ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΑΓΡΟΝΟΜΩΝ ΚΑΙ ΤΟΠΟΓΡΑΦΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ 'ΓΕΩΠΗΡΟΦΟΡΙΚΗ'

Εφαρμογή μοντέλου επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού με συμπερασμό Bayes και υπόθεση χρωματικού θορύβου

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του μεταπτυχιακού φοιτητή

Σταύρου Γ. Χλωροκώστα

Επιβλέπων
Βασιλεία Καραθανάση
Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

Αθήνα Σεπτέμβριος 2020

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΑΓΡΟΝΟΜΩΝ ΚΑΙ ΤΟΠΟΓΡΑΦΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΟΠΟΓΡΑΦΙΑΣ – ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΤΗΛΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗΣ

Εφαρμογή μοντέλου επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού με συμπερασμό Bayes και υπόθεση χρωματικού θορύβου

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του μεταπτυχιακού φοιτητή

Σταύρου Γ. Χλωροκώστα

Επιβλέπων : Βασιλεία Καραθανάση
Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή στις….. Οκτωβρίου του 2020.

.....	.....	.....
Β. Καραθανάση	Δ. Αργιαλάς	Κ. Καράτζαλος
Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.	Καθηγητής Ε.Μ.Π.	Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα Οκτώβριος 2020

.....
Σταύρος Γ. Χλωροκώστας
Διπλωματούχος Αγρονόμος και ΤοπογράφοςΜηχανικός Ε.Μ.Π.

Copyright © Σταύρος Γ. Χλωροκώστας 2020
Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω την κ. Βασιλεία Καραθανάση, επιβλέπουσα καθηγήτρια κατά την εκπόνηση της εργασίας αυτής, για τον χρόνο που αφιέρωσε στο άτομό μου με σκοπό την μετάδοση πολύτιμης βοήθειας και γνώσεων, όπως επίσης και την ολοκλήρωση αυτής της εργασίας. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω όλο το προσωπικό του Εργαστηρίου Τηλεπισκόπησης, και κυρίως τον κ. Βασίλειο Ανδρώνη για τον χρόνο που αφιέρωσε στην επεξήγηση θεωρητικών και πρακτικών τμημάτων της εργασίας.

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως θέμα την **εφαρμογή μοντέλου επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού με συμπερασμό Bayes και υπόθεση χρωματικού θορύβου.** Εκπονήθηκε στο Εργαστήριο Τηλεπισκόπησης της Σχολής Αγρονόμων Τοπογράφων Μηχανικών του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου, στο πλαίσιο του Διατμηματικού Μεταπτυχιακού Προγράμματος Σπουδών «Γεωπληροφορική».

Η επίλυση του προβλήματος του φασματικού διαχωρισμού αποτελεί σημαντικό βήμα κατά την ταξινόμηση εδαφικών εκτάσεων με την χρήση αερομεταφερόμενων ή δορυφορικών υπερφασματικών δεκτών. Η χαμηλή χωρική ανάλυση τέτοιων δεκτών έχει ως αποτέλεσμα μικτά εικονοστοιχεία, οι φασματικές υπογραφές των εξαρτώνται από τον συνδυασμό των υλικών που τα αποτελούν. Στην βιβλιογραφία έχει αναπτυχθεί πληθώρα μαθηματικών εκφράσεων του προβλήματος του φασματικού διαχωρισμού και αλγορίθμων επίλυσής του. Με την αύξηση της εύκολα προσβάσιμης υπολογιστικής ισχύος, έχουν αναπτυχθεί και προταθεί αποτελεσματικές στατιστικές μέθοδοι επίλυσης που χρησιμοποιούν ιεραρχικά μοντέλα Bayes και επαναληπτικές μεθόδους δειγματοληψίας.

Στην παρούσα εργασία γίνεται μία σύντομη εισαγωγή στις έννοιες του φασματικού διαχωρισμού, του μοντέλου γραμμικής μίξης, των ιεραρχικών μοντέλων Bayes και της μεθόδου δειγματοληψίας Gibbs, όπως επίσης και μία σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση ορισμένων αλγορίθμων που έχουν προταθεί για φασματικό διαχωρισμό με συμπερασμό Bayes. Επίσης, παρουσιάζεται, εφαρμόζεται και αξιολογείται μία τέτοια μέθοδος στατιστικού συμπερασμού Bayes για την επίλυση του προβλήματος του επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού, με υπόθεση χρωματικού κανονικού θορύβου (colored Gaussian noise), η οποία προτάθηκε πρώτη φορά από τους Dobigeon et al. [3].

Οκτώβριος 2020

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ ..... **VI**
ΠΡΟΛΟΓΟΣ ..... **I**
ΠΕΡΙΛΗΨΗ ..... **VI**
ABSTRACT ..... **VII**
ΕΙΣΑΓΩΓΗ **1**
ΚΕΦΑΛΑΙΟ1 ..... **4**
1.1. Βασικές έννοιες φασματικού διαχωρισμού 6
1.2. Φασματικός διαχωρισμός και το Μοντέλο της Φασματικής Γραμμικής Μίξης 7
1.3. Αλγόριθμοι φασματικού διαχωρισμού 9
1.3.1. Εξαγωγή καθαρών στόχων 11
1.3.2. Μέθοδοι αντιστροφής 13
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ..... **15**
2.1. Συμβολισμοί 17
2.2. Η μέθοδος συμπερασμού Bayes και το Ιεραρχικό Μοντέλο 17
2.3. Δειγματοληψία Gibbs 19
2.4. Εφαρμογές στον φασματικό διαχωρισμό 20
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ..... **25**
3.1. Εισαγωγή 27
3.2. Περιγραφή μοντέλου 27
3.2.1. Πρότερη συνάρτηση αφθονιών 28
3.2.2. Πρότερη συνάρτηση πίνακα συμμεταβλητότητας θορύβου 29
3.2.3. Πρότερες συναρτήσεις υπερπαραμέτρων 30
3.2.4. Εκ των υστέρων συνάρτηση κατανομής πιθανότητας 30
3.3. Δειγματοληψία με την μέθοδο Gibbs 31
3.3.1. Παραγωγή δειγμάτων της μεταβλητής $\boldsymbol{a}$ 31
3.3.1. Παραγωγή δειγμάτων της μεταβλητής $\boldsymbol{\Sigma}$ 32
3.4. Ολοκληρωμένος αλγόριθμος φασματικού διαχωρισμού 32
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ..... **35**
4.1. Εισαγωγή 37
4.2. Υπερφασματικά δεδομένα 37

4.3. Επιλογή καθαρών στόχων 39
4.4. Σύγκλιση αλυσίδας Marcov και χρόνοι εκτέλεσης 40
4.5. Αξιολόγηση αποτελεσμάτων 45
4.6. Εφαρμογή στα δεδομένα της λήψης 49
ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ 55
ΚΩΔΙΚΑΣ 57
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 64

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η μέθοδος στατιστικού συμπερασμού Bayes, μέσω ιεραρχικών μοντέλων, χρησιμοποιείται ευρέως για τον φασματικό διαχωρισμό μικτών εικονοστοιχείων, και τον υπολογισμό των ποσοστών συμμετοχής των καθαρών υλικών από τα οποία αποτελούνται. Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται και αξιολογείται μία τέτοια μέθοδος επίλυσης του προβλήματος του επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού με υπόθεση χρωματικού κανονικού θορύβου (colored Gaussian noise), δηλαδή θορύβου με άγνωστο πίνακα συμμεταβλητότητας.

Το μοντέλο μίξης που χρησιμοποιείται είναι το γραμμικό μοντέλο, όπου τα ποσοστά συμμετοχής των καθαρών υλικών πρέπει να ακολουθούν τον περιορισμό της προσθετικότητας και της μη αρνητικότητας. Βάσει του μοντέλου αυτού γίνεται η επιλογή των κατάλληλων πρότερων συναρτήσεων των αγνώστων του ιεραρχικού μοντέλου και ο υπολογισμός των υπό συνθήκη εκ των υστέρων κατανομών των αγνώστων. Η εκτίμηση των ποσοστών συμμετοχής για κάθε εικονοστοιχείο γίνεται από τις υπό συνθήκη εκ των υστέρων κατανομές με τη μέθοδο δειγματοληψίας Gibbs. Δόθηκε έμφαση στη μείωση του υπολογιστικού κόστους και του χρόνου εκτέλεσης μέσω παράλληλου προγραμματισμού (parallel processing), με σκοπό ο αλγόριθμος να καθίσταται εφαρμόσιμος σε μεγάλο μέγεθος υπερφασματικών δεδομένων με εύκολα προσβάσιμη υπολογιστική ισχύ.

Ο αλγόριθμος φασματικού διαχωρισμού που κατασκευάστηκε εφαρμόστηκε σε δεδομένα λήψης του αερομεταφερόμενου δέκτη AVIRIS. Οι φασματικές υπογραφές των καθαρών υλικών συλλέχθηκαν από τα δεδομένα της εικόνας με την μέθοδο NFINDR και θεωρούνται γνωστές για την επίλυση του φασματικού διαχωρισμού. Ο έλεγχος της σύγκλισης και η εξέταση του χρόνου εκτέλεσης έγινε σε δύο τυχαία εικονοστοιχεία της εικόνας, προτού αυτός εφαρμοστεί σε τμήμα της εικόνας. Τα ποσοστά συμμετοχής που εκτιμήθηκαν, συγκρίθηκαν με τα εκτιμώμενα ποσοστά από την εφαρμογή έτερου αλγορίθμου διαχωρισμού που ακολουθεί την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων. Οι εκτιμώμενες φασματικές υπογραφές, βάσει των εκτιμώμενων ποσοστών συμμετοχής, εμφάνισαν χαμηλό μέσο τετραγωνικό σφάλμα (RMSE), μικρότερο του 0.047 ανά εικονοστοιχείο.

ABSTRACT

Bayesian inference with the use of hierarchical statistical models, is frequently applied for spectral unmixing of large scale hyperspectral data, and the calculation of the endmember abundances that constitute them. This project presents and evaluates a supervised method for solving the problem of supervised spectral unmixing, assuming colored Gaussian noise with unknown covariance matrix.

The spectral mixing model used is the Linear Mixing Model (LMM), according to which the abundance values are fully constrained by the non-negativity and additivity constraints. Based on this mixing model, a Bayesian hierarchical model is built by using the proper prior distributions for its unknown variables and its parameters, and calculating their respective conditional posterior distributions. Abundances are then estimated for each pixel separately through sampling from the conditional posterior distributions using an MCMC Gibbs sampling algorithm. Emphasis was given on reducing the computational cost and the execution time of the algorithm through parallel processing, so that the algorithm can be executed on bigger datasets using easily accessible hardware.

The unmixing algorithm was tested on real hyperspectral data gathered by the AVIRIS sensor. The endmember spectra were picked among the existing image spectra using an NFINDR algorithm, and considered known variables for the implemented supervised method. The MCMC convergence diagnostics were run on two random pixels, before applying the algorithm on a specific part of the hyperspectral image. The estimated abundances were compared to the ones estimated by a separate unmixing algorithm that uses the Least Squares Regression (LSR) method and a white Gaussian noise assumption. The pixel spectra estimated through abundances and endmember spectra, were compared to the image pixel spectra, resulting in a maximum RMSE of 0.047 per pixel.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η χρήση υπερφασματικών δεκτών έχει επιτρέψει στην επιστήμη της Τηλεπισκόπησης την παρατήρηση και ανάλυση των ιδιοτήτων της επιφάνειας του πλανήτη και την εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων για πολλά χαρακτηριστικά του εδάφους. Τα δεδομένα που συλλέγονται είναι τιμές έντασης ακτινοβολίας όπως αυτή διαθλάται ή εκπέμπεται από την επιφάνεια της γης, μέσω υπερφασματικών απεικονίσεων, οι οποίες καταγράφονται με την βοήθεια ειδικών δεκτών, δορυφορικών ή αερομεταφερόμενων. Οι υπερφασματικές απεικονίσεις χρησιμοποιούνται σε μεγάλο πλήθος εφαρμογών όπως για την μελέτη μεγάλων εκτάσεων από απόσταση, την ταξινόμηση του τύπου του εδάφους και την παρατήρηση μεταβολών με την πάροδο του χρόνου. Αυτό καθίσταται δυνατό με την συλλογή, ανάλυση και ερμηνεία της φασματικής υπογραφής ενός υλικού, κάτι που αποτελεί αντικείμενο της επιστήμης της φασματοσκοπίας (spectroscopy).

Η χαμηλή χωρική ανάλυση των δορυφορικών/αερομεταφερόμενων δεκτών συνεπάγεται την ύπαρξη **μικτών εικονοστοιχείων,** δηλαδή εικονοστοιχείων που καταλαμβάνουν επί του εδάφους έκταση αρκετά μεγάλη ώστε να απεικονίζουν μεγάλο αριθμό αντικειμένων και των υλικών τους. Οι φασματικές υπογραφές των εικονοστοιχείων αυτών αποτελούν μίξη των φασματικών υπογραφών των καθαρών υλικών που εμπεριέχονται σε αυτά. Η φασματική αυτή μίξη αποτελεί πρόβλημα για το οποίο απαιτείται επίλυση, προκειμένου να γίνει ορθή μελέτη των ιδιοτήτων του εδάφους και της ορθής ταξινόμησης των δεδομένων μίας υπερφασματικής λήψης. Η επίλυση αυτή, δηλαδή η μέθοδος **φασματικού διαχωρισμού,** περιλαμβάνει μία προσεγγιστική μαθηματική έκφραση του μοντέλου μίξης, και μεθόδους αντιστροφής του μοντέλου αυτού για τον υπολογισμό των ποσοστών συμμετοχής κάθε καθαρού υλικού, ή καθαρού στόχου όπως συνηθίζεται να ονομάζεται, στις φασματικές υπογραφές των μικτών εικονοστοιχείων. Στην βιβλιογραφία έχει προταθεί τα τελευταία χρόνια πληθώρα μεθόδων για τον φασματικό διαχωρισμό, πολλές εκ των οποίων περιλαμβάνουν στατιστική συμπερασματολογία με χρήση ιεραρχικών μοντέλων Bayes.

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι ανάλυση του θεωρητικού υποβάθρου του φασματικού μοντέλου γραμμικής μίξης και των αλγορίθμων φασματικού διαχωρισμού, όπως και η εφαρμογή και αξιολόγηση ενός αλγορίθμου φασματικού διαχωρισμού. Η εργασία χωρίζεται σε τέσσερα κεφάλαια εκ των οποίων τα Κεφάλαια 1 και 2 αφορούν την εισαγωγή στις θεωρητικές έννοιες του φασματικού διαχωρισμού και την ανάλυση της μεθόδου συμπερασματολογίας Bayes, το Κεφάλαιο 3 αφορά την παρουσίαση ενός ιεραρχικού μοντέλου Bayes, και το Κεφάλαιο 4 αφορά την εφαρμογή και την αξιολόγηση του αλγορίθμου.

Στο **Κεφάλαιο 1** γίνεται μία βραχεία αναφορά στις έννοιες της φασματικής μίξης και το μοντέλο γραμμικής μίξης, όπως και μία σύντομη βιβλιογραφική ταξινόμηση των αλγοριθμικών μεθόδων που έχουν αναπτυχθεί για την επίλυση του προβλήματος. Αναλύονται τα βασικά βήματα εφαρμογής τέτοιων αλγορίθμων και οι μέθοδοι εξαγωγής των εικονοστοιχείων που απεικονίζουν εξ ολοκλήρου καθαρούς στόχους.

Στο **Κεφάλαιο 2** γίνεται παρουσίαση της μεθόδου συμπερασματολογίας Bayes και συγκεκριμένα της δομής ενός τυπικού ιεραρχικού μοντέλου και των στοιχείων που το αποτελούν: της συνάρτησης πιθανοφάνειας, των πρότερων κατανομών των αγνώστων και των εκ των υστέρων κατανομών. Επίσης, γίνεται μία σύντομη περιγραφή της μεθόδου δειγματοληψίας Gibbs για την εκτίμηση των αγνώστων από τις εκ των υστέρων κατανομές. Τέλος γίνεται μία σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση ορισμένων αλγορίθμων φασματικού διαχωρισμού που έχουν προταθεί και κάνουν χρήση της δειγματοληπτικής μεθόδου Gibbs.

Στο **Κεφάλαιο 3** γίνεται η παρουσίαση ενός ιεραρχικού μοντέλου που προτάθηκε από τους Dobigeon et al. [3], για την εκτίμηση των ποσοστών συμμετοχής με την υπόθεση χρωματικού κανονικού θορύβου (colored Gaussian noise), και το οποίο εφαρμόζεται και αξιολογείται στο Κεφάλαιο 4. Περιγράφονται αναλυτικά οι συναρτήσεις των πρότερων κατανομών των αγνώστων και των παραμέτρων του μοντέλου, η συνάρτηση πιθανοφάνειας και οι εκ των υστέρων κατανομές των αγνώστων. Επίσης περιγράφονται τα βήματα της δειγματοληψίας Gibbs.

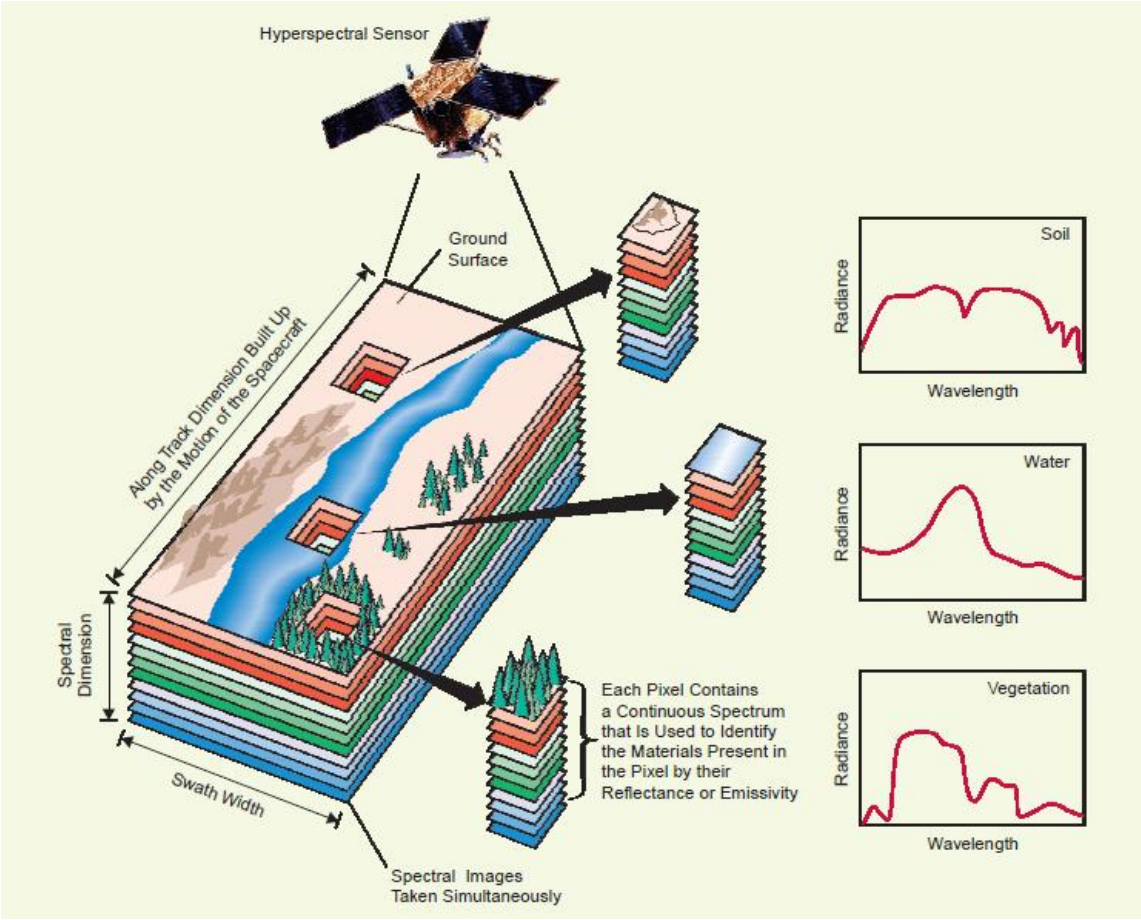
Στο **Κεφάλαιο 4** περιγράφεται η πρακτική εφαρμογή της μεθόδου που αναλύθηκε στο Κεφάλαιο 3 σε υπερφασματικά δεδομένα του αερομεταφερόμενου δέκτη AVIRIS. Περιγράφεται ο διαχωρισμός των δεδομένων σε διαφορετικά σετ δεδομένων, και αξιολογείται ο αλγόριθμος που κατασκευάστηκε με κριτήρια το υπολογιστικό του κόστος, την ποιότητα των αποτελεσμάτων και την σύγκρισή τους με αντίστοιχα αποτελέσματα άλλων αλγορίθμων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΝ ΦΑΣΜΑΤΙΚΟ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟ

1.1. Βασικές έννοιες φασματικού διαχωρισμού

Η φασματοσκοπία (spectroscopy) αποτελεί κλάδο της φυσικής και ιδιαίτερα της οπτικής κυματικής που ασχολείται με την έρευνα και μελέτη της δομής, σύστασης και των ιδιοτήτων του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος και της ύλης. Στην επιστήμη της Τηλεπισκόπησης, ο συνδυασμός της φασματοσκοπίας με την χρήση δορυφορικών ή αερομεταφερόμενων **υπερφασματικών δεκτών** (imaging spectroscopy) ονομάζεται **απεικονιστική φασματοσκοπία** (imaging spectroscopy) ή υπερφασματική Τηλεπισκόπηση (hyperspectral remote sensing) και καθιστά δυνατή τη μελέτη των χαρακτηριστικών της επιφάνειας του εδάφους εξ αποστάσεως.



Εικόνα 1.1: Απεικόνιση της λήψης υπερφασματικών δεδομένων και της φασματικής υπογραφής διαφορετικών υλικών (δέντρα, έδαφος, νερό) της επιφανείας εδάφους [43].

Σε αντίθεση με τους πολυφασματικούς δέκτες, οι οποίοι μετρούν την ανακλώμενη ακτινοβολία σε συγκεκριμένα τμήματα του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος, οι

υπερφασματικοί δέκτες συλλέγουν την ακτινοβολία σε ένα μεγάλο εύρος μήκους κύματος του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος (από 0.4-0.7 έως 2.4 μm) σε ένα πλήθος μερικών εκατοντάδων διαδοχικών ζωνών συχνοτήτων (bands) πλάτους περίπου 10 nm έκαστη [1]. Εάν η ανακλώμενη ακτινοβολία μετράται σε κάθε μήκος κύματος και σε μεγάλο εύρος του φάσματος, το αποτέλεσμα είναι μία **φασματική υπογραφή** (spectral signature),η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον χαρακτηρισμό και την αναγνώριση υλικών του εδάφους. Αυτό οφείλεται στην ιδιότητα κάθε υλικού να αντανακλά, να απορροφά ή και να εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία ανάλογα με την δομή του και την μοριακή του σύσταση [1]. Με τον συνδυασμό λοιπόν υπερφασματικών δεκτών για την λήψη εικόνων μεγάλης κλίμακας, και τη μελέτη των φασματικών υπογραφών των εικονοστοιχείων, καθίσταται δυνατή η ανίχνευση των υλικών και της κατάστασης των σωμάτων που απεικονίζονται στο εικονοστοιχείο.

Σε υπερφασματικά τηλεπισκοπικά δεδομένα όμως, πολλά από τα εικονοστοιχεία της εικόνας είναι **μικτά**, δηλαδή περιέχουν την φασματική υπογραφή περισσότερων από ενός υλικού ή/και αντικειμένου. Συνήθως αυτό συμβαίνει όταν το αντικείμενο είναι μίγμα διαφορετικών υλικών ή όταν η χωρική ανάλυση των δεδομένων είναι αρκετά χαμηλή έτσι ώστε ένα εικονοστοιχείο να απεικονίζει πολλά διαφορετικά αντικείμενα, κάτι που αποτελεί συχνό φαινόμενο με την χρήση αερομεταφερόμενων ή δορυφορικών δεκτών [2]. Οι παραπάνω περιπτώσεις διερευνώνται με μοντέλα **μη γραμμικής φασματικής μίξης** ή/και **γραμμικής φασματικής μίξης.** Η παρούσα εργασία υιοθετεί το μοντέλο της γραμμικής φασματικής μίξης.

