



HAL
open science

Calibration de spectromètre par résolution de problèmes inverses parcimonieux pour le sondage atmosphérique

Jihanne El Haouari

► **To cite this version:**

Jihanne El Haouari. Calibration de spectromètre par résolution de problèmes inverses parcimonieux pour le sondage atmosphérique. Mathématiques générales [math.GM]. Université de Toulouse, 2025. Français. <NNT : 2025TLSEP096>. <tel-05422899>

HAL Id: tel-05422899

<https://theses.hal.science/tel-05422899v1>

Submitted on 18 Dec 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire HAL, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

Doctorat de l'Université de Toulouse

préparé à Toulouse INP

calibration de spectromètre par résolution de problèmes
inverses parcimonieux pour le sondage atmosphérique

Thèse présentée et soutenue, le 25 novembre 2025 par

Jihanne EL HAOUARI

École doctorale

EDMITT - Ecole Doctorale Mathématiques, Informatique et Télécommunications de Toulouse

Spécialité

Informatique et Télécommunications

Unité de recherche

IRIT : Institut de Recherche en Informatique de Toulouse

Thèse dirigée par

Jean-Yves TOURNERET et Herwig WENDT

Composition du jury

Mme Florence TUPIN, Présidente, Télécom Paris

M. Mohammed Nabil EL KORSO, Rapporteur, Université Paris-Saclay

Mme Nelly PUSTELNIK, Rapporteur, ENS de Lyon

M. Nicolas LE BIHAN, Rapporteur, Grenoble INP

M. Toon VAN WATERSCHOOT, Examineur, Katholieke Universiteit Leuven

M. Ricardo BORSOI, Examineur, CNRS Centre-Est

M. Jean-Yves TOURNERET, Directeur de thèse, Toulouse INP

M. Herwig WENDT, Co-directeur de thèse, CNRS Occitanie Ouest

Membres invités

Mme Christelle Pittet, CNES

M. Jean-Michel Gaucel, Thales Alenia Space Cannes

Résumé

"Dans la nature réside la préservation du monde", écrivait Thoreau dans *Walking* (Finch & Elder, p. 192), soulignant le rôle fondamental de la nature dans l'équilibre terrestre. Aujourd'hui, le changement climatique bouleverse cet équilibre, menaçant les écosystèmes.

Une surveillance précise des gaz à effet de serre dans l'atmosphère, principaux responsables du changement climatique, est devenue indispensable. Dans cette optique, la télédétection spatiale constitue un outil puissant pour mesurer et analyser à l'échelle mondiale la composition de l'atmosphère grâce à l'interaction entre le rayonnement électromagnétique et les molécules atmosphériques. La présence de ces dernières modifie le contenu spectral du rayonnement, ce qui permet d'inférer leurs concentrations à partir de mesures de spectre rayonné. Les spectromètres utilisés sont des instruments à haute résolution, centrés sur les bandes spectrales des gaz d'intérêt. Toutefois, ces instruments présentent des imperfections optiques et électroniques, générant des erreurs qui biaisent l'interprétation des spectres mesurés. Il est donc crucial de modéliser précisément le comportement de l'instrument, en particulier sa fonction de réponse spectrale instrumentale (ISRF). La caractérisation instrumentale débute au sol, via des campagnes sous vide thermique, puis se poursuit en orbite durant la phase de calibration/validation (CALVAL). Des calibrations régulières permettent ensuite de suivre les dérives instrumentales liées à l'environnement spatial (vieillesse, variations thermomécaniques). La thèse s'est focalisée sur l'estimation des ISRFs, tout en prenant en compte d'autres imperfections tels que les erreurs radiométriques et les décalages spectraux, afin d'améliorer la qualité des produits utilisateurs.

Dans la littérature, les ISRFs sont souvent modélisées par des fonctions paramétriques (gaussiennes, super-gaussiennes). Toutefois, ces modèles peinent à représenter la diversité des formes observées et n'offrent pas une correction suffisante face aux exigences croissantes des missions spatiales. Par ailleurs, les erreurs instrumentales sont rarement intégrées dans le modèle global ou traitées conjointement. Pour dépasser ces limites, la thèse explore des approches de représentation parcimonieuse permettant d'estimer les ISRFs de manière plus flexible et précise que les approches paramétriques classiques. En complément, une méthode a été développée pour estimer simultanément les ISRFs et les erreurs de mesure, en combinant représentation parcimonieuse et modélisation paramétrique des erreurs. Cette approche conjointe atteint une précision comparable à celle obtenue dans des conditions idéales, c'est-à-dire sans erreurs instrumentales.

Le cadre méthodologique proposé ouvre la voie à une généralisation à d'autres problèmes inverses non-linéaires sous contraintes de parcimonie, par exemple en imagerie hyperspectrale. Les perspectives incluent l'exploration de modèles dynamiques, tels que les modèles à espace d'états (State Space Models), pour estimer conjointement les ISRFs selon la longueur d'onde. Des outils comme les filtres de Kalman, les réseaux de neurones récurrents, les transformateurs ou les processus gaussiens sont également envisagés. L'apprentissage automatique pourrait aussi être mobilisé pour estimer les ISRFs, atténuer le bruit ou calibrer les spectres. À plus long terme, il serait pertinent d'intégrer d'autres erreurs, telles que la lumière parasite (assimilable à une fonction de réponse spatiale ou spatio-spectrale), ou d'aller jusqu'à l'estimation des paramètres atmosphériques (comme le CO_2) au niveau 2, en tenant compte de l'impact des erreurs instrumentales sur l'inversion.

En définitive, cette thèse contribue à la mise au point d'algorithmes robustes pour la calibration en vol des instruments de télédétection, avec un impact potentiel fort sur la précision des mesures atmosphériques, et à terme, sur les applications climatiques et environnementales.

Mots-clés : Télédétection spatiale, Problèmes inverses, Calibration des instruments, Représentation parcimonieuse, Défauts radiométriques et spectraux.

Abstract

“In wildness is the preservation of the world,” wrote Thoreau in *Walking* (Finch & Elder, p. 192), emphasizing the fundamental role of nature in the Earth’s balance. Today, climate change is disrupting this balance, threatening ecosystems.

Accurate monitoring of greenhouse gases in the atmosphere, the main drivers of climate change, has become essential. In this context, space-based remote sensing is a powerful tool for measuring and analyzing the composition of the atmosphere on a global scale through the interaction between electromagnetic radiation and atmospheric molecules. The presence of these molecules modifies the spectral content of the radiation, making it possible to infer their concentrations from measurements of the radiated spectrum. The spectrometers used are high-resolution instruments, focused on the spectral bands of the gases of interest. However, these instruments have optical and electronic imperfections, generating errors that bias the interpretation of the measured spectra. It is therefore crucial to accurately model the behavior of the instrument, in particular its instrumental spectral response function (ISRF). Instrument characterization begins on the ground, via thermal vacuum campaigns, and then continues in orbit during the calibration/validation (CALVAL) phase. Regular calibrations then make it possible to monitor instrumental drifts related to the space environment (aging, thermomechanical variations). The thesis focuses on estimating ISRFs while taking into account other imperfections, such as radiometric errors and spectral shifts, in order to improve the quality of user products.

In the literature, ISRFs are often modeled by parametric functions (Gaussian, super-Gaussian). However, these models struggle to represent the diversity of observed shapes and do not offer sufficient correction for the growing demands of space missions. Furthermore, instrumental errors are rarely integrated into the overall model or treated jointly. To overcome these limitations, the thesis explores sparse representation approaches that allow ISRFs to be estimated more flexibly and accurately than classical approaches. In addition, a method has been developed to simultaneously estimate ISRFs and measurement errors by combining sparse representation and parametric modeling of errors. This joint approach achieves a level of accuracy comparable to that obtained under ideal conditions, i.e., without instrumental errors.

The proposed methodological framework paves the way for generalization to other nonlinear inverse problems under sparse constraints, for example, in hyperspectral imaging. Prospects include the exploration of dynamic models, such as state space models, to jointly estimate ISRFs according to wavelength. Tools such as Kalman filters, recurrent neural networks, transformers, or Gaussian processes are also being considered. Machine learning could also be used to estimate ISRFs, reduce noise, or calibrate spectra. In the longer term, it would be relevant to integrate other errors, such as stray light (assimilable to a spatial or spatio-spectral response function), or even estimate atmospheric parameters (such as CO_2) at level 2, taking into account the impact of instrumental errors on inversion. Ultimately, the work carried out in this thesis aims to contribute to the development of robust in-flight calibration algorithms for remote sensing instruments, with potentially significant impact on the accuracy of atmospheric measurements and, more broadly, on climate and environmental applications.

Keywords : Space remote sensing, Inverse problems, Flight calibration, Sparse representation, Radiometric and spectral defects.

Remerciements

Parce que cette thèse n'aurait jamais pu voir le jour sans toutes les personnes qui m'ont encouragée, soutenue, qui ont cru en moi et m'ont permis de réaliser ce rêve, je tiens à exprimer ici ma profonde gratitude.

Je pense tout d'abord à mes directeurs et encadrants de thèse. Merci à vous de m'avoir offert l'opportunité de travailler sur un sujet d'actualité, aussi enrichissant scientifiquement qu'humainement. Merci à vous, Jean-Yves Tourneret et Herwig Wendt, d'avoir cru en moi dès le premier jour, pour votre patience, votre capacité d'adaptation et votre accompagnement remarquable, qui m'ont permis d'aller aussi loin. Merci également à mes encadrants industriels, Christelle Pittet et Jean-Michel Gaucel de m'avoir donné la chance d'explorer un domaine aussi fascinant que la télédétection spatiale ; j'espère que mon travail pourra, à son échelle, contribuer à la calibration de nos instruments. Et je pense par ailleurs à toi, Karima, qui va poursuivre la recherche dans ce domaine incroyable : bonne chance à toi !

Je souhaite également remercier mes rapporteurs, Mohammed Nabil El Korso, Nicolas Le Bihan et Nelly Pustelnik, pour le temps qu'ils ont consacré à la lecture attentive d'un manuscrit peut-être un peu dense, ainsi que pour leurs remarques et questions particulièrement enrichissantes. Au plaisir de poursuivre notre collaboration, Nabil, durant mon post-doctorat. Plus largement, je remercie l'ensemble des membres du jury, Florence Tupin, Toon Van Waterschoot, Ricardo Borsöi, Caroline Bes et Corinne Mailhes, pour leur présence, leur disponibilité et leur venue en personne à ma soutenance.

De nombreuses autres personnes m'ont accompagnée tout au long de cette aventure, et je tiens à leur exprimer toute ma gratitude. Il m'arrivera sans doute d'oublier quelques noms, mais sachez que votre présence, précieuse, résonne entre ces lignes.

Ma gratitude va particulièrement à Corinne Mailhes, directrice du laboratoire TéSA, pour m'avoir accueillie durant ces trois années et pour avoir su créer un environnement de travail à la fois bienveillant, convivial et fondé sur l'entraide. (Merci également pour les quelques centaines de bonbons Arlequins !) Plus généralement, je remercie tous les membres de TéSA : les doctorants qui ont été présents depuis le début — Youssra, Hamish, Evelyne, Paul, Valérian, Marta et Joan — mais aussi les nombreux arrivants — Léa, Maurine, Younes, Jeff, Esteban, Alexandre et Karima — qui ont su apporter toujours plus de vie au laboratoire (Maurine, « pour combien » viens-tu à la danse avec moi ?). Sans oublier les membres permanents de TéSA, qui m'ont vue arriver et m'ont accueillie. Je n'oublierai pas non plus toutes nos discussions et nos mémorables débats lors des pauses.

