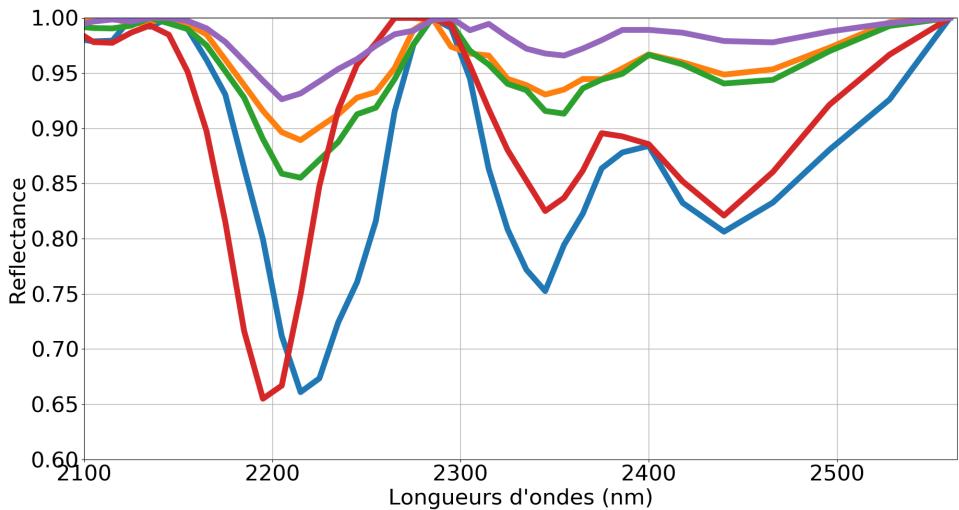


FIGURE 6.2 – Spectres d'absorption (continuum retiré [Clark and Roush, 1984]) de cinq échantillons d'illite issus de la base de données de l'USGS.

Également, lors de la déconvolution d'un spectre inconnu, des incertitudes sur les paramètres des absorptions pourraient être calculées en fonction du bruit instrumental. Actuellement, la procédure greedy-AGM ne permet pas d'évaluer ces incertitudes même si elle prend en compte la matrice de covariance du bruit. Ces incertitudes sur les positions estimées des absorptions pourraient être prises en compte dans une procédure d'identification.

La comparaison des positions théoriques et estimées pour identifier un spectre de réflectance de minéral est une tâche complexe. En effet, sans même discuter de la potentielle utilisation de la variabilité et des incertitudes sur les paramètres, les minéraux ne possèdent pas tous le même nombre d'absorptions, certains pouvant ne pas avoir d'absorption secondaire. Également, le nombre d'absorptions estimées varie en fonction du spectre observé. De plus, les spectres issus d'images hyperspectrales aériennes et satellitaires correspondent généralement à des mélanges de plusieurs minéraux ou à des mélanges avec d'autres matériaux (résolution spatiale ~ 1 m pour AVIRIS-NG [Hamlin et al., 2011] et ~ 30 m pour PRISMA [Loizzo et al., 2018]). Dans ce cas, les absorptions secondaires ont tendance à disparaître. Enfin, des minéraux, comme la calcite et la dolomite, possèdent des absorptions proches en position et en forme ce qui peut gêner l'identification. En pratique, une comparaison des positions théoriques et estimées pour identifier un spectre engendre trois cas possibles qu'il est nécessaire de pouvoir discerner :

- un seul minéral est identifié sans ambiguïté,
- le spectre est un mélange de plusieurs minéraux n'ayant pas d'absorption en commun,
- le spectre est un mélange de plusieurs minéraux ayant des absorptions en commun.

Dans la suite, un état de l'art des méthodes d'identification de minéraux à partir des positions de leurs absorptions est donné.

6.2.2 Approches expertes pour l'identification

L'identification d'un minéral à partir de ses absorptions se base classiquement sur des approches expertes, c'est-à-dire représentant le raisonnement d'un spécialiste et utilisant des connaissances spécifiques. Ainsi, une solution est d'utiliser la procédure proposée dans le guide utilisateur GMEX [Pontual et al., 2010]. Dans un premier temps, l'absorption principale, c'est-à-dire ayant la plus grande amplitude ou choisie par un expert, est comparée à celles de minéraux dans une

base de données pour identifier la famille minéralogique. Aucune métrique n'est définie spécifiquement et la comparaison, principalement sur les positions, est laissée à l'interprétation de l'expert. Les autres absorptions sont utilisées dans un second temps pour accroître la confiance dans l'identification et choisir parmi les minéraux de la famille. Cette solution n'est donc pas automatique et dépend des métriques choisies par l'utilisateur.

Ensuite, plusieurs méthodes semi-supervisées, comme QuanTools [Kopačková and Koucká, 2017] et Minimum Wavelength Mapper [Hecker et al., 2019]), utilisent les positions et profondeurs des absorptions principales pour identifier les principaux minéraux associés à un spectre inconnu. Appliquées à des images hyperspectrales aériennes et satellitaires, les cartographies obtenues nécessitent l'analyse d'un expert pour être pleinement exploitées.

Des approches plus automatiques mais nécessitant des connaissances approfondies en spectroscopie et minéralogie ont également été développées. En particulier, le Tetracorder [Clark et al., 2003, Livo and Clark, 2014] est un ensemble d'algorithmes (ajustement de la forme des absorptions, indice de similarité, système de logique floue, etc.) permettant d'extraire l'information spectrale utile à l'identification et la caractérisation des minéraux. Différentes cartographies minéralogiques sont alors obtenues mais dépendent de la base de données utilisée et du site étudié.

D'autre part, cette problématique d'identification à partir des positions des absorptions n'est pas spécifique à la spectroscopie VNIR-SWIR des minéraux. En effet, l'identification des spectres Raman se base sur la position de pics (semblables aux absorptions des spectres de réflectance de minéraux) dans le spectre. En particulier, une procédure [Perez-Pueyo et al., 2009] propose d'utiliser deux systèmes de logique floue pour identifier des pigments. Le premier sélectionne des pigments candidats à l'identification parmi une base de données et le second calcule un score d'identification. En sortie, chaque pigment sélectionné possède un score d'identification si au moins un de ses pics est retrouvé. Cependant, cette procédure ne permet pas de différencier les absorptions diagnostiques et secondaires. De plus, une interprétation par un expert est nécessaire pour conclure quant au score d'identification et à la gestion des mélanges spectraux.

En conclusion, l'identification d'un minéral se base sur des connaissances et un raisonnement expert. Dans la suite, nous présentons les principes de la logique floue qui permettent de reproduire artificiellement le raisonnement d'un expert en tenant compte de variabilités et d'incertitudes sur les paramètres.

6.2.3 Principe de logique floue

La logique floue [Zadeh, 1965] est utilisée ici pour représenter mathématiquement un raisonnement expert et obtenir des conclusions à partir de données vagues, ambiguës ou imprécises. Contrairement à la logique booléenne, qui utilise des valeurs de vérité (vrai ou faux), elle permet d'obtenir un degré de vérité associé à une déclaration. Ainsi, un système de logique floue se compose d'un ensemble de règles "Si-Alors" qui peuvent être définies par un expert ou déduites automatiquement des données étudiées. Une variable en entrée (condition) ou en sortie (conséquence) de ces règles possède alors plusieurs états, décrits par leurs fonctions d'appartenance (*membership function*).

La logique floue a déjà été appliquée à l'identification des minéraux à partir de spectres de réflectance [Asadzadeh and de Souza Filho, 2016] mais en comparant l'ensemble du spectre à une base de données sans utiliser les positions des absorptions. Ainsi, ces méthodes sont sensibles à la variabilité du continuum et à la définition d'une base de données exhaustive.

6.3 Procédure d'identification proposée

6.3.1 Principe général

La procédure proposée ici, adaptée de [Perez-Pueyo et al., 2009] pour des spectres de réflectance de minéraux, a pour objectif d'identifier un spectre inconnu en comparant les positions estimées μ_e à des positions théoriques μ_d issues d'une base de données de minéraux. Cette base de données contient pour chaque minéral les positions théoriques de ses absorptions diagnostiques et secondaires. La procédure proposée se décompose en trois étapes, Fig. 6.3. Tout d'abord, pour chaque minéral de la base de données, deux indices traduisant la coïncidence entre μ_e et μ_d sont calculés (étape de coïncidence). Le premier, noté S , est un degré de similarité entre les positions μ_e et μ_d . Cet indice prend en compte la variabilité et les incertitudes σ_{μ_e} associées aux positions μ_e . Le second indice, noté M_{pos} correspond au pourcentage de positions théoriques correspondant aux absorptions estimées. Ensuite, un système de logique floue, basé sur les indices S et M_{pos} , est mis en place pour identifier le minéral parmi ceux de la base de données (étape d'identification). Un score d'identification Id_{score} est ainsi obtenu pour chaque minéral et celui ayant le plus élevé est identifié. Enfin (étape de discrimination), une solution basée sur Id_{score} permet de conclure si le spectre inconnu correspond : (i) à un minéral unique, (ii) à un mélange de plusieurs minéraux ou (iii) à plusieurs minéraux ayant des absorptions similaires. Dans la suite, ces trois étapes sont détaillées et la base de données utilisée est décrite.

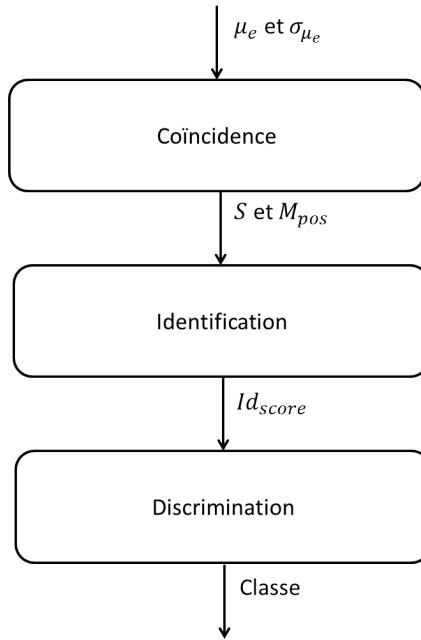


FIGURE 6.3 – Architecture de la procédure d'identification proposée.

Cette procédure se différencie en deux principaux points de celle proposée par [Perez-Pueyo et al., 2009]. D'une part, elle est adaptée pour traiter conjointement des absorptions diagnostiques et secondaires en leur donnant un poids différents dans le système de logique floue. D'autre part, l'étape de discrimination est ajoutée pour permettre une interprétation des résultats et la gestion des mélanges spectraux.

Comme expliqué dans la problématique de ce chapitre, deux "incertitudes" sur les positions sont à distinguer : celles sur les positions estimées μ_e et la variabilité sur les positions théoriques μ_d . Dans le but de tenir compte conjointement de ces deux incertitudes, elles sont regroupées en une unique, noté σ_{μ_e} . Cependant, la procédure greedy-AGM ne permet pas le calcul d'incertitudes

sur les positions estimées. Ainsi, seule la variabilité sur les positions théoriques est conservée. Pour des raisons de simplicité, cette variabilité est supposée identique pour chaque position de la base de données et fixée à $\sigma_{\mu_e} = 5$ nm.

6.3.2 Étape 1 : calcul de coïncidence

L'objectif de l'étape de coïncidence est de comparer les positions estimées μ_e et théoriques μ_d en calculant un degré de similarité S et un pourcentage de positions correspondantes M_{pos} . Ces deux indices sont calculés indépendamment pour les absorptions diagnostiques et secondaires de chaque minéral présent dans la base de données. Pour cela, une fonction de coïncidence f est définie et représentée Fig. 6.4. Elle correspond à une somme de gaussiennes et s'exprime par :

$$f(\lambda) = \min \left(1, \sum_i^{N_{\mu_e}} \exp \left(\frac{-(\lambda - \mu_{e_i})^2}{2\sigma_{\mu_{e_i}}^2} \right) \right) \quad (6.1)$$

Le nombre N_{μ_e} de gaussiennes correspond au nombre d'absorptions estimées. Leurs centres sont donnés par les positions estimées μ_e et leurs largeurs sont les incertitudes associées à ces positions σ_{μ_e} . Dans le cas où deux gaussiennes sont proches et se superposent, impliquant une valeur supérieure à 1 de f , le maximum de la fonction de coïncidence est fixé à 1.

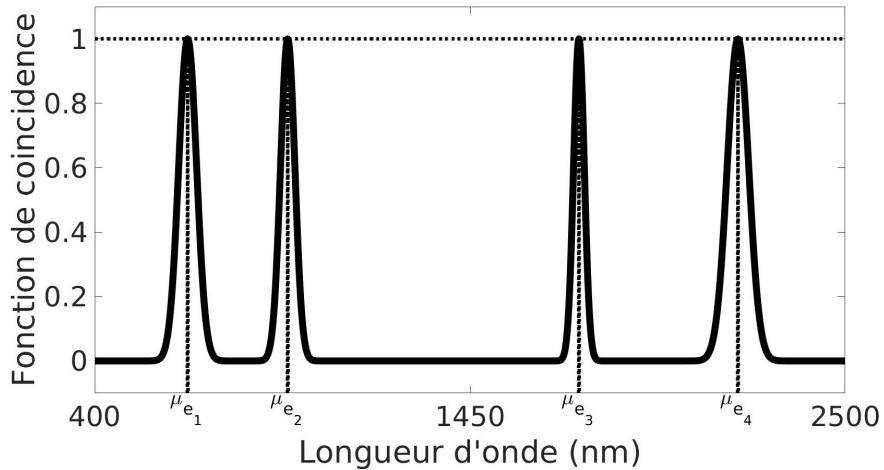


FIGURE 6.4 – Exemple de fonction de coïncidence pour quatre positions estimées.

La fonction f est évaluée pour chaque position μ_d d'un minéral. Il en résulte donc autant d'évaluations que d'absorptions théoriques associées au minéral. Le degré de similarité, noté S , correspond alors à la valeur maximale de f parmi les évaluations et sa valeur est comprise entre 0 et 1, Eq. (6.2). D'autres opérateurs peuvent être choisis pour calculer le degré de similarité (minimum, moyenne, etc.) mais ils sont moins performants car ils supposent que toutes les absorptions du minéral sont retrouvées avec une évaluation élevée. Ainsi, le degré de similarité traduit la plus forte correspondance entre les positions estimées et les positions théoriques en prenant en compte la variabilité sur les positions théoriques.

$$S = \max_{\lambda} f(\lambda) \quad (6.2)$$

Ensuite, le pourcentage de positions correspondantes, noté M_{pos} , est calculé par :

$$M_{pos} = \frac{N_{\mu_s}}{N_{\mu_d}} * 100. \quad (6.3)$$

C'est un pourcentage dont les valeurs sont comprises entre 0 et 100% avec N_{μ_d} le nombre d'absorptions théoriques du minéral et N_{μ_s} (l'indice s de μ_s signifie seuil) le nombre d'absorptions théoriques du minéral dont l'évaluation de f est supérieure à un seuil (fixé empiriquement à 0, 1). Cet indice permet d'évaluer le nombre d'absorptions théoriques d'un minéral correspondant aux absorptions estimées. Il est complémentaire au degré de similarité, qui ne dépend que d'une seule position.

Cette solution évalue la coïncidence (via les indices S et M_{pos}) entre les positions d'un spectre inconnu et celles de minéraux dans une base de données. Elle est automatique et les nombres d'absorptions N_{μ_e} et N_{μ_d} peuvent être différents. Dans la suite, les degrés de similarité et pourcentage de positions correspondantes sont calculés indépendamment pour les absorptions diagnostiques (notés avec l'exposant m pour *main*, soit S^m et M_{pos}^m) et secondaires (notés avec l'exposant s pour *secondary*, soit S^s et M_{pos}^s).

6.3.3 Étape 2 : identification par logique floue

La Fig. 6.5 présente une vue d'ensemble du système de logique floue mis en place pour l'identification des minéraux. Ce système reproduit le raisonnement d'un expert qui cherche à identifier les minéraux de la base de données à partir des résultats de l'étape de coïncidence. Un poids plus important est donné aux absorptions diagnostiques par rapport aux absorptions secondaires.

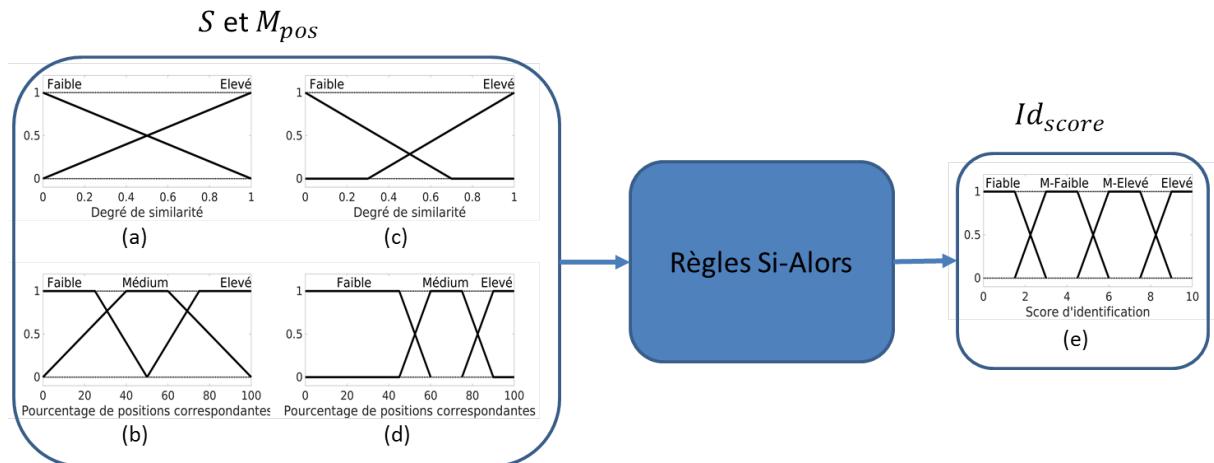


FIGURE 6.5 – Système de logique floue.