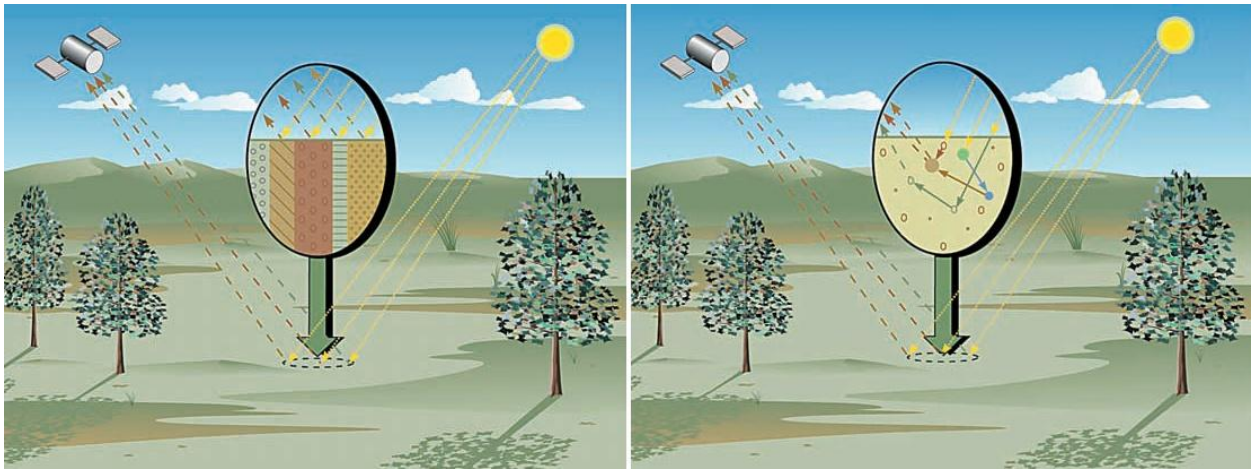
1.2. Φασματικός διαχωρισμός και το Μοντέλο της Φασματικής Γραμμικής Μίξης

Σύμφωνα με τους N. Keshava και J.F. Mustard (2002), **φασματικός διαχωρισμός** είναι η διαδικασία κατά την οποία η φασματική υπογραφή ενός μικτού εικονοστοιχείου αναλύεται στις φασματικές υπογραφές των συστατικών υλικών του (**endmembers**), και τα αντίστοιχα ποσοστά συμμετοχής (**abundances**), που δηλώνουν την αναλογία κάθε υλικού στο εικονοστοιχείο. Συνήθως, τα συστατικά υλικά αντιστοιχούν σε μακροσκοπικά υλικά όπως νερό, έδαφος, μέταλλο ή βλάστηση και ονομάζονται καθαροί στόχοι [2].

Το πρόβλημα του φασματικού διαχωρισμού είναι η επίλυση του αντίστροφου προβλήματος, δηλαδή της εκτίμησης των ποσοστών συμμετοχής (abundances) των καθαρών στόχων βάσει ενός προκαθορισμένου μοντέλου μίξης και της υπογραφής του μικτού εικονοστοιχείου. Η βασική υπόθεση σε όλα τα μοντέλα φασματικού διαχωρισμού είναι πως σε μία συγκεκριμένη λήψη, το σύνολο της επιφάνειας που απεικονίζεται στο εικονοστοιχείο καταλαμβάνεται από ένα περιορισμένο αριθμό συστατικών υλικών, οι φασματικές ιδιότητες των οποίων θεωρούνται αμετάβλητες.

Στα μοντέλα **γραμμικής μίξης**, γίνεται η παραδοχή πως η επιφάνεια του εικονοστοιχείου αποτελείται από ένα μίγμα διακριτών συστατικών υλικών και πως μόνο

η προσπίπτουσα από την πηγή ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία αλληλεπιδρά με τα υλικά που απεικονίζονται στο εικονοστοιχείο, ενώ δεν υφίσταται προσπίπτουσα σκεδαζόμενη ακτινοβολία μεταξύ των συστατικών υλικών (Εικόνα 1.2). Στην περίπτωση αυτή, η επιφάνεια που καταλαμβάνει κάθε συστατικό υλικό είναι ανάλογη του αντίστοιχου ποσοστού συμμετοχής του στο εικονοστοιχείο και ως εκ τούτου θεωρείται ότι η ανακλώμενη ακτινοβολία θα μεταφέρει τα φασματικά χαρακτηριστικά των υλικών αυτών με τις ίδιες ακριβώς αναλογίες. Εν ολίγοις, υφίσταται μία γραμμική σχέση μεταξύ των ποσοστών συμμετοχής (abundances) των συστατικών υλικών του ενός εικονοστοιχείου, και της φασματικής υπογραφής για το εικονοστοιχείο αυτό [2].



Εικόνα 1.2: Αριστερά: Απεικόνιση της οπισθοσκέδασης σε περίπτωση **γραμμικής μίξης**. Δεξιά: Απεικόνιση της οπισθοσκέδασης σε περίπτωση **μη γραμμικής μίξης** [2].

Συνεπώς, για ένα εικονοστοιχείο, το **μοντέλο γραμμικής μίξης (Linear Mixing Model – LMM)** με $\boldsymbol{R}$ αριθμό καθαρών υλικών και $\boldsymbol{L}$ αριθμό καναλιών παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$\mathrm{y} = \sum_{r=1}^{R} a_r \mathrm{m}_r + \mathrm{n} = \mathrm{M}a + \mathrm{n} \tag{1}$$

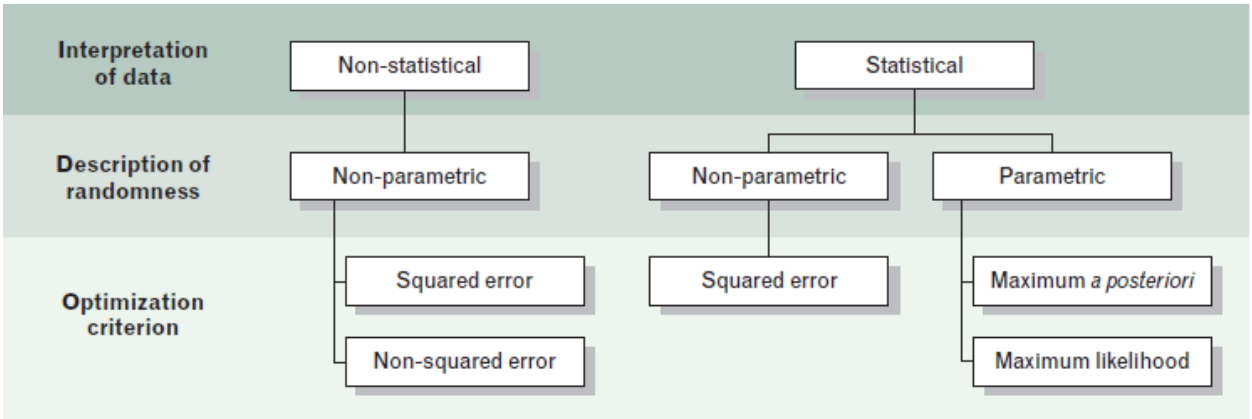
όπου y είναι το $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{1}$ διάνυσμα της φασματικής υπογραφής του εικονοστοιχείου, $\boldsymbol{M}$ είναι ένας πίνακας διαστάσεων $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{R}$ οι στήλες του οποίου είναι οι φασματικές υπογραφές των καθαρών υλικών σε διανύσματα διαστάσεων $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{1}$, $\boldsymbol{a}$ είναι το διαστάσεων $\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{1}$ διάνυσμα ποσοστών συμμετοχής των συστατικών υλικών για το συγκεκριμένο εικονοστοιχείο, ενώ $\boldsymbol{n}$ είναι το διάνυσμα σφάλματος [3].

Το μοντέλο της γραμμικής μίξης υπόκειται σε δύο σημαντικούς περιορισμούς για τις τιμές του διανύσματος $\boldsymbol{a}$. Ο πρώτος περιορισμός προϋποθέτει πως για κάθε τιμή του $\boldsymbol{a}$ ισχύει πως $\boldsymbol{a_i} \geq \boldsymbol{0}\,, \boldsymbol{i} = \boldsymbol{1}, \dots, \boldsymbol{M}$ και ονομάζεται **περιορισμός μη αρνητικότητας (non**

negative constraint). Ο δεύτερος περιορισμός προϋποθέτει πως το άθροισμα των τιμών του $\boldsymbol{a}$ δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερο της μονάδας, $\sum_i^M \boldsymbol{a_i} \leq \mathbf{1}$ ή $\sum_i^M \boldsymbol{a_i} = \mathbf{1}$ και ονομάζεται **περιορισμός προσθετικότητας (additivity constraint)** [3].

1.3. Αλγόριθμοι φασματικού διαχωρισμού

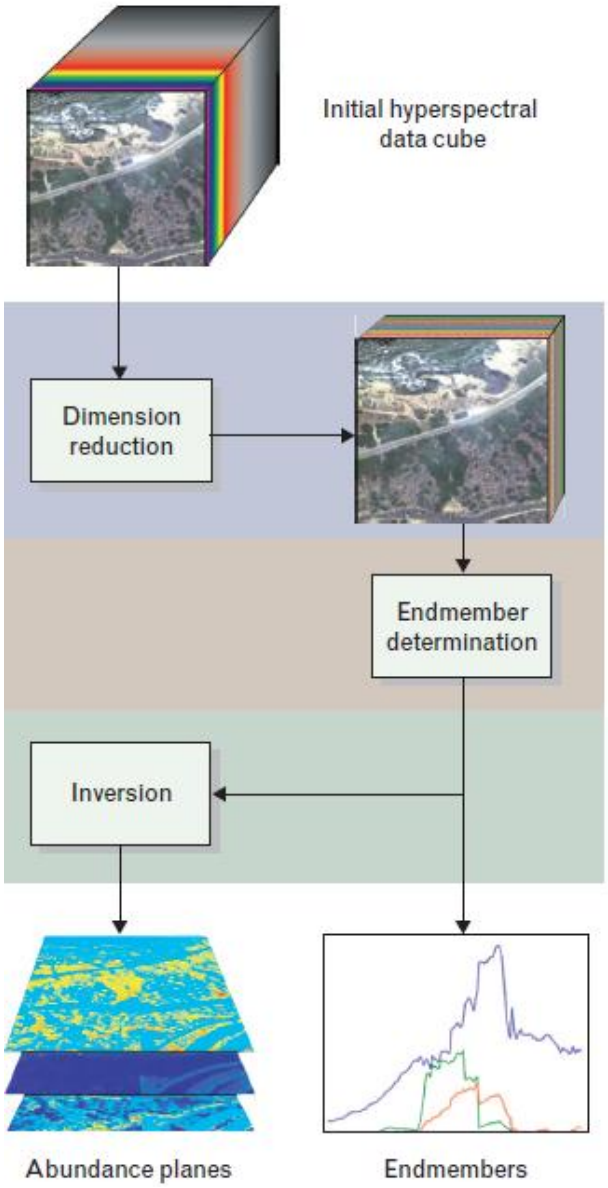
Κατά τους N. Keshava et al. (2000) οι αλγόριθμοι φασματικού διαχωρισμού χωρίζονται σε στατιστικούς ή μη στατιστικούς ανάλογα με τη μέθοδο ερμηνείας των δεδομένων, σε παραμετρικούς και μη παραμετρικούς ανάλογα με τη μέθοδο που διαχειρίζονται την τυχαιότητα των υπερφασματικών δεδομένων και σε περαιτέρω κατηγορίες ανάλογα με τη μέθοδο βελτιστοποίησης της συνάρτησης αντικειμενικής συνάρτησης που χρησιμοποιούν (squared-error, Maximum Likelihood, Maximum posteriori) (Εικόνα 1.3) [4].



Εικόνα 1.3: Ταξινόμηση αλγορίθμων φασματικού διαχωρισμού κατά τον N.Keshava (2003) [6].

Ανεξαρτήτως της κατηγορίας στην οποία ανήκει, κάθε μέθοδος φασματικού διαχωρισμού ακολουθεί τρία βασικά βήματα [4]:

- **Μείωση διαστάσεων (Dimension reduction)** των δεδομένων της απεικόνισης. Προαιρετικό βήμα που συνήθως συνδυάζεται με το επόμενο βήμα, με σκοπό τη μείωση του υπολογιστικού φόρτου.
- **Καθορισμός των καθαρών στόχων (Endmember determination /extraction)**. Καθορισμός των φασματικών υπογραφών των συστατικών υλικών της συγκεκριμένης απεικόνισης.
- **Αντιστροφή (Inversion) του μοντέλου μίξης και επίλυση**. Εκτίμηση των ποσοστών συμμετοχής για κάθε μικτό εικονοστοιχείο από την φασματική του υπογραφή και τις φασματικές υπογραφές των καθαρών στόχων.



Εικόνα 1.4: Βήματα εφαρμογής του φασματικού διαχωρισμού [6].

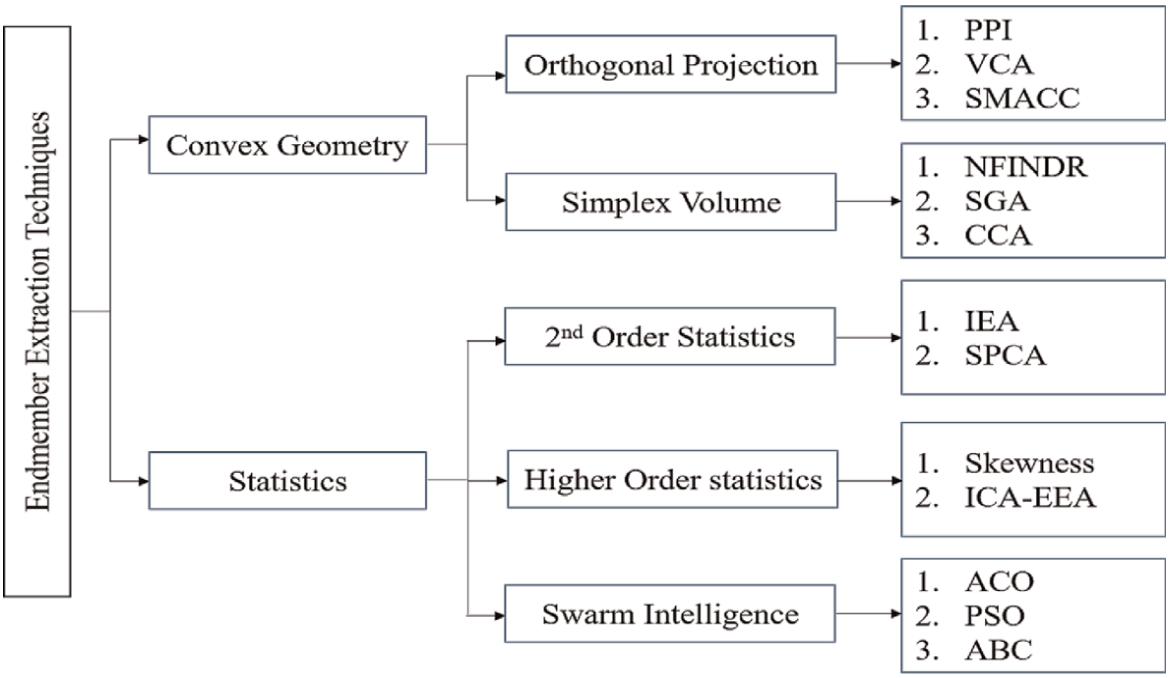
Επίσης, ανάλογα με την προέλευση των φασματικών υπογραφών των καθαρών στόχων, οι μέθοδοι φασματικού διαχωρισμού μπορούν να ανήκουν σε τρείς κατηγορίες:

- επιβλεπόμενες μέθοδοι, στις οποίες οι φασματικές υπογραφές των υλικών θεωρούνται γνωστές [7],[8],[9]
- ημι-επιβλεπόμενες, στις οποίες οι φασματικές υπογραφές των υλικών επιλέγονται από μία βιβλιοθήκη γνωστών φασματικών υπογραφών [10], [11], και
- μη επιβλεπόμενες, στις οποίες οι φασματικές υπογραφές των υλικών εξάγονται από τα δεδομένα της εικόνας, με την παραδοχή ότι στα δεδομένα υφίστανται

καθαροί στόχοι, δηλαδή εικονοστοιχεία που απεικονίζουν μόνο ένα συστατικό υλικό [12],[13],[14].

1.3.1. Εξαγωγή καθαρών στόχων

Η εξαγωγή καθαρών στόχων σε μία απεικόνιση, και ο καθορισμός των συστατικών υλικών, είναι πρόβλημα που έχει αντιμετωπιστεί με πολλές διαφορετικές προσεγγίσεις. Οι πιο δημοφιλείς προσεγγίσεις χρησιμοποιούν μεθόδους γεωμετρικής επίλυσης του προβλήματος και μείωση διαστάσεων του φασματικού χώρου των δεδομένων. Ωστόσο, έχουν αναπτυχθεί και στατιστικές μέθοδοι ή και μέθοδοι ευφυΐας σμήνους. Το σύνολο των ολοκληρωμένων αλγορίθμων καθορισμού καθαρών στόχων έχει καταγραφεί από τους K. Kale et al. (2020) και φαίνεται στην Εικόνα 1.5 [5].



Εικόνα 1.5: Αλγόριθμοι εξαγωγής καθαρών στόχων από υπερφασματικά δεδομένα [5].

Εκ των ανωτέρω, οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενοι αλγόριθμοι είναι αυτοί που ακολουθούν γεωμετρική προσέγγιση, όπως ο NFINDR [14] (ή παραλλαγές αυτού όπως ο LDU-NFINDR [15]), ο PPI (Pixel Purity Index) και ο VCA (Vertex Component Analysis) [12].

PPI

Η βασική υπόθεση στην λειτουργία του αλγορίθμου PPI είναι πως οι φασματικές υπογραφές των εικονοστοιχείων αποτελούν έναν νέφος σημείων σε έναν χώρο N διαστάσεων και πως οι καθαροί στόχοι είναι τα σημεία αυτά που βρίσκονται στα όρια του νέφους σημείων. Αρχικά σχηματίζεται ένα τυχαίο σύνολο προσωρινών διανυσμάτων, αποκαλλούμενα “skewers”, τα οποία ξεκινούν από την αρχή των αξόνων του N-διάστατου χώρου. Στην συνέχεια γίνεται προβολή όλων των σημείων του νέφους επάνω στα διανύσματα αυτά, και συλλέγονται τα σημεία οι προβολές των οποίων βρίσκονται στα άκρα των διανυσμάτων, δηλαδή αποτελούν μέγιστες ή ελάχιστες (ακραίες/extreme) τιμές [44]. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται με νέα τυχαία διανύσματα, έως ότου βρεθούν τα σημεία του νέφους των οποίων οι προβολές εμφάνισαν ακραίες τιμές περισσότερες φορές. Τα σημεία αυτά καθορίζονται ως καθαροί στόχοι. Ο αλγόριθμος PPI χρησιμοποιείται ευρέως μέσω του προγράμματος ENVI.

NFINDR

Στην περίπτωση του NFINDR σκοπός είναι ο εντοπισμός των φασματικών υπογραφών που καθορίζουν την **χωρική διάταξη (simplex)** με τον μέγιστο όγκο, με την προϋπόθεση ότι ο αριθμός των καθαρών στόχων είναι γνωστός. Θεωρείται ότι οι καθαροί στόχοι είναι οι κορυφές αυτής της χωρικής διάταξης και ο μέγιστος όγκος της εξασφαλίζει ότι θα περικλείονται όλα τα μικτά εικονοστοιχεία. Δεδομένου ότι τα υπερφασματικά δεδομένα ανήκουν σε έναν φασματικό χώρο $\boldsymbol{L}$ διαστάσεων, αρχικά γίνεται τυχαία επιλογή $\boldsymbol{n}$ αριθμού εικονοστοιχείων ως προσωρινοί καθαροί στόχοι και υπολογίζεται ο όγκος της χωρικής διάταξης που ορίζουν. Στην συνέχεια κάθε ένας από τους προσωρινούς καθαρούς στόχους αντικαθιστάται από ένα τυχαίο εικονοστοιχείο και ελέγχεται εάν ο όγκος της χωρικής διάταξης έχει αυξηθεί ή όχι. Στην περίπτωση που ο όγκος αυξάνεται το εικονοστοιχείο αυτό αποτελεί πλέον τον νέο καθαρό στόχο [14]. Η διαδικασία συνεχίζεται έως ότου ο όγκος της καθαρής διάταξης να μην αυξάνεται περαιτέρω.

VCA

Ο VCA λειτουργεί με παρόμοιο τρόπο με τον NFINDR και τον PPI, αρχικά γίνεται μια τυχαία επιλογή καθαρών στόχων από τα δεδομένα. Οι φασματικές υπογραφές των προσωρινών στόχων σχηματίζουν μία διάταξη, η οποία αποτελεί ένα κυρτό χώρο (convex hull), για τον οποίον υπολογίζεται η προβολή του σε ένα προκαθορισμένο υπερεπίπεδο (hyperplane) [12], με τρόπο παρόμοιο της μεθόδου PCA. Στην συνέχεια αντικαθίσταται τυχαία ένα εικονοστοιχείο από αυτά και επαναϋπολογίζεται η προβολή της νέας διάταξης. Εάν η προβολή της νέας διάταξης υπερβαίνει σε εμβαδόν αυτήν της προηγούμενης, το νέο εικονοστοιχείο διατηρείται ως καθαρός στόχος. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου το εμβαδόν της προβολής της διάταξης να μην αυξάνεται περαιτέρω.

1.3.2. Μέθοδοι αντιστροφής

Η επίλυση του προβλήματος της αντιστροφής του γραμμικού μοντέλου φασματικής μίξης, το οποίο εκφράζεται μαθηματικά με την εξίσωση (1), μπορεί να προσεγγιστεί ως ένα πρόβλημα γραμμικής παλινδρόμησης. Σε μορφή πινάκων η εξίσωση (1) γράφεται ως εξής:

$$\Upsilon = MA + N \tag{2}$$

Οι εκτιμήσεις των τιμών των A μπορούν να υπολογιστούν μέσω της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων από τον τύπο [17]:

$$\hat{A} = M'\Upsilon \tag{3}$$

Από τα μοντέλα που προκύπτουν από τις διαφορετικές εκτιμήσεις των A, επιλέγεται αυτό που ικανοποιεί ένα συγκεκριμένο κριτήριο. Στην περίπτωση της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων, το κριτήριο αυτό είναι η ελαχιστοποίηση του μέσου τετραγωνικού σφάλματος MSE, υπάρχουν ωστόσο και άλλα κριτήρια όπως ο συντελεστής προσδιορισμού R^2 και ο συντελεστής προσδιορισμού C_p του Mallows.

Προτεινόμενες προσεγγίσεις του προβλήματος της εκτίμησης των ποσοστών συμμετοχής, συμπεριλαμβάνουν την χρήση της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων με όλους τους περιορισμούς (Fully Constrained Least Squares Unmixing – FCLSU) [7], της μεθόδου Lasso [11], ή και συνδυασμό αυτών με την χρήση νευρωνικών δικτύων [18].