Je ne pourrais pas oublier mes amis toulousains, qui m'ont soutenue, encouragée et ont su trouver les mots justes dans les moments les plus difficiles. Je pense à vous, Elodie, Nina (oui, oui, un clin d'œil à la team SAT), Marie, Maël, Paul, Robin, Benoit, Liam, Justin et Pierre. Merci d'avoir toujours été là. Et puisque j'ai ici votre attention : oui, cela aura pris trois ans, mais... il est enfin temps de réaliser ce fameux yearbook !

Je tiens également à remercier mes amies d'enfance, Pauline et Anaïs, qui, malgré la distance, ont toujours répondu présentes. Je pense aussi à toi, Alexandre, le meilleur parrain du monde : merci pour tes encouragements constants et ta confiance inébranlable. Merci également à toi, Anouck, pour ton soutien et tes nombreux conseils.

Enfin, mes remerciements les plus sincères vont à ma famille. À mes parents, qui m'ont guidée,

soutenue, et sans qui je n'aurais jamais imaginé devenir docteur. À mon frère et à ma sœur, pour leur aide et leur présence indéfectible.

Merci à toutes et à tous.

Table des matières

Résumé	1
Abstract	3
Remerciements	5
1 Contexte	9
1.1 Sondage atmosphérique	10
1.1.1 Introduction	10
1.1.2 Spectroscopie	10
1.1.3 Instruments utilisés	11
1.1.4 MicroCarb et CO2M	12
1.1.5 Transfert radiatif	14
1.2 Calibration des instruments	15
1.3 Organisation du manuscrit, contributions et données utilisées	18
1.3.1 Organisation du manuscrit	18
1.3.2 Présentation des données utilisées	20
1.3.3 Publications	21
2 Modélisation et estimation des réponses spectrales	23
2.1 Modélisation des réponses spectrales	23
2.1.1 Modélisation paramétrique	24
2.1.2 Représentation parcimonieuse des ISRFs	29
2.1.3 Présence de bruit dans les mesures des ISRFs	39
2.1.4 Conclusion sur la modélisation des ISRFs	43
2.2 Estimation des ISRFs en vol : un problème inverse	44
2.2.1 Formulation du problème inverse	44
2.2.2 Résolution en utilisant la représentation parcimonieuse	45
2.3 Résultats obtenus pour le problème inverse	46
2.3.1 Résolution du problème inverse par moindres carrés	48
2.3.2 Estimation des ISRFs	48
2.3.3 Sensibilité aux paramètres	62
2.3.4 Analyse de la robustesse à la présence de bruit	67
2.3.5 Application à d'autres instruments	68
2.3.6 Impact des incertitudes ou de possibles écarts modèle–observations	78
2.4 Conclusion et limites de la méthode	85
3 Calibration spectrale et radiométrique	87
3.1 Calibration spectrale	88
3.1.1 Estimation des ISRFs avec prise en compte des décalages spectraux	89
3.1.2 Estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux	90

3.1.3	Autres approches non-paramétriques pour le recalage spectral	92
3.1.4	Comparaison des méthodes d'estimation du décalage spectral	94
3.1.5	Expérimentations	94
3.1.6	Conclusion sur l'estimation des ISRFs et décalages spectraux	110
3.2	Calibration radiométrique	110
3.2.1	Estimation des ISRFs et des défauts radiométriques	111
3.2.2	Estimation alternée des ISRFs et des erreurs radiométriques	114
3.2.3	Expérimentations	115
3.2.4	Conclusion sur les erreurs radiométriques	124
3.3	Estimation conjointe des ISRFs et des erreurs de mesures	125
3.3.1	Estimation des ISRFs et des erreurs radiométriques et spectrales	125
3.4	Conclusions	131
4	Généralisation du problème inverse non-linéaire	133
4.1	Présentation et modélisation du problème	134
4.2	Méthodes de résolution	135
4.2.1	Non-linéarités séparables	135
4.2.2	Non-linéarités non-séparables et bijectives	137
4.3	Préconditionnement des dictionnaires	139
4.3.1	Cas linéaire	139
4.3.2	Cas non-linéaire	141
4.4	Résultats numériques pour des données synthétiques	143
4.4.1	Application à différentes non-linéarités	144
4.4.2	Robustesse au bruit	147
4.4.3	Sensibilité aux hyperparamètres	150
4.4.4	Utilisation de différents dictionnaires	151
4.4.5	Conclusion sur les données synthétiques	152
4.5	Données réelles	153
4.5.1	Démélange spectral	153
4.5.2	Estimation de la réponse spectrale d'un spectromètre	172
4.6	Conclusion	179
	Conclusion et perspectives	181
	Glossaire	186
	A Description des algorithmes utilisés	189
	B Détermination du gradient dans le cadre des moindres carrés séparables	196
	C Calcul de la dérivée seconde pour EXIPRIM	199
	Bibliographie	208

Chapitre 1

Contexte

"Le changement climatique est sans équivoque, et l'influence humaine a réchauffé l'atmosphère, l'océan et les terres" - Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC), Rapport AR6, 2021.

Le changement climatique constitue l'un des enjeux majeurs du XXI^e siècle. L'augmentation rapide de la température globale, la fonte accélérée des glaciers, la montée du niveau des mers et la multiplication d'événements météorologiques extrêmes — sécheresses, incendies, tempêtes, inondations — en sont des manifestations visibles et documentées. Au cœur de ce dérèglement planétaire, le dioxyde de carbone (CO_2) joue un rôle central en tant que principal gaz à effet de serre d'origine anthropique. En effet, depuis les années 1960 [1], les mesures de concentration en CO_2 montrent une augmentation continue, atteignant des niveaux sans précédent dans l'histoire récente de l'humanité, comme le confirment les données diffusées par la National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) (voir Fig. 1.1). Cette hausse est étroitement corrélée à l'intensification des perturbations climatiques globales, dont certaines ont des effets irréversibles sur les écosystèmes naturels et les sociétés humaines.

Dans ce contexte, les missions de télédétection spatiale jouent un rôle fondamental pour comprendre, surveiller et anticiper les évolutions climatiques. La télédétection spatiale permet d'observer la Terre depuis l'espace et donc d'accéder à des données globales, continues et précises sur de nombreux paramètres physiques, chimiques et biologiques de la planète. Grâce à leur couverture étendue et leur fréquence de revisite élevée, ces instruments spatiaux offrent une capacité unique à documenter l'évolution rapide de notre environnement. Les applications sont nombreuses : mesure du niveau de la mer, cartographie tridimensionnelle de la surface terrestre, surveillance des feux de forêts, analyse de l'érosion côtière, ou encore le suivi de la fonte des glaciers. Ces données sont également essentielles pour l'amélioration des modèles de prévision météorologique et climatique. Plus spécifiquement, le sondage atmosphérique depuis l'espace permet de mesurer les concentrations de gaz à effet de serre. Cette capacité de mesure offre la possibilité non seulement de suivre les concentrations globales, mais aussi d'identifier les sources d'émissions (zones industrielles, feux de végétation, fuites de méthane, etc.) ainsi que les puits de carbone (forêts, océans, etc.). Elle permet également de détecter les variations saisonnières significatives du CO_2 [1], et d'affiner les mesures à l'échelle urbaine, notamment pour les émissions anthropiques de CO_2 et de méthane (CH_4) [2]. L'intégration de ces données dans les stratégies climatiques et les accords internationaux (comme les Accords de Paris) est devenue indispensable pour évaluer les engagements nationaux, adapter les politiques publiques et renforcer les actions de réduction des émissions. Les missions spatiales futures, notamment pour la détermination des concentrations en CO_2 tels que MicroCarb¹ ou CO2M, devront ainsi répondre à des exigences de plus en plus strictes en matière de précision, de fréquence d'acquisition, et de résolution spatiale et spectrale.

1. À noter que, dans le cadre de la mission MicroCarb, les sources d'émissions naturelles constituent le principal objet d'étude, tandis que les sources anthropiques ne sont considérées que comme un produit dérivé.

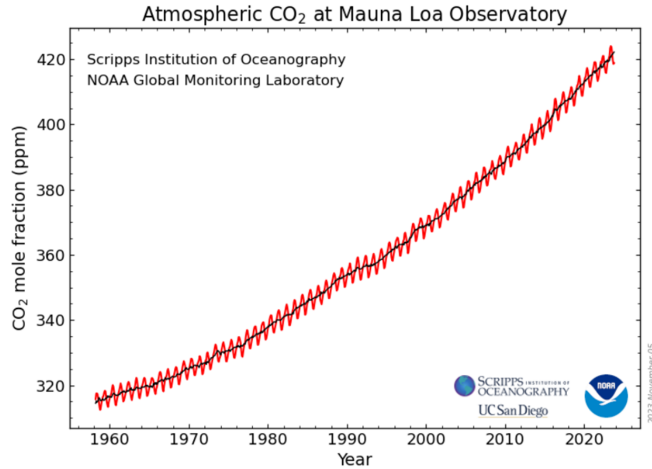


FIGURE 1.1 – Augmentation observée du CO_2 depuis les années 60 [1].

1.1 Sondage atmosphérique

1.1.1 Introduction

Le sondage atmosphérique consiste à observer, par télédétection satellitaire, la structure verticale et l'évolution temporelle des principales variables de l'atmosphère. Cette méthode permet de déterminer des profils verticaux ou des colonnes intégrées de paramètres atmosphériques tels que la température, l'humidité, les vents, la nébulosité, les aérosols, ainsi que les concentrations de gaz comme l'oxygène O_2 , le dioxyde de carbone CO_2 , le méthane CH_4 ou l'ozone O_3 . Le sondage atmosphérique joue un rôle clé dans un large éventail d'applications, allant de la prévision météorologique au suivi de la couche d'ozone et jusqu'à la surveillance de la composition atmosphérique, de ses évolutions, ainsi que des impacts sur le bilan radiatif de la Terre. Pour les missions climatiques, la priorité est donnée à l'acquisition de séries temporelles longues (généralement supérieures à cinq ans), condition indispensable à la détection de tendances robustes. C'est notamment le cas des missions telles qu'IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) [3], utilisées pour le suivi de long terme de la composition atmosphérique. Ces données alimentent également des services opérationnels ou pré-opérationnels comme Copernicus C3S (Climate Change Service), qui est un programme de l'Union européenne permettant la surveillance continue des changements climatiques à l'échelle planétaire. L'atmosphère terrestre est composée principalement d'azote, d'oxygène, d'argon et de gaz à effet de serre en proportions plus faibles mais fortement variables dans le temps et l'espace. La composition atmosphérique n'est ni stable ni homogène : elle dépend de nombreux facteurs comme l'activité humaine, la saison, la latitude, ou encore les conditions météorologiques locales. Le sondage atmosphérique permet de suivre ces variations à différentes échelles temporelles — de quelques jours à plusieurs années — et à différentes altitudes, offrant à la fois une vision intégrée (colonne totale) et une répartition verticale détaillée des constituants gazeux. Les mesures obtenues par sondage atmosphérique reposent en grande partie sur la spectroscopie, discipline fondamentale qui étudie l'interaction entre la matière et le rayonnement électromagnétique.