Les fonctions d'appartenance associées à S et M_{pos} sont représentées Fig. 6.5 (a) et 6.5 (b) pour les absorptions diagnostiques et Fig. 6.5 (c) et 6.5 (d) pour les absorptions secondaires. Le degré de similarité peut être "Faible" ou "Élevé" et le pourcentage de positions correspondantes "Faible", "Médium" ou "Élevé". Comme les absorptions secondaires ne sont pas suffisantes pour identifier un minéral, il est nécessaire que leurs résultats de coïncidence soient plus élevés que ceux des absorptions diagnostiques pour avoir un poids dans l'identification. Ainsi, les fonctions d'appartenance des absorptions secondaires sont décalées.

En sortie du système de logique floue, un score d'identification Id_{score} , dont les valeurs sont comprises entre 0 et 10, est défini. Un minéral pour lequel $Id_{score} = 0$ ne possède aucune absorption diagnostique ou secondaire en commun avec le spectre inconnu. A l'inverse, si pour un minéral $S = 1$ et $M_{pos} = 100\%$, alors $Id_{score} = 10$. Les fonctions d'appartenance du score d'identification, représentées Fig. 6.5 (e), sont : "Faible", "Moyen-Faible" (noté M-Faible), "Moyen-Élevé" (noté M-Élevé) et "Élevé" et permettent d'obtenir plusieurs possibilités d'interprétation.

Enfin, l'ensemble de règles "Si-Alors", défini Tab. 6.1, reproduit le raisonnement d'un expert dans le système de logique floue. Il donne également plus d'importance aux positions diagnostiques qu'aux positions secondaires. Ainsi, si les positions diagnostiques sont retrouvées avec des résultats de coïncidence "Élevé", alors Id_{score} est "Élevé". Les positions secondaires augmentent ou diminuent ensuite ce score si elles sont retrouvées ou non. Puis, dans le cas où seules les positions secondaires sont retrouvées avec des résultats de coïncidence "Élevé", alors Id_{score} est "Faible". Ainsi, ce système de règles n'identifie pas le minéral si seulement ses absorptions secondaires sont retrouvées.

S^m	M_{pos}^m	S^s	M_{pos}^s	Id_{score}
Élevé	Élevé	Élevé	Élevé / Médium	Élevé
Élevé	Élevé	Élevé	Faible	Médium Élevé
Élevé	Élevé	Faible	Élevé / Médium	Élevé
Élevé	Élevé	Faible	Faible	Médium Élevé
Élevé	Médium	Élevé	Élevé	Élevé
Élevé	Médium	Élevé	Médium / Faible	Médium Élevé
Élevé	Médium	Faible	Élevé	Élevé
Élevé	Médium	Faible	Médium / Faible	Médium Élevé
Élevé	Faible	Élevé	Élevé / Médium	Médium Élevé
Élevé	Faible	Élevé	Faible	Médium Faible
Élevé	Faible	Faible	Élevé / Médium	Médium Élevé
Élevé	Faible	Faible	Faible	Médium Faible
Faible	Élevé	Élevé	Élevé	Médium Élevé
Faible	Élevé	Élevé	Médium / Faible	Médium Faible
Faible	Élevé	Faible	Élevé	Médium Élevé
Faible	Élevé	Faible	Médium / Faible	Médium Faible
Faible	Médium	Élevé	Élevé / Médium	Médium Faible
Faible	Médium	Élevé	Faible	Faible
Faible	Médium	Faible	Élevé / Médium	Médium Faible
Faible	Médium	Faible	Faible	Faible
Faible	Faible	Élevé	Élevé	Médium Faible
Faible	Faible	Élevé	Médium / Faible	Faible
Faible	Faible	Faible	Élevé	Médium Faible
Faible	Faible	Faible	Médium / Faible	Faible

TABLE 6.1 – Ensemble de règles "Si-Alors" pour les minéraux ayant des absorptions diagnostiques et secondaires.

Dans certains cas, un spectre de réflectance de minéral ne possède pas d'absorptions secondaires (ex : illite, montmorillonite, muscovite, etc.). Ainsi, le système de logique floue n'a que deux entrées correspondant aux absorptions diagnostiques. Un ensemble de règles spécifiques est alors défini, Tab. 6.2. Il reprend le même raisonnement que le système de règles Tab.6.1 mais sans les absorptions secondaires.

Le système de logique floue utilisé ici est un système d'inférence floue Mamdani [Mamdani and Assilian, 1975]. L'opérateur minimum est "and method", l'opérateur produit est "implication method" et l'opérateur maximum est "aggregation method". La déffuzification est réalisée par "centroid". A noter qu'une normalisation est nécessaire pour obtenir un score d'identification entre 0 et 10.

S^m	M_{pos}^m	Id_{score}
Élevé	Élevé	Élevé
Élevé	Médium	Médium Élevé
Élevé	Faible	Médium Faible
Faible	Élevé	Médium Élevé
Faible	Médium	Médium Faible
Faible	Faible	Faible

TABLE 6.2 – Ensemble de règles "Si-Alors" pour les minéraux ayant uniquement des absorptions diagnostiques.

6.3.4 Étape 3 : gestion des mélanges et discrimination des minéraux

L'étape de discrimination, synthétisée Fig. 6.6, est appliquée dans les cas où le score d'identification d'au moins un minéral de la base de données est supérieur à un seuil ($Id_{score} > 0,1$). En effet, pour un même spectre, plusieurs minéraux peuvent avoir un Id_{score} élevé. Ainsi, il est nécessaire de conclure quant à l'identification du spectre. Quatre classes sont alors définies :

- non identifiée : aucun minéral n'est identifié,
- identifié : un unique minéral est identifié,
- mélange : plusieurs minéraux sont identifiés,
- absorptions similaires : plusieurs minéraux, ayant des absorptions similaires, sont identifiés.

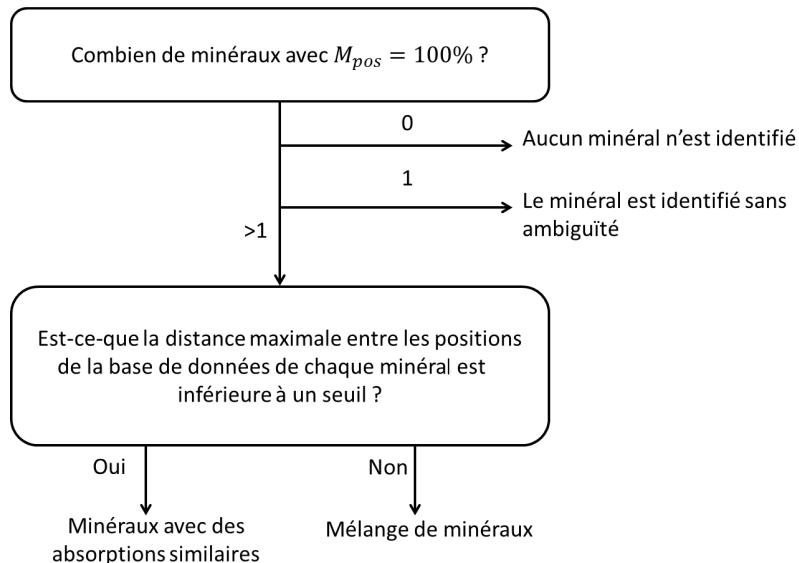


FIGURE 6.6 – Synthèse de l'étape de discrimination.

La solution proposée s'articule autour de deux étapes. D'une part, pour qu'un minéral soit identifié, il est nécessaire que toutes ses absorptions diagnostiques soient retrouvées. Ainsi, les minéraux pour lesquels $M_{pos}^m < 100\%$ ne sont pas considérés. Si $M_{pos}^m < 100\%$ pour tous les minéraux alors aucun minéral n'est identifié. A l'inverse, dans le cas où un unique minéral a un pourcentage de positions correspondantes à 100%, alors il est identifié sans ambiguïté. Enfin, si le nombre de minéraux pour lesquels $M_{pos}^m = 100\%$ est supérieur à 1, alors il est nécessaire de différencier entre le cas d'un mélange et le cas de minéraux ayant des absorptions similaires (proches en positions comme la calcite et la dolomite). Ainsi, la seconde étape de la solution proposée a pour objectif de choisir entre ces deux cas. Pour cela, elle s'appuie sur le calcul, pour chaque minéral restant, des distances entre ses positions et celles des autres minéraux. Puis, le

maximum de ces distances est déduit. Ainsi, si ce maximum est supérieur à un seuil (ici 10 nm), alors le spectre est un mélange. Sinon il correspond à plusieurs minéraux ayant des absorptions similaires.

6.3.5 Base de données des positions des absorptions des minéraux

La base de données des positions des absorptions des minéraux est l'élément clé de cette procédure d'identification. Elle sépare pour chaque minéral les absorptions diagnostiques et secondaires. Pour rappel, le nombre d'absorption varie d'un minéral à l'autre et certains minéraux ne possèdent pas d'absorptions secondaires.

Dans la suite, la base de données utilisée, donnée Tab. 6.3, est créée à partir de connaissances expertes et s'appuie sur la description des spectres réalisée Chap. 2. Elle tient compte de la variabilité des positions théoriques. Nous avons choisi ici $\sigma_{\mu_e} = 5$ nm pour toutes les absorptions. Cependant, cette base de données peut également être générée à partir des résultats de la procédure greedy-AGM. En effet, il est envisageable d'appliquer la procédure greedy-AGM à un grand nombre de spectre préalablement identifié et correspondant aux minéraux de la base de données. Ainsi, pour une absorption, la moyenne des positions estimées correspondrait à la position théorique et la variance à la variabilité. Cette solution permettrait également de créer des bases de données pour tous les paramètres EGO (amplitude, largeur et asymétrie des gaussiennes EGO).

Minéral	Absorptions diagnostique (nm)	Absorptions secondaires (nm)
Alunite	1760, 2165	2324
Buddingtonite	2013, 2112	-
Calcite	2342	2156
Chlorite	750, 928, 1130, 2248, 2340	-
Dolomite	2324	2140
Gibbsite	2268	2356
Goethite	660, 960	500
Gypse	1750	1538, 2215
Hematite	875	660
Illite	2204, 2347, 2440	-
Jarosite	435, 2206, 2269	952, 1849
Kaolinite	2162, 2206	2312, 2355, 2380
Montmorillonite	2217	-
Muscovite	2204, 2342, 2435	-
Nontromite	660, 960, 2283	2378
Talc	2288, 2390	2075, 2135, 2175, 2466

TABLE 6.3 – Base de données des positions des absorptions.

6.4 Validation sur des données synthétiques

6.4.1 Description des données

La procédure d'identification proposée est à présent validée sur trois spectres synthétiques dont les positions estimées des absorptions sont données Tab. 6.4. Pour chaque position estimée, l'incertitude associée est fixé à $\sigma_{\mu_e} = 5$ nm. Ces trois spectres correspondent aux trois classes possibles que sont : identifié, mélange et absorptions similaires.

Le spectre 1 correspond à un minéral unique : la montmorillonite. A son absorption diagnostique, nous avons ajouté deux des trois absorptions secondaires de la kaolinite. D'autres minéraux peuvent également être retrouvés mais sans leurs absorptions diagnostiques.

Les positions des absorptions du spectre 2 sont choisies pour correspondre à un mélange d'alunite et de kaolinite. Les positions correspondant au spectre kaolinite sont fixées à leurs valeurs définies dans la base de données. De plus, l'absorption secondaire de l'alunite n'est pas présente.

Les absorptions du spectre 3 correspondent aux absorptions diagnostiques de la muscovite. Cependant, l'illite, un minéral appartenant au même groupe minéralogique que la muscovite, possède les trois mêmes absorptions mais légèrement décalées. La procédure d'identification doit donc permettre de distinguer l'illite de la muscovite.

Cas	μ_e (nm)
spectre 1	2212, 2310, 2380
spectre 2	1760, 2162, 2206, 2312, 2380
spectre 3	2204, 2342, 2435

TABLE 6.4 – Positions des absorptions des trois spectres synthétiques utilisés pour la validation.

6.4.2 Identification de la montmorillonite

Les résultats pour le spectre 1 sont synthétisés Tab. 6.5. Tout d'abord, la montmorillonite est identifiée sans ambiguïté car c'est le seul minéral de la base de données avec $M_{pos}^m = 100\%$. Elle est identifiée avec $Id_{score} = 8,23$. En effet, son absorption diagnostique est retrouvée avec un indice de similarité de 0,61, dû à l'écart de 5 nm entre la position estimée de l'absorption et la position théorique dans la base de données. Ensuite, les positions des absorptions secondaires de kaolinite et nontronite sont retrouvées avec des indices de similarité élevés (0,96). Cependant, leurs scores d'identification sont relativement faibles (5,61 pour la kaolinite et 3,27 pour la nontronite) car leurs absorptions diagnostiques ne sont pas présentes dans le spectre. Enfin, certaines absorptions de gypse, d'illite, de jarosite, de muscovite et de talc sont également retrouvées.

Minéral	S^m / M_{pos}^m	S^s / M_{pos}^s	Id_{score}	Classe
Gypse	0 / 0	0,83 / 50	0,09	Non identifié
Illite	0,28 / 33	-	3,07	Non identifié
Jarosite	0,49 / 33	0 / 0	3,91	Non identifié
Kaolinite	0,49 / 50	0,96 / 66	5,61	Non identifié
Montmorillonite	0,61 / 100	-	8,23	identifié
Muscovite	0,28 / 33	-	3,07	Non identifié
Nontronite	0 / 0	0,96 / 100	3,27	Non identifié
Talc	0,14 / 50	0 / 0	1,58	Non identifié

TABLE 6.5 – Résultats de la procédure d'identification pour le spectre 1.

6.4.3 Mélanges d'alunite et de kaolinite

Les résultats pour le spectre 2 sont synthétisés Tab. 6.6. Il est identifié comme un mélange de trois minéraux : alunite, gypse et kaolinite, car pour chacun $M_{pos}^m = 100\%$. L'absorption diagnostique du gypse, qui appartient au même groupe minéralogique que l'alunite, est retrouvée,

mais décalée ($S^m = 0,14$). Ses absorptions secondaires ne sont pas toutes retrouvées. Ainsi, le gypse est identifié dans le mélange mais son Id_{score} est relativement faible ($Id_{score} = 4,26$). Ensuite, les absorptions diagnostiques de l'alunite sont retrouvées avec un degré de similarité élevé (0,92) mais pas ses secondaires. Ainsi, son Id_{score} est plus faible que celui de la kaolinite, pour qui toutes les absorptions diagnostiques et secondaires sont retrouvées à leurs positions exactes dans la base de données. Dans ce cas, le spectre est identifié comme un mélange alunite-kaolinite avec une forte prédominance (du point de vue de Id_{score}) de la kaolinite et la possibilité d'une contribution mineure de gypse.

Minéral	S^m / M_{pos}^m	S^s / M_{pos}^s	Id_{score}	Classe
Alunite	0,92 / 100	0 / 0	6,68	Mélange
Calcite	0 / 0	0,49 / 100	3,28	Non identifié
Gypse	0,14 / 100	0,19 / 50	4,26	Mélange
Illite	0,92 / 33	-	5,16	Non identifié
Jarosite	1 / 33	0 / 0	5,31	Non identifié
Kaolinite	1 / 100	1 / 100	10	Mélange
Muscovite	0,92 / 33	-	5,16	Non identifié
Nontronite	0 / 0	0,96 / 100	3,28	Non identifié
Talc	0,14 / 50	0 / 0	1,58	Non identifié

TABLE 6.6 – Résultats de la procédure d’identification pour le spectre 2.

6.4.4 Discrimination de l’illite et de la muscovite

Les résultats pour le spectre 2 sont synthétisés Tab. 6.7. Trois minéraux ont un pourcentage de positions correspondantes égal à 100% : calcite, illite et muscovite. Cependant, les positions de leurs absorptions diagnostiques dans la base de données sont proches et le minéral avec le score d’identification le plus élevé est identifié. Ainsi, la muscovite est identifiée avec $Id_{score} = 10$.

Le cas de la calcite est particulier car son spectre possède une unique absorption diagnostique, à 2342 nm, qui est proche des positions d’autres minéraux comme la muscovite et l’illite. Ainsi, la calcite est systématiquement identifiée dès que son absorption diagnostique est retrouvée. De la même manière, tous les minéraux ayant une unique absorption diagnostique (montmorillonite, dolomite, etc.) sont identifiés lorsque la position d’une absorption d’un spectre inconnu est proche de la leur. Pour limiter ce risque de fausse identification, plusieurs solutions sont possibles. Tout d’abord, il est important de bien différencier les absorptions diagnostiques et secondaires des minéraux dans la base de données et de réduire l’incertitude sur leurs positions. Ensuite, il peut être pertinent, dans les cas où cela est possible, d’inclure des connaissances minéralogiques expertes (contexte géologique, etc.). Enfin, une solution pourrait être d’utiliser les autres paramètres des absorptions (amplitude, largeur et asymétrie) pour améliorer le calcul du score d’identification.

Minéral	S^m / M_{pos}^m	S^s / M_{pos}^s	Id_{score}	Classe
Calcite	0,99 / 100	0 / 0	7,06	Absorptions similaires
Chlorite	0,92 / 20	0 / 0	4,59	Non identifié
Illite	0,74 / 100	-	8,67	Absorptions similaires
Jarosite	0,92 / 33	0 / 0	5,16	Non identifié
Kaolinite	0,92 / 50	0 / 0	6,56	Non identifié
Muscovite	1 / 100	-	10	Absorptions similaires

TABLE 6.7 – Résultats de la procédure d’identification pour le spectre 3.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, une procédure d'identification des minéraux a été présentée. Elle permet d'identifier automatiquement un spectre inconnu à partir des positions estimées de ses absorptions. En particulier, elle ne dépend pas directement du nombre d'absorptions dans le spectre ni du nombre d'absorptions des minéraux de la base de données. Également, les absorptions secondaires n'ont pas le même poids dans la procédure que les absorptions diagnostiques. D'autre part, la procédure s'appuie sur un système de logique floue pour tenir compte des variabilités associées aux positions théoriques et est capable de gérer le cas des mélanges spectraux. Enfin, la procédure est utilisable sans connaissances *a priori* sur les minéraux étudiés (autres que la définition de la base de données).

La procédure d'identification a été validée sur des spectres synthétiques associés à des cas d'identification difficiles. Il en résulte que la procédure est capable d'identifier tous les minéraux présents dans un mélange à condition que leurs absorptions diagnostiques soient retrouvées. Également, elle discerne, pour les exemples considérés ici, les minéraux ayant des absorptions similaires (c.-à-d. dont les centres sont proches).