Εκτός από τις παραπάνω μεθόδους, τα τελευταία χρόνια έχουν προταθεί και στατιστικοί μέθοδοι που κάνουν χρήση του συμπερασμού Bayes για την επίλυση μέσω δειγματοληψιών Gibbs [3],[10],[16],[19],[20],[27],[31],[32]. Στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας εφαρμόζεται η μέθοδος του συμπερασμού Bayes, η οποία και περιγράφεται αναλυτικότερα στο Κεφάλαιο 2.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΦΑΣΜΑΤΙΚΟΣ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΣ ΜΕ ΙΕΡΑΡΧΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ BAYES

2.1. Συμβολισμοί

Στο παρόν κεφάλαιο γίνεται γενική περιγραφή των ιεραρχικών μοντέλων Bayes και της δειγματοληπτικής μεθόδου Gibbs, και θα χρησιμοποιηθούν οι παρακάτω συμβολισμοί:

$(\vec{x})^{\mathrm{T}}$ → ανάστροφή του $\vec{x}$

$|x|$ → ορίζουσα του πίνακα x

$\|x\|_2$ → L_2 Ευκλείδεια νόρμα, με $\|\vec{x}\|_2^2 = \vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}$

$\|\vec{x}\|_{\mathrm{P}}^2$ → Ευκλείδεια νόρμα, με $\|\vec{x}\|_{\mathrm{P}}^2 = \vec{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{P}\vec{x}$

$\mathrm{R}^{\boldsymbol{N}}$ → N - διάστατος Ευκλείδειος χώρος

$\mathrm{R}_{+}^{\boldsymbol{N}}$ → Θετικός υποχώρος του N - διάστατου Ευκλείδειου χώρου

I_L → ο ταυτοτικός πίνακας $L \times L$

$\mathrm{I}(\gamma)$ → ο πληροφοριακός πίνακας Fisher για μία παράμετρο γ

$\exp[\,]$ → η εκθετική συνάρτηση, όπου $\exp[x] = \mathrm{e}^x$

2.2. Η μέθοδος συμπερασμού Bayes και το Ιεραρχικό Μοντέλο

Ο συμπερασμός Bayes αποτελεί μία γενική στατιστική μέθοδο συμπερασματολογίας, η οποία μπορεί να εφαρμοστεί και για την επίλυση γραμμικών μοντέλων συσχέτισης, όπως για παράδειγμα του γραμμικού μοντέλου φασματικής μίξης. Το μοντέλο γραμμικής μίξης, όπως προαναφέρθηκε στην (1) μπορεί να διατυπωθεί ως εξής:

$$\mathrm{y} = \mathrm{M}a + \mathrm{n}$$

Όπου y είναι ένα διάνυσμα δεδομένων, M είναι ένας παρατηρήσεων, a είναι ένα άγνωστο διάνυσμα μεταβλητών και n ένα διάνυσμα θορύβου με άγνωστη μεταβλητότητα σ. Η μέθοδος του συμπερασμού προϋποθέτει την κατασκευή ενός **ιεραρχικού μοντέλου** με τα παρακάτω τρία βήματα [23]:

- Έκφραση της **συνάρτησης πιθανοφάνειας** (likelihood function) των δεδομένων y
- Έκφραση των **πρότερων συναρτήσεων κατανομής** (prior distributions) των μεταβλητών, των παραμέτρων και των υπερπαραμέτρων του μοντέλου
- Υπολογισμός των υπό συνθήκη **εκ των υστέρων κατανομών πιθανότητας** για τις μεταβλητές, τις παραμέτρους και τις υπερπαραμέτρους του μοντέλου

Βήμα 1°: Συνάρτηση πιθανοφάνειας

Η συνάρτηση πιθανοφάνειας (Likelihood Function) μετρά την προσαρμογή ενός στατιστικού μοντέλου σε ένα δείγμα, με δεδομένες τιμές των αγνώστων παραμέτρων [50]. Το πρώτο βήμα είναι ο υπολογισμός της συνάρτησης πιθανοφάνειας για τα δεδομένα y: $\mathrm{y} \sim f(\mathrm{y}|\sigma^2, a)$.

Βήμα 2°: Πρότερες συναρτήσεις κατανομής

Η έκφραση των πρότερων συναρτήσεων των αγνώστων μεταβλητών γίνεται βάσει πρότερων πεποιθήσεων για τις παραμέτρους. Η γνώση αυτή επιτρέπει την έκφραση των μεταβλητών a και n με τις πρότερες συναρτήσεις κατανομής πιθανότητας (prior distributions) $a \sim f(\alpha)$ και $\mathrm{n} \sim f(\mathrm{n}|\sigma)$, όπου το σ αποτελεί άγνωστη **παράμετρο** της συνάρτησης της κατανομής του n. Αυτή εκφράζεται με την πρότερη συνάρτηση κατανομής $\sigma \sim f(\sigma|\gamma)$. Η μεταβλητή γ αποτελεί άγνωστη **υπερπαράμετρο** της κατανομής του σ με πρότερη κατανομή $\gamma \sim f(\gamma)$.

Σε περίπτωση έλλειψης πρότερης γνώσης για τις υπερπαραμέτρους ενός ιεραρχικού μοντέλου, συνήθως προσδίδεται σε αυτές η πρότερη κατανομή πιθανότητας του Jeffrey (Jeffrey's prior), η οποία είναι ανάλογη της τετραγωνικής ρίζας της ορίζουσας του πληροφοριακού πίνακα Fisher, και η έκφραση της οποίας φαίνεται στην εξίσωση (4). Βασική ιδιότητα της αντικειμενικής συνάρτησης του Jeffrey είναι πως παραμένει αναλλοίωτη από μετασχηματισμούς στο διάνυσμα της υπερπαραμέτρου [51].

$$f(\gamma) \propto |I(\gamma)|^{1/2} \tag{4}$$

Βήμα 3°: Υπολογισμός των εκ των υστέρων κατανομών

Από τις ιδιότητες των εξαρτημένων πιθανοτήτων είναι γνωστό ότι για μία από κοινού συνάρτηση πιθανότητας των μεταβλητών a, σ, γ και y, ισχύει:

$$f(\mathrm{y}, \sigma, \alpha, \gamma) = f(\mathrm{y}|\sigma, \alpha, \gamma) f(\sigma, \alpha, \gamma) \tag{5}$$

Κατ' επέκταση, με την προϋπόθεση πως οι μεταβλητές α και σ είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους, σύμφωνα με τον κανόνα του Bayes [21] η συνάρτηση της **εκ των υστέρων από κοινού κατανομής πιθανότητας** των a, σ και γ, εξαρτημένη από το y παίρνει την μορφή:

$$f(\sigma, \alpha, \gamma|\mathrm{y}) = \frac{f(\mathrm{y}, \sigma, \alpha, \gamma)}{\iiint f(\mathrm{y}, \sigma, \alpha, \gamma) \mathrm{d}\sigma \mathrm{d}\alpha d\gamma} = \frac{f(\mathrm{y}|\sigma, \alpha) f(\sigma, \alpha, \gamma)}{\iiint f(\mathrm{y}, \sigma, \alpha, \gamma) \mathrm{d}\sigma \mathrm{d}\alpha d\gamma} =$$

$$= \frac{f(\mathrm{y}|\sigma,\alpha)f(\sigma,a|\gamma)f(\gamma)}{\iiint f(\mathrm{y}|\sigma,\alpha)f(\sigma,\alpha|\gamma)f(\gamma)\mathrm{d}\sigma\mathrm{d}\alpha d\gamma} \propto f(\mathrm{y}|\sigma,\alpha)f(a)f(\sigma|\gamma)f(\gamma) \quad (6)$$

Το ολοκλήρωμα του παρονομαστή της εξίσωσης (6) ισούται με την πιθανότητα $p(\mathrm{y})$ και δεν μπορεί να εξαχθεί σε κλειστή μορφή, ωστόσο, με δεδομένες παρατηρήσεις y μπορεί θα θεωρηθεί πως είναι σταθερό και πως η $f(\sigma,\alpha,\gamma|\mathrm{y})$ είναι μόνον ανάλογη του αριθμητή.

Με ολοκλήρωση της (6), μπορούν να υπολογιστούν οι **υπό συνθήκη εκ των υστέρων κατανομές πιθανότητας (conditional posterior distribution)** ή οι **εκ των υστέρων περιθώριες κατανομές (conditional marginal distribution)** της μεταβλητής $\alpha \sim f(\alpha|\gamma,\sigma,\mathrm{y})$, της παραμέτρου $\sigma \sim f(\sigma|\gamma,\alpha,\mathrm{y})$ και της υπερπαραμέτρου $\gamma \sim f(\gamma|\sigma,\alpha,\mathrm{y})$. Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί πως η επιλογή των πρότερων συναρτήσεων των παραμέτρων και των υπερπαραμέτρων πρέπει να γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε αυτές να είναι (εάν γίνεται) συζυγείς μεταξύ τους, καθότι οι αναλυτικοί υπολογισμοί απλοποιούνται αρκετά.

Η λήψη δειγμάτων από τις υπό συνθήκη εκ των υστέρων κατανομές αυτές προσφέρει μία αμερόληπτη εκτίμηση των μεταβλητών του μοντέλου. Η εκτίμηση αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί εκ νέου ως πρότερη πληροφορία, για την αναθεώρηση της πρότερης γνώσης που διαθέτουμε. Μία μέθοδος που ανταποκρίνεται σε δειγματοληψία με τις παραπάνω επισημάνσεις είναι η MCMC δειγματοληψία Gibbs.

2.3. Δειγματοληψία Gibbs

Όπως περιεγράφηκε στην παραπάνω παράγραφο, η χρήση ιεραρχικών μοντέλων Bayes συμπεριλαμβάνει τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων, η επίλυση των οποίων γίνεται εξαιρετικά δύσκολη σε μοντέλα μεγάλης πολυπλοκότητας [24]. Για τον λόγο αυτό, αλγόριθμοι εφαρμογής τέτοιων μοντέλων βασίζονται σε **MCMC (Monte Carlo Markov Chain)** μεθόδους δειγματοληψίας.

Σε γενικές γραμμές οι αλυσίδες Markov αποτελούν στοχαστικά μοντέλα που περιγράφουν την αλληλουχία γεγονότων, με την πιθανότητα κάθε γεγονότος να εξαρτάται αποκλειστικά από την κατάσταση που επήλθε από το αμέσως προηγούμενο γεγονός της αλυσίδας [25]. Η βασική θεώρηση των MCMC αλγορίθμων είναι πως η εκτίμηση οποιουδήποτε στατιστικού μίας εκ των υστέρων κατανομής είναι εφικτή εάν διαθέτουμε έναν ικανοποιητικό αριθμό προσομοιωμένων δειγμάτων της κατανομής αυτής. Η επικρατέστερη MCMC οικογένεια αλγορίθμων αυτού του είδους χρησιμοποιεί τον αλγόριθμο Metropolis-Hastings. Επειδή ο υπολογισμός των εκ των υστέρων περιθώριων πιθανοτήτων, όπως ελέχθη παραπάνω, είναι σχετικά εύκολος να γίνει χρησιμοποιούμε τη μέθοδο **δειγματοληψίας Gibbs** [26], η οποία ξεπερνά τις δυσκολίες που μπορεί να έχει ο υπολογισμός της εκ των υστέρων πιθανότητας του μοντέλου (6).

Χρησιμοποιώντας το παράδειγμα του ιεραρχικού μοντέλου της παραγράφου 2.2, σύμφωνα με την μέθοδο δειγματοληψίας Gibbs, η προσομοίωση δειγμάτων από την συνδυαστική εκ των υστέρων κατανομή πιθανότητας $f(\sigma, \alpha, \gamma | \mathrm{y})$, των τριών μεταβλητών σ, α και γ μπορεί να γίνει με δειγματοληψίες από τις συναρτήσεις των υπό συνθήκη εκ των υστέρων κατανομών κάθε μεταβλητής περιθωριοποιώντας τις (δηλαδή θεωρώντας τις υπόλοιπες μεταβλητές σταθερές) και επαναλαμβάνοντας διαδοχικά ένα κύκλο επαναλήψεων για κάθε άγνωστη μεταβλητή. Για παράδειγμα, μία απλοποιημένη μορφή ενός αλγορίθμου δειγματοληψίας Gibbs για το ιεραρχικό μοντέλο της παραγράφου 2.2. είναι η παρακάτω [26]:

Αλγόριθμος 1: Παράδειγμα αλγορίθμου δειγματοληψίας Gibbs

Αρχικοποίηση $\alpha^{(0)}$, $\sigma^{(0)}$ και $\gamma^{(0)}$
for i=1,2,…*do*
  $\alpha^{(i)} \sim f(\alpha \mid \sigma^{(i-1)}, \gamma^{(i-1)})$
  $\gamma^{(i)} \sim f(\gamma \mid \alpha^{(i)}, \sigma^{(i-1)})$
  $\sigma^{(i)} \sim f(\sigma \mid \alpha^{(i)}, \gamma^{(i)})$
endfor

Οι επαναλήψεις συνεχίζουν έως ότου παρατηρηθεί σύγκλιση. Η σύγκλιση συνήθως επέρχεται μετά από έναν αριθμό επαναλήψεων, και τα δείγματα που προκύπτουν στις πρώτες επαναλήψεις της αλυσίδας αυτής δεν προσεγγίζουν επαρκώς την επιθυμητή κατανομή. Το τμήμα από την αρχή της αλυσίδας έως την πρώτη ένδειξη σύγκλισης ονομάζεται **burn-in period**.

2.4. Εφαρμογές στον φασματικό διαχωρισμό

Τα ιεραρχικά μοντέλα Bayes και η μέθοδος δειγματοληψίας Gibbs μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την επίλυση του προβλήματος της φασματικού διαχωρισμού. Ένα σημαντικό βήμα στην εφαρμογή των μεθόδων αυτών είναι η επιλογή των καταλληλότερων πρότερων συναρτήσεων για κάθε μεταβλητή. Όπως προαναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 1 μία βασική προϋπόθεση του γραμμικού μοντέλου μίξης είναι πως τα ποσοστά συμμετοχής ικανοποιούν τους περιορισμούς της προσθετικότητας και της μη αρνητικότητας.

Σε ένα ιεραρχικό μοντέλο ο περιορισμός της μη αρνητικότητας μπορεί να εκφραστεί με διάφορους τρόπους, π.χ. την χρήση κολοβωμένων κανονικών πρότερων συναρτήσεων (truncated normal priors) ή πρότερης Γάμα [10],[16],[27],[35]. Επίσης, στις περιπτώσεις ημι-επιβλεπόμενων μοντέλων οι τιμές των ποσοστών συμμετοχής διέπονται επίσης από τον κανόνα της **αραιότητας** (τα περισσότερα ποσοστά έχουν τιμή μηδέν) για την

έκφραση του οποίου έχει προταθεί η χρήση πρότερων συναρτήσεων κατανομής Laplace [28], [33], [34], Rayleigh [29] ή Student [30].

Οι Moussaoui et al (2006) [35] πρότειναν ένα μοντέλο επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού με συμπερασμό Bayes, με χρήση πρότερων συναρτήσεων Γάμα, που όπως προαναφέρθηκε, χρησιμοποιούνται για την έκφραση του κανόνα της μη αρνητικότητας. Οι Dobigeon et al. (2009) [36] εξέλιξαν την υπόθεση αυτή έτσι ώστε να συμπεριλαμβάνει και τον περιορισμό της προσθετικότητας με την χρήση της πρότερης κατανομής Dirichlet.

Οι N. Dobigeon και J.Y. Tourneret (2007) [27] πρότειναν έναν επιβλεπόμενο αλγόριθμο δειγματοληψίας Gibbs για τον υπολογισμό των ποσοστών συμμετοχής α και του θορύβου n του γραμμικού μοντέλου μίξης, όπως αυτό περιγράφηκε στην (1), με την παραδοχή ότι ο θόρυβος n ακολουθεί κανονική κατανομή με διακύμανση σ^2,$n \sim N(0_L, \sigma^2 I_L)$. Σύμφωνα με το ιεραρχικό τους μοντέλο, η συνάρτηση πιθανοφάνειας του y είναι η παρακάτω:

$$f(\mathrm{y}|a^+, \sigma^2) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{L}{2}} exp\left[-\frac{\|\mathrm{y} - \mathrm{M}^+ a^+\|^2}{2\sigma^2}\right] \tag{7}$$

όπου $\|x\|^2 = x^\mathsf{T} x$

Ως πρότερη συνάρτηση της παραμέτρου σ^2 επιλέχθηκε η αντίστροφη γάμα κατανομή: $\sigma^2 \sim IG(\frac{\boldsymbol{\nu}}{\mathbf{2}}, \frac{\boldsymbol{\gamma}}{\mathbf{2}})$.. Για την υπερπαράμετρο ν επιλέχθηκε ως πρότερη κατανομή, η αντίστροφη γάμα κατανομή $IG(\frac{\rho}{2}, \frac{\psi}{2})$**,** ενώ για την υπερπαράμετρο γ η πρότερη κατανομή του Jeffrey. Ως πρότερη συνάρτηση του διανύσματος τιμών των a, με α^+=[α^T,α_R]$^\mathsf{T}$ και α=[α_1,...,$\alpha_{\mathrm{R-1}}$]$^\mathsf{T}$ επιλέχθηκε η κολοβωμένη πολυδιάστατη κανονική κατανομή $a \sim N_S(0_{R-1}, \sigma_0^2 I_{R-1})$ όπου $\boldsymbol{S}$ η χωρική διάταξη (simplex) η οποία ορίζεται από τους περιορισμούς της προσθετικότητας και της μη αρνητικότητας

Η χρήση του παραπάνω ιεραρχικού μοντέλου έχει εμφανιστεί και σε παραλλαγές όπως για χρήση σε εφαρμογές ημι-επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού [10], με πρότερη συνάρτηση για το διάνυσμα των α την κατανομή Dirichlet. Έτερη παραλλαγή είναι ο αλγόριθμος BLU (Bayesian Linear Unmixing) [31] ο οποίος περιλαμβάνει ένα αρχικό βήμα Ανάλυσης Κυρίων Συνιστωσών (Principal Component Analysis – PCA) για την μείωση των διαστάσεων των δεδομένων και χρήση της κανονικής κατανομής ως πρότερης κατανομής για το διάνυσμα a.

Οι K.E. Themelis και A.A. Rontogiannis [16], [32] πρότειναν τον B-ICE (Bayesian Iterative Conditional Expectations), έναν αλγόριθμο για ημι-επιβλεπόμενο φασματικό διαχωρισμό, όπου οι φασματικές υπογραφές των καθαρών υλικών διαλέγονται από μία δεδομένη φασματική βιβλιοθήκη. Στην περίπτωση αυτή, με Φ τον πίνακα φασματικών

υπογραφών της βιβλιοθήκης αυτής και w τα ποσοστά συμμετοχής, η συνάρτηση πιθανοφάνειας, δεδομένου κανονικού θορύβου με διακύμανση β^{-1} είναι η εξής:

$$p(\mathrm{y}|w,\beta) = (2\pi)^{-\frac{M}{2}}\beta^{-\frac{M}{2}}exp\left[-\frac{\beta}{2}\|\mathrm{y}-\Phi w\|_2^2\right] \tag{8}$$

Λόγω της συνθήκης της αραιότητας που διέπει τις τιμές των w στις ημι-επιβλεπόμενες εφαρμογές, προτάθηκε να χρησιμοποιηθεί η συνάρτηση της κανονικής κατανομής $w \sim N_{R_+^N}(w0,\beta^{-1}\Lambda^{-1})$, κολοβωμένη στο θετικό υπόχωρο R_+^N, (truncated Gaussian prior) ως πρότερη για τις τιμές των w. Στην παραπάνω κατανομή, ο Λ^{-1} είναι ένας διαγώνιος πίνακας που εμπεριέχει τις τιμές των υπερπαραμέτρων $\gamma = [\gamma_1,\gamma_2,..,\gamma_N]^{\mathrm{T}}$, κάθε μία από τις οποίες ακολουθεί μία κατανομή Γάμα $G(\gamma_i 1,\frac{\lambda_i}{2})$. Η κανονική κατανομή των w σε συνδυασμό με τις κατανομές Γάμα των μεταβλητών γ, παίρνει τη μορφή κολοβωμένης κατανομής Laplace, η οποία ικανοποιεί την συνθήκη της αραιότητας. Για την παράμετρο β προτάθηκε επίσης κατανομή Γάμα ως πρότερη.

Οι Altman et al. (2015) [20] παρουσίασαν έναν αλγόριθμο ημι-επιβλεπόμενου διαχωρισμού ο οποίος κατά τον υπολογισμό των ποσοστών των καθαρών υλικών λαμβάνει υπόψη και τα οκτώ γειτονικά εικονοστοιχεία. Αυτό το επέτυχαν αναλύοντας τον πίνακα $A^{R\times N}$ των διανυσμάτων των ποσοστών συμμετοχής ως το γινόμενο $\mathrm{Z}\odot\mathrm{X}$ δύο πινάκων Z και X. Στην περίπτωση αυτή ο πίνακας $\mathrm{Z}\in\{0,1\}^{R\times N}$ περιέχει ένα σύνολο μεταβλητών Bernoulli που υποδηλώνουν την παρουσία ή απουσία ενός καθαρού υλικού στον περίγυρο του εικονοστοιχείου, ενώ ο πίνακας $\mathrm{X}\in R^{R\times N}$ περιέχει θετικές τιμές των ποσοστών συμμετοχής. Οι Altman et al. πρότειναν ένα ιεραρχικό μοντέλο Ising για τις τιμές του Z, σε συνδυασμό με την χρήση της κολοβωμένης κανονικής κατανομής $x_{r,n}|s_r^2 \sim N_{R+}(0,s_r^2)$ για τις τιμές του X , της ανάστροφης Γάμα κατανομής $s_r^2|\gamma,\nu \sim IG(\gamma,\nu)$ για την υπερπαράμετρο s και την πρότερη συνάρτηση του Jeffrey για την διακύμανση σ^2 του θορύβου.

Οι Schmit et al. (2009) [37] πρότειναν έναν μη επιβλεπόμενο αλγόριθμο φασματικού διαχωρισμού διατυπώνοντας το πρόβλημα ως παραγοντοποίηση μη αρνητικών πινάκων (Non-Negative Matrix Factorization - NMF). Το πρόβλημα της NMF μπορεί να διατυπωθεί ως $\mathrm{X}=\mathrm{AB}+\mathrm{E}$, όπου $\mathrm{X}\in R^{I\times J}$ ο πίνακας δεδομένων ο οποίος παραγοντοποιείται ως το γινόμενο δύο μη αρνητικών πινάκων, $\mathrm{A}\in R_+^{I\times N}$ και $\mathrm{B}\in R_+^{N\times J}$, με $\mathrm{E}\in R^{I\times J}$ έναν πίνακα υπολοίπων. Για την επίλυση οι Schmit et al. πρότειναν την χρήση ενός ιεραρχικού μοντέλου και της δειγματοληψίας Gibbs, με την εκθετική κατανομή πως πρότερη κατανομή για τα A και B, και την αντίστροφη Γάμα κατανομή πως πρότερη για την μεταβλητότητα του θορύβου. Η μέθοδος NMF χρησιμοποιήθηκε και από τους Arngren et al. (2010) [38] οι οποίοι πρότειναν την χρήση μίας πρότερης

συνάρτησης όγκου (volume prior) για την εκτίμηση των παραμέτρων του simplex που περιγράφουν τον φασματικό χώρο.

Οι J.Hahn και A. Zoubir (2017) [39] πρότειναν έναν αλγόριθμο μη επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού ο οποίος χρησιμοποιεί στοιχεία της μεθόδου IBP (Indian Buffing Process) για την εξαγωγή των καθαρών υλικών. Στην περίπτωση αυτή, ο πίνακας των φασματικών υπογραφών των K καθαρών υλικών εκφράζεται ως το γινόμενο δύο πινάκων $\mathrm{A}\odot\mathrm{W}$, όπου $A\in\{0,1\}^{K\times L}$ ο πίνακας των συντελεστών ενεργοποίησης, και $W\in R_{+}^{K\times L}$ ένας πίνακας βαρών. Ως πρότερη συνάρτηση για κάθε διάνυσμα ποσοστών συμμετοχής χρησιμοποιείται η κατανομή Dirichlet, και για την διασπορά του θορύβου χρησιμοποιήθηκε η αντίστροφη Γάμα κατανομή με παραμέτρους α_σ και β_σ: $\sigma_0^2 \sim IG(\alpha_\sigma, \beta_\sigma)$. Ως πρότερη συνάρτηση για την μεταβλητή A χρησιμοποιείται η διωνυμική Βήτα κατανομή με παραμέτρους α_α και β_α. Για την μεταβλητή W χρησιμοποιείται η ίδια πρότερη συνάρτηση όγκου των Arngren et al. [38].