1.1.2 Spectroscopie

La spectroscopie constitue une base du sondage atmosphérique depuis l'espace. En analysant le rayonnement électromagnétique émis ou réfléchi par la Terre et son atmosphère dans différentes bandes spectrales — notamment l'ultraviolet (UV), le visible (VIS), le proche infrarouge (NIR) et le

court infrarouge (SWIR) — il est possible d’accéder à une richesse d’informations sur la composition atmosphérique. Chaque molécule absorbe la lumière à des longueurs d’onde spécifiques correspondant à des transitions électroniques, vibrationnelles ou rotationnelles. Ces transitions se traduisent par des raies d’absorption étroites et caractéristiques, dont la position précise révèle l’identité des gaz présents, tandis que la forme et l’intensité de ces raies renseignent sur les conditions thermodynamiques locales, telles que la température et la pression. Selon les missions, les raies spectrales peuvent être extrêmement fines et leur forme est influencée par divers phénomènes physiques, notamment l’élargissement Doppler lié à l’agitation thermique des molécules, ainsi que l’élargissement provoqué par les interactions entre molécules. Pour exploiter pleinement ces signatures spectrales, les instruments de sondage atmosphérique sont conçus pour mesurer avec une haute résolution spectrale le rayonnement à différentes longueurs d’onde.

1.1.3 Instruments utilisés

Les instruments utilisés pour le sondage atmosphérique peuvent être répartis en deux catégories selon le mode d’acquisition : il y a les instruments passifs, qui mesurent le rayonnement naturellement émis ou réfléchi par la Terre et les instruments actifs, qui émettent leur propre signal (généralement un laser) et analysent le signal réfléchi ou rétrodiffusé. Les instruments actifs, comme les lidars, émettent un faisceau laser dont le signal réfléchi est mesuré pour extraire des informations sur la structure verticale de l’atmosphère dont l’exemple de la missions SWOT (altimétrie radar interférométrique) ou MERLIN (lidar pour le méthane). Les instruments passifs mesurent soit la diffusion atmosphérique du rayonnement solaire, notamment pour des études d’aérosols et d’ozone dans l’ultraviolet et le visible, soit le rayonnement thermique émis par la Terre et son atmosphère qui est mesuré dans l’infrarouge (dont l’exemple de IASI) soit le rayonnement solaire réfléchi par la surface terrestre, principalement dans le visible et le proche infrarouge dont l’exemple de MicroCarb et CO2M qui seront étudiées dans cette thèse.

Pour ces différentes missions, les spectromètres embarqués peuvent être de deux types. Les spectromètres à transformée de Fourier (FTS), basés sur le principe de l’interférométrie, utilisent un interféromètre dans lequel un faisceau lumineux est divisé en deux, réfléchi par deux miroirs (dont l’un est mobile), puis recombinaison. Le signal mesuré, appelé interférogramme, est ensuite transformé en spectre par application d’une transformée de Fourier. Ce principe est mis en œuvre dans l’instrument IASI, qui embarque un interféromètre de Michelson [3]. L’instrument fournit des spectres très détaillés dans l’infrarouge thermique. Pour interpréter correctement les spectres mesurés, il est essentiel de disposer d’un modèle précis de la réponse spectrale instrumentale [4]. De fait, différents effets peuvent déformer cette réponse, définie en théorie par un sinus cardinal, tels que des désalignements ou des décalages spectraux. Ces effets doivent impérativement être pris en compte dans le traitement. Les FTS offrent une excellente résolution spectrale et une calibration interne fine, mais nécessitent un traitement sophistiqué, surtout en cas d’échantillonnages irréguliers ou d’effets chromatiques. En comparaison, les spectromètres dispersifs reposent sur la dispersion de la lumière par un prisme ou un réseau de diffraction. Les instruments MicroCarb [1] et CO2M [5] en sont des exemples typiques. Ils projettent la lumière issue d’une fente sur un réseau de diffraction. Comme illustré en figure 1.2, qui montre le schéma d’un spectromètre de type push-broom issu de [6], chaque pixel du détecteur correspond à une position spatiale (axe Across Track) et à une longueur d’onde (axe spectral). Cette configuration permet d’acquérir à chaque instant une image 2D comportant une dimension spatiale et une dimension spectrale. Plus précisément, la matrice enregistrée représente une ligne spatiale (selon l’axe Across Track) dispersée spectralement sur le second axe. Ainsi, tous les pixels d’une même colonne ACT correspondent à la même zone au sol, mais à différentes longueurs d’onde. Ces systèmes sont compacts et robustes, et le couple largeur de bande/résolution est limité par la taille du détecteur. Chaque spectromètre possède une fonction de réponse appelée Instrument Line Shape (ILS), qui décrit la manière dont l’instrument répond à une raie spectrale théoriquement infiniment fine. L’ILS est mesurée par balayage laser, puis utilisée pour reconstruire la réponse spectrale de chaque pixel, c’est-à-dire sa sensibilité à l’ensemble des longueurs d’onde.

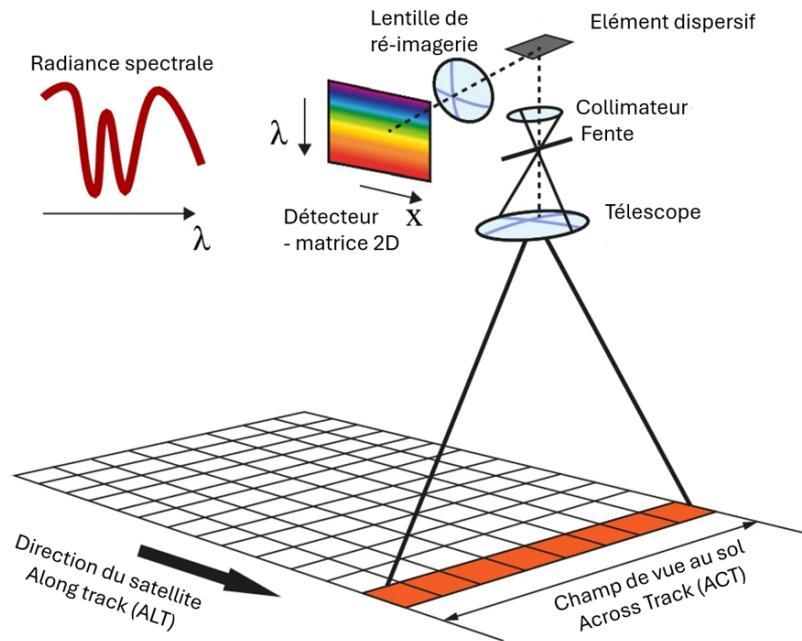


FIGURE 1.2 – Schéma d'un spectromètre de type push-broom [6].

Cette réponse spectrale, appelée Instrument Spectral Response Function (ISRF), agit comme un filtre linéaire appliqué au spectre incident, et définit la résolution spectrale effective de l'instrument. L'ISRF dépend de nombreux paramètres : configuration optique, taille des pixels, caractéristiques de dispersion, conditions thermiques, etc. Sa forme varie généralement en fonction de la longueur d'onde centrale (c'est-à-dire celle à laquelle le pixel est le plus sensible), ainsi que de la position sur le détecteur. Sa connaissance précise est essentielle pour estimer les paramètres de composition atmosphérique. Cette estimation a lieu par comparaison des spectres mesurés avec un modèle de transfert radiatif. Une erreur sur l'ISRF se traduit en biais dans l'estimation des concentrations de gaz. La mesure de l'ISRF est généralement effectuée au sol, avant le lancement, à l'aide de lasers accordables. En vol, une ré-estimation peut se faire à partir de sources internes ou via des approches inverses à partir des spectres mesurés de scènes bien caractérisées. Toutefois, elle reste complexe à mettre en place.

1.1.4 MicroCarb et CO2M

Le changement climatique constitue l'un des défis majeurs de notre siècle. L'Accord de Paris, adopté lors de la COP21 en 2015, a fixé comme objectif ambitieux de limiter le réchauffement global à 2°C, voire 1.5°C, par rapport aux niveaux pré-industriels. Pour suivre et évaluer les engagements des États, la surveillance des gaz à effet de serre (GES), en particulier le dioxyde de carbone (CO_2) et le méthane (CH_4), est devenue essentielle. Dans ce contexte, plusieurs missions satellitaires ont vu le jour pour assurer le suivi du cycle du carbone. Des missions pionnières telles que GOSAT (1 et 2), OCO-2 et OCO-3 ou TanSat ont permis d'acquérir les premières cartographies globales des concentrations atmosphériques de CO_2 . Les missions MicroCarb [1] et CO2M [2, 7] s'inscrivent dans cette continuité, avec des objectifs renforcés en termes de précision, de couverture géographique et de fréquence d'observation. MicroCarb vise à fournir des mesures précises des colonnes de CO_2 pour comprendre les processus gouvernant l'évolution de ses concentrations, tandis que CO2M ambitionne de mettre en place une capacité opérationnelle de cartographie des émissions anthropiques à l'échelle des pays et des grandes sources. La figure 1.1.4 présente un aperçu des principales missions spatiales

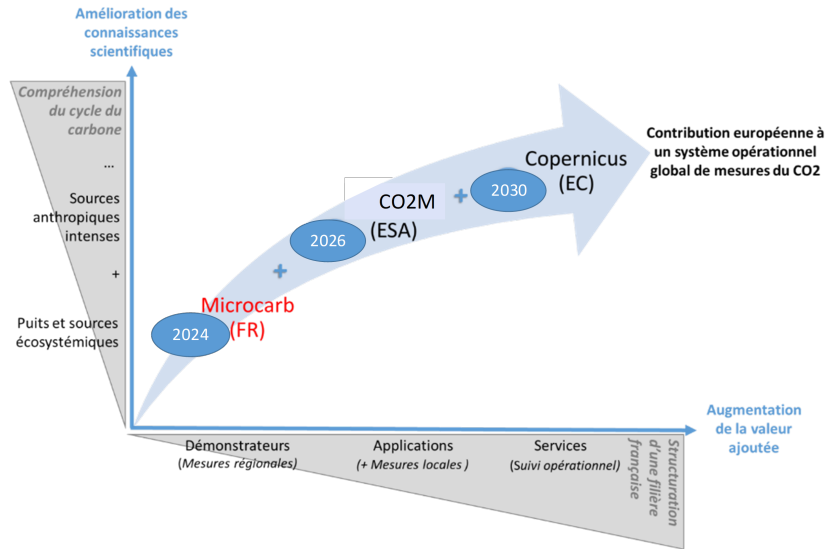


FIGURE 1.3 – Description des missions liées à la détermination des concentrations en CO_2 [1].

dédiées à la surveillance du CO_2 et illustre le positionnement complémentaire de MicroCarb et de CO2M. La précision visée pour la détermination du CO_2 pour ces missions est inférieure à 0.7 ppmv, avec une biais inférieur à 0.5ppmv [8], ce qui contraint d'autant plus la calibration. Ce travail se concentre plus spécifiquement sur l'étude et la modélisation des instruments embarqués sur ces deux missions, avec pour objectif de contribuer à l'amélioration des performances de calibration des instruments.