Cette procédure d'identification est une preuve de concept utilisant une approche par logique floue pour identifier les minéraux. De nombreuses évolutions sont envisagées comme la prise en compte des incertitudes associées aux positions théoriques. Également, l'utilisation des autres paramètres des absorptions (largeur, amplitude, asymétrie) peut permettre d'améliorer l'étape de coïncidence en calculant des indices plus adaptés.

Dans la suite, cette procédure d'identification ainsi que la procédure greedy-AGM sont appliquées à des données issues d'images hyperspectrales.

Chapitre 7

Campagne d'acquisitions et applications

Sommaire

7.1	Introduction	95
7.2	Campagne d'acquisition d'images hyperspectrales et de données terrain	96
7.2.1	Présentation des carrières étudiées	96
7.2.2	Mesures terrain réalisées	97
7.2.3	Acquisition et pré-traitement des images hyperspectrales	98
7.2.4	Préparation des procédures greedy-AGM et d'identification	98
7.3	Résultats - Carrière de Cherves-Richemont	99
7.3.1	Déconvolution spectrale par greedy-AGM	100
7.3.2	Identification des minéraux	100
7.4	Résultats - Carrière de Chevanceaux	102
7.4.1	Déconvolution spectrale par greedy-AGM	103
7.4.2	Cartographie	103
7.4.3	Identification des minéraux	104
7.5	Conclusion	105

7.1 Introduction

Dans ce chapitre, les procédures de déconvolution spectrale (Chap. 4) et d'identification des minéraux (Chap. 6) sont appliquées à des images hyperspectrales acquises au cours d'une campagne récente, menée par le CEA dans le cadre de cette thèse. Les objectifs sont :

- de valider les deux procédures sur des spectres issus d'images aériennes et satellitaires,
- d'envisager l'exploitation des paramètres du modèle EGO pour réaliser des cartographies d'intérêt minéralogique.

Dans un premier temps, la campagne d'acquisition d'images aériennes (caméra HySpex, <https://www.hyspex.com> et satellite PRISMA [Loizzo et al., 2018]), réalisée au cours de la thèse, est présentée (Sect. 7.2). Elle a consisté en un survol de deux carrières situées en France pour l'acquisition d'images hyperspectrales aériennes : la carrière de Cherves-Richemont (Charente) et la carrière de Chevanceaux (Charente-Maritime). Une image de la carrière de Chevanceaux, acquise par le satellite PRISMA [Loizzo et al., 2018], est également utilisée dans cette étude.

Des mesures terrain et des prélèvements au sol ont été réalisés en parallèle de l'acquisition des images aériennes pour obtenir des données de référence.

Ensuite, les procédures de déconvolution spectrale et d'identification des minéraux sont appliquées à des spectres issus des images hyperspectrales. La Sect. 7.3 présente les résultats pour la carrière de Cherves-Richemont (carrière de gypse). La déconvolution des spectres de gypse et de calcite est décrite et la gestion des mélanges entre ces deux minéraux est discutée. La Sect. 7.4 présente les résultats pour la carrière de Chevanceaux (carrière d'argile kaolinique). La déconvolution et l'identification de spectres de kaolinite, issus d'une image aérienne et d'une image satellitaire, sont discutées. Également, une cartographie du site est réalisée à partir de l'amplitude estimée du doublet d'absorption de la kaolinite à 2206 nm.

7.2 Campagne d'acquisition d'images hyperspectrales et de données terrain

7.2.1 Présentation des carrières étudiées

Carrière de Cherves-Richemont

La commune de Cherves-Richemont se situe à une dizaine de kilomètres au Nord-Est de Cognac en Charente (France). Géologiquement, cette zone est en bordure du bassin Aquitain, à la limite des terrains du Jurassique supérieur (étage Tithonien) et du Crétacé inférieur (étage Berriasiens). On y trouve des dépôts de gypse datés d'environ 140 millions d'années.

La carrière de gypse, située sur le site de Champblanc, est une carrière à ciel ouvert exploitée par le groupe Garandeau, Fig. 7.1. La carrière présente des alternances de bancs de gypse, de marnes, de calcaire ou d'argiles noires. Les bancs de gypse se présentent sous forme lenticulaire, liés à un faciès argilo-marneux. Le gypse extrait est principalement transformé en plâtre dans l'usine Placoplatre, visible en bas à gauche de l'image. Également, le gypse sert aux industries du ciment et des engrains agricoles. En fonction des besoins d'exploitation, la carrière se déplace en utilisant des terres agricoles et en restituant des terrains remis en état.

Deux minéraux d'intérêt peuvent être observés dans l'image hyperspectrale acquise : le gypse et la calcite. Le gypse est largement majoritaire. En effet, dans la zone d'extraction, quatre bancs de gypse sont exploités, en haut à droite de l'image. La calcite sert principalement au chemin d'accès dans la carrière. Également, plusieurs tas de calcite sont présents au niveau de l'usine. Pour rappel, le gypse possède une absorption diagnostique à 1750 nm et deux absorptions secondaires à 1538 et 2215 nm. Le spectre de calcite présente une absorption diagnostique à 2342 nm et une absorption secondaire à 2156 nm.

Carrière de Chevanceaux

La commune de Chevanceaux se situe à mi-distance entre Bordeaux et Angoulême (environ 60 km) en Charente-Maritime (France). On y exploite des argiles kaoliniques secondaires d'origine sédimentaire qui proviennent de l'altération de roches magmatiques du Massif Central puis de leur érosion et de leur transport.

La carrière, située au lieu-dit du Bois des Rentes, est une carrière à ciel ouvert exploitée par la société Imerys, Fig. 7.2. Les argiles extraites alimentent l'usine de Clérac, située à 15 km au sud, qui produit des céramiques réfractaires. Cette carrière est la seule exploitation autour de



FIGURE 7.1 – Image HySpex acquise au-dessus de la carrière de Cherves-Richemont (composition colorée à partir des canaux spectraux associés au rouge, au vert et au bleu). Les étoiles indiquent la localisation des pixels dont les spectres sont analysés Sect. 7.3 : gypse (rouge), calcite (bleu), mélange gypse-calcite (vert).

l'usine à disposer de réserves en argile à haute teneur en alumine.

Les spectres de réflectance des argiles visibles dans les images indiquent clairement la présence de kaolinite. La kaolinite est souvent associée à des minéraux secondaires et accessoires, présents en plus ou moins grande quantité selon la qualité originelle du matériau. Parmi ces minéraux secondaires et accessoires, on retrouve du quartz (qui ne peut pas être détecté spectralement dans les domaines du VNIR et du SWIR car ne présentant pas d'absorptions spécifiques dans cette gamme spectrale), des micas comme la biotite et la muscovite, des feldspaths (qui comme le quartz ne présentent pas d'absorptions spécifiques dans le VNIR-SWIR) ainsi notamment que des oxydes et hydroxydes de fer (goethite, magnétite). On retrouve également dans certains cas d'autres argiles (illite, montmorillonite) et de l'hydroxyde d'aluminium (gibbsite) en haut de profil d'altération. La kaolinite se retrouve principalement au niveau de la zone de stockage (en bas à gauche de l'image) où les argiles sont triées en fonction de leur concentration en alumine et dans la zone d'extraction. Pour rappel, le spectre de réflectance de la kaolinite présente un doublet d'absorptions diagnostique à 2162 et 2206 nm et trois absorptions secondaires à 2312, 2355 et 2380 nm.

7.2.2 Mesures terrain réalisées

Pour les deux sites, une campagne de mesures a été effectuée sur le terrain en parallèle de l'acquisition des images hyperspectrales. Elle a permis le prélèvement d'échantillons directement dans les carrières pour réaliser des mesures en laboratoire. La présence de gypse, de calcite et d'argile a ainsi pu être confirmée. Également, lors de la campagne, des mesures spectroscopiques ont été réalisées pour aider à la correction atmosphérique des images hyperspectrales. Ainsi, plusieurs

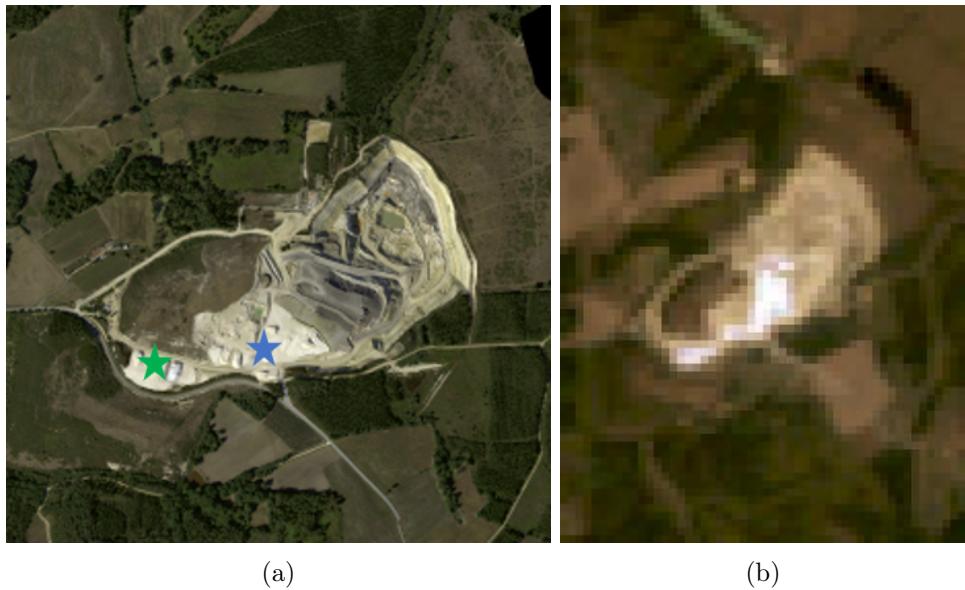


FIGURE 7.2 – Images (compositions colorées à partir des canaux spectraux associés au rouge, au vert et au bleu) acquises au-dessus de la carrière de Chevanceaux : (a) image HySpex. (b) image PRISMA. Les étoiles indiquent la localisation des pixels dont les spectres sont analysés Sect. 7.4.

surfaces réfléchissantes (blanches) au sol ont servi de zones de référence (données d'étalonnage). L'ensemble de ces mesures a été réalisé à l'aide d'un spectromètre ASD FieldSpec®FR3.

7.2.3 Acquisition et pré-traitement des images hyperspectrales

Les images hyperspectrales aériennes ont été acquises en septembre 2019 par deux caméras HySpex (<https://www.hyspex.com>), l'une couvrant le VNIR et l'autre le SWIR avec des résolutions spatiales et spectrales différentes. Les images dans les domaines du VNIR et du SWIR ont été acquises en même temps. Ainsi, la résolution spatiale des images est de 0,5 et 1 m pour respectivement le VNIR et le SWIR. Également, le nombre de bandes spectrales est de 160 dans le VNIR et de 162 dans le SWIR soit une résolution spectrale de respectivement 4 et 7 nm. Pour améliorer le RSB, les images ont été ré-échantillonnées à une résolution spatiale de 5 m.

L'image hyperspectrale satellitaire a été acquise sur le site de Chevanceaux en septembre 2020 par le capteur PRISMA [Loizzo et al., 2018]. Sa résolution spatiale est de 30 m et sa résolution spectrale de 10 nm (soit 234 bandes sur les domaines VNIR et SWIR).

Une correction atmosphérique a été réalisée sur les trois images avec les logiciels ATCOR-2/3 et ATCOR-4 [Richter and Schlapfer, 2012] pour respectivement les images satellitaire et aériennes. Les données d'étalonnage acquises lors des campagnes sur le terrain ont été utilisées. Enfin, deux masques spectraux, autour de 1400 et 1900 nm ont été appliqués pour retirer les effets des absorptions associées à la vapeur d'eau atmosphérique.

7.2.4 Préparation des procédures greedy-AGM et d'identification

Dans cette étude, les minéraux d'intérêt sont le gypse, la calcite et la kaolinite. Ainsi, seules les images HySpex dans le SWIR et la partie SWIR de l'image PRISMA sont utilisées car les absorptions de ces minéraux se situent toutes dans ce domaine spectral.

Le modèle du continuum est donc adapté pour ajuster uniquement la partie SWIR. Il s'ex-

prime par :

$$c(\lambda, \theta_c) = -c_0 - G_{eau}(\lambda, s_{eau}, \mu_{eau}, \sigma_{eau}). \quad (7.1)$$

La méthode de retrait du continuum utilisée par la procédure greedy-AGM reste valable pour ce modèle. Également, le dictionnaire défini pour l'étape de pré-estimation des absorptions dans greedy-AGM est adapté et ne contient pas de gaussiennes EGO centrées avant 1500 nm. Aucune autre modification n'est apportée à la procédure greedy-AGM et les réglages par défaut sont utilisés.

Le bruit dans les images est supposé additif gaussien. Ainsi, il est estimé préalablement pour les trois images par la procédure HySime [Bioucas-Dias and Nascimento, 2008]. La matrice de covariance Σ ainsi estimée est utilisée dans la procédure greedy-AGM.

La procédure d'identification ne nécessite pas de paramètres algorithmiques. Ainsi, la base de données des minéraux définie Chap. 6 est utilisée ici. Également, l'incertitude sur les paramètres n'étant pas estimée par la procédure greedy-AGM, on suppose que $\sigma_{\mu_e} = 5$ nm.

7.3 Résultats - Carrière de Cherves-Richemont

Le gypse et la calcite sont les deux principaux minéraux présents dans l'image HySpex acquise sur la carrière de Cherves-Richemont. Leurs spectres de réflectance issus des images, Fig. 7.3 (a) et 7.3 (b), sont facilement identifiables à partir de leurs absorptions diagnostiques et secondaires. Cependant, dans certaines zones de l'image, en particulier à proximité des routes et de l'usine, les spectres de gypse et de calcite sont mélangés. Il en résulte un spectre où les absorptions diagnostiques des deux minéraux sont présentes, Fig. 7.3 (c). Ainsi, dans la suite, la procédure greedy-AGM et la procédure d'identification sont appliquées à ces trois spectres.

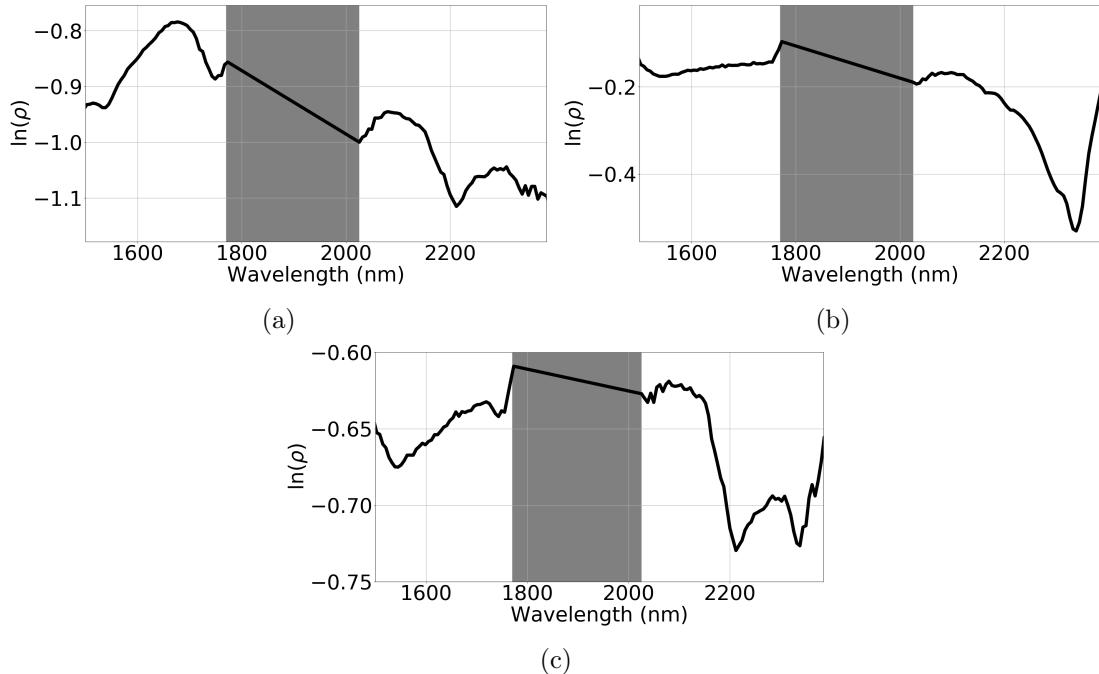


FIGURE 7.3 – Spectres de gypse (a), calcite (b) et mélange gypse-calcite (c) extraits de l'image HySpex.

7.3.1 Déconvolution spectrale par greedy-AGM

Les résultats de la déconvolution des spectres par la procédure greedy-AGM sont représentés Fig. 7.4.

Tout d'abord, l'absorption diagnostique du gypse à 1750 nm est retrouvée à sa position théorique ($\delta_\mu = -1$ nm). A noter que la somme des gaussiennes EGO à 1750 nm est $s = 0,16$. La large absorption secondaire à 2215 nm est décalée de quelques nanomètres ($\delta_\mu = -7$ nm) mais sa forme est ajustée par trois gaussiennes EGO dont deux de faible amplitude. Plusieurs fausses absorptions sont ajustées par des gaussiennes EGO larges. Il en résulte que le paramètre $c_0 = 0,67$. Cette déconvolution du spectre de gypse est satisfaisante car l'absorption diagnostique est retrouvée ainsi qu'une absorption secondaire.

Ensuite, l'absorption diagnostique de la calcite est ajustée par deux gaussiennes EGO : une modélisant la forme ($\mu = 2269$ nm) et l'autre donnant la position ($\mu = 2341$ nm). L'absorption secondaire est également retrouvée proche de sa position théorique ($\delta_\mu = 4$ nm). Le continuum estimé semble cohérent visuellement avec la forme générale du spectre dans le SWIR. Le paramètre c_0 est estimé à 0,07 Ainsi, la déconvolution du spectre de calcite est satisfaisante car les deux absorptions du minéral sont retrouvées.