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΙΕΡΑΡΧΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ BAYES ΜΕ ΥΠΟΘΕΣΗ ΧΡΩΜΑΤΙΚΟΥ ΘΟΡΥΒΟΥ

3.1. Εισαγωγή

Στα ιεραρχικά μοντέλα που περιγράφηκαν στην προηγούμενη παράγραφο, γίνεται η υπόθεση πως ο θόρυβος είναι κανονικός, δηλαδή ακολουθεί κανονική κατανομή (Gaussian noise). Στην περίπτωση του κανονικού θορύβου, το διάνυσμα του θορύβου είναι ένα σύνολο από τυχαίες τιμές, ανεξάρτητες μεταξύ τους, οι οποίες ακολουθούν την κανονική κατανομή με μέση τιμή 0 και διακύμανση σ^2. Αυτό συνεπάγεται πως ο πίνακας συμμεταβλητότητας του θορύβου είναι διαγώνιος και πως κάθε τιμή της διαγωνίου αυτής είναι η διακύμανση σ^2.

Στην περίπτωση χρωματικού θορύβου αυτό δεν ισχύει, συνεπώς στο ιεραρχικό μοντέλο ο πίνακας συμμεταβλητότητας αποτελεί μία από τις προς εκτίμηση μεταβλητές και πρέπει να επιλεχθεί μία πρότερη συνάρτηση κατανομής για αυτήν. Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται το ιεραρχικό μοντέλο **επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού** που προτάθηκε από τους Dobigeon et al. (2008) [3]. Στο παρόν κεφάλαιο περιγράφεται η μορφή του ιεραρχικού μοντέλου όπως και τα βήματα της δειγματοληψίας Gibbs που θα χρησιμοποιηθούν στον αλγόριθμο φασματικού διαχωρισμού.

3.2. Περιγραφή μοντέλου

Όπως αναφέρθηκε και στο Κεφάλαιο 1, το γραμμικό μοντέλο μίξης έχει την μορφή:

$$\mathrm{y} = \mathrm{M}^{+} a^{+} + \mathrm{n} \tag{9}$$

όπου $\mathrm{M}^{+} = [\mathrm{m}_1, \mathrm{m}_2, \dots, \mathrm{m}_R]$ ο πίνακας φασματικών υπογραφών των R καθαρών υλικών και $\alpha^{+} = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_R]^{\mathsf{T}}$ το διάνυσμα των ποσοστών συμμετοχής, στην συνέχεια αναφερόμενο ως διάνυσμα **αφθονιών**.

Για την κατασκευή ενός ιεραρχικού μοντέλου με υπόθεση χρωματικού θορύβου, γίνεται η βασική υπόθεση πως το διάνυσμα θορύβου n, όπως αυτό εμφαίνεται στην συνάρτηση του γραμμικού μοντέλου μίξης (9), ακολουθεί κανονική κατανομή με πίνακα συμμεταβλητότητας Σ, διαστάσεων $L \times L$, όπου L ο αριθμός των καναλιών. Συνεπώς το διάνυσμα n ακολουθεί την πολυδιάστατη κανονική κατανομή $\mathrm{n} \sim N(0_L, \Sigma)$, όπου 0_L είναι ένα μηδενικό διάνυσμα, μήκους L.

Βάσει των στατιστικών ιδιοτήτων του διανύσματος n, το διάνυσμα y της συνάρτησης (9) ακολουθεί την πολυδιάστατη κανονική κατανομή $\mathrm{y} \sim N(\mathrm{M}^{+} a^{+}, \Sigma)$ και η συνάρτηση πιθανοφάνειας, δηλαδή η συνάρτηση πιθανότητας του y, με παραμέτρους τις αφθονίες a^{+} και τον πίνακα συμμεταβλητότητας Σ, παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$f(\mathrm{y}|a^{+},\Sigma) \propto (\Sigma)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\|\mathrm{y}-\mathrm{M}^{+}a^{+}\|_{\Sigma^{-1}}^{2}\right] \tag{10}$$

Κατά την επιλογή των πρότερων συναρτήσεων κάθε παραμέτρου, σκοπός είναι η επιλογή αυτών που ικανοποιούν τους περιορισμούς που διέπουν το μοντέλο ενώ ταυτόχρονα εκφράζουν με όσο το δυνατόν καλύτερο τρόπο την εκ των προτέρων γνώση για τις παραμέτρους αυτές.

Στο σημείο αυτό θα γίνει αναφορά σε μία έννοια που φανεί χρήσιμη παρακάτω. Έστω ένα υποσύνολο $R^{\boldsymbol{N}}$ του N-διάστατου Ευκλείδιου χώρου $\mathbf{R}^{\boldsymbol{N}}$, με θετικό μέτρο κατά Lebesgue, και έστω μία συνάρτηση N-διάστατης κατανομής πιθανότητας $p(\vec{x}|\vec{\theta})$ της μεταβλητής $\vec{x}$ με παραμέτρους $\vec{\theta}$. Τότε ως $\mathrm{I}_{R^{\boldsymbol{N}}}(\vec{x})$ ορίζεται:

$$\mathrm{I}_{R^{\boldsymbol{N}}}(\vec{x}) = \begin{cases} 1, & x \in R^{\boldsymbol{N}} \\ 0, & x \in R^{\boldsymbol{N}} \end{cases}$$

και ως $\vec{x} \sim p_{R^{\boldsymbol{N}}}(\vec{x}|\vec{\theta})$ η κολοβωμένη συνάρτηση κατανομής πιθανότητας της $p(\vec{x}|\vec{\theta})$ στο $R^{\boldsymbol{N}}$ με $p_{R^{\boldsymbol{N}}}(\vec{x}|\vec{\theta}) \propto p(\vec{x}|\vec{\theta})\mathrm{I}_{R^{\boldsymbol{N}}}(\vec{x})$.

3.2.1. Πρότερη συνάρτηση αφθονιών

Για την πρώτη παράμετρο, τις αφθονίες a^{+}, δεν υπάρχει καμία πρότερη γνώση εκτός από την προϋπόθεση ότι πρέπει να ικανοποιούν την συνθήκη της μη αρνητικότητας και την συνθήκη της προσθετικότητας. Η συνθήκη της προσθετικότητας συνεπάγεται πως το διάνυσμα a^{+} μπορεί να εκφραστεί ως $a^{+} = [\alpha^{\mathsf{T}}, \alpha_R]^{\mathsf{T}}$ με $\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{R-1}]^{\mathsf{T}}$ και $\alpha_R = 1 - \sum_{r=1}^{R-1} a_r$ μειώνοντας τον αριθμό των προς εκτίμηση αφθονιών κατά 1.

Επομένως οι τιμές του a περιορίζονται εντός ενός simplex $\mathbb{S}$, όπου:

$$\mathbb{S} = \left\{ a \middle| a_r \geq 0, \forall r = 1, \dots, R-1, \sum_{r=1}^{R-1} a_r \leq 1 \right\} \tag{11}$$

Με βάση τα παραπάνω μία πρότερη συνάρτηση που ικανοποιεί όλα τα προαναφερόμενα είναι η ομοιόμορφη κατανομή, περιορισμένη στο $\mathbb{S}$ μέσω του δείκτη $\mathrm{I}_{\mathbb{S}}()$:

$$f(a) \propto \mathrm{I}_{\mathbb{S}}(\alpha) \tag{12}$$

3.2.2. Πρότερη συνάρτηση πίνακα συμμεταβλητότητας θορύβου

Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο, στην περίπτωση λευκού θορύβου $\mathrm{n} \sim N(0_L, \sigma^2 I_L)$ η πρότερη συνάρτηση που προτείνεται στην βιβλιογραφία για την παράμετρο σ^2 είναι αυτή της αντίστροφης Γάμα κατανομής. Ωστόσο, στην περίπτωση χρωματικού θορύβου, οι τιμές του διανύσματος n δεν μπορούν να θεωρηθούν ανεξάρτητες και κανονικά κατανεμημένες (independent and identically distributed – i.i.d.).

Μία πρότερη συνάρτηση που εκφράζει λοιπόν τον πίνακα συμμεταβλητότητας Σ είναι αυτή της αντίστροφης Wishart κατανομής πιθανότητας, με μέση τιμή D και ν βαθμούς ελευθερίας, σε ένα χώρο L διαστάσεων:

$$\Sigma|\nu, \mathrm{D} \sim W_L^{-1}\big((\nu - L - 1)\mathrm{D}, \nu\big) \tag{13}$$

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της αντίστροφης Wishart κατανομής, εξαρτημένη από το D εκφράζεται ως εξής [40]:

$$f(\Sigma|\nu, \mathrm{D}) = \frac{(\nu - L + 1)^{\nu/2}|\mathrm{D}|^{\nu/2}}{2^{L\nu/2}\Gamma_L\left(\frac{\nu}{2}\right)|\Sigma|^{(\nu+L+1)/2}}\mathrm{etr}\left\{-\frac{1}{2}(\nu - L - 1)\Sigma^{-1}\mathrm{D}\right\} \propto$$

$$\propto \frac{|\mathrm{D}|^{\nu/2}}{|\Sigma|^{(\nu+L+1)/2}}\mathrm{etr}\left\{-\frac{1}{2}(\nu - L - 1)\Sigma^{-1}\mathrm{D}\right\} \tag{14}$$

Όπου $\Gamma_L\left(\frac{\nu}{2}\right)$ η πολυμεταβλητή συνάρτηση Γάμα, η έκφραση της οποίας είναι:

$$\Gamma_L\left(\frac{\nu}{2}\right) = \pi^{L(L-1)/4}\prod_{i=1}^{L}\Gamma\left(\frac{\nu - L + i}{2}\right) \tag{15}$$

Η αντίστροφη Wishart κατανομή αποτελεί συζυγή πρότερη κατανομή για την μεταβλητή Σ, η παράμετρος ν της οποίας είναι σταθερή και εξαρτάται από την πρότερη γνώση για τον Σ, δηλαδή την φύση του θορύβου. Η απόσταση του Σ από την μέση τιμή D εξαρτάται από την τιμή της παραμέτρου αυτής καθώς η διακύμανση της συνάρτησης (14) εκφράζεται ως εξής:

$$\mathrm{var}[\Sigma|\nu, \mathrm{D}] = \frac{(\nu - L + 1)\mathrm{D}^2 + (\nu - L - 1)\mathrm{tr}\{\mathrm{D}\}\mathrm{D}}{(\nu - L - 3)(\nu - L)} \tag{16}$$

Βάσει της (16) προκύπτει επίσης πως η παράμετρος ν πρέπει να ικανοποιεί την προϋπόθεση $\nu > L + 3$. Η δεύτερη παράμετρος D είναι ένας διαγώνιος πίνακας διαστάσεων $L \times L$:

$$\mathrm{D} = \gamma I_L \tag{17}$$

όπου η γ είναι μία θετική ρυθμιζόμενη υπερπαράμετρος. Βάσει της (17), η συνάρτηση (14) της πρότερης κατανομής του Σ μπορεί πλέον να γραφτεί ως εξής:

$$f(\Sigma|\nu,\gamma) \propto \frac{\gamma^{\nu L/2}}{|\Sigma|^{(\nu+L+1)/2}} \operatorname{etr}\left\{-\frac{\gamma}{2}(\nu - L - 1)\Sigma^{-1}\right\} \tag{18}$$

3.2.3. Πρότερες συναρτήσεις υπερπαραμέτρων

Όπως προκύπτει από τις πρότερες συναρτήσεις που αναφέρθηκαν παραπάνω, υπάρχει μία μοναδική υπερπαράμετρος γ για την οποία δεν υπάρχει καμία πρότερη γνώση. Η απώλεια πρότερης γνώσης υποδεικνύει την χρήση της πρότερης συνάρτησης του Jeffrey, όπως προαναφέρθηκε και στην παράγραφο 2.1, και η πρότερη συνάρτηση εκφράζεται ως εξής:

$$f(\gamma) \propto \frac{1}{\gamma} \mathrm{I}_{\boldsymbol{R}+}(\gamma) \tag{19}$$

3.2.4. Εκ των υστέρων συνάρτηση κατανομής πιθανότητας

Εάν υποθέσουμε ένα διάνυσμα παραμέτρων θ με $\theta = \{\alpha, \Sigma\}$, τότε η συνάρτηση πιθανοφάνειας $f(\mathrm{y}|\theta)$ και η συνάρτηση της παραμέτρου $f(\gamma)$, όπως εμφαίνονται στις εξισώσεις (10) και (19) σχηματίζουν ένα ιεραρχικό μοντέλο δύο επιπέδων. Βάσει του μοντέλου αυτού, η εκ των υστέρων συνάρτηση πιθανότητας $f(\theta|\mathrm{y})$ είναι:

$$\begin{aligned} f(\theta|\mathrm{y}) &= \int f(\theta,\gamma|\mathrm{y})d\gamma = \\ &= \int f(\mathrm{y}|\theta,\gamma)f(\theta,\gamma)d\gamma \propto \int f(\mathrm{y}|\theta)f(\theta|\gamma)f(\gamma)d\gamma \end{aligned} \tag{20}$$

Με την προϋπόθεση ότι οι μεταβλητές Σ και α είναι μεταξύ τους ανεξάρτητες τότε η συνάρτηση της από κοινού κατανομής πιθανότητας $f(\theta|\gamma) = f(\alpha, \Sigma|\gamma)$ ισούται με το γινόμενο των κατανομών των επιμέρους μεταβλητών $f(\alpha)$ και $f(\Sigma|\nu,\gamma)$. Οι εξισώσεις των κατανομών αυτών δίνονται από τις (12) και (18), δίνοντας στην $f(\theta|\gamma)$ την παρακάτω μορφή :

$$\begin{aligned} f(\theta|\gamma) &= f(\alpha,\Sigma|\gamma) = f(\alpha)f(\Sigma|\nu,\gamma) \propto \\ &\propto \frac{\gamma^{\nu L/2}}{|\Sigma|^{(\nu+L+1)/2}} \operatorname{etr}\left\{-\frac{\gamma}{2}(\nu - L - 1)\Sigma^{-1}\right\} \mathrm{I}_{\mathrm{S}}(\alpha) \end{aligned} \tag{21}$$

Με την $f(y|\theta)$ όπως δίνεται από την εξίσωση (10) και την $f(\theta|\gamma)$ όπως δίνεται από την (21), η εκ των υστέρων συνάρτηση κατανομής πιθανότητας του θ που φαίνεται στην (20) παίρνει την μορφή:

$$f(\theta|\mathrm{y}) \propto (\mathrm{tr}\{\Sigma^{-1}\})^{-\nu L/2}|\Sigma|^{-(\nu+L+1)/2} \times \exp\left[-\frac{1}{2}\|y - \mathrm{M}^{+}a^{+}\|^{2}_{\Sigma^{-1}}\right]\mathrm{I_S}(\alpha) \quad (22)$$

Η συνάρτηση αυτή είναι δεν μπορεί να υπολογιστεί αριθμητικά, καθώς δεν είναι δυνατός ο υπολογισμός του ολοκληρώματός της σε κλειστή μορφή. Για τον λόγο αυτό προτείνεται η χρήση της μεθόδου δειγματοληψίας Gibbs για την παραγωγή τυχαίων δειγμάτων των μεταβλητών Σ και a^{+} από την εκ των υστέρων συνάρτηση κατανομής πιθανότητας (22).

3.3. Δειγματοληψία με την μέθοδο Gibbs

Σκοπός του αλγορίθμου δειγματοληψίας που θα περιγράψουμε είναι η παραγωγή τυχαίων δειγμάτων για τις μεταβλητές Σ και a^{+} με περιθωριοποίηση της εξίσωσης (22) ως προς a και ως προς Σ αντίστοιχα.

3.3.1. Παραγωγή δειγμάτων της μεταβλητής a

Με $\mathrm{M} = [\mathrm{m}_1, \mathrm{m}_2, \dots, \mathrm{m}_{R-1}]$ και $\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{R-1}]^{\mathsf{T}}$, η συνάρτηση της εκ των υστέρων κατανομής πιθανότητας (22), εξαρτημένη από το Σ είναι η εξής:

$$f(a|\Sigma, \mathrm{y}) \propto \exp\left[-\frac{(a-\mu)^{\mathsf{T}}\Lambda^{-1}(\alpha-\mu)}{2}\right]\mathrm{I_S}(\alpha) \quad (23)$$

όπου:

$$\begin{cases} \Lambda = \left[\left(\mathrm{M} - \mathrm{m}_R\mathrm{u}^{\mathsf{T}}\right)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}\left(\mathrm{M} - \mathrm{m}_R\mathrm{u}^{\mathsf{T}}\right)\right]^{-1} \\ \mu = \Lambda\left[\left(\mathrm{M} - \mathrm{m}_R\mathrm{u}^{\mathsf{T}}\right)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(\mathrm{y} - \mathrm{m}_R)\right] \end{cases} \quad (24)$$

με $\mathrm{u} = [1,1,\dots,1]^{\mathsf{T}} \in \mathrm{R}^{R-1}$**.** Η εξίσωση (23) είναι μία πολυμεταβλητή κανονική κατανομή με μέση τιμή μ και πίνακα συμμεταβλητότητας Λ, κολοβωμένη στο διάστημα $\mathbb{S}$, $\alpha|\Sigma^{-1} \sim N_{\mathbb{S}}(\mu, \Lambda)$. Λόγω της κολόβωσης της συνάρτησης κατανομής στο simplex $\mathbb{S}$, τα παραγόμενα α ικανοποιούν τους περιορισμούς της προσθετικότητας και της μη αρνητικότητας.

3.3.1. Παραγωγή δειγμάτων της μεταβλητής Σ

Η παραγωγή δειγμάτων για την μεταβλητή Σ γίνεται σε δύο βήματα:

<u>Βήμα 1ο:</u> παραγωγή δειγμάτων της μεταβλητής γ από την συνδυαστική συνάρτηση κατανομής πιθανότητας $f(\Sigma, \gamma | \alpha, \mathrm{y})$ εξαρτημένη από το Σ, η συνάρτηση αυτή έχει την μορφή κατανομής Γάμα:

$$\gamma | \alpha, \Sigma, \mathrm{y} \sim G\left(\frac{\nu L}{2}, \frac{\nu - L - 1}{2} \mathrm{tr}\{\Sigma^{-1}\}\right) \tag{25}$$

<u>Βήμα 2ο:</u> παραγωγή δειγμάτων της μεταβλητής Σ από την συνδυαστική συνάρτηση κατανομής πιθανότητας $f(\Sigma, \gamma | \alpha, \mathrm{y})$ εξαρτημένη από το γ, η συνάρτηση αυτή έχει την μορφή ανάστροφης Wishart κατανομής:

$$\Sigma | \nu, \mathrm{D} \sim W_L^{-1}\left(\gamma(\nu - L - 1)\mathbf{I}_L + \mathrm{z}\mathrm{z}^{\mathsf{T}}, \nu + 1\right) \tag{26}$$

όπου $\mathrm{z} = \mathrm{y} - \mathrm{M}^{+} a^{+}$

3.4. Ολοκληρωμένος αλγόριθμος φασματικού διαχωρισμού

Στην συνέχεια παρουσιάζεται ο αλγόριθμος δειγματοληψίας που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία, και ο οποίος βασίζεται στο μοντέλο που περιγράφηκε παραπάνω. Ο αλγόριθμος αυτός αρχικοποιείται με μία τυχαία αρχική εκτίμηση του πίνακα Σ, μία τιμή της παραμέτρου ν, και μία τιμή της παραμέτρου γ.

Η αρχική τιμή της παραμέτρου γ ορίζεται $\gamma = 4.8 \times 10^{-3}$ με βάση τη μέση τιμή αναλογίας σήματος και θορύβου (Average Signal to Noise Ratio - ASNR) των 15dB, όπως προτείνεται στην [3]:

$$\mathrm{ASNR} = \frac{1}{\gamma L} \|\mathrm{M}^{+} a^{+}\| = 15\mathrm{dB} \tag{27}$$

Η αρχικοποίηση της μεταβλητής Σ γίνεται με τυχαία δειγματοληψία από την αντίστροφη Wishart κατανομή $W_L^{-1}\left((\nu - L - 1)\mathrm{D}, \nu\right)$ της εξίσωσης (13). Ο βαθμός ελευθερίας ν της κατανομής αυτής προτείνεται από την [3] ως ίσος με $\nu = L + 3 + \eta,\ \ \eta \in \mathbb{N}$ και $\eta \gg 1$. Για πολύ μεγάλες τιμές της παραμέτρου η (η>100) η διακύμανση της αντίστροφης Wishart κατανομής, όπως αυτή δίνεται από την εξίσωση (16), πλησιάζει το

0 με αποτέλεσμα ο θόρυβος να παίρνει την μορφή i.i.d. κανονικού θορύβου. Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας ορίζεται $\eta = 30$.

Όπως προαναφέρθηκε η συνθήκη της μη αρνητικότητας για τις τιμές του διανύσματος a ικανοποιείται από την λήψη δειγμάτων από μία κολοβωμένη κανονική κατανομή της εξίσωσης (23). Ωστόσο η τυχαία δειγματοληψία μπορεί να έχει αποτελέσματα που δεν ικανοποιούν την συνθήκη της προσθετικότητας. Για αυτό τον λόγο το άθροισμα των στοιχείων του a, στο πρώτο βήμα κάθε επανάληψης, ελέγχεται ως προς την συνθήκη αυτή και το διάνυσμα a κανονικοποιείται εάν δεν την ικανοποιεί.

Επίσης αξίζει να αναφερθεί στο σημείο αυτό πως στους υπολογισμούς της παραπάνω δειγματοληψίας Gibbs χρησιμοποιείται μόνο ο αντίστροφος Σ^{-1}, όπως εμφαίνεται στις εξισώσεις (24) και (25). Για να αποφευχθεί η αναστροφή του πίνακα Σ σε κάθε επανάληψη, γίνεται απευθείας εκτίμηση του Σ^{-1} από την Wishart κατανομή, με αποτέλεσμα η εξίσωση (13) να αντικαθίσταται από την:

$$\Sigma^{-1}|\nu, \mathrm{D} \sim W_L\left(\left((\nu - L - 1)\mathrm{D}\right)^{-1}, \nu\right) \tag{28}$$

και η εξίσωση (26) αντικαθίσταται από την:

$$\Sigma^{-1}|\nu, \mathrm{D} \sim W_L\left(\left(\gamma(\nu - L - 1)\mathbf{I}_L + \mathrm{z}\mathrm{z}^{\mathsf{T}}\right)^{-1}, \nu + 1\right) \tag{29}$$

Τα βήματα του αλγορίθμου περιγράφονται συνοπτικά στον παρακάτω Πίνακα:

Αλγόριθμος δειγματοληψίας Gibbs, με υπόθεση χρωματικού θορύβου
Αρχικοποίηση:
- $\eta = 30$
- $\nu = L + 3 + \eta$
- $\gamma^{(0)} = 4.8 \times 10^{-3}$
- αρχικοποίηση του $\Sigma^{(0)}$ βάσει της (28)
Δειγματοληψία
for i=1,2,… *do*
εκτίμησε το $\alpha^{(i)}$ βάσει των (23) και (24)
εκτίμησε το $\gamma^{(i)}$ βάσει της (25)
εκτίμησε το $\Sigma^{(i)}$ βάσει της (29)
endfor

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΣΕ ΥΠΕΡΦΑΣΜΑΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ

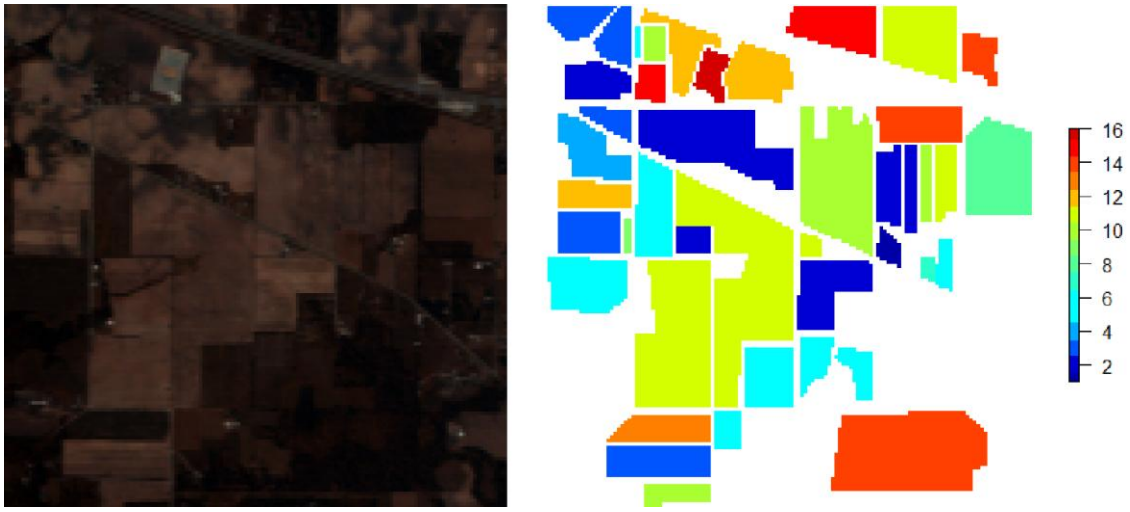
4.1. Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφεται της εφαρμογής του αλγορίθμου του Κεφαλαίου 3. Ο αλγόριθμος αυτός αναπτύχθηκε σε περιβάλλον γλώσσας R με σκοπό την εφαρμογή του σε κατάλληλα επεξεργασμένα δεδομένα υπερφασματικών δεκτών. Ιδιαίτερη σημασία δόθηκε στην αξιολόγηση της σύγκλισης της δειγματοληψίας Gibbs, και στην βελτίωση του χρόνου εκτέλεσης μέσω παράλληλου προγραμματισμού. Τέλος, έγινε εφαρμογή και αξιολόγηση με βάση την ταχύτητα εκτέλεσης και την ποιότητα των αποτελεσμάτων.