La mission MicroCarb est développée par le Centre national d'études spatiales (CNES) et l'United Kingdom Space Agency (UKSA). L'instrument associé, compact et économique, est plus petit que les spectromètres existants et a été lancé le 26 juillet à 2h03 UTC. MicroCarb est un instrument passif qui utilise un réseau dispersif en échelle pour répartir la lumière dans quatre bandes spectrales sur une même matrice de détection [1]. La première bande, B1(758.3-768.3 nm), correspond à une raie d'absorption de O_2 et offre une résolution spectrale d'environ 0.01 nm. Les bandes B2 (1596.7-1618.9 nm) et B3 (2023-2051 nm), avec des résolutions respectives de 0.02 nm et 0.03nm, sont sensibles au CO_2 et couvrent ses principales raies d'absorption [9]. La quatrième bande, B4 (1264-1282.2 nm), est une seconde bande de O_2 , proche du domaine spectral du CO_2 , utile pour la validation des observations de gaz à effet de serre depuis l'espace² [10]. Le schéma de l'instrument MicroCarb, issu de [11], est présenté à gauche de la figure 1.4. Pour cette mission, le meilleur compromis entre le temps d'intégration, le niveau de bruit (SNR) et la probabilité de présence des nuages conduit à des champs de vue de 13.5 km suivant l'axe spectral (ACT) et de 9km suivant l'axe spatial (ALT). Ces champs de vue sont découpés en trois mesures mitoyennes (fields of view - FOVs) de 4.5 km en ACT. Le temps d'intégration obtenu est de l'ordre de 1.4s.

La mission Copernicus CO2M, développée par l'Agence spatiale européenne (ESA) en collaboration avec la Commission européenne et EUMETSAT, mettra en œuvre un système orbital pour quantifier les émissions de CO_2 d'origine anthropique. CO2M surveillera globalement le CO_2 , le CH_4 et le NO_2 avec un lancement prévu fin 2026. Intégrée au programme Copernicus, cette mission sera déployée sous forme de constellation de satellites exploités sur plus de sept ans, qui mesureront la fraction molaire moyenne en colonne de CO_2 (XCO₂). Chaque satellite délivrera des images continues des radiances "top-of-atmosphere" sur la partie illuminée de l'orbite, avec une largeur de fauchée supérieure à 250 km et une résolution spatiale meilleure que 2 km × 2 km au centre de la

2. Une description détaillée est disponible sur le site du CNES : <https://cnes.fr/projets/microcarb>

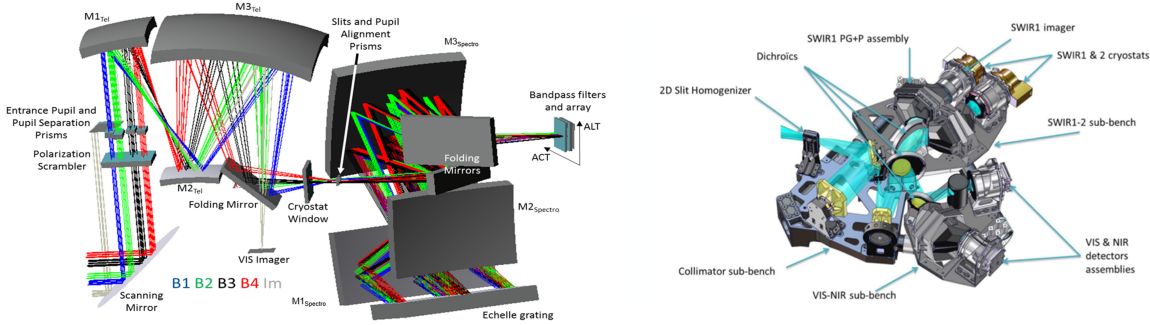


FIGURE 1.4 – Description des instruments MicroCarb (gauche) [11] et CO2M (droite)[5].

fauchée. Le schéma de l'instrument CO2M, issu de [5], est présenté à droite au niveau de la figure 1.4. La charge utile comprend plusieurs spectromètres couvrant le proche infrarouge (NIR : 747-773 nm à 0.1 nm), le SWIR-1 (1595-1675 nm à 0.3 nm) et le SWIR-2 (1990-2095 nm à 0.35 nm), ainsi qu'un spectromètre visible (405 - 490 nm à 0.6 nm) dédié à la mesure du NO_2 , utile pour localiser les panaches d'émissions industriels et urbains [7].³

1.1.5 Transfert radiatif

L'interprétation des mesures spectrales issues des instruments de sondage atmosphérique repose sur la modélisation du transfert radiatif, qui décrit comment le rayonnement électromagnétique interagit avec l'atmosphère et la surface terrestre. La luminance spectrale, ou radiance, correspond à la puissance rayonnée dans une direction donnée par unité de surface, par unité de fréquence et par unité d'angle solide. Cette grandeur se conserve lors de la propagation dans un milieu transparent sans absorption ou diffusion, ce qui en fait une quantité centrale pour la télédétection. Le spectre mesuré à bord du satellite est la somme des contributions du rayonnement solaire réfléchi par la surface terrestre (principalement dans le visible et le proche infrarouge), du rayonnement thermique émis par la surface et l'atmosphère (dans l'infrarouge), de la diffusion atmosphérique, et éventuellement de la polarisation du signal, qui peut influencer l'intensité mesurée (ex. : surfaces océaniques fortement polarisées). Les raies d'absorption présentes dans le spectre mesuré sont façonnées par la concentration des gaz atmosphériques et le chemin optique parcouru par la lumière. La profondeur d'une raie dépend ainsi de la concentration du gaz absorbant, de la longueur du trajet optique, ainsi que des conditions de pression et de température, qui influencent la forme des raies, notamment par élargissement Doppler qui est dû à la vitesse relative entre la cible et l'observateur. Dans certaines bandes spectrales, par exemple la bande B3 du CO_2 pour MicroCarb, les raies saturées permettent d'avoir une sensibilité accrue proche de la surface, ce qui est essentiel pour caractériser les émissions anthropiques.

L'inversion atmosphérique peut être décrite en trois grandes étapes, comme c'est le cas pour la mission CO2M [12] : (1) le pré-traitement, qui consiste à filtrer les données d'entrée afin d'éliminer les scènes atmosphériques ou de surface inadaptées, optimisant ainsi le temps de calcul ; (2) l'étape d'inversion proprement dite ; et (3) le post-traitement, qui filtre les sorties de l'inversion pour détecter et corriger les valeurs aberrantes [12]. L'objectif de l'inversion atmosphérique est de restituer les paramètres physiques de l'atmosphère — tels que les profils verticaux de gaz, la température ou l'humidité — à partir de mesures spectrales satellitaires. Cette démarche repose sur des modèles de transfert radiatif qui simulent le spectre attendu pour un état donné de l'atmosphère, en tenant compte de la géométrie d'observation, des propriétés de surface, de la composition atmosphérique et de la réponse spectrale de l'instrument (ISRF). L'inversion consiste alors à ajuster les paramètres du modèle pour minimiser l'écart entre le spectre simulé et le spectre mesuré. Cette procédure peut être

3. Une description détaillée est disponible sur le site d'EUMETSAT : <https://www.eumetsat.int/co2m>

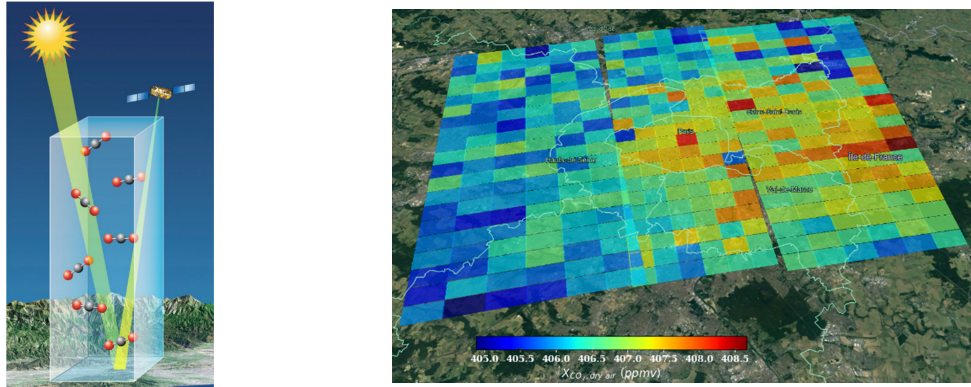


FIGURE 1.5 – Principe de mesure du CO_2 dans une colonne d'atmosphère (gauche) et simulation pour la mission MicroCarb d'une carte de la concentration sur Paris [1].

réalisée à l'aide de l'approche d'estimation optimale (Optimal Estimation retrieval [12]), formalisée par Rodgers dans sa référence fondatrice [13]. Cet ouvrage fournit les bases théoriques de l'inversion des mesures atmosphériques, en définissant les modèles directs (forward models) qui décrivent les instruments et les processus physiques. Rodgers y propose différentes méthodes pour résoudre les problèmes inverses appliqués à l'atmosphère, s'appuyant sur l'algèbre linéaire, la théorie bayésienne, les modèles d'état (comme le filtre de Kalman), la théorie de l'estimation et l'information théorique. Il y développe également l'inversion basée sur l'équation du transfert radiatif. L'approche d'estimation optimale [13] est notamment utilisée dans l'outil d'inversion 4ARTIC (4AOP Radiative Transfer Inversion Code) utilisé par la mission MicroCarb [10]. Cet outil repose sur une approche bayésienne, combinant les observations aux informations a priori afin de contraindre la récupération des profils verticaux de CO_2 , notamment dans un contexte d'incertitudes importantes sur les aérosols. Enfin, certains instruments opérationnels comme MODIS [14] utilisent une combinaison d'approches statistiques et physiques pour dériver les profils atmosphériques à partir des radiances infrarouges mesurées. Les paramètres restitués incluent les concentrations de certains gaz, la température, l'humidité, l'ozone et d'autres variables climatiques clés, avec une couverture globale, de jour comme de nuit. Cela illustre l'importance des méthodes d'inversion physique pour la surveillance atmosphérique à l'échelle planétaire.

Une fois les profils verticaux obtenus, l'estimation de la colonne de gaz, comme le CO_2 , repose sur l'analyse de bandes spectrales où ce gaz présente de fortes raies d'absorption. Cependant, l'absorption mesurée dépend aussi du trajet optique de la lumière. Pour lever cette ambiguïté, on utilise une bande de référence, généralement celle de l'oxygène (O_2), dont la concentration est bien connue. En comparant les absorptions du CO_2 et de l' O_2 , on peut estimer la longueur du trajet optique, puis en déduire la concentration en CO_2 dans une colonne atmosphérique, comme illustré en figure 1.5. Cette méthode est notamment utilisée pour la mission MicroCarb. La figure présente une simulation de carte de concentration en CO_2 que la mission permettra de produire une fois opérationnelle.