Enfin, les absorptions diagnostiques du gypse et de la calcite sont retrouvées dans le spectre de mélange. Ainsi, l'absorption à 1750 nm du gypse est retrouvée par une gaussienne EGO mais son amplitude est réduite à cause de la forte asymétrie d'une autre gaussienne EGO compensant un artéfact. Cependant, la somme des gaussiennes EGO à 1750 nm est de 0,08, ce qui est inférieur de moitié par rapport au spectre de gypse. Également, la large absorption secondaire du gypse est retrouvée. Dans ce mélange, la forme de l'absorption diagnostique de la calcite est modifiée. Ainsi, elle est ajustée par une unique gaussienne EGO positionnée à 2235 nm. Enfin, malgré la présence d'un artéfact, la forme du continuum est correctement retrouvée et le paramètre $c_0 = 0,54$. Ces résultats de la procédure greedy-AGM sont satisfaisants car ils permettent d'envisager l'identification des spectres de mélanges à partir des positions estimées des absorptions. Également, les autres paramètres estimés (ex : s et c_0) permettent d'envisager une potentielle évaluation des proportions relatives de gypse et de calcite dans le mélange.

7.3.2 Identification des minéraux

La Fig. 7.5 représente les trois spectres extraits de l'images HySpex de Cherves-Richemont. Sont également indiquées les positions des gaussiennes EGO estimées par la procédure greedy-AGM et correspondantes aux absorptions diagnostiques et secondaires du gypse et de la calcite. Les résultats de la procédure d'identification sont donnés Tab. 7.1 pour les trois spectres.

Tout d'abord, le spectre du gypse est classé comme un mélange de gypse et de montmorillonite. En effet, la montmorillonite possède une unique absorption diagnostique proche de l'absorption secondaire du gypse à 2215 nm et est donc faussement identifiée. Ce problème est inhérent à l'identification, par la procédure proposée, des minéraux ayant une unique absorption diagnostique. Ensuite, le spectre de calcite est classé comme étant soit de la calcite soit de la dolomite (absorptions similaires). Cependant, l' Id_{score} de la calcite étant légèrement supérieur, elle est identifiée. En effet, les absorptions de la calcite et de la dolomite sont proches car elles appartiennent au même groupe minéralogique et les positions estimées à 2333 nm se situent entre leurs positions diagnostiques. Enfin, le spectre de mélange gypse-calcite est identifié comme un mélange de cinq minéraux : alunite, calcite, dolomite, gypse et montmorillonite. La présence d'alunite est due à une surestimation du nombre d'absorptions dans la procédure de déconvolution alors que la dolomite et la montmorillonite étaient déjà présentes pour les spectres "purs"

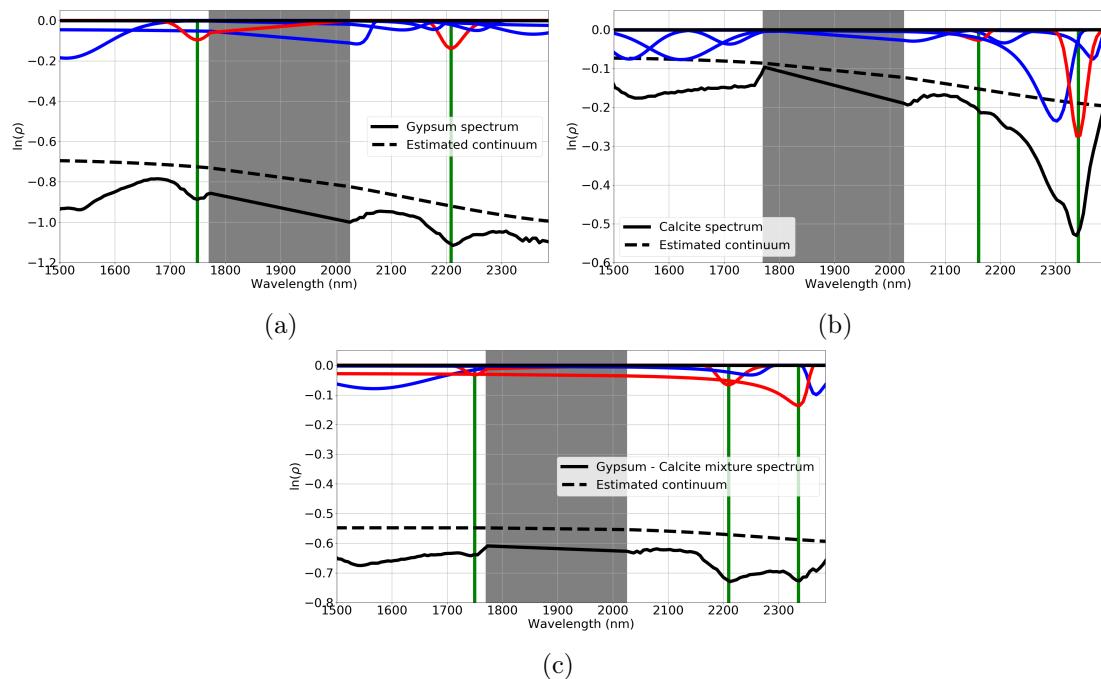


FIGURE 7.4 – Spectres de gypse (a), calcite (b) et mélange gypse-calcite (c) extraits de l'image HySpex (noir), continuum estimé (noir pointillé), gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires (rouge), autres gaussiennes EGO sélectionnées (bleu). Les centres des gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires sont indiqués par des lignes verticales (vert).

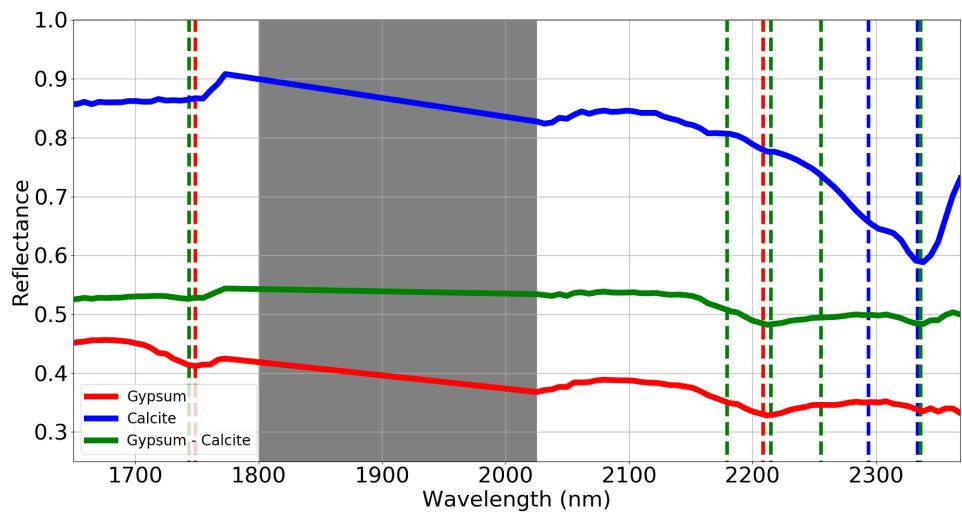


FIGURE 7.5 – Spectres de gypse (rouge), calcite (bleu) et mélange gypse-calcite (vert) extraits de l'image HySpex. Les positions des absorptions, estimées par greedy-AGM, sont représentées par les lignes verticales pointillées.

de gypse et de calcite. Une solution permettant d'éviter la fausse identification de la montmorillonite, de la dolomite et de l'alunite peut être d'utiliser les autres paramètres des absorptions (amplitude, largeur et asymétrie) pour améliorer la procédure d'identification.

Minéral	Gypse	Calcite	mélange Gypse - Calcite
-	Id_{score} / Classe	Id_{score} / Classe	Id_{score} / Classe
Alunite	3, 56 / Non identifié	3, 28 / Non identifié	7, 44 / Mélange
Calcite		5, 35 / Absorptions similaires	6, 03 / Mélange
Dolomite		5, 33 / Absorptions similaires	4, 70 / Mélange
Gypse	7, 72 / Mélange		6, 76 / Mélange
Montmorillonite	8, 25 / Mélange		9, 77 / Mélange

TABLE 7.1 – Résultats de la procédure d'identification pour les spectres extraits de l'image HySpex.

7.4 Résultats - Carrière de Chevanceaux

La kaolinite est le principal minéral observable dans les images HySpex et PRISMA acquises sur la carrière de Chevanceaux. Son spectre est facilement identifiable à partir de ses absorptions diagnostiques et secondaires. Cependant, dans la zone de stockage, les minéraux extraits sont triés en différents tas. Ainsi, le doublet de kaolinite varie en fonction du tas observé. Également, une absorption (à 2268 nm) possiblement due à la présence de gibbsite est visible dans certains spectres. Deux spectres issus de l'image HySpex sont représentés Fig. 7.6 pour illustrer ces variations.

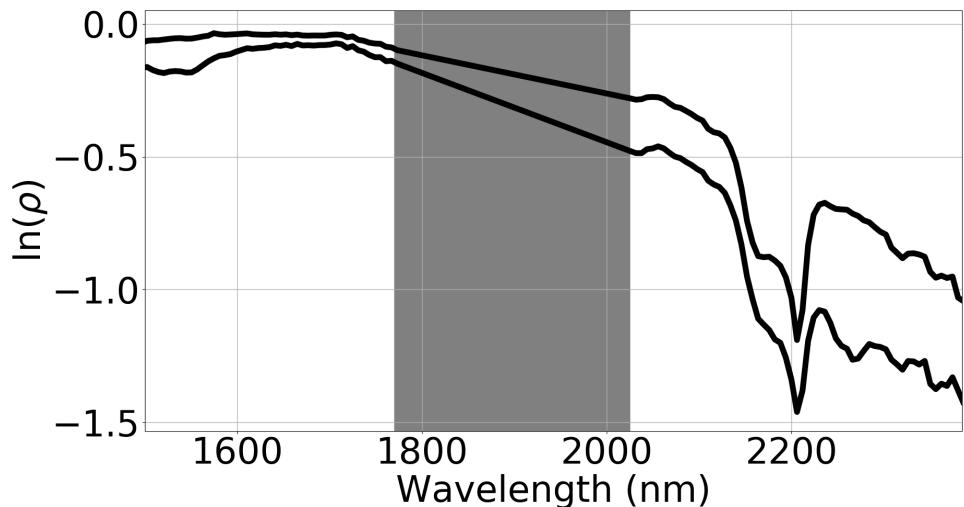


FIGURE 7.6 – Spectres de kaolinite issus de deux tas différents et extraits de l'image HySpex.

Dans la suite, les résultats de la procédure greedy-AGM appliquée à deux spectres de l'image HySpex sont présentés. Puis, une cartographie du site est réalisée à partir de l'amplitude estimée de la gaussienne EGO positionnée à 2206 nm. Cette cartographie est comparée à celle réalisée avec une méthode de *band ratio*. Enfin, la procédure d'identification des minéraux est appliquée à des spectres issus des images HySpex et PRISMA.

7.4.1 Déconvolution spectrale par greedy-AGM

Deux spectres issus de tas différents sont choisis dans l'image HySpex. Le premier correspond à un spectre "pur" de kaolinite alors que le second est un mélange de kaolinite et de gibbsite. Les résultats de la procédure greedy-AGM appliquée à ces deux spectres sont illustrés Fig. 7.7.

Comme attendu, le doublet d'absorptions de kaolinite est retrouvé par trois gaussiennes EGO pour les deux spectres. La première gaussienne EGO ajuste la forme du doublet alors que les deux autres sont positionnées proches des positions théoriques. Cependant, la gaussienne EGO ajustant la forme du doublet n'est pas identique pour les deux spectres. En effet, sa position et sa forme varient en fonction de la forme du doublet ($\mu = 2201$ nm, $\sigma = 17,6$ nm pour le spectre "pur" et $\mu = 2193$ nm, $\sigma = 21,5$ nm pour le spectre de mélange). Il est à noter que les deux autres gaussiennes ajustant le doublet sont peu impactées par ce changement. Ce résultat permet donc d'envisager l'identification du minéral à partir des positions estimées des absorptions. Également, d'autres études peuvent être envisagées à partir des paramètres estimés de la gaussienne EGO ajustant la forme du doublet (ex : cristalinité [Clark, 1999]).

Les absorptions secondaires de la kaolinite ne sont retrouvées que pour le spectre "pur". En effet, la gaussienne EGO associée à l'absorption de gibbsite dans le spectre de mélange présente une forte asymétrie qui empêche la procédure greedy-AGM d'ajuster les deux absorptions secondaires. Ainsi, l'absorption de gibbsite à 2260 nm est correctement retrouvée ($\delta_\mu = -1$ nm) même si sa forme dépend d'un artefact dû au retrait du continuum. Ce résultat de déconvolution permet donc l'identification du mélange kaolinite-gibbsite car les absorptions diagnostiques de ces deux minéraux sont retrouvées.

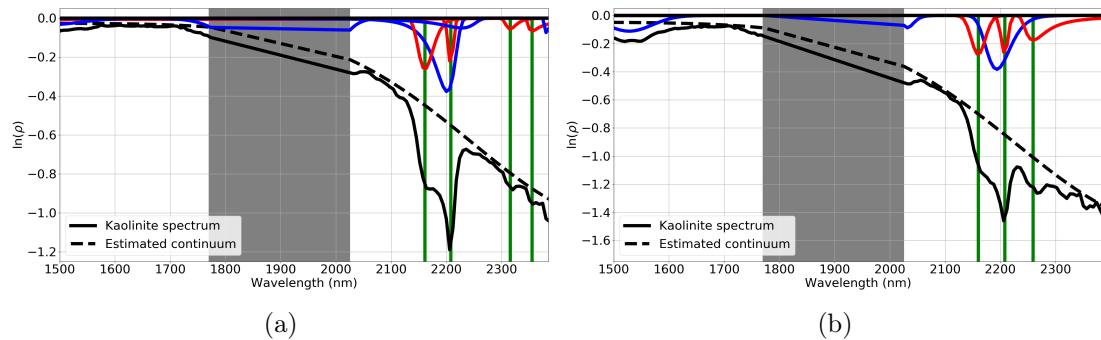


FIGURE 7.7 – Spectres de kaolinite "pur" (a) et mélange kaolinite-gibbsite (b) extraits de l'image HySpex (noir), continuum estimé (noir pointillé), gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires (rouge), autres gaussiennes EGO sélectionnées (bleu). Les centres des gaussiennes EGO ajustant les absorptions diagnostiques et secondaires sont indiqués par des lignes verticales (vert).

7.4.2 Cartographie

L'objectif de cette section est de montrer une exploitation des paramètres estimés autres que la position des absorptions. Ainsi, une cartographie de la carrière de Chevanceaux est réalisée à partir des amplitudes estimées par la procédure greedy-AGM sur l'image HySpex. Cette cartographie est comparée à celle réalisée à partir du rapport suivant :

$$R = \frac{0,275\rho(\lambda = 2127 \text{ nm}) + 0,725\rho(\lambda = 2236 \text{ nm})}{\rho(\lambda = 2206 \text{ nm})}. \quad (7.2)$$

En effet, ce rapport permet de quantifier la profondeur de l'absorption de kaolinite à 2206 nm en s'affranchissant du continuum. C'est un indice simple à utiliser mais qui nécessite des connais-

sances expertes sur le doublet de kaolinite pour être défini.

Tout d'abord, un masque spatial est défini manuellement pour ne conserver que les pixels de l'image correspondant à la carrière. Ensuite, le rapport R est calculé pour tous les pixels restants et seuls ceux ayant un rapport supérieur à 1,25 sont conservés. Cela correspond aux 6721 pixels formant la cartographie Fig. 7.8 (a). Les tas de kaolinite sont alors visibles et correspondent aux pixels ayant les rapports R les plus élevés.

La procédure greedy-AGM est appliquée à ces mêmes 6721 pixels. Pour tous les spectres, le doublet de kaolinite est ajusté par trois gaussiennes EGO. Ainsi, la somme à 2206 nm de la gaussienne EGO de forme et de celle à 2206 nm est calculée. L'amplitude résultante (la somme) permet alors de tracer la cartographie Fig. 7.8(b). Les tas de kaolinite sont ainsi visibles pour les valeurs d'amplitudes les plus élevées.

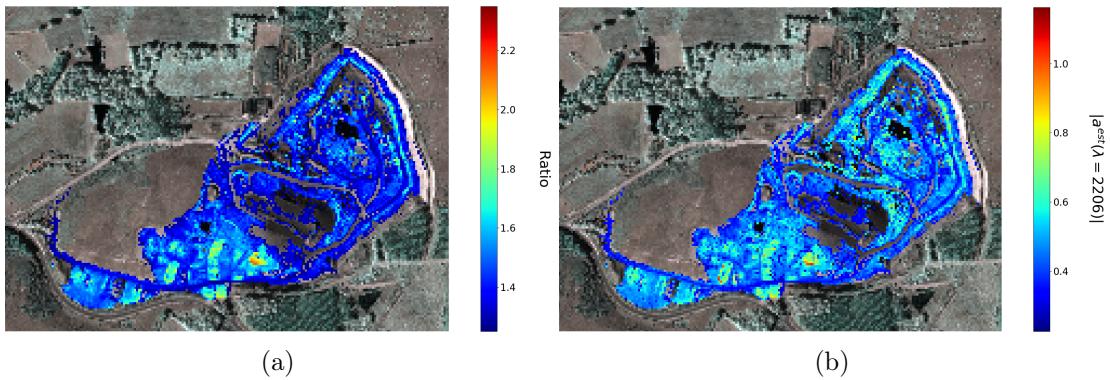


FIGURE 7.8 – Cartographies de la carrière de Chevanceaux obtenues par une méthode de *band ratio* (a) et par la procédure greedy-AGM (b). Les tas de minéraux sont particulièrement visibles en bas de la carrière.

Une comparaison pixel à pixel des deux cartographies n'est pas envisageable car la vérité terrain n'est pas connue. Une comparaison visuelle permet tout de même de démontrer le potentiel de la procédure greedy-AGM pour extraire diverses informations minéralogiques des spectres. En effet, le modèle EGO, ici utilisé, permet d'extraire toute l'information associée aux absorptions et au continuum ce qui n'est pas le cas des méthodes de *band ratio*.