4.2. Υπερφασματικά δεδομένα

Για τις ανάγκες της παρούσας εργασίας υπερφασματικά δεδομένα του δέκτη AVIRIS, τα οποία διατίθενται σε δημόσιες βιβλιοθήκες δεδομένων. Ο δέκτης AVIRIS (Airborne Visible/Infared Imaging Spectrometer) είναι αερομεταφερόμενος υπερφασματικός δέκτης ο οποίος λαμβάνει εικόνες σε ένα εύρος 400 nm έως 2500 nm μήκους κύματος, με φασματική ανάλυση 224 καναλιών.

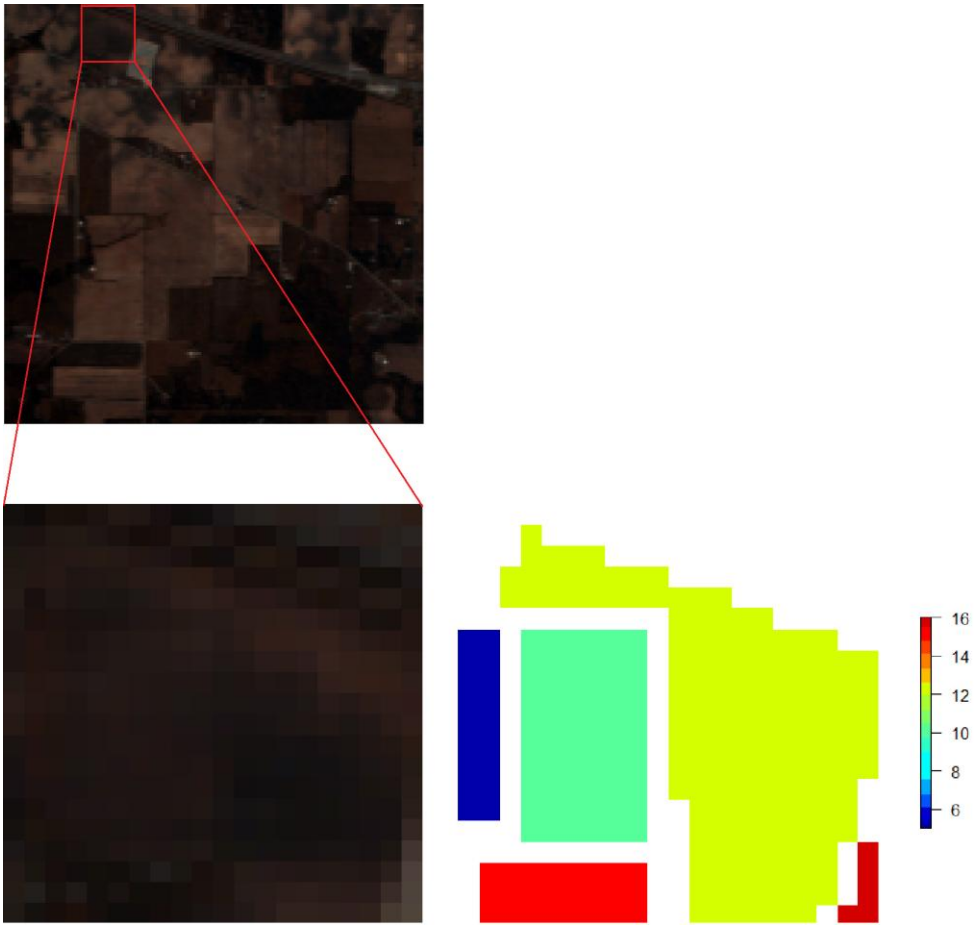
Η λήψη που χρησιμοποιήθηκε είναι μία πτήση του δέκτη AVIRIS πάνω από την περιοχή Indian Pines στην βόρειο-δυτική Ιντιάνα. Τα υπερφασματικά δεδομένα συνοδεύονται από ταυτόχρονη με την λήψη, μελέτη της κάλυψης γης και λήψεις δειγμάτων επί του εδάφους. Τα δεδομένα αυτά εκτείνονται σε 145 σειρές 145 εικονοστοιχείων (145x145, Εικόνα 4.1), από το οποίο έχουν αφαιρεθεί τα κανάλια 104-108, 150-163 και 220 τα οποία έχουν αξιολογηθεί μη αξιοποιήσιμα λόγω μεγάλου ποσοστού θορύβου και υψηλής απορρόφησης ατμοσφαιρικών υδρατμών.



Εικόνα 4.1: Φυσικό έγχρωμο σύνθετο της λήψης Indian Pines (αριστερά) με τις 16 κατηγορίες κάλυψης γης (δεξιά).

1	Alfa - Alfa
2	Corn - No till
3	Corn - Min
4	Corn
5	Grass/Pasture
6	Grass/Trees
7	Grass/Pasture - Mowed
8	Hay - Windrowed
9	Oats
10	Soybeans - No till
11	Soybeans - Min
12	Soybeans - Clean
13	Wheat
14	Woods
15	Building - Grass - Tree - Drives
16	Stone-steel Towers

Πίνακας 4.1: Οι 16 κατηγορίες κάλυψης γης για την λήψη Indian Pines.



Εικόνα 4.2: Απομόνωση του τμήματος 20x20 της αρχικής εικόνας Indian Pines.

Επίσης για τα δεδομένα αυτά έχει υπολογιστεί ο φασματικός υποχώρος του σήματος και έχει εκτιμηθεί ο βέλτιστος αριθμός καθαρών στόχων (endmembers) με εφαρμογή της μεθόδου ODM (Outlier Detection Method). Ο αριθμός των καθαρών στόχων είναι 16 για το τμήμα των 145x145 εικονοστοιχείων [45]. Οι κατηγορίες αυτές εμφαίνονται στην Εικόνα 4.1 και καταγράφονται στον Πίνακα 4.1.

Για τις ανάγκες της εφαρμογής χρησιμοποιήθηκε το αρχικό σύνολο δεδομένων και τρία επιπλέον σύνολα που κατασκευάστηκαν με βάση τον αρχικό κύβο δεδομένων. Συγκεκριμένα αποκόπηκε ένα τμήμα χωρικών διαστάσεων 20x20 εικονοστοιχείων (Εικόνα 4.2). Στην συνέχεια, τα σύνολα δεδομένων, διαστάσεων 145x145 και 20x20 αντίστοιχα, χρησιμοποιήθηκαν για την δημιουργία δύο επιπλέον συνόλων, με αντίστοιχες χωρικές διαστάσεις, τα οποία όμως περιορίζονται σε 40 κανάλια που καλύπτουν το διάστημα των 567 nm έως 1285 nm, δηλαδή στο τμήμα του φάσματος από το κίτρινο έως το εγγύς υπέρυθρο. Σε αυτό του τμήμα περιέχεται η περιοχή του φάσματος περιέχεται η περιοχή όπου έχουμε την “κόκκινη ακμή” (red edge) η οποία είναι βασικό χαρακτηριστικό της φασματικής υπογραφής των καλλιεργειών [47]. Καθότι η λήψη Indian Pines αποτελείται κατά δύο τρίτα από καλλιέργειες και κατά ένα τρίτο από δασικές εκτάσεις ή άλλες χρήσεις γης (κτίσματα κλπ.), το φασματικό τμήμα αυτό είναι επαρκές.

4.3. Επιλογή καθαρών στόχων

Όπως προαναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 3, ο αλγόριθμος που θα χρησιμοποιηθεί ανήκει στην κατηγορία των **επιβλεπόμενων μεθόδων φασματικού διαχωρισμού**, δηλαδή, οι φασματικές υπογραφές των καθαρών στόχων θεωρούνται γνωστές και δεν αποτελούν προς εκτίμηση μεταβλητή.

Στην περίπτωση της παρούσας εργασίας δεν διατίθενται οι φασματικές υπογραφές των καθαρών στόχων, και ο αριθμός τους έγινε γνωστός με την εφαρμογή του ODM. Για τον λόγο αυτό επιλέχθηκε η εφαρμογή της μεθόδου NFINDR για την εξαγωγή των φασματικών υπογραφών των καθαρών στόχων που θα χρησιμοποιηθούν για την εκτίμηση των αφθονιών στο κάθε εικονοστοιχείο. Η μέθοδος θεωρεί ότι οι καθαροί στόχοι υπάρχουν στην εικόνα ως εικονοστοιχεία.

Ο αλγόριθμος NFINDR που εφαρμόστηκε επιλέχθηκε από το πακέτο unmixR της γλώσσας R, και χρησιμοποιήθηκε για την εξαγωγή των φασματικών υπογραφών των καθαρών στόχων. Για την εικόνα των 145x145 εικονοστοιχείων ο αλγόριθμος NFINDR εκτελέστηκε για 16 καθαρούς στόχους, ενώ για το τμήμα των 20x20 εικονοστοιχείων εφαρμόστηκε για 5 καθαρούς στόχους. Εδώ αξίζει να σημειωθεί πως στο τμήμα 20x20 εφαρμόστηκε μάσκα για να αφαιρεθούν τα εικονοστοιχεία που δεν αντιστοιχούν σε κατηγορία, σύμφωνα με τα δεδομένα που συλλέχθηκαν από το πεδίο. Με αυτόν τον

τρόπο οι 5 καθαροί στόχοι αντιστοιχούν στις 5 κατηγορίες του τμήματος 20x20, όπως αυτές δίνονται από τα δεδομένα πεδίου

4.4. Σύγκλιση αλυσίδας Marcov και χρόνοι εκτέλεσης

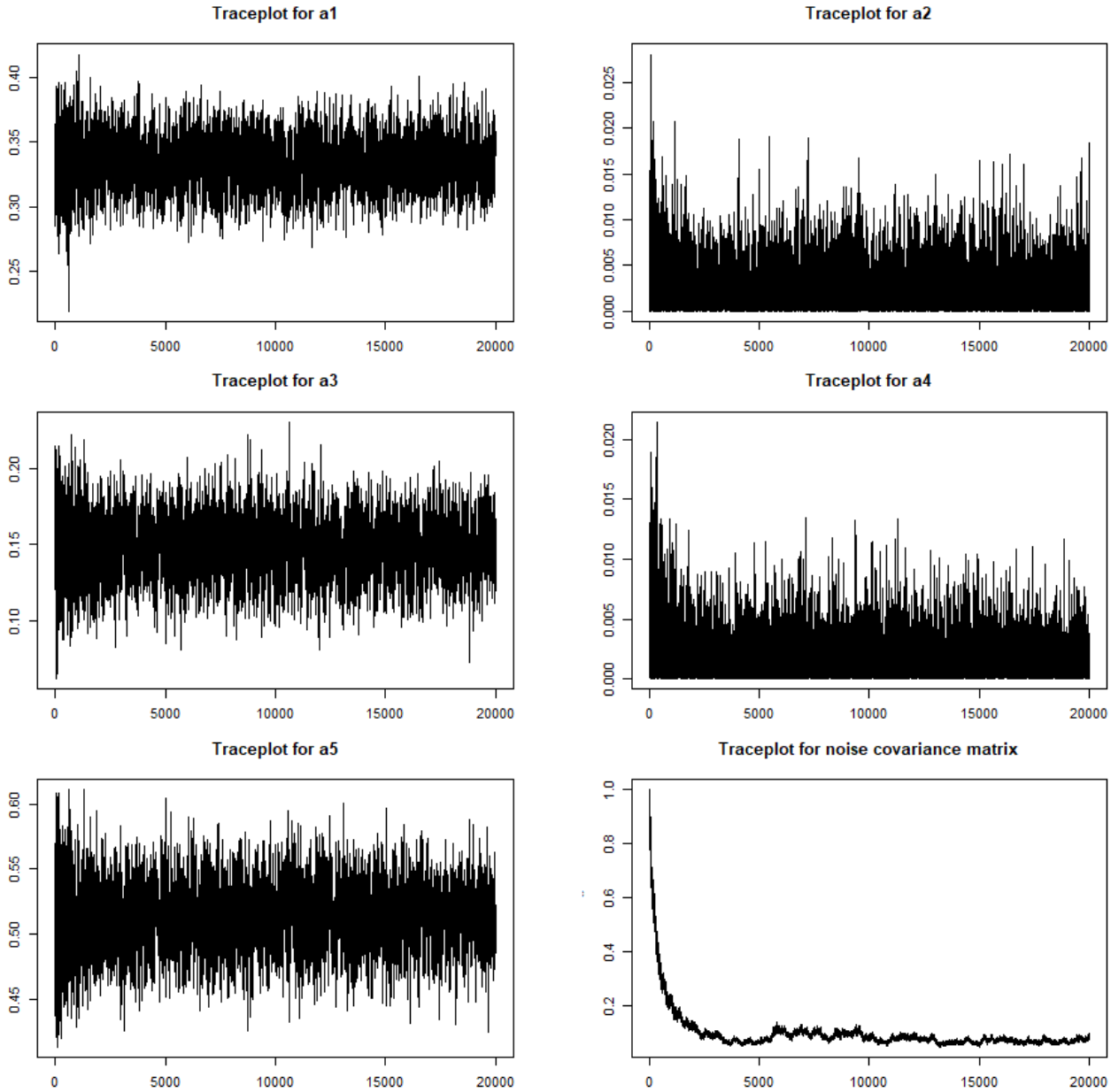
Αρχικά έγινε πειραματική εφαρμογή επιλεκτικά σε δύο τυχαία εικονοστοιχεία, με σκοπό την μελέτη της σύγκλισης της αλυσίδας Markov και την βελτίωση του χρόνου εκτέλεσης του αλγορίθμου υπολογισμού των αφθονιών με βάση την Μπεϋζιανή προσέγγιση.

Στην Εικόνα 4.3 παρουσιάζονται τα διαγράμματα μεταβολής των τιμών (traceplots) των μεταβλητών της αλυσίδας, δηλαδή για τις τιμές του διανύσματος a^+ και του πίνακα Σ, για 5 καθαρούς στόχους. Για τον πίνακα Σ απεικονίζεται η τιμή του ίχνους του πίνακα συμμεταβλητότητας ($\mathrm{tr}\{\Sigma\}$). Μία καλύτερη μέθοδος παρατήρησης της σύγκλισης που χρησιμοποιείται ευρέως είναι η εξέταση της εργοδικότητας της αλυσίδας με την χρήση του εργοδικού μέσου όρου (ergodic average). Κατά τον Walters (1982) [47], ως εργοδική ονομάζεται μία αλυσίδα Markov η οποία είναι μη περιοδική και στην οποία οποιαδήποτε νέα κατάσταση μπορεί να επέλθει αμέσως μετά από οποιαδήποτε προηγούμενη κατάσταση μέσα σε περιορισμένο αριθμό N βημάτων. Ο εργοδικός μέσος υπολογίζεται από την εξίσωση:

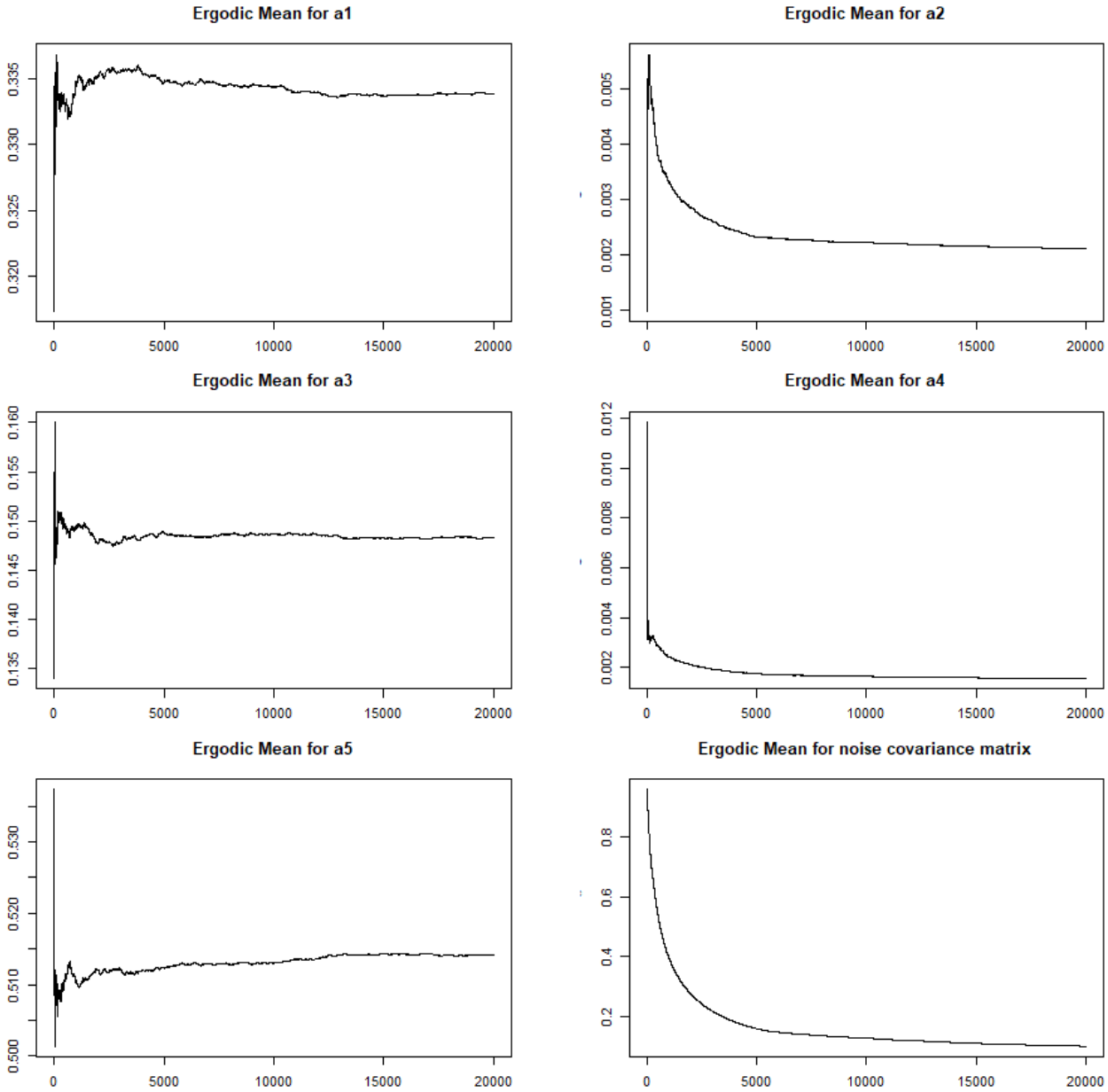
$$\mathrm{ergmean} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k \tag{30}$$

Από τα διαγράμματα του εργοδικού μέσου που παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.4, προκύπτει πως οι τιμές των μεταβλητών εμφαίνεται να συγκλίνουν μετά τις 5000-6000 επαναλήψεις.

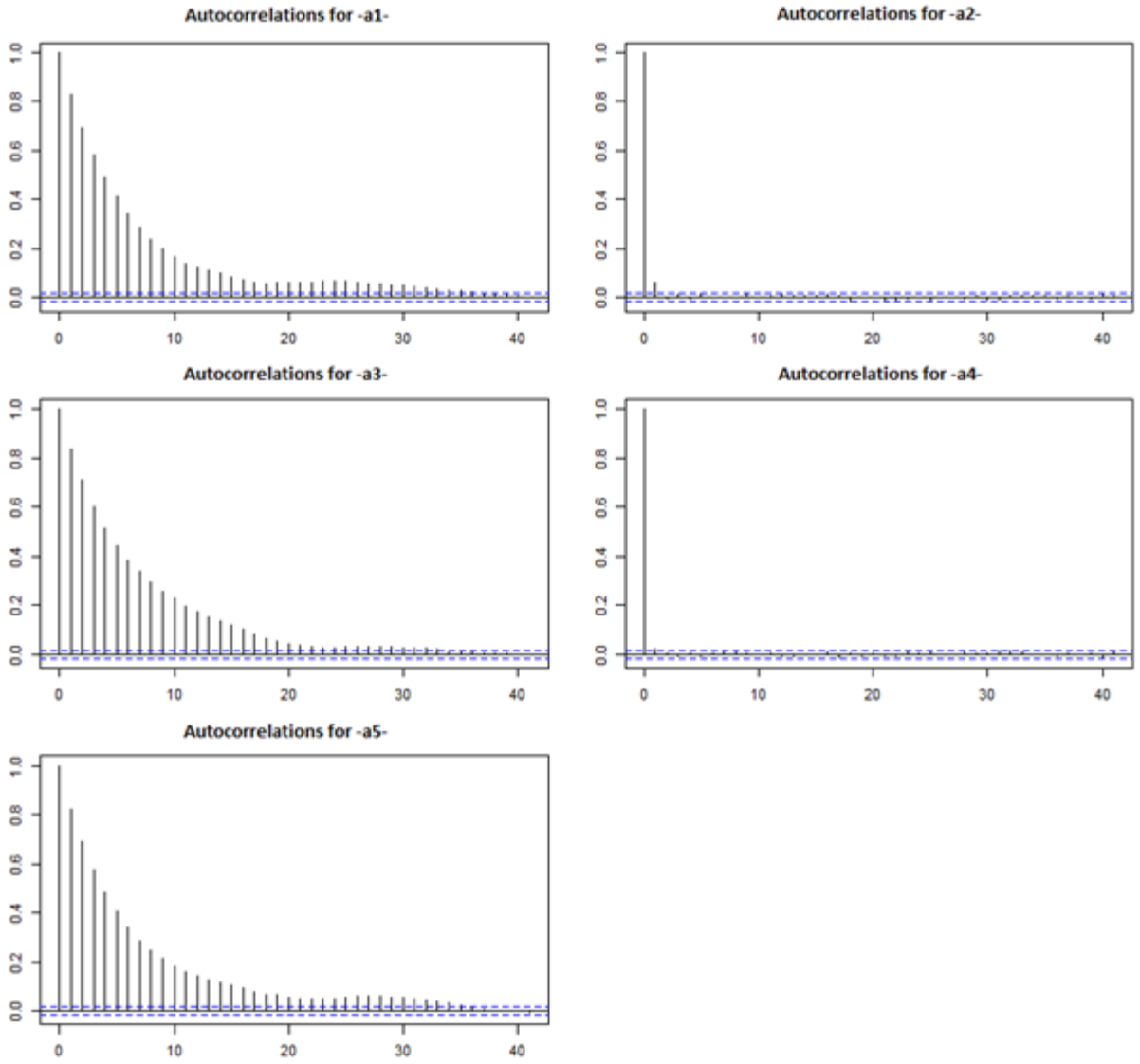
Επίσης έγινε έλεγχος των διαγραμμάτων αυτοσυσχέτισης για την μεταβλητή a^+, μετά τις πρώτες 5000 επαναλήψεις. Στα διαγράμματα αυτοσυσχέτισης εξετάζεται η τιμή συσχέτισης μεταξύ διαδοχικών βημάτων, η οποία πρέπει να μηδενίζεται μετά το τέλος της burn-in περιόδου [48]. Από τα διαγράμματα της Εικόνας 4.5 προκύπτει πως πράγματι η αυτοσυσχέτιση για κάθε στοιχείο του διανύσματος a^+ μηδενίζεται μερικές επαναλήψεις μετά τις 5000, γεγονός που υποδηλώνει σύγκλιση.