1.2 Calibration des instruments

À partir du modèle de transfert radiatif et des mesures instrumentales, les données sont traitées pour estimer les concentrations en gaz, évaluer les performances en vol, et ajuster les paramètres d'échelle des algorithmes. La figure 1.6 illustre les différents niveaux de produits pour la mission MicroCarb — une structure commune à de nombreuses missions spatiales d'observation atmosphérique [1, 8]. Le niveau 0 correspond aux données brutes issues de la télémétrie, comprenant les signaux numériques fournis par le détecteur et des méta-données dont les mesures d'attitudes et

d'orbites. Au niveau 1, les corrections instrumentales sont appliquées. En effet, les instruments sont exposés à de nombreuses sources d'erreurs pouvant affecter la qualité des mesures. L'environnement spatial lui-même — rayonnements ionisants, oxygène atomique, particules chargées, dégazage, vide ou encore microgravité — peut altérer les performances instrumentales. Au niveau optique, un échantillonnage insuffisant par rapport à la largeur des raies spectrales peut engendrer de l'aliasing, imposant ainsi un compromis entre la résolution spectrale et le champ de vue. Des imperfections comme les aberrations géométriques, les effets de smile et de keystone, ou les défauts de télécentricité, peuvent altérer la géométrie de l'image spectrale et modifier la forme des fonctions de réponse spectrale instrumentale (ISRFs). De plus, la lumière parasite, issue de réflexions internes (straylight) ou de réflexions multiples (ghosting), produit également des signaux indésirables. D'autres facteurs optiques, tels que la sensibilité à la polarisation (en particulier dans les instruments à réseau de diffraction), peuvent affecter l'interprétation spectrale, notamment si la scène observée contient des aérosols induisant une polarisation partielle de la lumière. Une calibration spectrale imprécise ou une résolution spectrale dégradée peut réduire la finesse des raies d'absorption, limitant ainsi la capacité de détection des concentrations de gaz. À cela, s'ajoutent des effets liés au détecteur : rémanence, bruit de mesure des ISRFs (par exemple du speckle), saturation, artefacts de compression ou encore défauts de focalisation. La stabilité mécanique et thermique de l'instrument en orbite joue également un rôle crucial pour maintenir la précision de la mesure. Pour réaliser la calibration, on soustrait le courant d'obscurité (dark), on corrige la non-linéarité du détecteur, on prend en compte la transmission optique et la réponse du détecteur (gains linéaires), les artefacts liés à la lumière parasite, les pixels défectueux, ainsi que les anomalies ponctuelles dues à des événements tels que l'impact de protons. On procède également à un recalage spectral, en ajustant les longueurs d'onde et les réponses spectrales, et à une estimation de la fonction de réponse spectrale instrumentale (ISRF). L'ensemble de ces traitements repose sur un modèle de l'instrument alimenté par des caractérisations et des calibrations. Au niveau 1b, on dispose de spectres calibrés radiométriquement et spectralement et géolocalisés. Dans certains cas, un recalage spectral dynamique est réalisé en fonction des caractéristiques de la scène observée, notamment en présence de forte hétérogénéité de la scène. Le niveau 1c, consiste à la projection des mesures sur une grille géométrique spécifique. Le niveau 2 correspond à l'inversion atmosphérique vue précédemment, c'est-à-dire à l'estimation des paramètres atmosphériques à partir des spectres mesurés. La connaissance précise de l'ISRF est ici essentielle, car elle conditionne non seulement la finesse des raies spectrales, mais aussi leur forme en pouvant les déformer ou les déplacer. Une ISRF mal modélisée peut dégrader fortement la qualité de l'inversion. L'un des aspects fondamentaux de la précision des produits au niveau 2 réside dans la connaissance fine du modèle de l'instrument, et en particulier de sa réponse spectrale. En effet, comme l'illustre la figure 1.7, une erreur de 0.7% sur la connaissance de la largeur à mi-hauteur (FWHM) des ISRFs peut entraîner une erreur absolue de plus de 1.5 ppmv sur l'estimation de la concentration en CO_2 . Dès lors, une calibration précise au sol est indispensable pour garantir la qualité des produits, qui doit dans certains cas, être complétée par une recalibration en vol. Cette calibration vise à ré-estimer précisément les paramètres de l'instrument, en particulier la forme des ISRFs et leur position spectrale. Elle permet également de quantifier les erreurs radiométriques et spectrales, et d'appliquer les corrections nécessaires pour garantir la fiabilité des inversions tout au long de la mission.

Pour des missions comme MicroCarb ou CO2M, la précision exigée pour l'estimation de la concentration en CO_2 impose une connaissance de l'ISRF à mieux de 1%. La variation de formes des ISRFs selon la longueur d'onde (effet de stretch par exemple) peut dépasser ce seuil. En vol, les ISRFs peuvent évoluer en raison de déplacements mécaniques post-lancement, de variations des conditions thermiques ou de l'illumination de la scène pour MicroCarb. Il a été montré [15] que pour certains instruments l'hétérogénéité de la scène au sol pouvait fortement impacter la qualité des produits atmosphériques. Selon la distribution d'albédo ou la présence de nuages, la fente d'entrée du spectromètre peut être illuminée de manière non-uniforme, modifiant la forme des ISRFs et donc la forme des raies d'absorption. Ce phénomène est présent sur le spectromètre UVN de Sentinel-4 [15] et également dans les simulations pour MicroCarb. Pour atténuer cet effet, différents systèmes

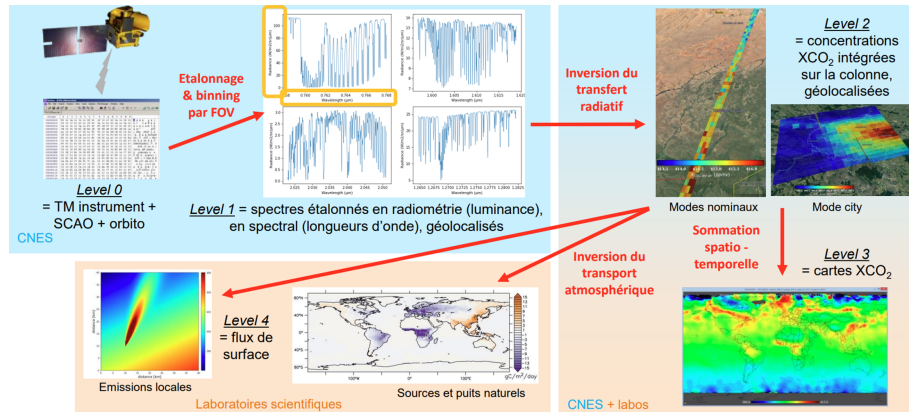


FIGURE 1.6 – Description des différents niveaux de produits pour la détermination des concentrations en CO_2 [1].

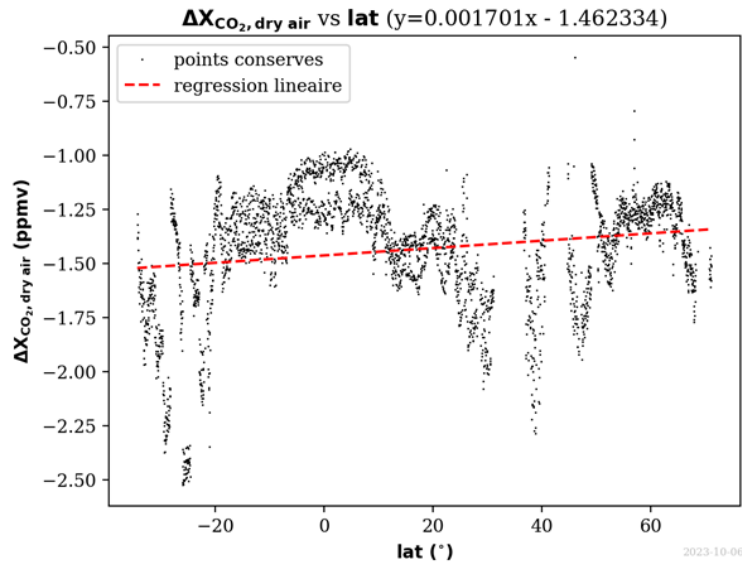


FIGURE 1.7 – Erreur sur la détermination de la concentration en CO_2 lorsque la FWHM de l'ISRF est fautive de 0.7%.

d'homogénéisation de fente (slit homogenizers) ont été développés. Dans [16], un homogénéisateur basé sur des composants optiques a été proposé pour réduire l'impact de scènes non-uniformes, bien que limité à la dimension spectrale et laissant subsister des erreurs résiduelles. Pour CO2M, une solution à fibres optiques multi-modes a été retenue pour homogénéiser la fente dans les deux dimensions, spatiale et spectrale [5]. La fente est ainsi composée de fibres rectangulaires positionnées selon l'axe transversal du télescope, rendant le système moins sensible aux distorsions optiques de type smile ou keystone, tout en optimisant les performances vis-à-vis de la lumière parasite. D'un point de vue détecteur, les erreurs radiométriques incluent les non-linéarités de gain, le courant d'obscurité (dark current), les effets de saturation, ainsi que les défauts de réponse locale. Tous ces phénomènes influencent la modélisation de la réponse radiométrique et doivent être correctement caractérisés pour garantir la précision de l'inversion.

Dans ce manuscrit, nous regroupons les erreurs en deux grandes catégories. Les erreurs spectrales incluent les incertitudes sur la forme des ISRF, ainsi que sur la connaissance de leur position

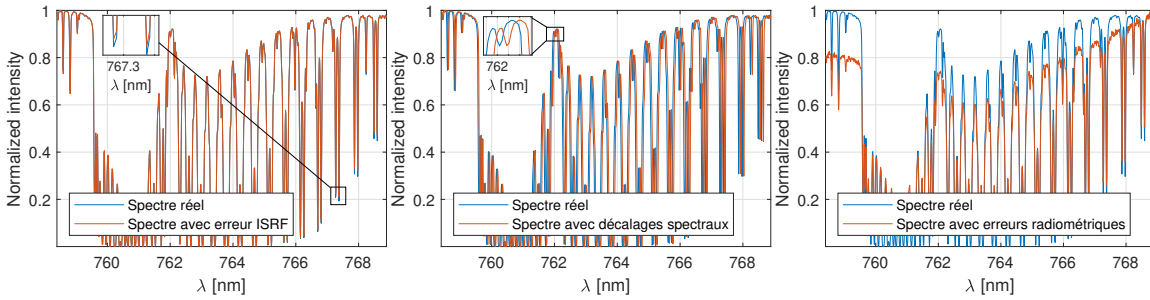


FIGURE 1.8 – Comparaison entre spectre réel et le spectre prenant en compte des erreurs sur la connaissance des ISRFs (gauche), des décalages spectraux (milieu) ainsi que des erreurs radiométriques (droite).

spectrale et de leur barycentre — ce dernier définissant la loi de dispersion, c’est-à-dire la correspondance entre longueur d’onde et pixel. Une mauvaise connaissance de cette loi peut engendrer des décalages spectraux. Les erreurs radiométriques englobent les défauts liés au détecteur : non-linéarités, offset, bruit et artefacts de compression. La figure 1.8 illustre l’impact de ces différents erreurs sur un spectre. On y voit qu’une erreur sur l’ISRF affecte la forme des raies, tandis que les défauts radiométriques modifient l’ensemble du spectre, notamment dans le continuum (zones plates du spectre, insensible à la forme des ISRFs). Les erreurs radiométriques introduisent principalement des biais verticaux, tandis que les erreurs de calibration spectrale entraînent des distorsions horizontales, décalant, élargissant ou rétrécissant les raies selon la longueur d’onde.