7.4.3 Identification des minéraux

La Fig. 7.9 représente quatre spectres extraits des images HySpex et PRISMA de la carrière de Chevanceaux. Sont indiquées les positions des gaussiennes EGO estimées par la procédure greedy-AGM et correspondant aux absorptions diagnostiques et secondaires de kaolinite et de gibbsite. Il est à noter que l'absorption secondaire de kaolinite à 2380 nm est en dehors du domaine spectral d'étude pour l'image HySpex. Également, les absorptions secondaires de la kaolinite ne sont pas visibles dans les spectres extraits de l'image PRISMA. Enfin, même si l'absorption à 2260 nm de la gibbsite est retrouvée dans les spectres PRISMA, son amplitude est faible (proche du niveau de bruit). Les résultats de la procédure d'identification sont données Tab. 7.2 pour les quatre spectres.

D'une part, la montmorillonite est identifiée dans les quatre spectres étudiés. Cependant, il s'agit d'une fausse détection expliquée par le fait que ce minéral possède une unique absorption diagnostique proche du doublet d'absorption de kaolinite à 2206 nm. De la même manière, la dolomite est identifiée pour les spectres HySpex en raison de son unique absorption diagnostique à 2324 nm qui est proche des absorptions secondaires de la kaolinite. Également, la nontronite est

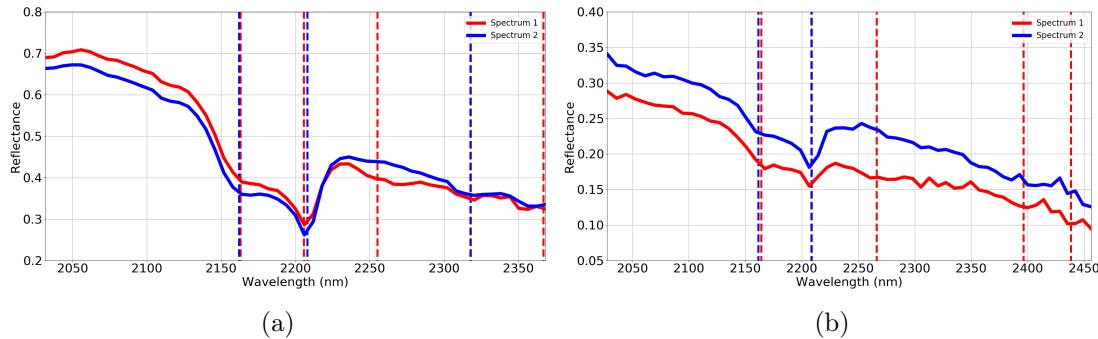


FIGURE 7.9 – Spectres de kaolinite issus de (a) l'image HySpex et (b) l'image PRISMA. Les positions des absorptions, estimées par greedy-AGM, sont représentées par les lignes verticales pointillées.

faussement identifiée pour un des spectres PRISMA à cause de son unique absorption diagnostique dans le SWIR à 2283 nm confondue avec l'absorption diagnostique de gibbsite. Ce problème est inhérent à l'identification, par la procédure proposée, des minéraux ayant une unique absorption diagnostique. Une solution permettant d'éviter ces fausses détections pourrait être d'utiliser les autres paramètres estimés des absorptions (amplitude, largeur et asymétrie) pour améliorer la procédure d'identification.

D'autre part, la kaolinite est identifiée pour les quatre spectres. Il est à noter que les valeurs d' Id_{score} de la kaolinite sont plus élevées pour les spectres HySpex que pour les spectres PRISMA car les positions secondaires ne sont pas retrouvées pour les seconds. De plus et comme attendu, la présence de gibbsite est détectée pour deux des spectres. Ainsi, la procédure permet d'identifier la kaolinite et les mélanges kaolinite-gibbsite.

Mineral	HySpex (spectre 1)	HySpex (spectre 2)	PRISMA (spectre 1)	PRISMA (spectre 2)
-	Id_{score} / Classe	Id_{score} / Classe	Id_{score} / Classe	Id_{score} / Classe
Dolomite	6, 10 / Mélange	6, 05 / Mélange		
Gibbsite	4, 53 / Mélange	3, 27 / Non identifié	6, 94 / Mélange	
Kaolinite	7, 76 / Mélange	9, 80 / Mélange	7, 59 / Mélange	6, 83 / Mélange
Montmorillonite	7, 71 / Mélange	8, 11 / Mélange	8, 21 / Mélange	8, 51 / Mélange
Nontonite		3, 27 / Non identifié	7, 24 / Mélange	

TABLE 7.2 – Résultats de la procédure d'identification pour les spectres extraits des images HySpex et PRISMA.

7.5 Conclusion

Dans ce chapitre, la campagne d'acquisitions réalisée dans le cadre de la thèse a été présentée. Les images aériennes et satellitaires acquises sur deux carrières en France ont ainsi permis d'appliquer les procédures développées au cours de la thèse. Trois minéraux d'intérêt sont identifiables dans ces images : calcite, gypse et kaolinite. Ainsi, les résultats de déconvolution et d'identification ont été discutés.

La procédure greedy-AGM a permis de retrouver les absorptions diagnostiques des trois minéraux. Cela démontre le potentiel de la procédure pour traiter des cas difficiles (absorptions proches, masques spectraux, etc.) à partir de spectres extraits d'images aériennes et satellitaires. Également, greedy-AGM permet d'extraire les caractéristiques spectrales dans le cas de mé-

langes, les absorptions étant retrouvées. D'autre part, la plupart des paramètres estimés par la procédure peuvent être utilisés pour générer des cartographies d'intérêt minéralogique. Ainsi, greedy-AGM offre la possibilité d'extraire en un unique traitement de nombreuses informations sur les caractéristiques du spectre.

La procédure d'identification a également permis de retrouver les minéraux présents dans les spectres à partir des positions estimées par la procédure greedy-AGM. Également, elle gère les mélanges spectraux. Cependant, il s'agit d'une preuve de concept qui nécessite encore certains développements techniques. Par exemple, les minéraux ayant une unique absorption diagnostique sont régulièrement identifiés sans être présents dans les spectres. L'utilisation des autres paramètres estimés par la procédure greedy-AGM pourrait permettre de solutionner cette limitation.

En conclusion, ces deux procédures permettent d'extraire les caractéristiques spectrales des spectres de réflectance et d'identifier les minéraux associés. Elles sont automatiques et ne nécessitent pas de réglages spécifiques à l'étude. Également, elles sont adaptées à l'étude de spectres laboratoire ou extraits d'images hyperspectrale aériennes et satellitaires.

Chapitre 8

Conclusions et perspectives

L'objectif de la thèse est l'identification et la caractérisation de minéraux par imagerie hyperspectrale aérienne et satellitaire. Pour cela, une approche en deux parties a été mise en place. Dans un premier temps, une procédure de déconvolution spectrale est proposée pour extraire les caractéristiques (continuum et absorptions) des spectres de réflectance des minéraux. Puis, dans un second temps, les paramètres estimés de ces caractéristiques sont utilisés pour identifier les minéraux. Cette approche se base sur un modèle physique décrivant les spectres de réflectance de minéraux. Également, la statistique du bruit est prise en compte. Enfin, les deux procédures mises en place sont validées sur des données synthétiques et de laboratoire ainsi que sur des images hyperspectrales issues d'une campagne réalisée au cours de la thèse.

L'apport principal est le développement d'une procédure de déconvolution spectrale automatique nommée greedy-AGM. Cette procédure permet d'estimer, sans connaissances *a priori*, les paramètres associés au continuum (la forme générale du spectre) et aux gaussiennes EGO (les absorptions). En particulier, le nombre de gaussiennes EGO est retrouvé automatiquement et plusieurs cas complexes peuvent être traités (ex : absorptions larges, asymétriques, proches en position et proches de masques spectraux, etc.). Également, les erreurs d'estimation (~ 5 nm pour les positions des absorptions) sont faibles et permettent d'envisager l'utilisation des paramètres pour identifier les minéraux. D'autre part, pour des données bruitées, la procédure greedy-AGM prend en compte la statistique du bruit si elle est connue. Comparée à d'autres méthodes, l'estimation des paramètres reste satisfaisante pour des SNR allant jusqu'à 30 dB (sur les exemples considérés Sect. 5.2.3). Enfin, la procédure est appliquée à divers spectres de laboratoire et les résultats spécifiques sont discutés.

Le second apport est la mise en place d'une procédure d'identification des minéraux à partir des positions estimées par la procédure greedy-AGM. Cette procédure est une preuve de concept automatisant l'identification des minéraux en prenant en compte la variabilité sur les positions théoriques des absorptions des minéraux de la base de données de référence. Il est à noter que des incertitudes sur les paramètres estimés pourraient être intégrés à la procédure (elles ne sont pas pour l'instant calculées par la procédure greedy-AGM). La procédure d'identification est donc automatique et ne nécessite pas de connaissances expertes pour être utilisée. Elle s'appuie uniquement sur une base de données rassemblant les positions théoriques des absorptions des minéraux. La procédure est validée sur des données synthétiques et permet de gérer les mélanges spectraux lorsque les positions diagnostiques des minéraux constituants sont retrouvées par greedy-AGM. Plusieurs évolutions peuvent être envisagées pour améliorer les performances de la procédure et limiter le risque de fausse identification. Par exemple, les autres paramètres estimés (amplitude, largeur, asymétrie) pourraient être utilisés pour confirmer ou infirmer le score d'identification. Enfin, des procédures similaires peuvent être envisagées pour caractériser les minéraux.

Une contribution importante de la thèse est l'application de ces procédures à des images issues d'une campagne réalisée au cours de la thèse. Dans un premier temps, les sites étudiés ainsi que les images hyperspectrales acquises sont décrits. Trois minéraux d'intérêts sont alors identifiables à partir des spectres de ces images : la calcite, le gypse et la kaolinite. Pour tous les spectres, la procédure greedy-AGM retrouve les absorptions diagnostiques des minéraux. Cela démontre le potentiel applicatif de la procédure pour des images aériennes et satellitaires. Également, l'utilisation des paramètres EGO estimés permet de réaliser diverses cartographies d'intérêt minéralogique. D'autre part, la procédure d'identification permet d'identifier les mélanges de calcite-gypse sur le site de Cherves-Richement ainsi que les mélanges kaolinite-gibbsite sur le site de Chevanceaux.

Ainsi, les procédures proposées dans cette thèse permettent d'identifier les minéraux à partir d'images hyperspectrales aériennes et satellitaires. Les deux procédures sont automatiques et ne nécessitent pas de connaissances expertes ou *a priori* pour être utilisées. Également, elles s'appuient sur des modèles physiques et prennent en compte le bruit instrumental. Ces travaux permettent ainsi d'envisager l'exploitation de nombreuses données hyperspectrales pour des études minéralogiques.

Chapitre 9

Annexe : bruit dans les images hyperspectrales

9.1 Modèles de bruit sur la luminance

9.1.1 Bruit signal indépendant

Le modèle classiquement utilisé en imagerie hyperspectrale est signal indépendant [Bioucas-Dias and Nascimento, 2008]. C'est-à-dire que la variance du bruit ne dépend pas du signal en entrée du capteur. Ainsi, la luminance acquise par le capteur s'exprime par :

$$L^{num}(\lambda) = G\alpha(\lambda)L^{inst}(\lambda) + \mu_{Dc}(\lambda) + \nu_{SI}(\lambda) \quad (9.1)$$

avec $\nu_{SI} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{Dc}^2(\lambda) + \sigma_{Rn}^2(\lambda))$ le bruit signal indépendant de moyenne nulle.

Ainsi, L^{num} suit une loi normale de moyenne $\mu_{L^{num}}$ et de variance $\sigma_{L^{num}}^2$ avec :

$$\begin{cases} \mu_{L^{num}}(\lambda) &= G\alpha(\lambda)L^{inst}(\lambda) + \mu_{Dc}(\lambda) \\ \sigma_{L^{num}}^2(\lambda) &= \sigma_{Dc}^2(\lambda) + \sigma_{Rn}^2(\lambda) \end{cases} \quad (9.2)$$

9.1.2 Bruit signal dépendant

Le modèle signal dépendant s'applique aux capteurs pour lesquels le bruit photonique ne peut être négligé. Avec l'évolution rapide des performances des capteurs hyperspectraux aériens et satellitaires, ce modèle tend à être de plus en plus utilisé [Foi et al., 2008, Meola et al., 2011, Acito et al., 2011].

Dans ce cas, la luminance acquise par le capteur s'exprime par :

$$L^{num}(\lambda) = G\alpha(\lambda)L^{inst}(\lambda) + \mu_{Dc}(\lambda) + \nu_{SI}(\lambda) + \nu_{SD}(\lambda) \quad (9.3)$$

avec $\nu_{SI} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{Dc}^2(\lambda) + \sigma_{Rn}^2(\lambda))$ le paramètre signal indépendant du bruit. Le paramètre signal dépendant, $\nu_{SD} \sim \mathcal{P}(\mu_N(\lambda))$ suit une loi de Poisson. Or, pour une loi de Poisson, $\mu_N(\lambda) = \sigma_N^2(\lambda)$ et donc σ_{SD}^2 , la variance du paramètre signal dépendant, est $\sigma_{SD}^2(\lambda) = \mu_N(\lambda)$.

Ainsi, de la même manière que pour le modèle signal indépendant, L^{num} suit une loi normale de moyenne $\mu_{L^{num}}$ et de variance $\sigma_{L^{num}}^2$ avec :

$$\begin{cases} \mu_{L^{num}}(\lambda) &= G\alpha(\lambda)L^{inst}(\lambda) + \mu_{Dc}(\lambda) \\ \sigma_{L^{num}}^2(\lambda) &= G^2\sigma_{SD}^2(\lambda) + \sigma_{Dc}^2(\lambda) + \sigma_{Rn}^2(\lambda) \end{cases} \quad (9.4)$$

Il est à noter que le bruit photonique s'applique avant la numérisation. Ainsi, le paramètre de numérisation G est présent dans l'expression de la variance.

Cependant, la moyenne μ_N du nombre de photons acquis correspond à la moyenne de la luminance moins la moyenne du courant d'obscurité [Meola et al., 2011] :

$$\begin{aligned}\mu_N(\lambda) &= \mu_{L^{num}}(\lambda) - \mu_{Dc}(\lambda) \\ &= G\alpha(\lambda)L^{inst}(\lambda)\end{aligned}\quad (9.5)$$

Ainsi, il est possible de réécrire la variance de la luminance telle que :

$$\sigma_{L^{num}}^2(\lambda) = \gamma_{SD}(\lambda)L^{inst}(\lambda) + \gamma_{SI}(\lambda) \quad (9.6)$$

avec :

$$\begin{cases} \gamma_{SD}(\lambda) &= G\alpha(\lambda) \\ \gamma_{SI}(\lambda) &= \sigma_{Dc}^2(\lambda) + \sigma_{Rn}^2(\lambda) \end{cases} \quad (9.7)$$

On nomme dans la suite γ_{SD} le paramètre signal dépendant et γ_{SI} le paramètre signal indépendant.

9.2 Hypothèse S^{atm} faible

Cette étude a pour objectif de discuter de l'hypothèse selon laquelle le paramètre S^{atm} (l'albédo sphérique de l'atmosphère), défini dans l'équation du transfert radiatif, est faible sur les domaines du VNIR et du SWIR. Cette hypothèse permet de réécrire l'Eq. (3.14) sans le terme S^{atm} et d'obtenir une relation linéaire entre la réflectance ρ et la luminance en entrée du capteur L_{sans}^{inst} :

$$L_{sans}^{inst}(\lambda) = L^{atm}(\lambda) + \frac{E^{sol}(\lambda) \cdot \rho(\lambda) \cdot T^{atm}(\lambda)}{\pi} \quad (9.8)$$

Dans le but de comparer L^{inst} et L_{sans}^{inst} , la métrique suivante, nommée *Rapport*, est mise en place :

$$Rapport(\lambda) = 100 \times \frac{L^{inst}(\lambda) - L_{sans}^{inst}(\lambda)}{L^{inst}(\lambda)}. \quad (9.9)$$

C'est un pourcentage qui décrit la différence entre L^{inst} et L_{sans}^{inst} et donc l'influence de S^{atm} . Dans la suite, L^{inst} et L_{sans}^{inst} sont simulées et comparées via la métrique *Rapport*.

La luminance, définie par le modèle de transfert radiatif, peut être simulée pour différentes réflectances de la surface, modèles atmosphériques, positions du Soleil par rapport à la surface, visibilités (présence d'aérosol) et altitudes du capteur. Cependant, parmi ces grandeurs, la réflectance de la surface et la présence d'aérosols entraînent les plus grandes variations dans les spectres de luminance. Ainsi, L^{inst} et L_{sans}^{inst} sont comparées pour plusieurs aérosols et différentes valeurs de réflectance. Il est à noter que l'outil COMANCHE, disponible au CEA, est utilisé pour réaliser ces simulations.

Plusieurs simulations sont ainsi réalisées avec des réflectances (supposées constantes) variant entre 0,1 et 0,7. Également, plusieurs modèles d'aérosols (rural, maritime, urbain) sont testés. Les résultats de ces simulations sont représentés Fig. 9.1.

Ainsi, l'hypothèse S^{atm} faible est cohérente pour des longueurs d'onde supérieures à 1000 nm. En effet, pour ces λ , les rapports sont inférieurs à 2% ce qui permet d'écrire que $L^{inst} \approx L_{sans}^{inst}$. Pour des longueurs d'onde inférieures à 1000 nm, l'hypothèse est valide pour uniquement des valeurs de réflectance faibles ($\rho < 0,5$). Cette étude n'a pas vocation de démontrer cette hypothèse mais juste de discuter de sa validité dans certains cas.