Εικόνα 4.3: Διαγράμματα μεταβολής των αφθονιών α και του ίχνους του πίνακα Σ



Εικόνα 4.4: Διαγράμματα εργοδικού μέσου των αφθονιών α και του ίχνους του πίνακα Σ



Εικόνα 4.5: Διαγράμματα αυτοσυσχετίσεων των αφθονιών α

Τέλος εξετάστηκε και η τιμή του διαγνωστικού δείκτη σύγκλισης του Geweke (Geweke's diagnostic) [49]. Ο διαγνωστικός δείκτης του Geweke υπολογίζει την μέση τιμή των τιμών της μεταβλητής σε ένα πρώτο διάστημα κ αρχικών επαναλήψεων και την συγκρίνει με την μέση τιμή του διαστήματος n των τελευταίων επαναλήψεων της αλυσίδας:

$$\mathrm{var} = \frac{\bar{\theta}_\kappa - \bar{\theta}_n}{\sqrt{Var(\theta_\kappa) + Var(\theta_n)}} \tag{31}$$

Τελική απόκλιση εντός του διαστήματος (-2,2) υποδηλώνει πως έχει επέλθει σύγκλιση εντός του διαστήματος κ. Παρακάτω φαίνονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής του κριτηρίου Geweke στα πέντε στοιχεία του διανύσματος a^+, και στο διάστημα από τις 5500 έως 20000 επαναλήψεις, εδώ το πρώτο διάστημα είναι το πρώτο 10% των επαναλήψεων (frac1, 5500 εως 6950 επαναλήψεις) και το δεύτερο διάστημα (frac2, 12750 έως 20000) είναι το τελευταίο 50% των επαναλήψεων. Από τις τιμές του κριτηρίου (var1 έως var5) προκύπτει πως έχει επέλθει σύγκλιση στο πρώτο διάστημα:

```
> geweke.diag(t(trace_a[,5500:20000]), frac1=0.1, frac2=0.5)

Fraction in 1st window = 0.1
Fraction in 2nd window = 0.5

   var1    var2    var3    var4    var5
 0.1995  1.4899 -0.1969  1.9005 -0.1189
```

Από τα παραπάνω προκύπτει πως το διάστημα της burn-in περιόδου είναι περίπου οι έξι χιλιάδες επαναλήψεις, όπου και η αλυσίδα εμφανίζει σύγκλιση. Το πλήθος των απαιτούμενων επαναλήψεων συνεπάγεται μεγάλο κόστος χρόνου, και απαιτήθηκε η αναζήτηση μεθόδων μείωσης του χρόνου εκτέλεσης του αλγορίθμου.

Σύμφωνα με τις [41] και [42], οι αλγόριθμοι φασματικού διαχωρισμού αποτελούν ιδανικές μεθόδους για παράλληλο προγραμματισμό (parallel processing) σε επεξεργαστές με πολλαπλούς πυρήνες, δεδομένου ότι τα εικονοστοιχεία είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Συνεπώς, είναι εφικτή η επεξεργασία εικονοστοιχείων παράλληλα, εκτελώντας μία αλυσίδα σε κάθε πυρήνα. Η μέθοδος αυτή εφαρμόστηκε στα προαναφερόμενα σύνολα δεδομένων, με 40 ή 200 κανάλια και 5 ή 16 καθαρούς στόχους, με 15000 επαναλήψεις, σε δοκιμές με 1, 4 και 8 εικονοστοιχεία ανά δοκιμή. Οι υπολογισμοί έγιναν σε σύστημα Windows 10 – 64 bit, με επεξεργαστή Intel i7-7700, 3.60 GHz, με 8 διαθέσιμους πυρήνες, 16 GB RAM, και προέκυψαν οι παρακάτω ενδεικτικοί χρόνοι εκτέλεσης:

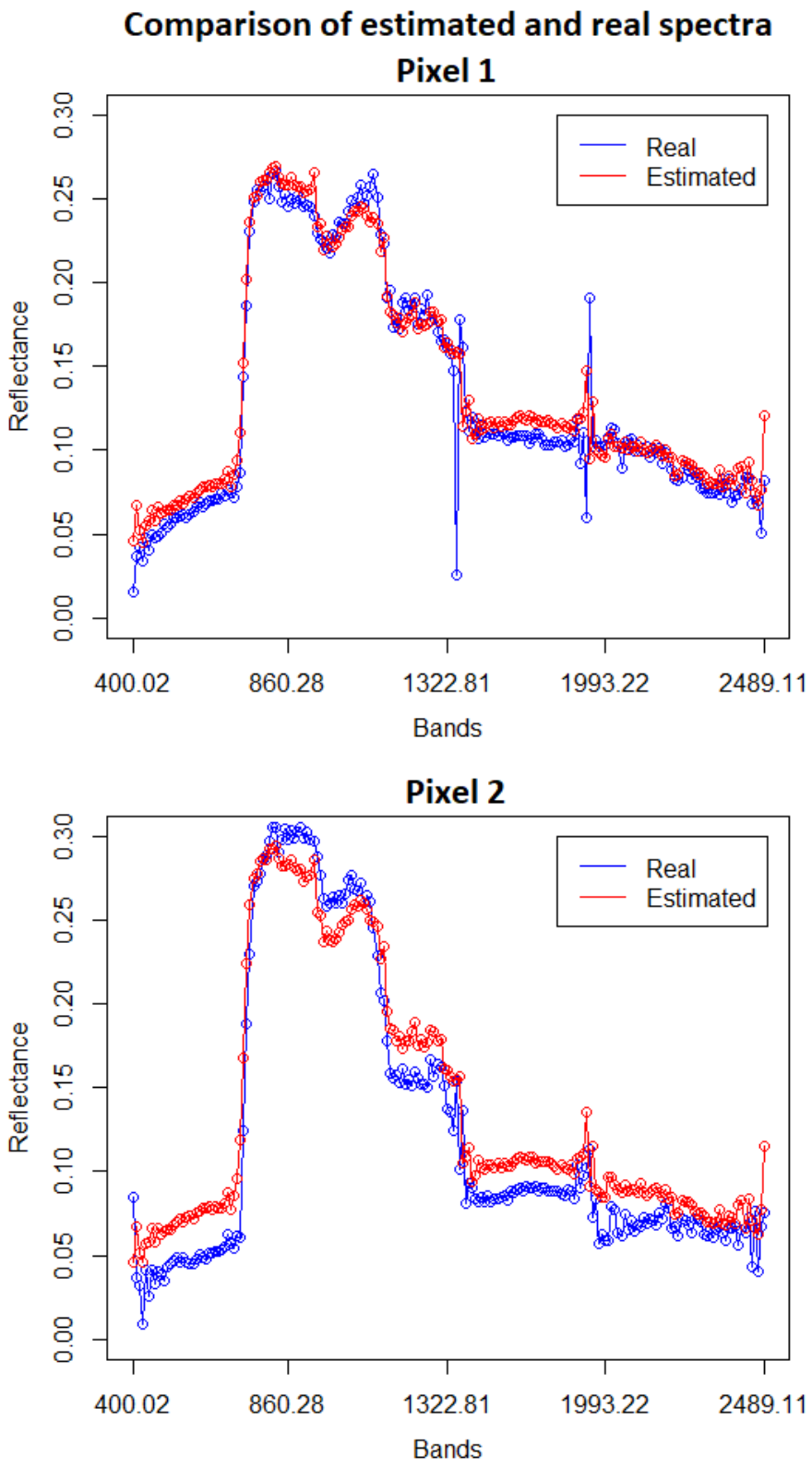
		Καθαροί Στόχοι	
		5	**16**
Κανάλια	**40**	1 pixels: 21.06 sec 4 pixels: 27.73 sec 8 pixels: 47.64 sec	1 pixels: 84.14 sec 4 pixels: 103.25 sec 8 pixels: 174.56 sec
	200	1 pixels: 257.42 sec 4 pixels: 285.75 sec 8 pixels: 622.53 sec	1 pixels: 276.75 sec 4 pixels: 394.53 sec 8 pixels: 796.88 sec

Πίνακας 4.1: Ενδεικτικοί χρόνοι εκτέλεσης διαχωρισμού

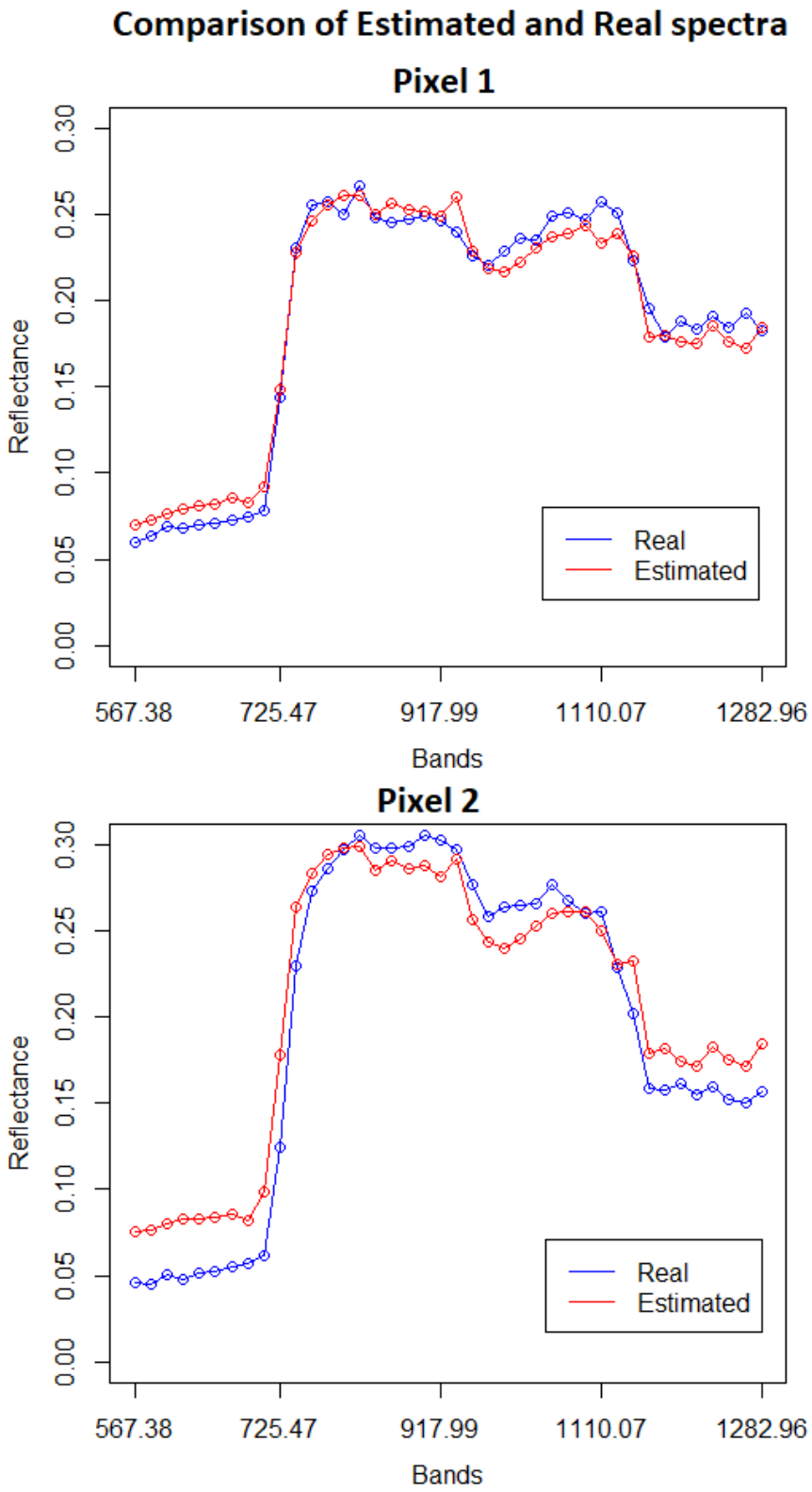
Παρατηρείται πως η δυνατότητα επεξεργασίας 8 εικονοστοιχείων ταυτόχρονα εμφανίζει αξιοσημείωτη μείωση στον χρόνο σε σύγκριση με την σειριακή επεξεργασία εικονοστοιχείων.

4.5. Αξιολόγηση αποτελεσμάτων

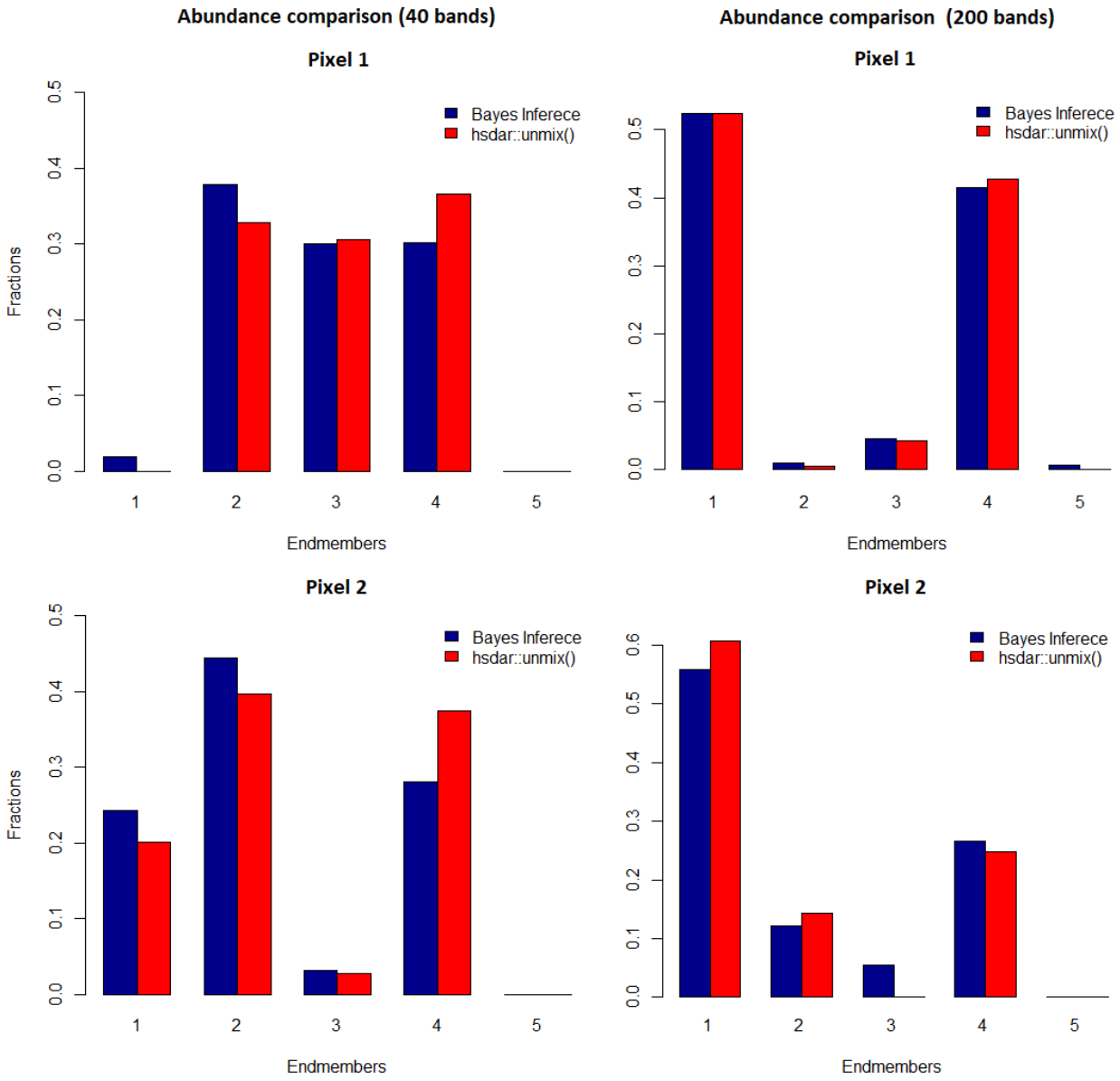
Από τις δοκιμαστικές εφαρμογές σε δύο τυχαία εικονοστοιχεία, έγινε σύγκριση της φασματικής υπογραφής του όπως αυτή προκύπτει σύμφωνα με το γραμμικό μοντέλο μίξης (estimated), με την υπογραφή του εικονοστοιχείου, όπως αυτή προκύπτει από την ανάγνωση της δορυφορικής εικόνας (real). Η δοκιμαστική εφαρμογή έγινε α) για εικόνα 200 καναλιών με χρήση 16 καθαρών στόχων και β) για εικόνα 40 καναλιών με χρήση 5 καθαρών στόχων. Παρατηρήθηκε πως στην εφαρμογή με χρήση των 200 καναλιών, η εκτιμώμενη φασματική υπογραφή αποκλίνει από την πραγματική (Εικόνα 4.5), ωστόσο στην εφαρμογή με χρήση 40 μόνο καναλιών η προσέγγιση είναι ακριβέστερη (Εικόνα 4.6)



Εικόνα 4.5: Σύγκριση εκτιμώμενης (κόκκινο) και πραγματικής (μπλε) φασματικής υπογραφής 200 καναλιών για δύο εικονοστοιχεία.



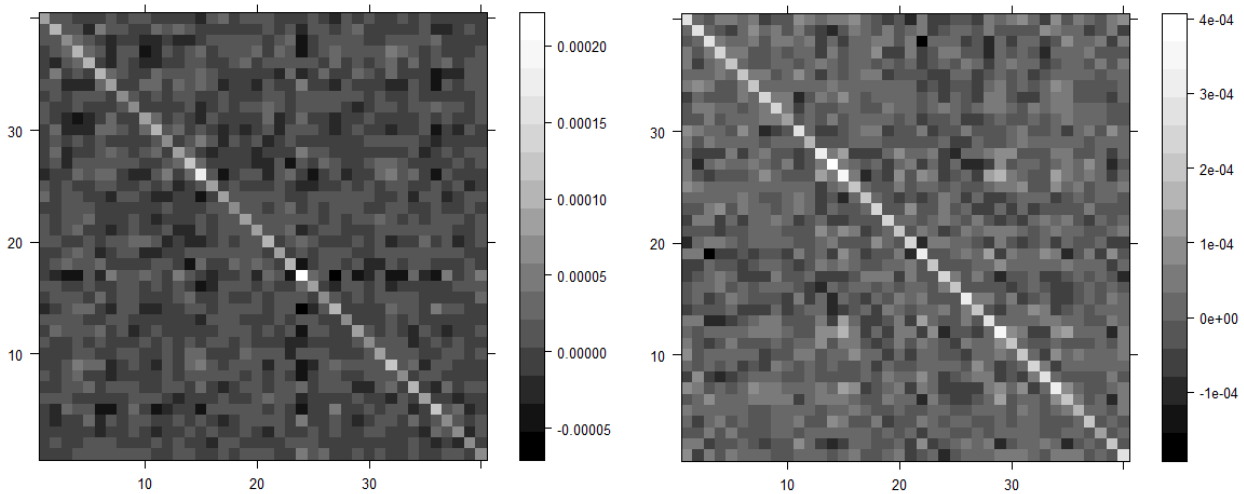
Εικόνα 4.6: Σύγκριση εκτιμώμενης (κόκκινο) και πραγματικής (μπλε) φασματικής υπογραφής 40 καναλιών για δύο εικονοστοιχεία.



Εικόνα 4.7: Σύγκριση αφθονιών δύο εικονοστοιχείων από τον αλγόριθμο Bayes (μπλε) και τον αλγόριθμο ελαχίστων τετραγώνων (κόκκινο) για 200 κανάλια (δεξιά), και 40 κανάλια (αριστερά).

Στα ίδια εικονοστοιχεία εφαρμόστηκε επίσης και ένας αλγόριθμος επίλυσης του γραμμικού μοντέλου φασματικού διαχωρισμού, ο οποίος χρησιμοποιεί τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων, υπό τους περιορισμούς της μη αρνητικότητας και της προσθετικότητας και με υπόθεση λευκού θορύβου. Και αυτός ο αλγόριθμος επιλέχθηκε από την βιβλιοθήκη hsdar της R. Οι αφθονίες που υπολογίστηκαν από τον αλγόριθμο αυτό συγκρίθηκαν με τις αφθονίες που προέκυψαν από την εφαρμογή του συμπερασμού Bayes και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται γραφικά (Εικόνα 4.7). Στην εικόνα 4.7 παρατηρούνται αξιοσημείωτες διαφορές μεταξύ των αποτελεσμάτων οι οποίες εν μέρει μπορούν να αποδοθούν στην διαφορετική θεώρηση του θορύβου (λευκός και χρωματικός) από τις δύο μεθόδους αντίστοιχα.

Επίσης έγινε έλεγχος του εκτιμώμενου πίνακα συμμεταβλητότητας του θορύβου για κάθε εικονοστοιχείο, Στην εικόνα 4.8 παρατίθεται η οπτικοποίηση των πινάκων συμμεταβλητότητας του θορύβου (διαστάσεων 40x40) για τα δύο τυχαία εικονοστοιχεία, στην δοκιμή με 40 κανάλια και 5 καθαρούς στόχους. Ο θόρυβος δεν είναι λευκός καθώς οι τιμές του πίνακα συμμεταβλητότητας δεν περιορίζονται μόνο στην διαγώνιο, ωστόσο τα στοιχεία της διαγωνίου εμφανίζουν πολύ μεγαλύτερες τιμές και θα μπορούσαμε να ισχυριστούμε, γενικεύοντας, ότι προσεγγίζει λευκό θόρυβο.



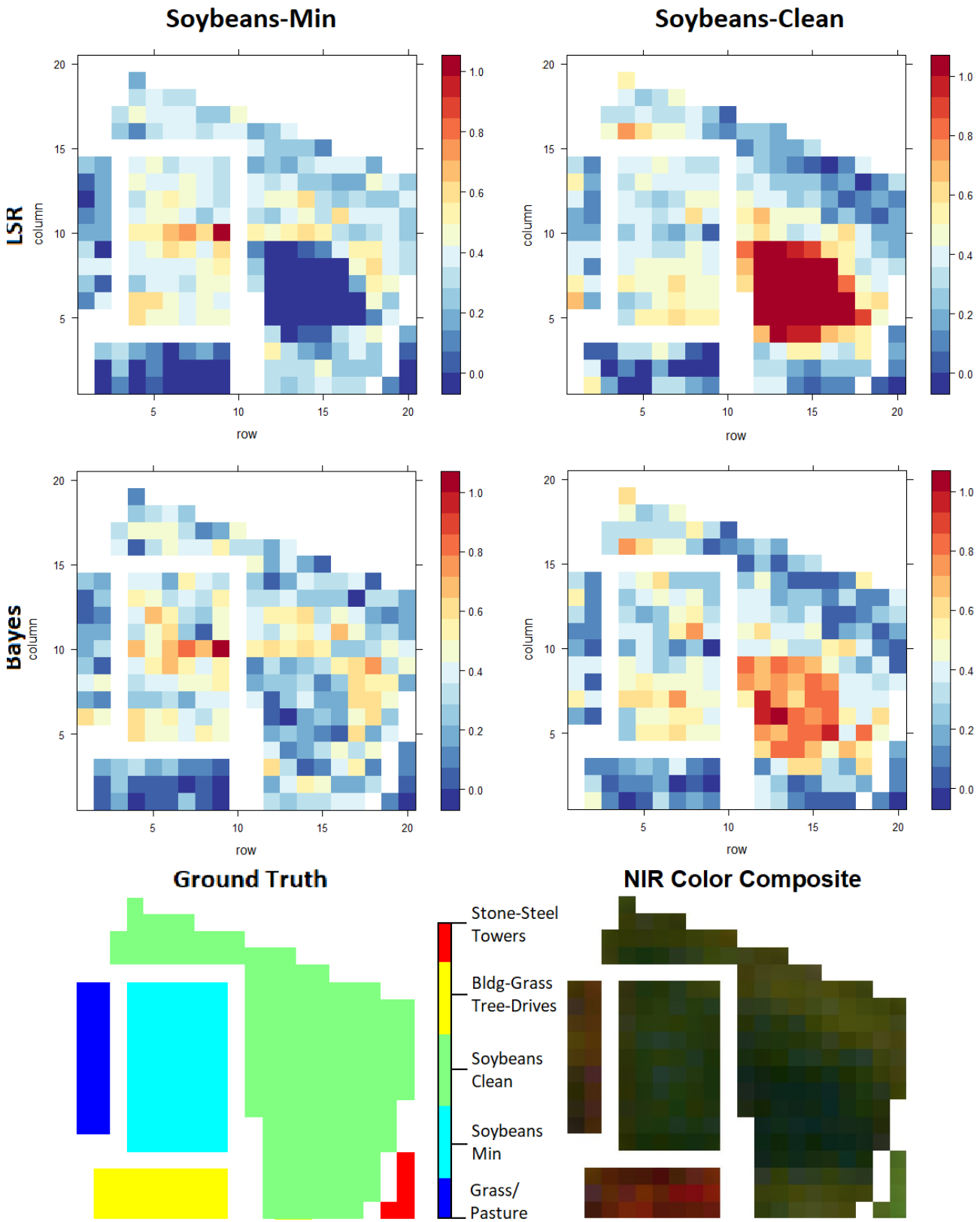
Εικόνα 4.8: Οπτικοποίηση των πινάκων συμμεταβλητότητας του θορύβου για δύο εικονοστοιχεία.