1.3 Organisation du manuscrit, contributions et données utilisées

1.3.1 Organisation du manuscrit

L’objectif de cette thèse est de développer des modèles, des algorithmes et de nouvelles méthodes permettant une meilleure caractérisation des instruments ainsi que de certains défauts associés, afin d’améliorer la qualité des mesures de l’atmosphère et de sa composition, à partir d’observations satellitaires effectuées par des spectromètres à haute résolution. Plus précisément, le travail se concentre sur la phase de calibration de l’instrument, avec pour but d’estimer aussi précisément que possible les fonctions de réponse spectrale.

Le chapitre 2 est consacré à la modélisation et à l’estimation en vol ou au sol des fonctions de réponse spectrale des instruments (ISRFs). Dans la littérature, ces fonctions sont généralement représentées par des modèles paramétriques, tels que les fonctions gaussiennes ou leurs généralisations [17]. Bien que couramment utilisées, ces modélisations présentent une flexibilité limitée pour représenter des formes d’ISRFs complexes ou variables. Pour surmonter cette limitation, ce chapitre propose une approche alternative reposant sur la représentation parcimonieuse des ISRFs dans un dictionnaire. Le problème d’estimation est alors formulé comme un problème inverse sous contrainte de parcimonie, résolu notamment via l’algorithme OMP. Les résultats montrent que cette approche permet d’obtenir des estimations plus précises et plus robustes que les méthodes paramétriques classiques. La méthode a été appliquée à différents instruments, y compris ceux décrits dans [17], afin d’évaluer son application à d’autres missions. Les travaux ont donné lieu à plusieurs publications : un article à la conférence GRETSI [18], un article à la conférence IEEE IGARSS [19] sur la variabilité des ISRFs selon la scène observée, et un article de synthèse publié dans la revue *Atmospheric Measurement Techniques* [20]. Ce dernier présente une comparaison étendue des approches parcimonieuses appliquées à divers instruments. Enfin, une méthode originale d’estimation a été dé-

veloppée, fondée sur la maximisation de l’enveloppe quadratique d’une fonction de coût adaptée au problème d’estimation des ISRFs. Cette contribution, réalisée en collaboration avec Marcus Carlsson (Université de Lund, Suède), a été présentée à la conférence ICASSP [21].

Le chapitre 3 s’intéresse aux différents défauts pouvant affecter le spectre mesuré par un spectromètre, notamment les erreurs radiométriques et les décalages spectraux. Un modèle mathématique général a été élaboré pour décrire ces perturbations, en supposant que les différentes erreurs peuvent être représentées par des fonctions polynomiales. Les problèmes d’estimation associés s’écrivent alors comme des problèmes inverses non-linéaires. Dans le cas des erreurs radiométriques, une méthode itérative a été développée pour estimer conjointement les ISRFs et les fonctions polynomiales associées aux défauts radiométriques. Cette méthode exploite plusieurs spectres de référence pour identifier les coefficients des polynômes et utilise une fenêtre glissante sur les données mesurées pour reconstruire les ISRFs. Ce travail a donné lieu à une publication à la conférence EUSIPCO [22]. En complément, une autre contribution a été publiée à la conférence ICSSO [23], portant sur le débruitage des ISRFs par représentation parcimonieuse et sur l’estimation conjointe des ISRFs et des erreurs radiométriques en fonction de la scène observée. Parallèlement, plusieurs modèles ont été proposés pour traiter les décalages spectraux. Une première approche consiste à estimer les ISRFs à partir du premier atome du dictionnaire (associé à la moyenne des ISRFs de base), tandis que le décalage est estimé en comparant le spectre mesuré à différentes convolutions entre l’ISRF et des versions décalées du spectre de référence. Cette méthode simple fournit des résultats prometteurs, permettant une estimation initiale des décalages tout en maintenant une bonne précision sur les ISRFs. Une seconde approche, plus élaborée, repose sur l’interpolation du spectre et les décalages spectraux sont modélisés par une fonction polynomiale. La fonction de coût associée est basée sur la norme ℓ_2 . Pour traiter des décalages plus importants une méthode fondée sur la distance de Wasserstein, issue de la théorie du transport optimal, a été introduite. Cette distance permet de mieux capter les déformations spectrales et assure une meilleure convexité du problème d’optimisation. Les résultats montrent que, pour des décalages faibles, les approches basées sur la norme ℓ_2 et sur la distance de Wasserstein sont équivalentes et supérieures à la méthode de base. En revanche, dans le cas de décalages plus marqués, seule l’approche par transport optimal conserve des performances fiables. Ce travail sur le transport optimal a été réalisé en collaboration avec Filip Elvander, Assistant Professor à l’Université Aalto (Finlande), et a donné lieu à une publication à la conférence EUSIPCO [24] sur l’estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux. Enfin, une dernière partie de l’étude a exploré l’estimation conjointe des ISRFs, des erreurs radiométriques et des décalages spectraux, en tenant compte des différentes régions du spectre. En effet, certaines zones peuvent être plus ou moins sensibles à un type particulier de défaut, ce qui justifie une estimation localisée et adaptée selon la bande spectrale considérée.

Le chapitre 4 propose une généralisation du problème inverse présenté précédemment, en l’étendant au cadre des problèmes inverses non-linéaires sous contrainte de parcimonie, dans le cas où la fonction non-linéaire est paramétrée. L’objectif de ce chapitre est double : s’appuyer sur les fondements théoriques de l’estimation parcimonieuse tout en intégrant des non-linéarités dans le modèle, et étudier le potentiel d’un préconditionnement des dictionnaires, notamment lorsqu’ils sont mal conditionnés. Différentes configurations de non-linéarités ont été explorées, qu’elles soient séparables ou non-séparables mais bijectives. Les approches développées ont été appliquées à plusieurs contextes concrets : le démixage spectral en imagerie hyperspectrale d’une part, et l’estimation des fonctions de réponse spectrale instrumentale (ISRFs) d’autre part. Ce travail est en cours de valorisation dans le cadre de la rédaction d’un article destiné à la revue IEEE Transactions on Signal Processing.

Le chapitre 4.6 conclut l’ensemble des travaux menés, aussi bien dans le cadre linéaire que non-linéaire, en synthétisant les résultats obtenus et en identifiant les principales limites des méthodes développées. Il ouvre également sur plusieurs perspectives de recherche, notamment autour de nouveaux modèles d’estimation des ISRFs évoluant dans le temps. Parmi les pistes envisagées figurent l’utilisation de modèles d’état, tels que les filtres de Kalman, ainsi que des architectures fondées sur l’apprentissage automatique, comme les réseaux de neurones récurrents de type LSTM ou les

auto-encodeurs. Une collaboration a d'ailleurs été initiée avec Ricardo Borsoi, chercheur CNRS à l'Université de Lorraine, autour de l'utilisation du machine learning pour l'estimation des ISRFs et l'étude de leurs variations dans une bande spectrale. Enfin, une autre voie prometteuse concerne le recours à des méthodes d'apprentissage profond adaptées aux situations fortement bruitées, telles que les autoencodeurs variationnels (VAE) ou les modèles de diffusion, qui pourraient offrir une meilleure robustesse dans des contextes où les approches classiques atteignent leurs limites.

1.3.2 Présentation des données utilisées

Les données utilisées dans ce manuscrit proviennent principalement de simulations, les missions MicroCarb et CO2M n'ayant pas encore été lancées au début de la rédaction. Nous présentons d'abord les spectres de référence (également appelés spectres théoriques), puis les réponses spectrales utilisées, ainsi que le procédé de génération des spectres mesurés.

Spectres de référence

Certains spectres de référence, aussi appelés spectres théoriques, utilisés dans cette étude ont été générés à l'aide du logiciel 4A/OP (Automatized Atmospheric Absorption Atlas) décrit dans [25]. Ce logiciel repose sur un modèle de transfert radiatif ligne par ligne à la fois rapide et précis, pouvant être intégré dans des chaînes de traitement opérationnelles incluant l'inversion de problèmes inverses [26]. Il a été sélectionné par le CNES comme modèle radiatif officiel et code de référence pour la mission MicroCarb [26]. Les profils atmosphériques utilisés proviennent de la base de données TIGR (Thermodynamical Initial Guess Retrieval), hébergée par le portail de données Aeris⁴. Un échantillon de cette base a été sélectionné pour la génération des spectres de référence dédiés à MicroCarb. Toutefois, les longueurs d'onde observées par la mission CO2M se situent en dehors des quatre bandes spectrales utilisées pour MicroCarb. Dans ce cas et comme pour d'autres instruments dont les longueurs d'onde diffèrent de celles de MicroCarb, les spectres de référence sont extraits de l'atlas solaire haute résolution fourni par Kurucz et al.⁵ [27].

Spectres mesurés et réponses spectrales

Les spectres mesurés sont obtenus en convoluant les spectres de référence avec les fonctions de réponse spectrale instrumentale (ISRFs). Des ISRFs typiques ont été mesurées ou simulées pour chaque instrument. Elles sont normalisées à une aire unitaire, puis convoluées avec les spectres de référence. Du bruit gaussien additif est ensuite ajouté afin de simuler le bruit radiométrique. Puis des modèles d'erreurs radiométriques et/ou spectraux sont utilisés pour simuler les différents défauts. Cette méthode de génération de données présente l'avantage de fournir des ISRFs de référence connues (ground truth), permettant ainsi d'évaluer la performance des différentes méthodes dans un cadre contrôlé. Les spectres de référence comportent en moyenne autour de $N_R = 628000$ points avec un pas spectral de $\Delta_R = 2.93 \times 10^{-5} nm$ pour la bande B1, $N_R = 300000$ points échantillonnés avec un pas spectral de $\Delta_R = 1.29 \times 10^{-4} nm$ pour la bande B2, $N_R = 360000$ points échantillonnés avec un pas spectral de $\Delta_R = 2.03 \times 10^{-4} nm$ pour la bande B3 et $N_R = 660000$ points échantillonnés avec un pas spectral de $\Delta_R = 8.07 \times 10^{-5} nm$ pour la bande B4 de MicroCarb et sont obtenus avec le logiciel 4A/OP. Le spectre de référence obtenu à partir de l'atlas de Kurucz comporte $N_R = 138000$ points sur la bande NIR (longueurs d'onde d'intérêts pour les données CO2M), avec un pas spectral de $\Delta_R = 2.89 \times 10^{-4} nm$. Ce pas est environ dix fois plus large que celui utilisé pour la bande B1 de MicroCarb, également située dans le NIR donnant un spectre de référence moins résolu.