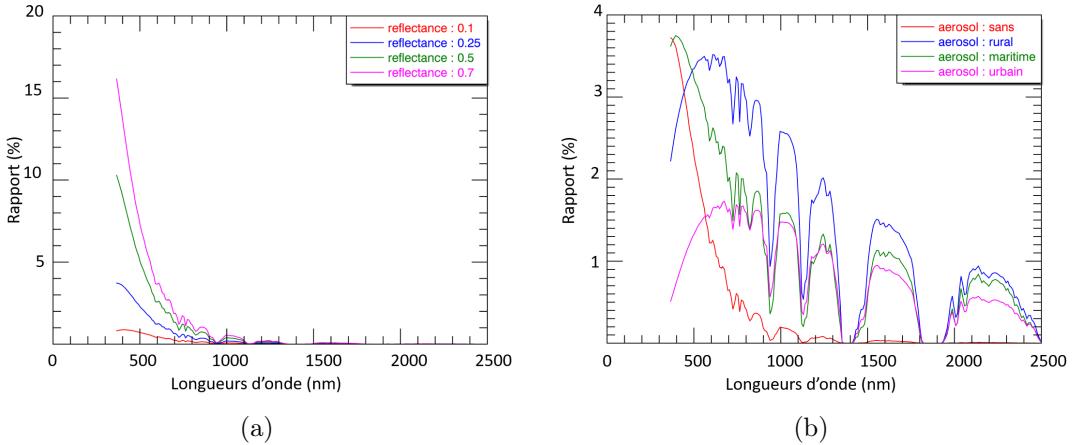


FIGURE 9.1 – Rapport pour différentes valeurs de réflectance (a) et plusieurs aérosols (b).

9.3 Étude du bruit pour le capteur AVIRIS

9.3.1 Objectifs et présentation des données

L'objectif de cette partie est de valider les modèles de bruit présentés ainsi que les méthodes d'estimation de la littérature. Pour cela, deux études sont menées. La première consiste à comparer les bruits estimés à ceux calculés à partir des caractéristiques du capteur. Cette étude valide à la fois les modèles et les méthodes d'estimation. La seconde étude a pour but de montrer le passage progressif d'un bruit signal indépendant à un bruit signal dépendant pour les images hyperspectrales AVIRIS.

9.3.2 Validation des modèles et des méthodes

Pour cette première étude, une image en luminance acquise par le capteur AVIRIS [Green et al., 1998] en 1997 sur le site de Lunar Lake est choisie. Les caractéristiques du capteur AVIRIS sont connues pour cette époque [Vane, 1987] ainsi que les données de calibration. Parmi les données de calibration, le courant d'obscurité a été mesuré et il est possible d'en déduire sa variance $\sigma_{D_c}^2$. Ensuite, en utilisant relation Eq. (3.13), il est possible de calculer la variance associée au bruit photonique. Enfin, le bruit total est calculé tel que :

$$\sigma_{tot}^2(\lambda) = \sigma_{P_h}^2(\lambda) + \sigma_{D_c}^2(\lambda) \quad (9.10)$$

Ces trois variances sont représentées Fig. 9.2.

Les trois variances calculées sont à présent comparées aux variances estimées par la procédure proposée par [Acito et al., 2011]. Les comparaisons pour chacune sont représentées Fig. 9.3.

L'ordre de grandeur et les tendances des trois variances calculées et estimées sont comparables et le bruit total est correctement retrouvé. La décomposition en paramètres signal dépendants et indépendants donne également des résultats satisfaisants même si le bruit photonique est surestimé. Il est à noter que le paramètre signal indépendant est fortement majoritaire. Ainsi, cette étude valide le modèle de bruit signal dépendant ainsi que la procédure proposée par [Acito et al., 2011] pour estimer les paramètres.

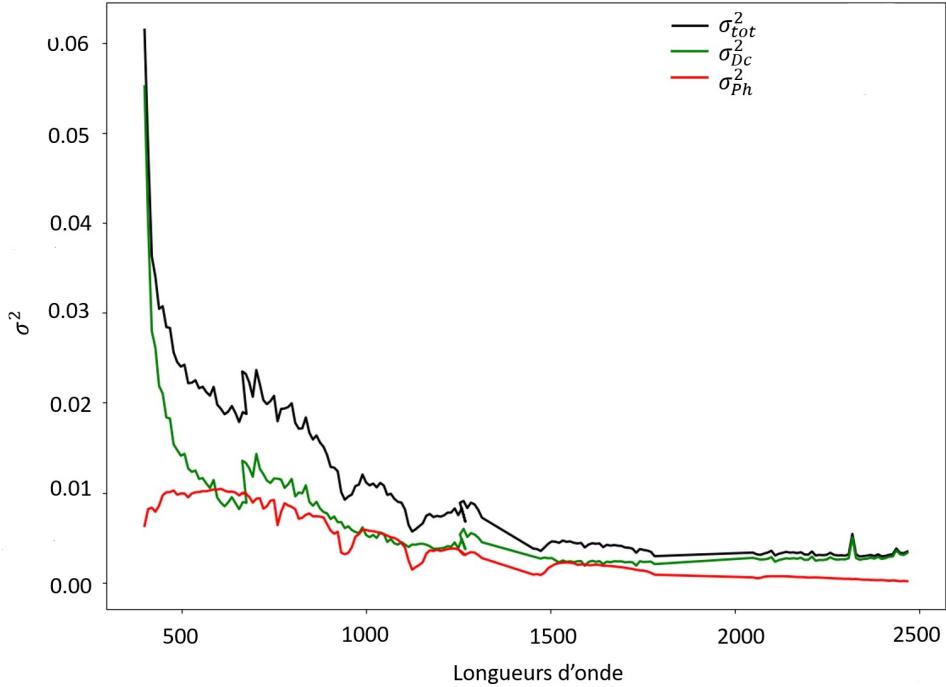


FIGURE 9.2 – Variances des bruits définies à partir des caractéristiques du capteur : courant d'obscurité (vert), bruit photonique (rouge) et bruit total (noir).

9.3.3 Évolution du bruit pour le capteur AVIRIS

Pour cette seconde étude, cinq images acquises par le capteur AVIRIS entre 1992 et 2009 sur le site de Lunar Lake sont utilisées. Pour chaque image, le bruit est estimé par la procédure proposée par [Acito et al., 2011].

Tout d'abord, la Fig. 9.4 présente les variances du bruit total estimées pour les différentes images. Comme attendu, une diminution significative de la variance est visible au cours des ans.

Ensuite, la Fig. 9.5 présente la décomposition en paramètres dépendant et indépendant des variances associées aux bruits totaux. Ainsi, le paramètre signal indépendant est majoritaire pour les années 1992 et 1994. Cependant, à partir de l'image acquise en 1997, les deux paramètres tendent à s'équilibrer.

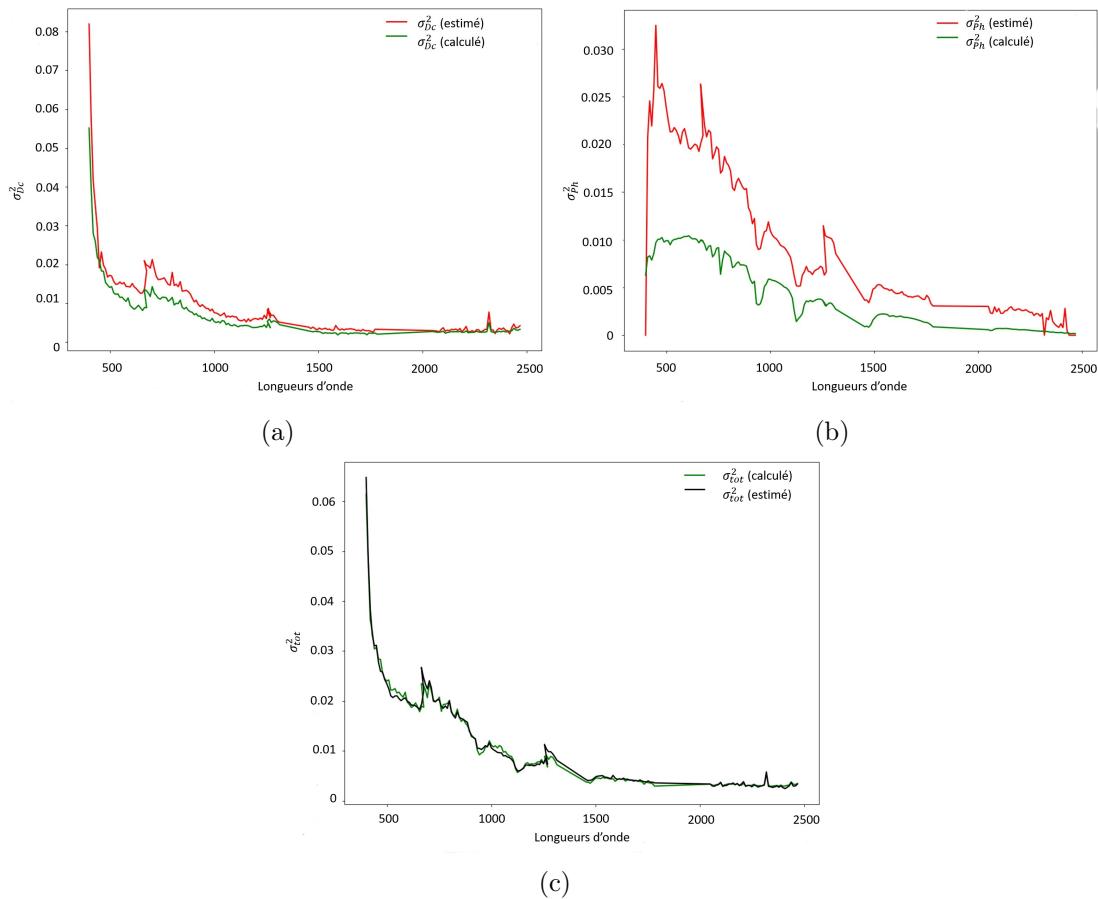


FIGURE 9.3 – Comparaison des bruits calculés et estimés. (a) Variances des paramètres signal indépendants estimés (rouge) et calculés (vert). (b) Variances des paramètres signal dépendants estimés (rouge) et calculés (vert). (c) Variances des σ_L^2 estimés (noir) et calculés (vert).

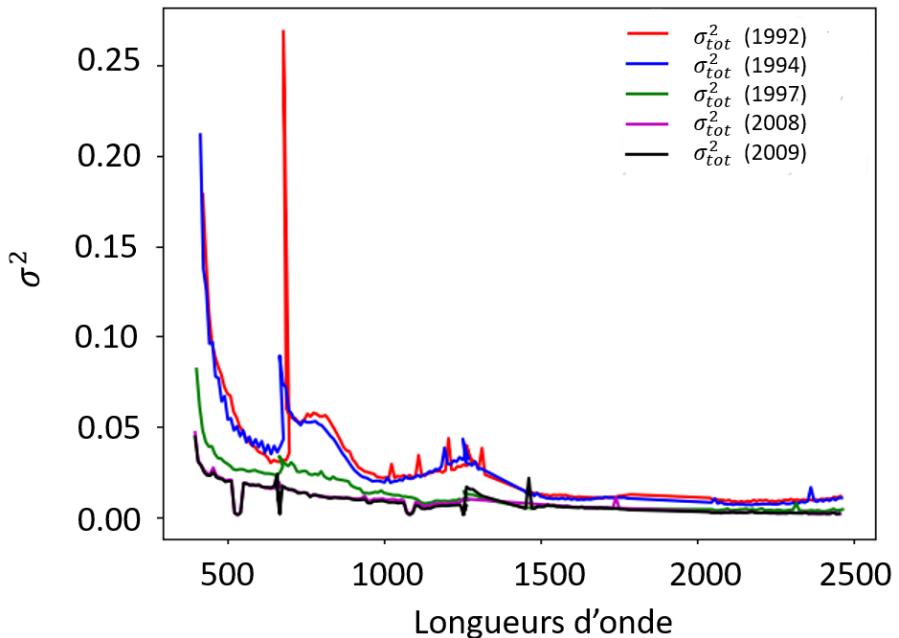


FIGURE 9.4 – Lunar Lake (AVIRIS) - Bruits totaux estimés sur plusieurs années.

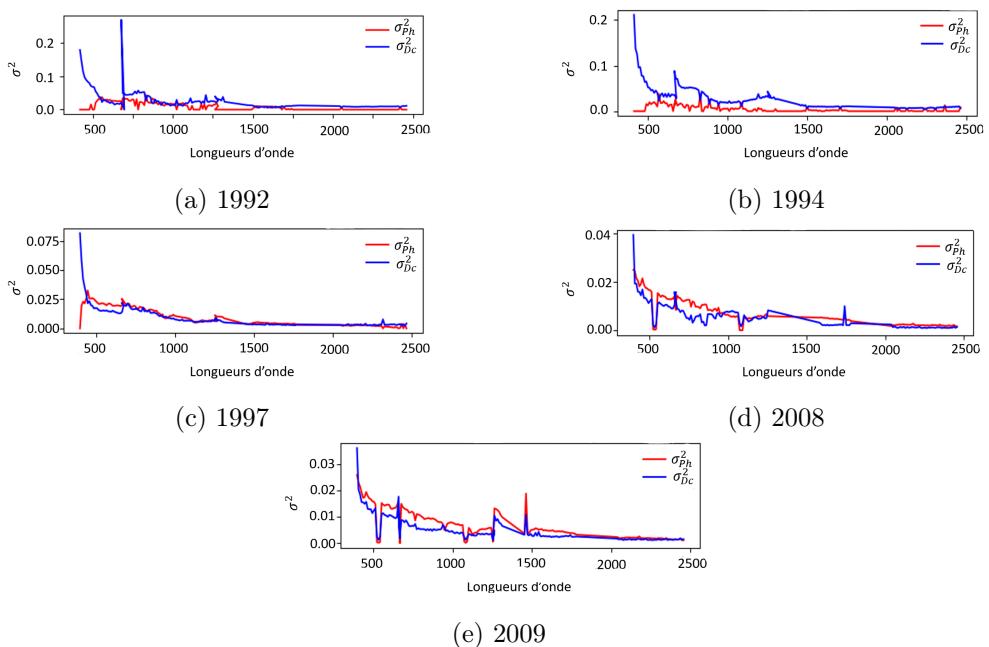


FIGURE 9.5 – Lunar Lake (AVIRIS) - Paramètres signal dépendant et indépendant estimés sur plusieurs années.

Bibliographie

- [Acito et al., 2011] Acito, N., Diani, M., and Corsini, G. (2011). Signal-dependent noise modeling and model parameter estimation in hyperspectral images. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 49(8) :2957–2971.
- [Adams, 1975] Adams, J. (1975). Interpretation of visible and near-infrared diffuse reflectance spectra of pyroxenes and other rock-forming minerals. *Infrared and Raman spectroscopy of lunar and terrestrial minerals*, pages 91–116.
- [Adão et al., 2017] Adão, T., Hruška, J., Pádua, L., Bessa, J., Peres, E., Moraes, R., and Sousa, J. J. (2017). Hyperspectral Imaging : A Review on UAV-Based Sensors, Data Processing and Applications for Agriculture and Forestry. *Remote Sens.*, 9(11).
- [Aiazzi et al., 2006] Aiazzi, B., Alparone, L., Barducci, A., Baronti, S., Marcoionni, P., Pippi, I., and Selva, M. (2006). Noise modelling and estimation of hyperspectral data from airborne imaging spectrometers. *Ann. Geophys.*, 49(1).
- [Akaike, 1974] Akaike, H. (1974). A new look at the statistical model identification. *IEEE Trans. Automat. Contr.*, 19(6) :716–723.
- [Alparone et al., 2009] Alparone, L., Selva, M., Aiazzi, B., Baronti, S., Butera, F., and Chiarantini, L. (2009). Signal-dependent noise modelling and estimation of new-generation imaging spectrometers. In *First Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing*, pages 1–4.
- [Asadzadeh and de Souza Filho, 2016] Asadzadeh, S. and de Souza Filho, C. R. (2016). A review on spectral processing methods for geological remote sensing. *Int. J. Appl. Earth Obs. Geoinf.*, 47 :69 – 90.
- [Baldridge et al., 2009] Baldridge, A., Hook, S., Grove, C., and Rivera, G. (2009). The ASTER spectral library version 2.0. *Remote Sens. Environ.*, 113(4) :711–715.
- [Bedini, 2011] Bedini, E. (2011). Mineral mapping in the Kap Simpson complex, central East Greenland, using HyMap and ASTER remote sensing data. *Advances in Space Research*, 47(1) :60 – 73.
- [Berg et al., 2016] Berg, B. L., Cloutis, E. A., Beck, P., Vernazza, P., Bishop, J. L., Takir, D., Reddy, V., Applin, D., and Mann, P. (2016). Reflectance spectroscopy (0.35–8 μ m) of ammonium-bearing minerals and qualitative comparison to Ceres-like asteroids. *Icarus*, 265 :218–237.
- [Berk et al., 2005] Berk, A., Anderson, G. P., Acharya, P. K., Bernstein, L. S., Muratov, L., Lee, J., Fox, M., Adler-Golden, S. M., Chetwynd, J. H., Hoke, M. L., Lockwood, R. B., Gardner, J. A., Cooley, T. W., Borel, C. C., and Lewis, P. E. (2005). MODTRAN 5 : a reformulated atmospheric band model with auxiliary species and practical multiple scattering options : update. In Shen, S. S. and Lewis, P. E., editors, *Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery XI*, volume 5806, pages 662 – 667. International Society for Optics and Photonics, SPIE.