4.6. Εφαρμογή στα δεδομένα της λήψης

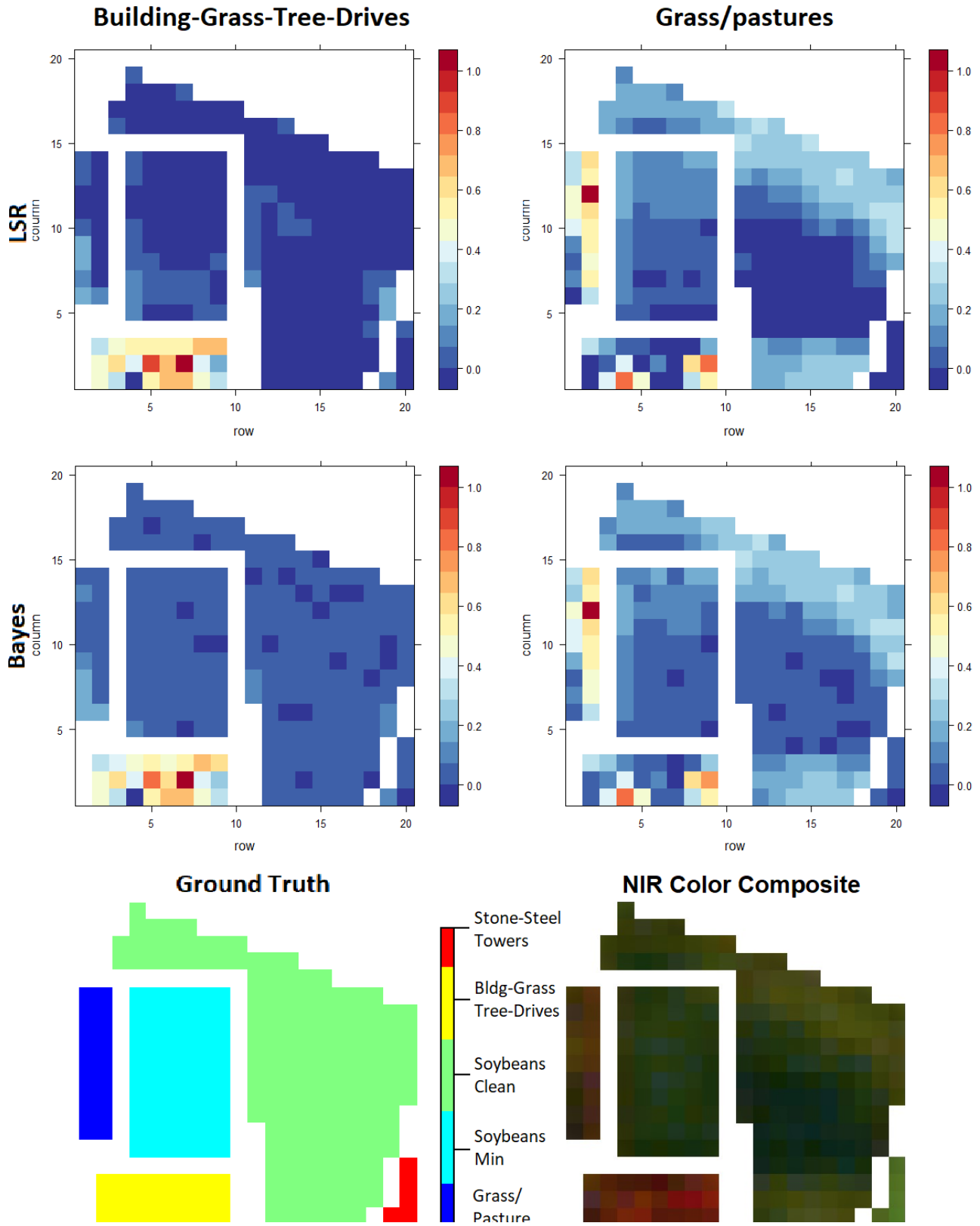
Η εφαρμογή του αλγορίθμου σε πραγματικά δεδομένα έγινε στις ταξινομημένες περιοχές περιορισμένου τμήματος της εικόνας, δηλαδή στο τμήμα των 20x20 εικονοστοιχείων με πέντε καθαρούς στόχους. Χρησιμοποιήθηκαν μόνο 40 κανάλια και 5 καθαροί στόχοι, και η επεξεργασία διήρκησε 1104.89 sec, με μέσο όρο 2.76 sec ανά εικονοστοιχείο. Οι καθαροί στόχοι αντιστοιχούν στις κατηγορίες γης που παρατίθενται στον πίνακα 4.3. Για τα ίδια δεδομένα εφαρμόστηκε και ο αλγόριθμος ελαχίστων τετραγώνων (LSR). Με τις τιμές των αφθονιών που προέκυψαν από κάθε αλγόριθμο για τα εικονοστοιχεία της εικόνας, κατασκευάστηκαν πέντε χάρτες αφθονιών, στους οποίους εμφαίνεται η αναλογία κάθε καθαρού στόχου στην εικόνα (Εικόνες 4.9, 4.10, 4.11). Τα αποτελέσματα με τους χάρτες κατανομής των αφθονιών και τον χάρτη σφάλματος παρατίθενται παρακάτω:

1	Soybeans - Min
2	Soybeans - Clean
3	Building - Grass - Tree - Drives
4	Grass/Pasture
5	Stone-steel Towers

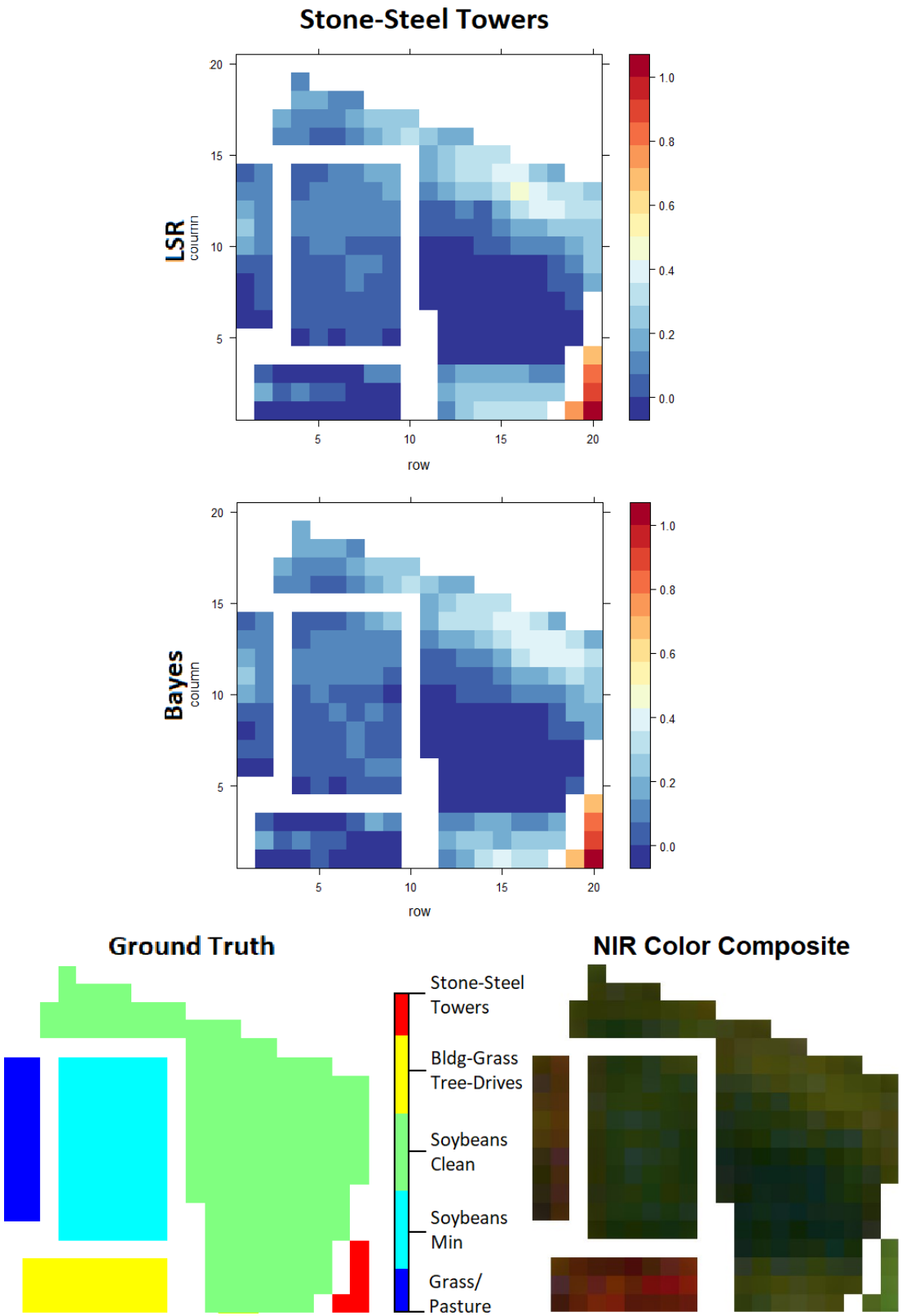
Πίνακας 4.3: Οι κατηγορίες των 5 καθαρών στόχων για το τμήμα 20x20.



Εικόνα 4.9: Χάρτες αφθονιών α_1 και α_2, εικόνα Ground Truth και ψευδέγχρωμο σύνθετο στο εγγύς υπέρυθρο για την εικόνα 20x20 με 5 καθαρούς στόχους. Στην εικόνα Ground Truth οι κατηγορίες 1 και 2 εμφαίνονται με γαλάζιο και πράσινο χρώμα αντίστοιχα.



Εικόνα 4.10: Χάρτες αφθονιών α_3 και α_4, εικόνα Ground Truth και ψευδέγχρωμο σύνθετο στο εγγύς υπέρυθρο για την εικόνα 20x20 με 5 καθαρούς στόχους. Στην εικόνα Ground Truth οι κατηγορίες 3 και 4 εμφαίνονται με κίτρινο και μπλε χρώμα αντίστοιχα.



Εικόνα 4.11: Χάρτες αφθονίας α_5, εικόνα Ground Truth και ψευδέγχρωμο σύνθετο στο εγγύς υπέρυθρο, για την εικόνα 20x20 με 5 καθαρούς στόχους. Στην εικόνα Ground Truth η κατηγορία 5 εμφαίνεται κόκκινο χρώμα.

Παρατηρούμε πως υπάρχουν αποκλίσεις μεταξύ των αποτελεσμάτων του αλγορίθμου συμπερασμού Bayes και του αλγορίθμου ελαχίστων τετραγώνων. Οι μεγαλύτερες αποκλίσεις εμφανίζονται στις κατηγορίες καλλιέργειας σόγιας (Soybeans-Min, Soybeans-Clean) (Εικόνα 4.9), ενώ οι αποκλίσεις στις τιμές αφθονιών των υπόλοιπων κατηγοριών είναι πολύ μικρότερες (Εικόνες 4.10, 4.11). Παρ' όλα αυτά παρατηρούμε πως κατά τον υπολογισμό των αφθονιών για κάθε κατηγορία, ο αλγόριθμος LSR υπολογίζει χαμηλές τιμές στα εικονοστοιχεία άλλων κατηγοριών, ενώ αυτό δεν συμβαίνει για τον αλγόριθμο συμπερασμού Bayes, ο οποίος δίνει ελαφρώς υψηλότερες τιμές. Αυτό έμμεσα οφείλεται στην υπόθεση του χρωματικού θορύβου. Ο αλγόριθμος συμπερασμού κατά Bayes υποθέτει μεταβλητότητα του θορύβου στα κανάλια της απεικόνισης, την οποία και υπολογίζει. Όμως, γίνεται η υπόθεση πως τα κανάλια αυτά έχουν διαφορετικό SNR, επομένως η φασματική υπογραφή του κάθε εικονοστοιχείου επί της οποίας υπολογίζονται οι αφθονίες, έμμεσα παρεκκλίνει από αυτή της εικόνας.

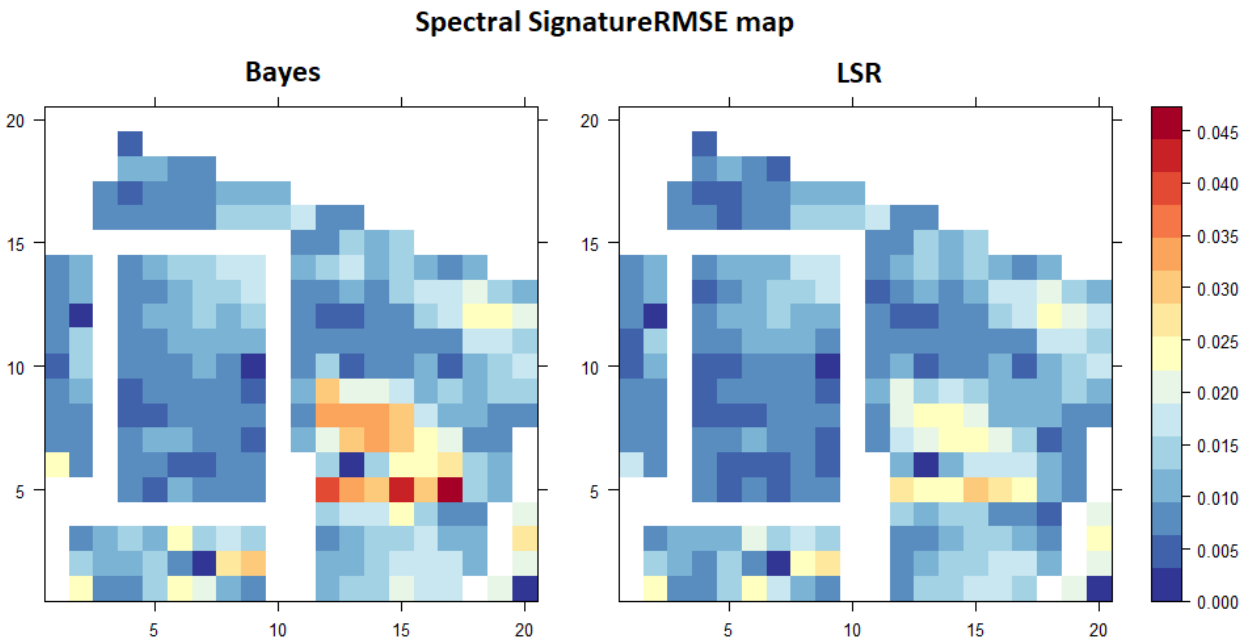
Η υπόθεση χρωματικού θορύβου, στον εξεταζόμενο αλγόριθμο συμπερασμού Bayes, προσομοιώθηκε με την αντίστροφη Wishart κατανομή. Ωστόσο, δεν είναι επιβεβαιωμένο ότι συμμεταβλητότητα του θορύβου των καναλιών του δέκτη AVIRIS ακολουθεί αυτή την κατανομή. Εξάλλου το SNR μπορεί είναι διαφορετικό για κάθε κανάλι του. Αυτό μπορεί να είναι μια ακόμη πιθανή αιτία μείωσης της απόδοσης του αλγορίθμου Bayes με την υπόθεση χρωματικού θορύβου.

Τέλος, για κάθε εικονοστοιχείο υπολογίστηκε το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (RMSE) της εκτιμώμενης φασματικής του υπογραφής ($\hat{\mathrm{y}}$), βάσει των αφθονιών, σε σύγκριση με την πραγματική του φασματική υπογραφή (y), αυτή που έχει καταγραφή στην υπερφασματική απεικόνιση. Ο υπολογισμός του σφάλματος έγινε βάσει της εξίσωσης (31).

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{L}(\hat{\mathrm{y}}_i - \mathrm{y}_i)^2}{L}} \tag{31}$$

όπου L ο αριθμός των καναλιών.

Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για τον αλγόριθμο Bayes περιορίζονται κάτω από 0.047, ενώ για τον αλγόριθμο LSR περιορίζονται κάτω από 0.031 και απεικονίζονται στον χάρτη της Εικόνας 4.12. Από τις τιμές του σφάλματος ανά εικονοστοιχείο, βγάζουμε το ίδιο συμπέρασμα με πριν, δηλαδή ότι ο αλγόριθμος συμπερασμού Bayes συγχέει τις δύο κατηγορίες καλλιέργειας σόγιας (Soybeans-Clean, Soybeans-Min).



Εικόνα 4.12: Χάρτης μέσου τετραγωνικού σφάλματος, στην εικόνα 20x20 με 5 καθαρούς στόχους για τους αλγόριθμους συμπερασμού Bayes και ελαχίστων τετραγώνων (LSR).

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα εργασία εξετάστηκε η χρήση ενός ιεραρχικού μοντέλου Bayes και της μεθόδου δειγματοληψίας Gibbs, σε γλώσσα R, για την επίλυση του προβλήματος του επιβλεπόμενου φασματικού διαχωρισμού. Η ιδιαιτερότητα του παρόντος μοντέλου έγκειται στην υπόθεση χρωματικού κανονικού θορύβου με άγνωστο πίνακα συμμεταβλητότητας. Κατά την δόμηση του ιεραρχικού μοντέλου, επιλέχθηκαν κατάλληλες πρότερες κατανομές έτσι ώστε να εκφραστούν οι περιορισμοί και η πρότερη γνώση μας για τους αγνώστους. Συγκεκριμένα ο περιορισμός της μη αρνητικότητας εκφράστηκε μέσω της κολοβωμένης κανονικής κατανομής στο διάστημα [0,1], και η άγνοια της συμμεταβλητότητας του θορύβου εκφράστηκε με την συζυγή αντίστροφη κατανομή Wishart στην υπερπαράμετρο του πίνακα συμμεταβλητότητας, όπως προτείνεται στην [3].

Το ιεραρχικό μοντέλο εφαρμόστηκε σε δύο τυχαία εικονοστοιχεία για να εξεταστεί η σύγκλιση της αλυσίδας MCMC της δειγματοληψίας Gibbs. Η αλυσίδα παρουσίασε σύγκλιση μετά από μεγάλο αριθμό επαναλήψεων, με burn-in περίοδο έξι χιλιάδων επαναλήψεων. Παρατηρήθηκε πως η εκτέλεση του αλγορίθμου έχει μεγάλο υπολογιστικό κόστος καθώς, ακόμα και με την εφαρμογή παράλληλου προγραμματισμού, ο μέσος χρόνος εκτέλεσης ανά εικονοστοιχείο υπερβαίνει τα 100 δευτερόλεπτα, για 8000 επαναλήψεις με 200 κανάλια και 16 καθαρούς στόχους, γεγονός που τον καθιστά δύσχρηστο για μεγάλο όγκο δεδομένων, όταν η υπολογιστική ισχύς είναι μέτρια (πχ. ενός laptop). Η επαναληπτική δειγματοληψία από την αντίστροφη Wishart κατανομή, για την εκτίμηση του πίνακα συμμεταβλητότητας Σ, είναι υπολογιστικά δαπανηρή, ωστόσο, η μείωση του υπερφασματικού χώρου με την κατάλληλη αφαίρεση καναλιών και η μείωση του αριθμού των καθαρών στόχων (αν και αυτό δεν είναι εφικτό αφού σε μία απεικόνιση ο αριθμός των καθαρών στόχων παραμένει σταθερός εφόσον δεν μειωθούν οι διαστάσεις της), μειώνει τον χρόνο εκτέλεσης στα 2 με 3 δευτερόλεπτα ανά εικονοστοιχείο, καθιστώντας τον αλγόριθμο άμεσα εφαρμόσιμο για χρήση κοινών laptop.

Ο αλγόριθμος συμπερασμού Bayes παρουσίασε χαμηλό RMSE σφάλμα, με τιμές ανά εικονοστοιχείο μικρότερες ή ίσες του 0.047, αλλά σε σχέση με τον αλγόριθμο ελαχίστων τετραγώνων με τον οποίο συγκρίθηκε, το σφάλμα ήταν μεγαλύτερο κατά 0.016. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι, με την υπόθεση χρωματικού θορύβου ο αλγόριθμος συμπερασμού Bayes εκτίμησε τις τιμές αφθονιών των εικονοστοιχείων δεδομένης της εκτιμώμενης συμμεταβλητότητας του θορύβου. Εξάλλου αυτό φαίνεται από το γεγονός ότι παρόλο που το άθροισμα των αφθονιών ανέρχεται στην μονάδα, οι ανακατασκευασμένες φασματικές υπογραφές αποκλίνουν από αυτές της απεικόνισης. Το γεγονός ότι οι ιδιότητες του θορύβου δεν είναι γνωστές, αλλά ούτε και η κατανομή της συμμεταβλητότητάς του, μας αποτρέπει από το να εξάγουμε ασφαλή συμπεράσματα από την σύγκριση του αλγορίθμου συμπερασμού Bayesσε με την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων. Στόχος μελλοντικής εργασίας είναι η υπόθεση λευκού

θορύβου για την εφαρμογή συμπερασμού Bayes και η σύγκρισή του με τους δύο αλγορίθμους αυτής της εργασίας, με σκοπό: α) την εξαγωγή ασφαλέστερων συμπερασμάτων ως προς τις ιδιότητες του θορύβου και β) την πληρέστερη αξιολόγηση της αποδοτικότητας του αλγορίθμου κατά συμπερασμό Bayes.