Le Centre National d'Etudes Spatiales, Toulouse, France (CNES) a fourni un jeu de données simulées pour la mission MicroCarb contenant $N_\lambda = 1024$ ISRFs associées aux mesures spectrales dans les quatre différentes bandes de l'instrument. Pour la bande B1, deux mesures du spectres

4. Les données Aeris peuvent être récupérées à l'adresse suivante : <https://www.aeris-data.fr/en/projects/thermodynamical-initial-guess-retrieval-tigr/>

5. L'atlas solaire est accessible à l'adresse suivante : <http://kurucz.harvard.edu/sun/fluxatlas/>

sont séparées de $\Delta_s = 0.0103$ et la période d'échantillonnage des ISRFs est de l'ordre de $\Delta_I = 9.54 \times 10^{-4}nm$ en moyenne avec $N = 895$ échantillons. Pour la bande B2, deux mesures du spectres sont séparées de $\Delta_s = 0.0216$ et la période d'échantillonnage des ISRFs est de l'ordre de $\Delta_I = 0.002nm$ en moyenne avec $N = 885$ échantillons. Pour la bande B3, deux mesures du spectre sont séparées de $\Delta_s = 0.0274$ et la période d'échantillonnage des ISRFs est de l'ordre de $\Delta_I = 0.0026nm$ en moyenne avec $N = 884$ échantillons. Et finalement, pour la bande B4, deux mesures du spectres sont séparées de $\Delta_s = 0.0171$ et la période d'échantillonnage des ISRFs est de l'ordre de $\Delta_I = 0.0016nm$ en moyenne avec $N = 889$ échantillons. On peut noter que les ISRFs sont en moyenne 10 fois moins échantillonnées que les spectres de référence, ce qui peut avoir un impact au niveau de la modélisation. Des spectres correspondant à des observations de scènes non-uniformes sont simulées en utilisant des ISRFs asymétriques. En pratique, aucune information directe sur l'hétérogénéité d'une scène n'est disponible à partir des seuls spectres mesurés. Ce n'est qu'au moment de l'inversion, lors de l'estimation des ISRFs, que l'on peut détecter des signatures de non-uniformité par la modification des formes des raies et donc des ISRFs. Des détails supplémentaires sont disponibles dans [28].

L'entreprise Thales Alenia Space, Cannes, France a fourni un jeu de données simulées pour la mission CO2M contenant 2000 ISRFs sol et ISRFs vol associées à 2000 fibres simulées pour la bande NIR. Les ISRFs sol sont caractérisées lors de la campagne de mesure au sol alors que les ISRFs vol incluent les déplacements et le vieillissement de l'instrument, entre la caractérisation sol et l'acquisition d'image en vol. On dispose d'informations à la fois spatiales et spectrales à l'aide d'une grille de 11×11 ISRFs différentes. En fixant l'axe spatial, on obtient ainsi 11 ISRFs distinctes le long de l'axe spectral. Pour identifier l'ISRF associée aux longueurs d'onde nominales restantes, notées λ_l , une interpolation linéaire a été réalisée entre deux longueurs d'onde nominales connues, notées λ_a et λ_b . L'ISRF interpolée est alors définie par :

$$I_l = \frac{\lambda_l - \lambda_a}{\lambda_b - \lambda_a} I_b + \frac{\lambda_b - \lambda_l}{\lambda_b - \lambda_a} I_a \quad (1.1)$$

Nous obtenons ainsi pour chacune des 2000 fibres, 1024 ISRFs au total le long de l'axe spectrales. Les spectres mesurés comportent donc 1024 points, espacés d'un pas spectral de $\Delta_s = 0.0254nm$ en moyenne. La période d'échantillonnage des ISRFs est de l'ordre de $\Delta_I = 0.001nm$ en moyenne avec $N = 801$ échantillons.

1.3.3 Publications

Communications - sans comité de lecture

1. *Estimating Instrument Spectral Response Functions Using Sparse Approximation*, workshop on Deep learning, image analysis, inverse problems, and optimization : Workshop DIPOpt, Lyon, France, Nov. 27-30, 2023.
2. *Estimating Spectral Responses of Spectrometers by solving a Nonlinear Inverse Problem* workshop on Statistical Learning for Signal and Image Processing : Workshop SLSIP, Porquerolles, France, May. 13-17, 2024.

Conférences à comité de relecture

1. Jihanne El Haouari, Jean-Yves Tourneret, Herwig Wendt, Christelle Pittet, Jean-Michel Gaucel, *Approximation et Estimation de Réponses Spectrales d'Instruments*, XXIXème Colloque Francophone de Traitement du Signal et des Images (GRETSI), Grenoble, France, August 28- September 1, 2023.
2. Jihanne El Haouari, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tourneret and Herwig Wendt, *Estimation of Instrument Spectral Response Functions using Sparse Representation in a Dictionary*, Proc. IEEE Int. Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS), Athens, Greece, July 7-12, 2024.

3. Jihanne El Haouari, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tourneret and Herwig Wendt, *Estimation of Instrument Spectral Response Functions in Presence of Radiometric Errors*, Proc. 32nd European Signal Processing Conference (EUSIPCO), Lyon, France, Aug. 26-30, 2024.
4. Jihanne El Haouari, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tourneret and Herwig Wendt, *On-ground and in-flight estimation of instrument spectral responses in the presence of measurement errors*, International Conference on Space Optics (ICSO2024), Antibes Juan-les-Pins, Oct. 21-25, 2024.
5. Jihanne El Haouari, Marcus Carlsson, Jean-Yves Tourneret, Herwig Wendt, Jean-Michel Gaucel and Christelle Pittet, *Estimating Instrument Spectral Response Functions Using Sparse Representations and Quadratic Envelopes*, International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP), Hyderabad, India, Apr. 06-11, 2025.
6. Jihanne El Haouari, Filip Elvander, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tourneret and Herwig Wendt, *Joint ISRF and Spectral Shift Estimation for Spectrometer Calibration using Optimal Transport*, Proc. 33rd European Signal Processing Conference (EUSIPCO), Palermo, Italy, Sept. 8-12, 2025.

Article de journal

1. Jihanne El Haouari, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tourneret and Herwig Wendt, *In-Flight Estimation of Instrument Spectral Response Functions Using Sparse Representations*, Atmospheric Measurement Techniques, 2024.
2. Jihanne El Haouari, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tourneret and Herwig Wendt, *Solving parametric nonlinear inverse problems through sparse modeling*, Transaction in Signal Processing, 2025, en préparation

Chapitre 2

Modélisation et estimation des réponses spectrales

La précision des mesures spectrales constitue un enjeu central pour les missions spatiales dédiées à l'étude de l'atmosphère. L'un des éléments clé de cette précision réside dans la connaissance fine des caractéristiques instrumentales, en particulier des fonctions de réponse spectrale des instruments (Instrument Spectral Response Functions, ou ISRFs). Celles-ci décrivent, pour chaque pixel l du détecteur, la manière dont l'instrument transforme une radiance incidente en signal mesuré, en tenant compte des contributions de la chaîne optique (fente, télescope, réseau de dispersion) et du détecteur lui-même. Les ISRFs sont d'abord calibrées au sol, mais leur forme peut varier en vol sous l'effet de multiples facteurs : chocs mécaniques liés au lancement, variations thermiques en orbite, ou encore sensibilités propres à l'instrument, comme celles obtenues avec la scène observée par l'instrument dans le cas de la mission MicroCarb. Ces variations rendent nécessaire une réévaluation régulière des ISRFs, ce qui est l'objectif de ce chapitre.

Dans une première partie, nous posons les fondements du modèle proposé pour l'estimation des ISRFs. Seule l'information spectrale est considérée, de sorte que chaque pixel l est associé à une longueur d'onde spécifique λ_l et une ISRF est alors définie pour chaque longueur d'onde. Dans un premier temps, nous étudierons différentes modélisations de ces fonctions et proposerons une alternative permettant de minimiser l'erreur afin d'atteindre les performances de mission (section 2.1). Le modèle proposé repose sur la représentation parcimonieuse des réponses spectrales dans un dictionnaire adapté. Il vise à dépasser les limites des approches paramétriques traditionnellement utilisées, qui peinent à satisfaire les critères de précision exigés. Le modèle sera comparé aux méthodes existantes de la littérature, tant sur le plan de la précision que de la capacité de généralisation. Puis, une méthode de résolution de problèmes inverses sera utilisée pour estimer ces réponses en vol à partir de spectres mesurés et de spectres théoriques (ou spectres de référence) (section 2.2). Les résultats obtenus seront présentés dans la section 2.3. Finalement, une attention particulière sera portée à l'analyse des paramètres utilisés et à l'étude de la robustesse de l'approche face à certaines incertitudes instrumentales et variations des conditions d'observation.

2.1 Modélisation des réponses spectrales

Les ISRFs sont tout d'abord mesurées au sol lors de campagnes de calibration. L'instrument est alors directement éclairé avec un laser accordable. Pour chaque pixel, on effectue un scan en longueur d'onde stable et connue avec un pas d'échantillonnage suffisamment fin pour construire la réponse de chaque pixel pour chaque longueur d'onde. On obtient ainsi une courbe appelée ILS (pour "Instrument Line Shape") avec en abscisse l'indice du pixel et en ordonnée la réponse du pixel. L'ISRF d'un pixel est ensuite reconstruite à partir de toutes les ILS à toutes les longueurs d'onde, avec en

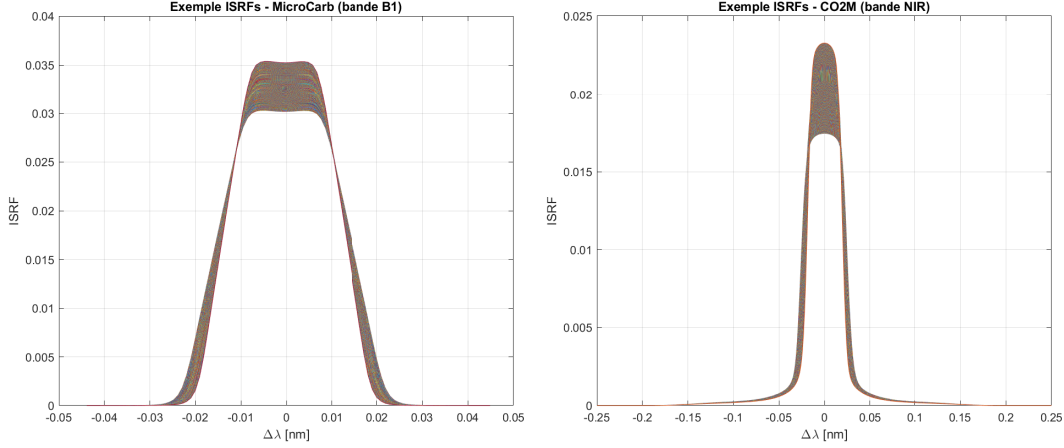


FIGURE 2.1 – Exemples d'ISRFs pour les missions MicroCarb et CO2M.

abscisse la longueur d'onde et en ordonnée la réponse d'un même pixel à ces différentes longueurs d'onde. On peut produire des ISRFs de scènes de différents types en éclairant l'instrument avec le laser de manière uniforme ou en ajoutant des masques qui obturent une partie de l'instrument pour simuler des scènes non-uniformes. La figure 2.1 illustre des exemples d'ISRFs typiques notamment dans le cadre des missions MicroCarb et CO2M.