- [Bernstein et al., 2005] Bernstein, L. S., Adler-Golden, S. M., Sundberg, R. L., Levine, R. Y., Perkins, T. C., Berk, A., Ratkowski, A. J., Felde, G., and Hoke, M. L. (2005). Validation of the QUick atmospheric correction (QUAC) algorithm for VNIR-SWIR multi- and hyperspectral imagery. In Shen, S. S. and Lewis, P. E., editors, *Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery XI*, volume 5806, pages 668 – 678. International Society for Optics and Photonics, SPIE.
- [Bevington et al., 1993] Bevington, P. R., Robinson, D. K., Blair, J. M., Mallinckrodt, A. J., and McKay, S. (1993). Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences. *Computers in Physics*, 7(4) :415–416.
- [Bioucas-Dias and Nascimento, 2008] Bioucas-Dias, J. M. and Nascimento, J. M. P. (2008). Hyperspectral subspace identification. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 46(8) :2435–2445.
- [Bioucas-Dias et al., 2013] Bioucas-Dias, J. M., Plaza, A., Camps-Valls, G., Scheunders, P., Nasrabadi, N., and Chanussot, J. (2013). Hyperspectral remote sensing data analysis and future challenges. *IEEE Geosci. Remote Sens. Mag.*, 1(2) :6–36.
- [Bioucas-Dias et al., 2012] Bioucas-Dias, J. M., Plaza, A., Dobigeon, N., Parente, M., Du, Q., Gader, P., and Chanussot, J. (2012). Hyperspectral unmixing overview : Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 5(2) :354–379.
- [Bishop et al., 1996] Bishop, J. L., Koeberl, C., Kralik, C., Fröschl, H., Enolert, P. A. J., Andersen, D. W., Pieters, C. M., and Wharton, R. A. (1996). Reflectance spectroscopy and geochemical analyses of Lake Hoare sediments, Antarctica : Implications for remote sensing of the Earth and Mars. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 60(5) :765–785.
- [Bishop et al., 2008] Bishop, J. L., Lane, M. D., Dyar, M. D., and Brown, A. J. (2008). Reflectance and emission spectroscopy study of four groups of phyllosilicates : Smectites, kaolinite-serpentines, chlorites and micas. *Clay Minerals*, 43(1) :35–54.
- [Bishop and Murad, 2005] Bishop, J. L. and Murad, E. (2005). The visible and infrared spectral properties of jarosite and alunite. *Am. Min.*, 90(7) :1100–1107.
- [Bishop et al., 1993] Bishop, J. L., Pieters, C. M., and Burns, R. G. (1993). Reflectance and Mössbauer spectroscopy of ferrihydrite-montmorillonite assemblages as Mars soil analog materials. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 57(19) :4583–4595.
- [Bishop et al., 1994] Bishop, J. L., Pieters, C. M., and Edwards, J. O. (1994). Infrared Spectroscopic Analyses on the Nature of Water in Montmorillonite. *Clays and Clay Minerals*, 42(6) :702–716.
- [Bishop et al., 2014] Bishop, J. L., Quinn, R., and Dyar, M. D. (2014). What lurks in the martian rocks and soil ? Investigations of sulfates, phosphates, and perchlorates. Spectral and thermal properties of perchlorate salts and implications for Mars. *American Mineralogist*, 99(8-9) :1580 – 1592.
- [Bourennane et al., 2018] Bourennane, S., Fossati, C., and Lin, T. (2018). Noise Removal Based on Tensor Modelling for Hyperspectral Image Classification. *Remote Sens.*, 10(9).
- [Branch et al., 1999] Branch, M. A., Coleman, T. F., and Li, Y. (1999). A subspace, interior, and conjugate gradient method for large-scale bound-constrained minimization problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(1) :1–23.
- [Brossard et al., 2016] Brossard, M., Marion, R., and Carrère, V. (2016). Deconvolution of SWIR reflectance spectra for automatic mineral identification in hyperspectral imaging. *Remote Sens. Lett.*, 7(6) :581–590.
- [Bruckstein et al., 2008] Bruckstein, A. M., Elad, M., and Zibulevsky, M. (2008). On the uniqueness of nonnegative sparse solutions to underdetermined systems of equations. *IEEE Trans. Inf. Theory*, 54(11) :4813–4820.

- [Burns, 1970] Burns, R. (1970). Site preferences of transition metal ions in silicate crystal structures. *Chem. Geol.*, 5(4) :275–283.
- [Burns, 1993] Burns, R. G. (1993). *Mineralogical applications of crystal field theory*. Cambridge Topics in Mineral Physics and Chemistry. Cambridge University Press, 2 edition.
- [Carmina, 2012] Carmina, E. (2012). *Impact des mélanges de minéraux à macro-échelle sur la réflectance spectrale de surfaces naturelles : étude empirique à partir de scénarios de terrain*. PhD thesis, Université de Nantes.
- [Chabrillat et al., 2011] Chabrillat, S., Eisele, A., Guillaso, S., Eisele, A., Rogals, C., Ben-Dor, E., and Kaufmann, H. (2011). HYSOMA : An easy-to-use software interface for soil mapping applications of hyperspectral imagery. *Proceedings of the 7th EARSeL SIG Imaging Spectroscopy Workshop*.
- [Chandrasekhar, 1960] Chandrasekhar, S. (1960). *Radiative transfer*. Dover Publications Inc.
- [Chapman et al., 2019] Chapman, J. W., Thompson, D. R., Helmlinger, M. C., Bue, B. D., Green, R. O., Eastwood, M. L., Geier, S., Olson-Duvall, W., and Lundein, S. R. (2019). Spectral and Radiometric Calibration of the Next Generation Airborne Visible Infrared Spectrometer (AVIRIS-NG). *Remote Sens.*, 11(18).
- [Clark, 1981] Clark, R. N. (1981). Water frost and ice : The near-infrared spectral reflectance 0.65–2.5 μm . *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 86 :3087–3096.
- [Clark, 1999] Clark, R. N. (1999). *Manual of remote sensing, volume 3, remote sensing for the Earth sciences*, chapter 1 : Spectroscopy of rocks and minerals, and principles of spectroscopy, pages 3–58. John Wiley and Sons, New York.
- [Clark et al., 1990] Clark, R. N., King, T. V., Klejwa, M., Swayze, G. A., and Vergo, N. (1990). High spectral resolution reflectance spectroscopy of minerals. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 95(B8) :12653–12680.
- [Clark and Roush, 1984] Clark, R. N. and Roush, T. L. (1984). Reflectance spectroscopy : Quantitative analysis techniques for remote sensing applications. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 89(B7) :6329–6340.
- [Clark et al., 2003] Clark, R. N., Swayze, G. A., Livo, K. E., Kokaly, R. F., Sutley, S. J., Dalton, J. B., McDougal, R. R., and Gent, C. A. (2003). Imaging spectroscopy : Earth and planetary remote sensing with the USGS Tetracorder and expert systems. *J. Geophys. Res. Planets*, 108(E12) :5131.
- [Clenet, 2009] Clenet, H. (2009). *Télédétection hyperspectrale : minéralogie et pétrologie, application au volcan Syrtis Major (Mars) et à l'ophiolite d'Oman*. PhD thesis, Université Paul Sabatier, Toulouse 3.
- [Clénet et al., 2011] Clénet, H., Pinet, P., Daydou, Y., Heuripeau, F., Rosemburg, C., Baratoux, D., and Chevrel, S. (2011). A new systematic approach using the Modified Gaussian Model : Insight for the characterization of chemical composition of olivines, pyroxenes and olivine–pyroxene mixtures. *Icarus*, 213(1) :404 – 422.
- [Cloutis et al., 2010] Cloutis, E. A., Grasby, S. E., Last, W. M., Léveillé, R., Osinski, G. R., and Sherriff, B. L. (2010). Spectral reflectance properties of carbonates from terrestrial analogue environments : Implications for Mars. *Planet. Space Sci.*, 58(4) :522 – 537.
- [Cloutis et al., 2006] Cloutis, E. A., Hawthorne, F. C., Mertzman, S. A., Krenn, K., Craig, M. A., Marcino, D., Methot, M., Strong, J., Mustard, J. F., Blaney, D. L., Bell, J. F., and Vilas, F. (2006). Detection and discrimination of sulfate minerals using reflectance spectroscopy. *Icarus*, 184(1) :121 – 157.
- [Combe, 2005] Combe, J. P. (2005). *Études des surfaces planétaires par télédétection visible-infrarouge hyperspectrale*. PhD thesis, Université de Nantes.

- [Combe et al., 2005] Combe, J.-P., Launeau, P., Carrère, V., Despan, D., Méléder, V., Barillé, L., and Sotin, C. (2005). Mapping microphytobenthos biomass by non-linear inversion of visible-infrared hyperspectral images. *Remote Sens. Environ.*, 98(4) :371–387.
- [Crowley et al., 2003] Crowley, J., Williams, D., Hammarstrom, J., Piatak, N., Chou, I., and Mars, J. (2003). Spectral reflectance properties (0,4-2,5 μ m) of secondary Fe-oxide, Fe-hydroxide, and Fe-sulphate-hydrate minerals associated with sulphide-bearing mine wastes. *Geochem. : Explor. Environ. Anal.*, 3(3) :219–228.
- [Crowley and Vergo, 1988] Crowley, J. K. and Vergo, N. (1988). Near-Infrared Reflectance Spectra of Mixtures of Kaolin-Group Minerals : Use in Clay Mineral Studies. *Clays and Clay Minerals*, 36(4) :310–316.
- [Cudahy, 1997] Cudahy, T. (1997). PIMA-II spectral characteristics of natural kaolins. Technical report, CSIRO / AMIRA Project P435, Exploration Mining Report 420R.
- [Dalm et al., 2017] Dalm, M., Buxton, M. W. N., and van Ruitenbeek, F. J. A. (2017). Discriminating ore and waste in a porphyry copper deposit using short-wavelength infrared (SWIR) hyperspectral imagery. *Minerals Engineering*, 105 :10 – 18.
- [De Ridder et al., 2005] De Ridder, F., Pintelon, R., Schoukens, J., and Gillikin, D. P. (2005). Modified AIC and MDL model selection criteria for short data records. *IEEE Trans. Instrum. Meas.*, 54(1) :144–150.
- [Dobigeon et al., 2014] Dobigeon, N., Tourneret, J.-Y., Richard, C., Bermudez, J. C., McLaughlin, S., and Hero, A. O. (2014). Nonlinear Unmixing of Hyperspectral Images : Models and Algorithms. *IEEE Sig. Proc. Mag.*, 31(1) :82–94.
- [Drumetz, 2016] Drumetz, L. (2016). *Endmember Variability in hyperspectral image unmixing*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes.
- [Du et al., 2006] Du, P., Kibbe, W. A., and Lin, S. M. (2006). Improved peak detection in mass spectrum by incorporating continuous wavelet transform-based pattern matching. *Bioinformatics*, 22(17) :2059–2065.
- [Farmer, 1974] Farmer, V. C. (1974). *The Infrared Spectra of Minerals*. Mineralogical Society of Great Britain and Ireland.
- [Farr et al., 1980] Farr, T. G., Bates, B. A., Ralph, R. L., and Adams, J. B. (1980). Effects of overlapping optical absorption bands of pyroxene and glass on the reflectance spectra of lunar soils. In *Lunar and Planetary Science Conference Proceedings*, volume 11, pages 719–729.
- [Flahaut et al., 2017] Flahaut, J., Martinot, M., Bishop, J. L., Davies, G. R., and Potts, N. J. (2017). Remote sensing and in situ mineralogic survey of the Chilean salars : An analog to Mars evaporate deposits ? *Icarus*, 282 :152 – 173.
- [Foi et al., 2008] Foi, A., Trimeche, M., Katkovnik, V., and Egiazarian, K. (2008). Practical Poissonian-Gaussian Noise Modeling and Fitting for Single-Image Raw-Data. *IEEE Trans. Image Process.*, 17(10) :1737–1754.
- [Gaffey, 1986] Gaffey, S. J. (1986). Spectral reflectance of carbonates minerals in the visible and near-infrared (0.35 – 2.55 microns) : Calcite, aragonite and dolomite. *Am. Minerals*, 712 :151–162.
- [Gaffey, 1987] Gaffey, S. J. (1987). Spectral reflectance of carbonates minerals in the visible and near-infrared (0.35 – 2.55 microns) : Anhydrous carbonate minerals. *J. Geophys. Res.*, 92 :1429–1440.
- [Gallie et al., 2008] Gallie, E. A., Lyder, D. A., Rivard, B., and Cloutis, E. A. (2008). Technical Note : Equivalence of modified Gaussian model (MGM) in wavenumber and Gaussian in wavelength for deconvolution of hyperspectral reflectance spectra. *Int. J. Remote Sens.*, 29(14) :4089–4096.

- [Gao et al., 2008] Gao, L.-R., Zhang, B., Zhang, X., Zhang, W.-J., and Tong, Q.-X. (2008). A New Operational Method for Estimating Noise in Hyperspectral Images. *IEEE Geosci. Remote. Sens. Lett.*, 5(1) :83–87.
- [Green et al., 1998] Green, R. O., Eastwood, M. L., Sarture, C. M., Chrien, T. G., Aronsson, M., Chippendale, B. J., Faust, J. A., Pavri, B. E., Chovit, C. J., Solis, M., Olah, M. R., and Williams, O. (1998). Imaging Spectroscopy and the Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer (AVIRIS). *Remote Sens. Environ.*, 65(3) :227–248.
- [Guanter et al., 2015] Guanter, L., Kaufmann, H., Segl, K., and et al, S. F. (2015). The EnMAP spaceborne imaging spectroscopy mission for Earth observation. *Remote Sensing*, 7(7) :8830–8857.
- [Guo, 2011] Guo, H. (2011). A Simple Algorithm for Fitting a Gaussian Function [DSP Tips and Tricks]. *IEEE Signal Process. Mag.*, 28(5) :134–137.
- [Hamlin et al., 2011] Hamlin, L., Green, R. O., Mouroulis, P., Eastwood, M., Wilson, D., Dudik, M., and Paine, C. (2011). Imaging spectrometer science measurements for terrestrial ecology : AVIRIS and new developments. In *Aerospace Conference*, pages 1–7.
- [Hecker et al., 2019] Hecker, C., van Ruitenbeek, F. J. A., van der Werff, H. M. A., Bakker, W. H., Hewson, R. D., and van der Meer, F. D. (2019). Spectral absorption feature analysis for finding ore : A tutorial on using the method in geological remote sensing. *IEEE Geosci. Remote Sens. Mag.*, 7(2) :51–71.
- [Hiroi et al., 2000] Hiroi, T., Pieters, C. M., and Noble, S. K. (2000). Improved Scheme of Modified Gaussian Deconvolution for Reflectance Spectra of Lunar Soils. In *Lunar and Planetary Science Conference*, Lunar and Planetary Science Conference, page 1548.
- [Hong et al., 2019] Hong, D., Yokoya, N., Chanussot, J., and Zhu, X. X. (2019). An Augmented Linear Mixing Model to Address Spectral Variability for Hyperspectral Unmixing. *IEEE Trans. Image Process.*, 28(4) :1923–1938.
- [Hunt, 1977] Hunt, G. R. (1977). Sprectral signatures of particulate minerals in the visible and near infrared. *Geophys.*, 42(3) :501 – 513.
- [Hunt and Salisbury, 1970] Hunt, G. R. and Salisbury, J. W. (1970). Visible and near-infrared spectra of minerals ans rocks : I. Silicate minerals. *Mod. Geol.*, 1 :283–300.
- [Hunt and Salisbury, 1971] Hunt, G. R. and Salisbury, J. W. (1971). Visible and near-infrared spectra of minerals ans rocks : II. Carbonates. *Mod. Geol.*, 2 :23–30.
- [Hunt et al., 1971a] Hunt, G. R., Salisbury, J. W., and Lenhoff, C. (1971a). Visible and near-infrared spectra of minerals ans rocks : III. Oxides and hydroxides. *Mod. Geol.*, 2 :195–205.
- [Hunt et al., 1971b] Hunt, G. R., Salisbury, J. W., and Lenhoff, C. (1971b). Visible and near-infrared spectra of minerals ans rocks : IV. Sulphides and sulphates. *Mod. Geol.*, 3 :1–14.
- [Hunt et al., 1973] Hunt, G. R., Salisbury, J. W., and Lenhoff, C. (1973). Visible and near-infrared spectra of minerals ans rocks : VI. Additional silicates. *Mod. Geol.*, 4 :85–106.
- [Kaper et al., 1966] Kaper, H., Smits, D., Schwarz, U., Takakubo, K., and Woerden, H. (1966). Computer Analysis of Observed Distributions into Gaussian Components. *Bulletin of the Astronomical Institutes of the Netherlands*, 18 :465–487.
- [Kodikara and McHenry, 2020] Kodikara, G. R. L. and McHenry, L. J. (2020). Machine learning approaches for classifying lunar soils. *Icarus*, 345 :113719.
- [Kokaly et al., 2017] Kokaly, R., Clark, R. N., Swayze, G., Livo, K. E., Hoefen, T., Pearson, N., Wise, R., Benzel, W., Lowers, H., and Driscoll, R. L. (2017). USGS Spectral Library Version 7. Report, U.S. Geological Survey.
- [Kopačková and Koucká, 2017] Kopačková, V. and Koucká, L. (2017). Integration of Absorption Feature Information from Visible to Longwave Infrared Spectral Ranges for Mineral Mapping. *Remote Sens.*, 9(10).

- [Kruse and Hauff, 1991] Kruse, F. A. and Hauff, P. L. (1991). Identification of illite polytype zoning in disseminated gold deposits using reflectance spectroscopy and X-ray diffraction-potential for mapping with imaging spectrometers. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 29(1) :101–104.
- [Kruse et al., 1993] Kruse, F. A., Lefkoff, A. B., and Dietz, J. B. (1993). Expert system-based mineral mapping in northern death valley, California/Nevada, using the Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer (AVIRIS). *Remote Sens. Environ.*, 44(2) :309–336.
- [Leon et al., 2019] Leon, G., Gonzalez, C., Mayo, R., Mozos, D., and Quintana-Orti, E. (2019). Noise estimation for hyperspectral subspace identification on FPGAs. *The Journal of Supercomputing*, 75(3) :1323–1335.
- [Li et al., 2013] Li, Q., He, X., Wang, Y., Liu, H., Xu, D., and Guo, F. (2013). Review of spectral imaging technology in biomedical engineering : Achievements and challenges. *J. Biomed. Opt.*, 18 :100901.
- [Livo and Clark, 2014] Livo, K. E. and Clark, R. N. (2014). The Tetracorder user guide : version 4.4. Technical report, U.S. Geological Survey, Reston, VA. Report.
- [Loizzo et al., 2018] Loizzo, R., Guarini, R., Longo, F., Scopa, T., Formaro, R., Facchinetti, C., and Varacalli, G. (2018). Prisma : The Italian hyperspectral mission. In *IEEE Int. Geosc. Rem. Sens. Symp.*, pages 175–178.
- [Makarewicz et al., 2009] Makarewicz, H. D., Parente, M., and Bishop, J. L. (2009). Deconvolution of VNIR spectra using modified Gaussian modeling (MGM) with automatic parameter initialization (API) applied to CRISM. In *IEEE Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing*, pages 1–5.
- [Mamdani and Assilian, 1975] Mamdani, E. H. and Assilian, S. (1975). An experiment in linguistic synthesis with a fuzzy logic controller. *Int. J. Man-Mach. Stud.*, 7(1) :1–13.
- [Marion and Carrère, 2018] Marion, R. and Carrère, V. (2018). Mineral mapping using the Automatized Gaussian Model (AGM) - Application to two industrial French sites at Gardanne and Thann. *Remote Sens.*, 10(1).
- [McCord et al., 1981] McCord, T. B., Clark, R. N., Hawke, B. R., McFadden, L. A., Owensby, P. D., Pieters, C. M., and Adams, J. B. (1981). Moon : Near-infrared spectral reflectance, A first good look. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 86(B11) :10883–10892.
- [McCraig et al., 2017] McCraig, M. A., Osinski, G. R., Cloutis, E. A., and et al, R. L. F. (2017). Fitting the curve in Excel® : Systematic curve fitting of laboratory and remotely sensed planetary spectra. *Comp. Geosci.*, 100 :103–114.
- [McFadden and Cline, 2005] McFadden, L. A. and Cline, T. P. (2005). Spectral reflectance of Martian meteorites : Spectral signatures as a template for locating source region on Mars. *Meteorit. Planet. Sci.*, 40(2) :151–172.
- [Meola et al., 2011] Meola, J., Eismann, M. T., Moses, R. L., and Ash, J. N. (2011). Modeling and estimation of signal-dependent noise in hyperspectral imagery. *Appl. Opt.*, 50(21) :3829–3846.
- [Mielke et al., 2016] Mielke, C., Rogass, C., Boesche, N., Segl, K., and Altenberger, U. (2016). EnGeoMAP 2.0—Automated Hyperspectral Mineral Identification for the German EnMAP Space Mission. *Remote Sens.*, 8(2).
- [Moré, 1978] Moré, J. (1978). The Levenberg-Marquardt algorithm : Implementation and theory. In Watson, G. A., editor, *Numer. Anal.*, pages 105–116, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg.
- [Mulder et al., 2013] Mulder, V. L., Plötze, M., de Bruin, S., Schaepman, M. E., Mavris, C., Kokaly, R. F., and Egli, M. (2013). Quantifying mineral abundances of complex mixtures by coupling spectral deconvolution of SWIR spectra (2.1–2.4 μm) and regression tree analysis. *Geoderma*, 207-208 :279 – 290.