ΚΩΔΙΚΑΣ

```
library(rgdal)
library(raster)

# Working with atmospherically corrected data
# Load corrected image stack
corr_pines <- stack('INDIAN
PINES/aviris_hyperspectral_data/atm_200_indianPines.tif')
# Normalise reflectance values
corr_pines <- corr_pines/10000

# Load ground truth image
corr_pines_ground <- stack('D:/METAPTYXIAKO/DIPLOMATIKI/INDIAN
PINES/aviris_hyperspectral_data/Site3_Project_and_Ground_Reference_Files/
19920612_AVIRIS_IndianPine_Site3_gr.tif')
corr_pines_ground[corr_pines_ground==0] <- NA


library(colorRamps)
plot(corr_pines_ground,col=matlab.like2(16))
plot(crop(corr_pines_ground,extent(corr_pines_ground,1,20,26,45)),col=mat
lab.like2(16))

# Restructure Data Cube into matrix of spectra
corr_pines_mat <- matrix(corr_pines_crop,prod(dim(corr_pines_crop)[1:2]),
                         dim(corr_pines)[3])

############################## NFINDR ##################################

######### Whole image
em <- 16
# Apply N-FindR to find the 16 purest pixels (endmembers)
library(unmixR)
corr_endmembers <- nfindr(corr_pines_mat,em,method="LDU")
# Endmember spectra
corr_em_spec <- corr_pines_mat [corr_endmembers$indices,]
# Plot endmember spectra
matplot(t(corr_em_spec), type = "l",pch=1,col = 1:em)
# Endmember classification
na.omit(matrix(corr_pines_ground))[corr_endmembers$indices]
#########

######### Crop
em <- 5
# Apply N-FindR to find the 5 purest pixels (endmembers)
library(unmixR)
corr_endmembers <- nfindr(corr_pines_mat,em,method="LDU")
# Endmember spectra
corr_em_spec <- corr_pines_mat [corr_endmembers$indices,]

# Plot endmember spectra
matplot(t(corr_em_spec), type = "l",pch=1,col = 1:em)

# Vector of Wavelengths
```

```
doctable <- read.table(file='INDIAN
PINES/documentation/Calibration_Information_for_220_Channel_Data_Band_Set
.txt',header=FALSE, skip=23,fill=T)
wavelengths <- as.vector(na.omit(as.numeric(as.character(doctable[,3]))))
wavelengths <- wavelengths[-c((104:108),(150:163),220)]

library(hsdar)

############################ LSR UNMIXING ##############################
# Creating Speclib object for image spectra
corr_spectra <- speclib(corr_pines_mat,wavelengths)

# Creating Speclib object for endmember spectra
corr_em <- speclib(corr_em_spec,wavelengths)
corr_unmix_res <- unmix(corr_spectra,corr_em)


############################  Reduced bands ##########################

# Load corrected image stack
corr_pines <- stack('INDIAN
PINES/aviris_hyperspectral_data/atm_200_indianPines.tif')
# Normalise reflectance values
corr_pines <- corr_pines/10000
# Isolate Green to NIR bands
nir_pines <- subset(corr_pines,subset=seq(from=18, by=2, length.out=40))

# Load ground truth image
corr_pines_ground <- stack('D:/METAPTYXIAKO/DIPLOMATIKI/INDIAN
PINES/aviris_hyperspectral_data/Site3_Project_and_Ground_Reference_Files/
19920612_AVIRIS_IndianPine_Site3_gr.tif')
corr_pines_ground[corr_pines_ground==0] <- NA


library(colorRamps)
plot(corr_pines_ground,col=matlab.like2(16))
plot(crop(corr_pines_ground,extent(corr_pines_ground,1,20,26,45)),col=mat
lab.like2(16))

# Restructure Data Cube into matrix of spectra
corr_pines_mat <- matrix(nir_pines_crop,prod(dim(nir_pines_crop)[1:2]),
                         dim(nir_pines)[3])

########################## NFINDR ##########################
######### Whole image
em <- 16
# Apply N-FindR to find the 16 purest pixels (endmembers)
library(unmixR)
corr_endmembers <- nfindr(corr_pines_mat,em,method="LDU")
# Endmember spectra
corr_em_spec <- corr_pines_ mat[corr_endmembers$indices,]
# Plot endmember spectra
matplot(t(corr_em_spec), type = "l",pch=1,col = 1:em)

######### Crop
em <- 5
# Apply N-FindR to find the 5 purest pixels (endmembers)
```

```
library(unmixR)
corr_endmembers <- nfindr(corr_pines_mat,em,method="LDU")
# Endmember spectra
corr_em_spec <- corr_pines_mat [corr_endmembers$indices,]

# Plot endmember spectra
matplot(t(corr_em_spec), type = "l",pch=1,col = 1:em)

# Vector of Wavelengths
doctable <- read.table(file='INDIAN
PINES/documentation/Calibration_Information_for_220_Channel_Data_Band_Set
.txt',header=FALSE, skip=23,fill=T)
wavelengths <- as.vector(na.omit(as.numeric(as.character(doctable[,3]))))
wavelengths <- wavelengths[-c((104:108),(150:163),220)]
wavelengths <- wavelengths[seq(from=18, by=2, length.out=40)]


library(hsdar)
########################### LSR UNMIXING ###########################
# Creating Speclib object for image spectra
corr_spectra <- speclib(corr_pines_mat,wavelengths)

# Creating Speclib object for endmember spectra
nir_em <- speclib(corr_em_spec,wavelengths)
nir_unmix_res <- unmix(corr_spectra,nir_em)

########################### Bayes sampler ###########################
library(MCMCpack)
library(TruncatedNormal)
library(psych)
library(pracma)
library(MCMCpack)
library(compiler)

h <- 30
L <- dim(corr_pines_mat)[2]        # number of bands
v <- L+3+h                         # hyperparameter v value
Mplus <- t(corr_em_spec)           # all endmember spectra
M <- Mplus[,1:(dim(Mplus)[2]-1)]   # em-1 endmember spectra
mr <- cbind(corr_em_spec[em,])     # last endmember spectra
u <- rep(1,dim(corr_em_spec)[1]-1) # singular vector
Mmr <- M-mr%*%u
tMmr <- t(Mmr)
g <- 4.8/10^3

ub <- rep(1,length=length(u))
lb <- rep(0,length=length(u))

# Pixel unmix function, inputs: y = pixel spectra, g = g value, x =
number of iterations
# inputs:
# y = pixel spectra
# g = g hyperparameter value
# its = number of iterations

Bayes_unmixer <- function(y,g,its){
  # Wishart scale matrix
```

```
  dL <- diag(length(y))
  D <- g*dL
  sigma <-solve((v-L-1)*D)
  # Instead  of sampling the noise Covariance Matrix from the Inverse
  Wishart
  invS <- rwish(v,sigma)
  # Avoid overflow errors
  invS <- invS*(10^(-20))
# REMOVE  '#' FROM 'trace' VARS FOR TRACEPLOT STATS
  ## Matrix for abundance traceplot
  #trace_a <- matrix(,nrow=dim(corr_em_spec)[1],ncol=its)
  ## Array for Sigma traceplot
  #trace_S <- array(numeric(),c(L,L,its))
  ## Vector for g traceplot
  #trace_g <- vector()

  for (t in seq(1:its)){
    # Sample a from truncated Multivariate Normal Distribution N(μ,Lamda)
    Lamda <- solve(tMmr%*%invS%*%Mmr)
    μ <- Lamda%*%(tMmr%*%invS%*%(y-mr))
    a <- mvrandn(1,mu=as.numeric(μ),Sig=Lamda,l=lb,u=ub)
    if (sum(a)>1){
      a <- a/sum(a)
    }
    # Sample new g value from Gamma Distribution
    g <- rgamma(1, shape=v*L/2, rate=tr(invS)*(v-L-1)/2)
    aplus <- cbind(c(a,1-sum(a)))

    # Calculate Error
    z <- y-Mplus%*%aplus

    # Create new scale matrix and sample a New noise Covariance Matrix
    sigma <- solve(g*(v-L-1)*dL+z%*%t(z))
    invS <- rwish(v+1,sigma)

# REMOVE  '#' FROM 'trace' VARS FOR TRACEPLOT STATS
    ## Collect aplus for traceplot
    #trace_a[,t] <- aplus
    ## Collect invS for traceplot
    #trace_S[,,t] <- solve(invS)
    ## Collect aplus for traceplot
    #trace_g[t] <- g
  }
  #result <- list(aplus,trace_a,trace_g,trace_S)
  result <- list(aplus,invS)
  return(result)
}

# Compile function with cmpfun()
Bayes_unmixer <- cmpfun(Bayes_unmixer)

########### parallel processing ###############
library(parallel)
library(doParallel)
library(MASS)
library(foreach)
library(doSNOW)
```

```r
library(utils)
library(iterators)

# Detect number of cores on CPU
numCores <- detectCores()
# Register initiate parallel core cluster
registerDoParallel(cores=numCores)
packages <- c('MCMCpack','TruncatedNormal', 'pracma','psych')
system.time(
  # Execute for loop on all cores with foreach and %dopar%
  output <- foreach (i=1:dim(corr_pines_mat)[1],
                     .packages=packages) %dopar% {
     # Select the spectra of a pixel
     y <- cbind(corr_pines_mat[i,])
     Bayes_unmixer(y,g,x=8000)}
  )
# Stop parallel core cluster
stopImplicitCluster()

# Add image abundances results to a matrix
abundances <- matrix(numeric(),nrow=dim(corr_em_spec)[1],
                     ncol=dim(corr_pines_mat)[1],
                     dimnames = NULL)
covariances <- array(numeric(),c(L,L,dim(corr_pines_mat)[1]))
for(i in 1:dim(corr_pines_mat)[1]){
    abundances[,i] <- output[[i]][[1]]
    covariances[,,i] <- solve(output[[i]][[2]])
}

write.csv(abundances,file="Bayes_crop_abundances.csv",row.names=F)

# Compare Bayes abundances against LSR abundances
comparison <-
rbind(as.vector(abundances[,2]),corr_unmix_res$fractions[,2])
comparison <- rbind(as.vector(abundances[,200]),
                    nir_unmix_res$fractions[,200])
row.names(comparison) <- c('Bayes Inferece','hsdar::unmix()')
barplot(comparison,main="Comparison of abundances for the same pixel",
        xlab="Endmembers", ylab='Fractions',
        beside=T,col=c("darkblue","red"),
        legend=rownames(comparison),
        args.legend = list(x = "topright", bty = "n", inset=c(0, 0)))

# Comparison of estimated spectra with actual spectra
spec_est <- Mplus%*%abundances
par(mfrow = c(1,2),mgp=c(2.5,1,0))
for(i in 1:2){
comparison <- rbind(as.vector(spec_est[,i]),corr_pines_mat[i,])
plot(comparison[1,],type="o",col="blue",
     xlab="Bands",
     ylab="Reflectance",
     main="Comparison of estimated and real spectra", ylim=c(0,0.30))
     lines(comparison[2,],type="o",col="red")
     legend(29,0.10,legend=c("Real","Estimated"),
     col=c("blue","red"),lty=1)
}
```

```
# Visualise Covariance matrix (2 test pixels)
library(lattice)
library(RColorBrewer)
par(mfrow = c(1,2))
levelplot(covariances[,40:1,1],
          col.regions=colorRampPalette(rev(brewer.pal(9, "Greys"))))
levelplot(covariances[,40:1,2],
          col.regions=colorRampPalette(rev(brewer.pal(9, "Greys"))))

# Calculate RMSE for estimated vs real spectra per pixel
spec_est <- Mplus%*%abundances
diff <- (corr_pines_mat-t(spec_est))^2
sum <- rowSums(diff)
rmse <- sqrt(sum/L)

# Create classes mask
mask <- crop(corr_pines_ground,extent(corr_pines_ground,1,20,26,45))
mask <- matrix(mask,ncol = 20)
mask <- mask[,20:1]
mask[mask>=0] <- 1

# Rmse map
rmse_map <- matrix(rmse,ncol = 20)
rmse_map <- rmse_map[,20:1]
masked_rmse <- rmse_map*mask
max_rmse <- max(na.omit(as.numeric(masked_rmse)))
levelplot(masked_rmse, at=seq(0,max_rmse,length.out=16),
          col.regions=colorRampPalette(rev(brewer.pal(16, "RdYlBu"))))

# Bayes abundance maps
for(i in 1:dim(abundances)[1]){
# Convert matrix from 400x1 to 20x20
  abundance_map <- matrix(abundances[i,],ncol = 20)
  # Flip abundance map horizontally
  abundance_map <- abundance_map[,20:1]
  # Mask nonclassified regions
  masked_map <- abundance_map*mask
  levelplot(masked_map,
            col.regions=colorRampPalette(rev(brewer.pal(11,"RdYlBu"))))
}
# LSR abundance maps
for(i in 1:dim(nir_unmix_res$fractions)[1]){
  abundance_map <- matrix(nir_unmix_res$fractions[i,],ncol = 20)
  abundance_map <- abundance_map[,20:1]
  # Mask nonclassified regions
  masked_map <- abundance_map*mask
  levelplot(masked_map,
            col.regions=colorRampPalette(rev(brewer.pal(11,"RdYlBu"))))
}

############### convergence evaluation ###############
trace_a <- output[[1]][[2]]
trace_g <- output[[1]][[3]]
trace_S <- output[[1]][[4]]
# Ergodic mean function
erg.mean <- function(x){
  m <- length(x)
```

```
  calc <- cumsum(x) /cumsum(rep(1,m))
  return(calc)}

# Traceplot examples
par(mfrow = c(3,2))
for (i in 1:em){
plot(trace_a[i,],type='l',xlab='Iterations',ylab=sprintf('a%s',i),main=sp
rintf('Traceplot for a%s',i))}

par(mfrow=c(1,1))
plot(trace_g,type='l',xlab='Iterations',ylab='g',main='Traceplot for g')

test <- apply(trace_S,3,tr)
plot(test,type='l',xlab='Iterations',ylab='Trace tr()',main='Traceplot
for noise covariance matrix')

# Ergodic Mean plots
par(mfrow = c(3,2))
for (i in 1:em){
plot(erg.mean(trace_a[i,]),type='l',xlab='Iterations',ylab='ergmean',main
=sprintf('Ergodic Mean for a%s',i))}
plot(erg.mean(test),type='l',xlab='Iterations',ylab='Trace
tr()',main='Ergodic Mean for noise covariance matrix')

# Autocorellation Graphs (burn-in 5000 iterations)
for (i in 1:em){
  acf(trace_a[i,5000:20000], main=sprintf('Autocorrelations for -a%s-
',i))}

plot(erg.mean(trace_g),type='l',xlab='Iterations',ylab='ergmean',main='Er
godic Mean for g')

# Geweke diagnostic
geweke.diag(t(trace_a[,5500:20000]), frac1=0.1, frac2=0.5)

# Abundances RMSE
hsdar_abundances <- corr_unmix_res$fractions
rmse <- (hsdar_abundances-abundances)^2
rmse <- rowSums(rmse)/dim(corr_pines_mat)[1]

# Abundance Estimations on initial Endmembers
em_ind <- rownames(na.omit(df_crop)[corr_endmembers$indices,])
# convert to numeric
em_ind <- as.numeric(em_ind)
# Collect estimated abundances for endmembers
em_abund <- abundances[,em_ind]
row.names(em_abund) <- c('a1','a2','a3','a4','a5')

# Endmember estimated abundance barblots
par(mfrow=c(3,2))
for (i in 1:em){
barplot(em_abund[,i],main=sprintf('Abundances for Endmember %s',i),

xlab="Abundances",ylab='Fractions',beside=T,col=c("darkblue"),ylim=c(0,1)
)}
```

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] D. Manolakis, C. Siracusa, and G. Shaw, “Hyperspectral Subpixel Target Detection Using the Linear Mixing Model,” in IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, vol. 39, pp. 1392–1409, July 2001.

[2] N.Keshava and J. F. Mustard, “Spectral unmixing,” IEEE Trans. Signal Process., vol. 19, pp. 44–57, Jan. 2002.

[3] N. Dobigeon, J.Y. Tourneret and A. O. Hero, "Bayesian linear unmixing of hyperspectral images corrupted by colored Gaussian noise with unknown covariance matrix," 2008 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing, Las Vegas, NV, April 2008

[4] N. Keshava, J.Kerekes, D. Manolakis, and G. Shaw, “An algorithm taxonomy for hyperspectral unmixing” in Proc. SPIE, Algorithms for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery VI, vol. 4049, 2000, pp. 42-63.

[5] Kale, Karbhari & Solankar, Mahesh & Nalawade, Dhananjay. “Hyperspectral Endmember Extraction Techniques.”, January 2020.

[6] N.Keshava, “A Survey of Spectral Unmixing Algorithms,” Lincoln Laboratory Journal. 14. 55-78. 2003.

[7] D. C. Heinz and C. I. Chang, “Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery,” in IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, vol. 39, pp. 529–545, Mar. 2001.

[8] H. Kwon and N. M. Nasrabadi, “Kernel orthogonal subspace projection for hyperspectral signal classification,” in IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, vol. 43, pp. 2952–2962, Dec. 2005.

[9] C. I. Chang, “Orthogonal subspace projection (OSP) revisited: a comprehensive study and analysis,” IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing, vol. 43, pp. 502–518, March 2005.

[10] N. Dobigeon, J.-Y. Tourneret and C.-I. Chang, “Semi-Supervised linear spectral unmixing using a hierarchical Bayesian model for hyperspectral imagery,” IEEE Trans. Signal Process., vol. 56, no. 7, pp. 2684–2695, Jul. 2008.

[11] K. Themelis, A. A. Rontogiannis and K. D.Koutroumbas, “Semisupervised hyperspectral unmixing via the weighted Lasso,” in Proc. IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing, (ICASSP’10), Dallas, TX, Mar. 2010.

[12] J. M. Nascimento and J. M. Bioucas-Dias, “Vertex component analysis: A fast algorithm to unmix hyperspectral data,” in IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, vol. 43, pp. 898–910, Apr. 2005.

[13] S. Jia and Y. Qian, “Spectral and Spatial Complexity-Based Hyperspectral Unmixing,” in IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, vol. 45, pp. 3867–3879, Dec. 2007.

[14] M. E. Winter, “N-FINDR: An algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data,” Proc. SPIE Imaging Spectrometry V, vol. 3753, pp. 266–275, Jul. 1999.

[15] S. W. Dowler, R. Takashima and M. Andrews, "Reducing the Complexity of the N-FINDR Algorithm for Hyperspectral Image Analysis," in IEEE Transactions on Image Processing, vol. 22, no. 7, pp. 2835-2848, July 2013.

[16] K. E. Themelis, A. A. Rontogiannis and K. Koutroumbas, "Sparse semi-supervised hyperspectral unmixing using a novel iterative Bayesian inference algorithm," 2011 19th European Signal Processing Conference, Barcelona, August 2011, pp. 1165-1169.

[17] Γ.Α. Σταθόπουλος, “Στατιστικές Τεχνικές Παλινδρόμησης για την Ανάλυση Μεγάλων Δεδομένων», Ιούλιος 2017.

[18] Plaza A., Martín G., Plaza J., Zortea M. and Sánchez S. “Recent Developments in Endmember Extraction and Spectral Unmixing”. In: Prasad S., Bruce L., Chanussot J. (eds) “Optical Remote Sensing. Augmented Vision and Reality”, vol 3. Springer, Berlin, Heidelberg, March 2011

[19] G.A. Rodriguez-Yam, R.A. Davis and L.L. Scharf (n.d.). “A Bayesian model and Gibbs sampler for hyperspectral imaging,” Sensor Array and Multichannel Signal Processing Workshop Proceedings, 2002. doi:10.1109/sam.2002.1191009 .

[20] Y. Altmann, M. Pereyra and J. Bioucas-Dias, “Collaborative sparse regression using spatially correlated supports - Application to hyperspectral unmixing.” IEEE Transactions on Image Processing : a publication of the IEEE Signal Processing Society, September 2014

[21] J. Joyce, "Bayes’ Theorem", The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Spring 2019 Edition), Edward N. Zalta (ed.),
URL =<https://plato.stanford.edu/archives/spr2019/entries/bayes-theorem/>.

[22] A. Gelman, J.B. Carlin, H.S. Stern, D.B. Dunson, A. Vehtari and B. Donald, “Bayesian Data Analysis”, Third Edition. Chapman and Hall/CRC, November 2013

[23] G.M. Allenby, P.E. Rossi and R.E. McCulloch, "Hierarchical Bayes Model: A Practitioner’s Guide". Journal of Bayesian Applications in Marketing, January 2005.

[24] S.M. Lynch, “Introduction to Applied Bayesian Statistics and Estimation for Social Scientists”, New York: Springer, Chapter 4, 2007.

[25] P.A. Gagniuc, “Markov Chains: From Theory to Implementation and Experimentation”. USA, NJ: John Wiley & Sons. pp. 1–235, 2017.

[26] S. Geman and D. Geman, “Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images,” in IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. PAMI-6, no. 6, pp. 721-741,564-584, November 1987.

[27] N. Dobigeon and J.Y. Tourneret, “Spectral Unmixing of Hyperspectral Images Using a Hierarchical Bayesian Model,” 2007 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing - ICASSP '07, Honolulu, HI, pp. III-1209-III-1212, 2007

[28] S. Babacan, R. Molina and A. Katsaggelos, “Bayesian compressive sensing using Laplace priors,” in IEEE Transactions on Image Processing, vol. 19, no. 1, pp. 53–63, Jan. 2010.

[29] T. Blumensath and M. E. Davies, “Monte-Carlo methods for adaptive sparse approximations of time-series,” in IEEE Transactions on Signal Processing, vol. 55, no. 9, pp. 4474–4486, Sep. 2007.

[30] C. Févotte and S. J. Godsill, “A Bayesian approach for blind separation of sparse sources,” in IEEE Transactions on Audio, Speech, and Language Processing, vol. 14, no. 6, pp. 2174–2188, Nov. 2006.

[31] N. Dobigeon, S. Moussaoui, M. Coulon, J. Tourneret and A. O. Hero, "Joint Bayesian Endmember Extraction and Linear Unmixing for Hyperspectral Imagery," in IEEE Transactions on Signal Processing, vol. 57, no. 11, pp. 4355-4368, Nov. 2009

[32] K. E. Themelis, A. A. Rontogiannis and K. D. Koutroumbas, "A Novel Hierarchical Bayesian Approach for Sparse Semisupervised Hyperspectral Unmixing," in IEEE Transactions on Signal Processing, vol. 60, no. 2, pp. 585-599, Feb. 2012

[33] M. Figueiredo, “Adaptive sparseness for supervised learning,” IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. 25, no. 9, pp. 1150–1159, September 2003.

[34] M.E. Tipping, “Sparse Bayesian learning and the relevance vector machine,” Journal of Machine Learning Reasearch, vol. 1, pp. 211–244, 2001.

[35] S. Moussaoui, D. Brie, A. Mohammad-Djafari and C. Carteret. "Separation of Non-Negative Mixture of Non-Negative Sources Using a Bayesian Approach and MCMC Sampling," Signal Processing, IEEE Transactions on. 54. 4133 - 4145. 2006.

[36] N. Dobigeon, S.Moussaoui, J.Tourneret and C. Carteret. “Bayesian separation of spectral sources under non-negativity and full additivity constraints,” Signal Processing. 89. 2657-2669. 2009

[37] M. Schmidt, O. Winther and L. Hansen. "Bayesian Non-negative Matrix Factorization," Independent component analysis and signal separation, international conference on lecture notes in computer science (LNCS), vol. 5441, pp. 540–547. 2009.

[38] M. Arngren, M.N. Schmidt and J. Larsen. “Unmixing of hyperspectral images using Bayesian non-negative matrix factorization with volume prior,” Journal of Signal Processing Systems, 65, 479-496, 2010.

[39] J.T. Hahn and A.M. Zoubir. “Bayesian Nonparametric Unmixing of Hyperspectral Images.” ArXiv abs/1702.08007, 2017.

[40] A. Gelman, J.B. Carlin, H.S. Stern, D.B. Dunson, A. Vehtari and D.B. Rubin, "Bayesian Data Analysis, Third Edition (3rd ed.)," Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2013.

[41] S. Bernabé, S. Sanchez, A. Plaza, S. Lopez, J. Benediktsson and R. Sarmiento, “Hyperspectral Unmixing on GPUs and Multi-Core Processors: A Comparison,” Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing, IEEE Journal of. 6, pp. 1386-1398, June 2013.

[42] J.M.P. Nascimento, J.M. Bioucas-Dias, J.M. Rodríguez Alves, V. Silva and A. Plaza, "Parallel Hyperspectral Unmixing on GPUs," in IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters, vol. 11, no. 3, pp. 666-670, March 2014.

[43] G. Shaw and D. Manolakis, "Signal processing for hyperspectral image exploitation," in IEEE Signal Processing Magazine, vol. 19, no. 1, pp. 12-16, Jan. 2002.

[44] W.Wang and G. Cai, “Endmember Extraction by Pure Pixel Index Algorithm from Hyperspectral Image,” in International Conference on Optical Instruments and Technology: Advanced Sensor Technologies and Applications, 2008.

[45] M. Graña and M. Veganzones, “Endmember induction by lattice associative memories and multi-objective genetic algorithms,” EURASIP Journal on Advances in Signal Processing. 2013.

[46] S. Seager, E.L. Turner, J. Schafer and E.B. Ford, "Vegetation's Red Edge: A Possible Spectroscopic Biosignature of Extraterrestrial Plants," Astrobiology. **5** (3): 372–390, March 2005

[47] P. Walters, “An Introduction to Ergodic Theory,” New York: Springer, 1982.

[48] M. Taboga, "Markov Chain Monte Carlo (MCMC) diagnostics", Lectures on probability theory and mathematical statistics, Third edition. Kindle Direct Publishing. 2017.
Online appendix:
https://www.statlect.com/fundamentals-of-statistics/Markov-Chain-Monte-Carlo-diagnostics.

[49] J. Geweke, “Evaluating the Accuracy of Sampling-Based Approaches to the Calculation of Posterior Moments,” 4, November 1995.

[50] In. Myung, “Tutorial on Maximum Likelihood Estimation,” Journal of Mathematical Psychology, 47: 90-100, February 2003.

[51] H. Jeffreys, "An Invariant Form for the Prior Probability in Estimation Problems," Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 186 (1007): 453–461, September 1946.