- [Mustard and Sunshine, 1999] Mustard, J. and Sunshine, J. (1999). *Spectral analysis for earth science investigation*, volume 3, chapter 5. John Wiley, 3 edition.
- [Nguyen et al., 2019] Nguyen, T. T., Idier, J., Souussen, C., and Djermoune, E. (2019). Non-negative orthogonal greedy algorithms. *IEEE Trans. Signal Process.*, 67(21) :5643–5658.
- [Pearlman et al., 2001] Pearlman, J., Carman, S., Segal, C., Jarecke, P., Clancy, P., and Browne, W. (2001). Overview of the Hyperion Imaging Spectrometer for the NASA EO-1 mission. In *IGARSS 2001. Scanning the Present and Resolving the Future. Proceedings.*, volume 7, pages 3036 – 3038.
- [Perez-Pueyo et al., 2009] Perez-Pueyo, R., Soneira, M. J., Castanys, M., and Ruiz-Moreno, S. (2009). Fuzzy Approach for Identifying Artistic Pigments with Raman Spectroscopy. *Appl. Spectrosc.*, 63(8) :947–957.
- [Pieters, 1983] Pieters, C. M. (1983). Strength of mineral absorption features in the transmitted component of near-infrared reflected light : First results from RELAB. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 88(B11) :9534–9544.
- [Pinet et al., 2009] Pinet, P., Clenet, H., Heuripeau, F., Chevrel, S., Rosemberg, C., Daydou, Y., Toplis, M., and Baratoux, D. (2009). Mafic Mineralogy of Martian Meteorites Based on a Systematic Deconvolution Using an Improved Modified Gaussian Model (MGM) Approach. In *Lunar and Planetary Science Conference*, Lunar and Planetary Science Conference, page 1612.
- [Pompilio et al., 2010] Pompilio, L., Pedrazzi, G., Cloutis, E. A., Craig, M. A., and Roush, T. L. (2010). Exponential Gaussian approach for spectral modelling : The EGO algorithm II. Band asymmetry. *Icarus*, 208(2) :811 – 823.
- [Pompilio et al., 2009] Pompilio, L., Pedrazzi, G., Sgavetti, M., Cloutis, E. A., Craig, M. A., and Roush, T. L. (2009). Exponential Gaussian approach for spectral modeling : The EGO algorithm I. Band saturation. *Icarus*, 201(2) :781 – 794.
- [Pompilio et al., 2014] Pompilio, L., Pepe, M., Pedrazzi, G., and Marinangeli, L. (2014). Informational clustering of hyperspectral data. *IEEE J. Sel. Top. Appl. Earth. Obs. Remote Sens.*, 7(6) :2209–2223.
- [Pontual et al., 2008] Pontual, S., Merry, N., and Gamson, P. (2008). *Spectral interpretation field manual. GMEX spectral analysis guides for mineral exploration*, volume 1. AusSpec Int. Ltd., Victoria, 3 edition.
- [Pontual et al., 2010] Pontual, S., Merry, N., and Gamson, P. (2010). GMEX : Guides for Mineral EXploration : Spectral interpretation field manual. *AusSpec International Ltd. : Queenstown, New Zealand*, 1 :191.
- [Powell, 1998] Powell, M. J. D. (1998). Direct search algorithms for optimization calculations. *Acta Numerica*, 7 :287–336.
- [Rialland et al., 2021a] Rialland, R., Carrère, V., Marion, R., and Souussen, C. (2021a). Identification of minerals from hyperspectral imaging based on a fuzzy logic approach. In Velez-Reyes, M. and Messinger, D. W., editors, *Algorithms, Technologies, and Applications for Multispectral and Hyperspectral Imaging XXVII*, volume 11727, pages 108 – 119. SPIE.
- [Rialland et al., 2019a] Rialland, R., Marion, R., Carrere, V., Souussen, C., and Poli, J.-P. (2019a). Mineral Identification And Characterization : An Integrated Approach To Recover Mineralogical Information From Hyperspectral Images. In *11th EARSeL SIG IS Workshop*, Brno, Czech Republic. EARSeL and CzechGlobe.
- [Rialland et al., 2018] Rialland, R., Marion, R., and Carrère, V. (2018). Détection/identification de minéraux industriels par imagerie hyperspectrale VNIR/SWIR – Apport de la transformée en ondelettes continue pour l’initialisation de l’algorithme AGM. In *6ème colloque scientifique du groupe SFPT-GH*, Montpellier, France.

- [Rialland et al., 2019b] Rialland, R., Marion, R., Souussen, C., and Carrère, V. (2019b). Identification et caractérisation de minéraux : une procédure automatique de traitement d'image hyperspectrale. In *7ème colloque scientifique du groupe SFPT-GH*, Toulouse, France.
- [Rialland et al., 2020] Rialland, R., Souussen, C., Marion, R., and Carrère, V. (2020). OMP-based algorithm for mineral reflectance spectra deconvolution from hyperspectral images. In *IEEE Int. Geosc. Rem. Sens. Symp.*, pages 4918–4921.
- [Rialland et al., 2021b] Rialland, R., Souussen, C., Marion, R., and Carrère, V. (2021b). Improved Deconvolution of Mineral Reflectance Spectra. *IEEE J. Sel. Top. Appl. Earth. Obs. Remote. Sens.*, 14 :9711–9726.
- [Richter and Schlapfer, 2012] Richter, R. and Schlapfer, D. (2012). Atmospheric/topographic correction for airborne imagery : ATCOR-4 user Guide. *DLR IB*, pages 565–02.
- [Rissanen, 1978] Rissanen, J. (1978). Modeling by shortest data description. *Automatica*, 14(5) :465–471.
- [Rivard et al., 2008] Rivard, B., Feng, J., Gallie, A., and Sanchez-Azofeifa, A. (2008). Continuous wavelets for the improved use of spectral libraries and hyperspectral data. *Remote Sens. Environ.*, 112(6) :2850 – 2862.
- [Roger and Arnold, 1996] Roger, R. E. and Arnold, J. F. (1996). Reliably estimating the noise in AVIRIS hyperspectral images. *Int. J. Remote Sens.*, 17(10) :1951–1962.
- [Roy et al., 2009] Roy, R., Launeau, P., Carrère, V., Pinet, P., Ceuleneer, G., Clénet, H., Daydou, Y., Girardeau, J., and Amri, I. (2009). Geological mapping strategy using visible near-infrared–shortwave infrared hyperspectral remote sensing : Application to the Oman ophiolite (Sumail Massif). *Geochem. Geophys.*, 10(2).
- [Salisbury et al., 1987] Salisbury, J. W., Walter, L. S., and Vergo, N. (1987). Mid-infrared (2.1-25 μm) spectra of minerals ; first edition. Technical report, U.S. Geological Survey. Report.
- [Savitzky and Golay, 1964] Savitzky, A. and Golay, M. J. E. (1964). Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures. *J. Anal. Chem.*, 36(8) :1627–1639.
- [Schäfer et al., 2013] Schäfer, M., Bierwirth, E., Ehrlich, A., Heyner, F., and Wendisch, M. (2013). Retrieval of cirrus optical thickness and assessment of ice crystal shape from ground-based imaging spectrometry. *Atmos. Meas. Tech.*, 6(8) :1855–1868.
- [Skauli, 2011] Skauli, T. (2011). Sensor noise informed representation of hyperspectral data, with benefits for image storage and processing. *Opt. Express*, 19(14) :13031–13046.
- [Skauli, 2017] Skauli, T. (2017). Feasibility of a standard for full specification of spectral imager performance. In Bannon, D. P., editor, *Hyperspectral Imaging Sensors : Innovative Applications and Sensor Standards*, volume 10213, pages 33 – 44. International Society for Optics and Photonics, SPIE.
- [Somers et al., 2011] Somers, B., Asner, G. P., Tits, L., and Coppin, P. (2011). Endmember variability in Spectral Mixture Analysis : A review. *Remote Sens. Environ.*, 115(7) :1603–1616.
- [Souussen et al., 2015] Souussen, C., Idier, J., Duan, J., and Brie, D. (2015). Homotopy based algorithms for ℓ_0 -regularized least-squares. *IEEE Trans. Signal Process.*, 63(13) :3301–3316.
- [Stoica and Selén, 2004] Stoica, P. and Selén, Y. (2004). Model-order selection : A review of information criterion rules. *IEEE Sig. Proc. Mag.*, 21(4) :36–47.
- [Sunshine and Pieters, 1993] Sunshine, J. M. and Pieters, C. M. (1993). Estimating modal abundances from the spectra of natural and laboratory pyroxene mixtures using the Modified Gaussian Model. *J. Geophys. Res. Planets*, 98(E5) :9075–9087.
- [Sunshine et al., 1990] Sunshine, J. M., Pieters, C. M., and Pratt, S. F. (1990). Deconvolution of mineral absorption bands : An improved approach. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 95(B5) :6955–6966.

- [Swayze et al., 2014] Swayze, G. A., Clark, R. N., Goetz, A. F. H., Livo, K. E., Breit, G. N., Kruse, F. A., Sutley, S. J., Snee, L. W., Lowers., H. A., Post, J. L., Stoffregen, R. E., and Ashley, R. P. (2014). Mapping advanced argillic alteration at Cuprite, Nevada, using imaging spectroscopy. *Econ Geol*, 109(5) :1179–1221.
- [Tarantola and Valette, 1982] Tarantola, A. and Valette, B. (1982). Generalized nonlinear inverse problems solved using the least squares criterion. *Reviews of Geophysics*, 20(2) :219–232.
- [Terreaux, 2018] Terreaux, E. (2018). *Théorie des Matrices Aléatoires pour l'Imagerie Hyperspectrale*. PhD thesis.
- [Uezato et al., 2019] Uezato, T., Fauvel, M., and Dobigeon, N. (2019). Hyperspectral Unmixing With Spectral Variability Using Adaptive Bundles and Double Sparsity. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 57(6) :3980–3992.
- [Uss et al., 2011] Uss, M. L., Vozel, B., Lukin, V. V., and Chehdi, K. (2011). Local Signal-Dependent Noise Variance Estimation From Hyperspectral Textural Images. *IEEE J. Se. Topics Signal Process*, 5(3) :469–486.
- [Van der Meer, 2006] Van der Meer, F. (2006). The effectiveness of spectral similarity measures for the analysis of hyperspectral imagery. *Int. J. Appl. Earth Obs.*, 8(1) :3 – 17.
- [van der Meer et al., 2018] van der Meer, F., Kopačková, V., Koucká, L., van der Werff, H. M. A., van Ruitenbeek, F. J. A., and Bakker, W. H. (2018). Wavelength feature mapping as a proxy to mineral chemistry for investigating geologic systems : An example from the Rodalquilar epithermal system. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 64 :237–248.
- [Vane, 1987] Vane, G. (1987). First Results From The Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer (AVIRIS). In Vane, G., editor, *Imaging Spectroscopy II*, volume 0834, pages 166 – 175. International Society for Optics and Photonics, SPIE.
- [Vane et al., 1993] Vane, G., Green, R. O., Chrien, T. G., Enmark, H. T., Hansen, E. G., and Porter, W. M. (1993). The airborne visible/infrared imaging spectrometer (AVIRIS). *Remote Sens. Environ.*, 44(2) :127–143.
- [Verpoorter, 2009] Verpoorter, C. (2009). *Télédétection hyperspectrale et cartographie des faciès sédimentaires en zone intertidale : application à la baie de Bourgneuf*. PhD thesis, Université de Nantes.
- [Verpoorter et al., 2014] Verpoorter, C., Carrère, V., and Combe, J.-P. (2014). Visible, near-infrared spectrometry for simultaneous assessment of geophysical sediment properties (water and grain size) using the Spectral Derivative–Modified Gaussian Model. *J. Geophys. Res. Earth Surf.*, 119(10) :2098–2122.
- [Whiting et al., 2004] Whiting, M. L., Li, L., and Ustin, S. L. (2004). Predicting water content using Gaussian model on soil spectra. *Remote Sens. Environ.*, 89(4) :535 – 552.
- [Wilson et al., 1955] Wilson, E. B., Decius, J. C., Cross, P. C., and Sundheim, B. R. (1955). Molecular Vibrations : The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra. *J. Electrochem. Soc.*, 102(9) :235C.
- [Wu and Sun, 2013] Wu, D. and Sun, D. (2013). Advanced applications of hyperspectral imaging technology for food quality and safety analysis and assessment : A review — Part I : Fundamentals. *Innov. Food Sci. Emerg. Technol.*, 19 :1–14.
- [Zadeh, 1965] Zadeh, L. A. (1965). Fuzzy sets. *Inf. Control.*, 8(3) :338–353.

Titre: Télédétection hyperspectrale pour l'identification et la caractérisation de minéraux industriels

Mots clés: Imagerie hyperspectrale, spectroscopie, minéralogie

Résumé: La télédétection hyperspectrale permet l'étude de larges zones d'intérêt via la caractérisation physico-chimique des surfaces observées. Cette thèse concerne l'identification de minéraux rencontrés sur des sites industriels à partir de leurs spectres de réflectance observés dans le domaine réflectif [400-2500] nm. Un modèle physique paramétrique adapté est proposé pour représenter un spectre comme la somme d'un continuum et de formes spectrales localisées représentant les formes d'absorption. La première contribution est une procédure de déconvolution spectrale pour estimer adaptativement le nombre d'absorptions dans un spectre ainsi que les paramètres associés. Cette procédure est composée de trois étapes : retrait du continuum, pré-estimation des absorptions, ajustement conjoint du continuum et des absorptions. La pré-estimation des absorptions est l'étape clé, où les paramètres (positions, paramètres de formes) des absorptions sont estimés par un algorithme inspiré d'Orthogonal Matching Pursuit. Cette

étape fournit des décompositions du spectre pour un nombre variable de formes d'absorption, rendant possible l'utilisation d'un critère de sélection d'ordre pour estimer leur nombre. La deuxième contribution concerne l'identification des minéraux pour des spectres de mélanges, inspirée d'une méthode de logique floue et basée sur la comparaison des paramètres estimés avec ceux d'une base de données prédefinie. Cette solution tient compte des incertitudes d'estimation et des possibles variations des spectres de réflectance des minéraux. Les méthodes proposées sont validées sur de nombreuses données synthétiques et réelles issues de mesures en laboratoire, posant des difficultés d'analyse du fait d'absorptions de formes variées, possiblement superposées, et positionnées sur une plage très étendue de longueurs d'onde. De plus, une validation extensive a été effectuée sur des images hyperspectrales acquises dans le cadre du survol de deux carrières de gypse et de kaolinite. Les minéraux présents sur les sites sont précisément identifiés.

Title: Hyperspectral remote sensing for industrial minerals identification and characterization

Keywords: hyperspectral imagery, spectroscopy, mineralogy

Abstract: Hyperspectral remote sensing allows for studying large areas of interest through the physicochemical characterization of the observed surfaces. This thesis deals with the identification of minerals found on industrial sites from their reflectance spectra observed in the reflective domain [400-2500] nm. A parametric physical model is proposed to represent a spectrum as the sum of a continuum and localized spectral shapes representing absorption shapes. The first contribution is a spectral deconvolution procedure to adaptively estimate the number of absorptions in a spectrum as well as the associated parameters. This procedure is made up of three steps: continuum removal, absorptions pre-estimation, joint adjustment of continuum and absorptions. Absorptions pre-estimation is the key step, where the absorption parameters (positions, shape parameters) are estimated by an algorithm inspired by Orthogonal Matching Pursuit. This step provides spectrum decomposi-

tions for a varying number of absorption shapes, making it possible to use an order selection criterion to estimate their number. The second contribution concerns the identification of minerals for mixture spectra, inspired by a fuzzy logic method and based on the comparison of the estimated parameters with those of a predefined database. This solution takes into account the estimation uncertainties and the possible variations in the reflectance spectra of the minerals. The proposed methods are validated on numerous synthetic and real data, obtained from laboratory measurements. Processing these data raises challenging issues due to the various shapes of the absorptions, their possible overlapping, and their location over a wide range of wavelengths. In addition, extensive validation was performed on hyperspectral images acquired during the survey of two gypsum and kaolinite quarries. The minerals present on the sites are precisely identified.

Maison du doctorat de l'Université Paris-Saclay

2^{ème} étage aile ouest, École normale supérieure Paris-Saclay
4 avenue des Sciences,
91190 Gif sur Yvette, France