Il peut être compliqué de construire de manière analytique un modèle des ISRFs en utilisant un petit nombre de paramètres, car cela demanderait d'incorporer un nombre important de contributions associées à l'optique de l'instruments (fente, miroirs, séparateur ou éléments dispersifs) au détecteur ou au mode d'acquisitions. L'approximation des ISRFs consiste à approcher ces fonctions en utilisant un modèle mathématique avec un nombre très petit de paramètres tel que l'erreur de reconstruction entre l'ISRF au pixel l notée I_l et son estimation \hat{I}_l , définie par

$$E_l = \frac{\sum_{n=-N/2}^{N/2} |I_l(n\Delta_I) - \hat{I}_l(n\Delta_I)|}{\sum_{n=-N/2}^{N/2} I_l(n\Delta_I)}, \quad (2.1)$$

soit la plus petite possible. La précision attendue pour MicroCarb est une erreur inférieure à 1% pour chaque longueur d'onde.

2.1.1 Modélisation paramétrique

Les modèles paramétriques présentent l'avantage d'être simples à mettre en œuvre, tout en permettant de modéliser une fonction à l'aide d'un nombre réduit de paramètres. Dans la littérature, des approches paramétriques telles que les modèles gaussiens ou les gaussiennes généralisées — également appelées super-gaussiennes [17] — ont été largement utilisés pour approcher les ISRFs. Le modèle gaussien suppose que l'ISRF à la longueur d'onde λ_l est définie par :

$$I_l(\lambda; \beta_G) = A_G \exp\left(-\frac{(\lambda - \mu_G)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (2.2)$$

où on rappelle que λ_l est la longueur d'onde centrale de l'ISRF (correspondant à la position relative $\Delta\lambda = 0$ dans les figures 2.1). Cette ISRF dépend donc de trois paramètres qui sont regroupés dans le vecteur $\beta_G = (A_G, \mu_G, \sigma^2)^T$ qui doit être estimé. Le modèle super gaussien suppose que l'ISRF

est définie par (avec les notations de [17]) :

$$I_l(\lambda; \beta_{\text{SG}}) = A_{\text{SG}} \exp\left(-\left|\frac{\lambda - \mu_{\text{SG}}}{w}\right|^k\right), \quad (2.3)$$

où $\beta_{\text{SG}} = (A_{\text{SG}}, \mu_{\text{SG}}, w, k)^T$ est le vecteur paramètre à estimer. Ce deuxième modèle est plus général que le modèle gaussien, qui correspond au cas particulier où $w = \sqrt{2}\sigma$ et $k = 2$. Le paramètre w est un paramètre d'échelle tandis que k est un paramètre de forme qui permet d'obtenir des ISRFs plus ou moins piquées ou aplaties. On notera que les modèles (2.2) et (2.3) diffèrent légèrement de ceux présentés dans [17] puisque des paramètres supplémentaires (moyennes μ_{G} et μ_{SG} et amplitudes A_{G} et A_{SG}) sont considérés. Il est également possible d'étendre les deux modèles en tenant compte de possibles asymétries. Par exemple, le modèle super-gaussien asymétrique est défini par :

$$I_l(\lambda, \beta_{\text{SG}_A}) = A_{\text{SG}_A} \exp\left(-\left|\frac{\lambda - \mu_{\text{SG}_A}}{w_{\text{SG}_A} + \text{signe}(\lambda - \mu_{\text{SG}_A})aw_{\text{SG}_A}}\right|^{k_{\text{SG}_A}}\right), \quad (2.4)$$

où on veut estimer $\beta_{\text{SG}_A} = [A_{\text{SG}_A}, \mu_{\text{SG}_A}, w_{\text{SG}_A}, aw_{\text{SG}_A}, k_{\text{SG}_A}]$. Une autre approche consisterait à généraliser cette formulation à la somme de plusieurs super-gaussiennes, chacune ayant ses propres paramètres à estimer :

$$I_l(\lambda; \beta_{2\text{SG}}) = \sum_i A_{2\text{SG}_i} \exp\left(-\left|\frac{\lambda - \mu_{2\text{SG}_i}}{w_i}\right|^{k_i}\right), \quad (2.5)$$

où $\beta_{2\text{SG}} = (A_{2\text{SG}_i}, \mu_{2\text{SG}_i}, w_i, k_i, A_{2\text{SG}_i})^T$ est le vecteur paramètre à estimer. A notre connaissance, la modélisation des ISRFs par une somme de super-gaussiennes n'a pas été formellement introduite dans la littérature, mais a été utilisée dans [20], dans le cas particulier de la somme de deux super-gaussiennes.

D'autres modèles ont pu être utilisés pour différentes missions telles que OMI [29] et TROPOMI [30]. En effet, pour l'instrument OMI, les ISRFs ont pu être ajustées à l'aide d'une combinaison d'une gaussienne standard et d'une fonction à sommet plat (super-gaussienne (2.3) avec $k = 4$), définie sur la grille de longueurs d'onde λ_l :

$$I_l(\lambda, ; \beta_{\text{OMI}}) = A_0 \exp\left[-\left(\frac{\lambda - \lambda_0}{w_0}\right)^2\right] + A_1 \exp\left[-\left(\frac{\lambda - \lambda_1}{w_1}\right)^4\right], \quad (2.6)$$

où le vecteur à estimer est $\beta_{\text{OMI}} = (A_0, \lambda_0, w_0, A_1, \lambda_1, w_1)^T$. Dans ce vecteur, A_0 et A_1 sont les amplitudes relatives des composantes gaussienne standard et flat-top, λ_0 et λ_1 sont leurs positions centrales respectives, et w_0 et w_1 déterminent leur largeur. Pour la bande SWIR de l'instrument TROPOMI [30], les ISRFs sont modélisées par une somme pondérée de deux composantes représentant le pic central et les ailes spectrales :

$$I_l(\lambda; \beta_{\text{TROPOMI}}) = (1 - \eta)P(\lambda; d, s, w, \lambda_0) + \eta P_7(\lambda; \gamma, m, \lambda_0), \quad (2.7)$$

où $\beta_{\text{TROPOMI}} = (d, s, w, \eta, \gamma, m, \lambda_0)^T$. Dans cette équation, P est la fonction de pic, obtenue par convolution d'une distribution skew-normale N_2 avec une distribution uniforme de largeur w et P_7 est une densité d'une loi de Pearson de type VII utilisée pour modéliser les ailes de l'ISRF. Le paramètre η représente la proportion de la contribution des ailes ($0 \leq \eta \leq 1$), et λ_0 est la position centrale de l'ISRF. La distribution skew-normale centrée est définie par :

$$N_2(\lambda; d, s, \lambda_0) = \left[1 + \text{erf}\left(\frac{s\xi_0}{\sqrt{2}}\right)\right] \exp\left(-\frac{1}{2}\xi_0^2\right), \quad (2.8)$$

avec :

$$\xi_0 = \frac{\sqrt{1 - \delta^2}}{d}(\lambda - \lambda_0) + \delta, \quad \delta = \frac{\sqrt{2}s}{\sqrt{\pi(1 + s^2)}}. \quad (2.9)$$

La densité d'une loi de Pearson de type VII est définie par :

$$P_7(\lambda; \gamma, m, c_0) = \frac{\Gamma(m)}{\gamma\sqrt{\pi}\Gamma(m-1/2)} \left(1 + \frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{\gamma^2}\right)^{-m}, \quad (2.10)$$

où $\gamma > 0$ contrôle la largeur et $m > 1/2$ la décroissance des ailes.

Finalement, d'autres modèles paramétriques plus proches de la physique ont été utilisés pour modéliser chaque partie de l'instrument, i.e. le télescope, la fente rectangulaire et le spectromètre et un détecteur 2D (axe ACT et axe spectral ALT). On peut modéliser la fente en utilisant une fonction rectangle avec la largeur comme paramètre à estimer, la réponse du télescope, modélisée en utilisant une super-gaussienne et la réponse du spectromètre avec une seconde super-gaussienne. La fonction de réponse spectrale est alors obtenue en effectuant la convolution de ces trois termes :

$$I_l(\lambda, \boldsymbol{\beta}_{\text{MI}}) = \text{rect}_T(\lambda) * A_{\text{SG}_1} \exp\left(-\left|\frac{\lambda - \lambda_l - \mu_{\text{SG}_1}}{w_1}\right|^{k_1}\right) * A_{\text{SG}_2} \exp\left(-\left|\frac{\lambda - \lambda_l - \mu_{\text{SG}_2}}{w_2}\right|^{k_2}\right), \quad (2.11)$$

où le vecteur à estimer est $\boldsymbol{\beta}_{\text{MI}} = [T, A_{\text{SG}_1}, \mu_{\text{SG}_1}, w_1, k_1, A_{\text{SG}_2}, \mu_{\text{SG}_2}, w_2, k_2]$ et la fonction rect est définie par :

$$\text{rect}_T(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{si } |\lambda| \leq \frac{T}{2}, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.12)$$

La méthode d'estimation largement utilisée pour estimer les paramètres $\boldsymbol{\beta}$ des ISRFs est la méthode des moindres carrés qui consiste à minimiser par rapport au vecteur $\boldsymbol{\beta}$ la fonction de coût suivante :

$$R_{\text{MI}}(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{n=-N/2}^{N/2} |I_l(n\Delta_I) - I_l(n\Delta_I, \boldsymbol{\beta})|^2. \quad (2.13)$$

Une dernière modélisation des ISRFs consiste à utiliser des fonctions splines. Les fonctions splines sont des outils d'interpolation souples et réguliers, largement utilisés pour approcher des fonctions à partir de données discrètes [31]. Elles bénéficient de méthodes d'estimation efficaces, notamment lorsqu'on utilise des splines cubiques, qui offrent un bon compromis entre simplicité et qualité d'ajustement. Dans ce contexte, on cherche à approcher la fonction $I(\lambda)$ par une fonction f appartenant à la classe des fonctions deux fois dérivables, en minimisant le critère suivant :

$$C(f) = \sum_{j=1}^J [I(\lambda_j) - f(\lambda_j)]^2 + \gamma \int [f''(\lambda)]^2 d\lambda, \quad (2.14)$$

où les λ_j sont les points d'échantillonnage (ou nœuds), $\gamma > 0$ est un paramètre de régularisation contrôlant la tension de la spline, et le terme $\int [f''(\lambda)]^2 d\lambda$ pénalise les courbures excessives, assurant ainsi une solution suffisamment régulière. Un choix classique pour la fonction f est une fonction polynomiale par morceaux de degré 3, définie sur chaque intervalle $[\lambda_i, \lambda_{i+1}]$ par :

$$f(\lambda) = f_i(\lambda) = a_i(\lambda - \lambda_i)^3 + b_i(\lambda - \lambda_i)^2 + c_i(\lambda - \lambda_i) + d_i, \quad \forall \lambda \in [\lambda_i, \lambda_{i+1}], \quad (2.15)$$

où a_i, b_i, c_i et d_i sont des coefficients constants propres à chaque sous-intervalle. Les points $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_J$ constituent les nœuds de l'interpolation. Au total, $4(J-1)$ coefficients sont à estimer pour définir entièrement la fonction spline sur l'ensemble du domaine.

Les résultats obtenus sont illustrés dans la figure 2.2 pour les quatre bandes spectrales de Micro-Carb, et dans la figure 2.3 pour quatre fibres représentatives de l'instrument CO2M. Le tableau 2.1 complète cette analyse en présentant, pour chaque instrument, l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs associée à chaque modèle paramétrique considéré.

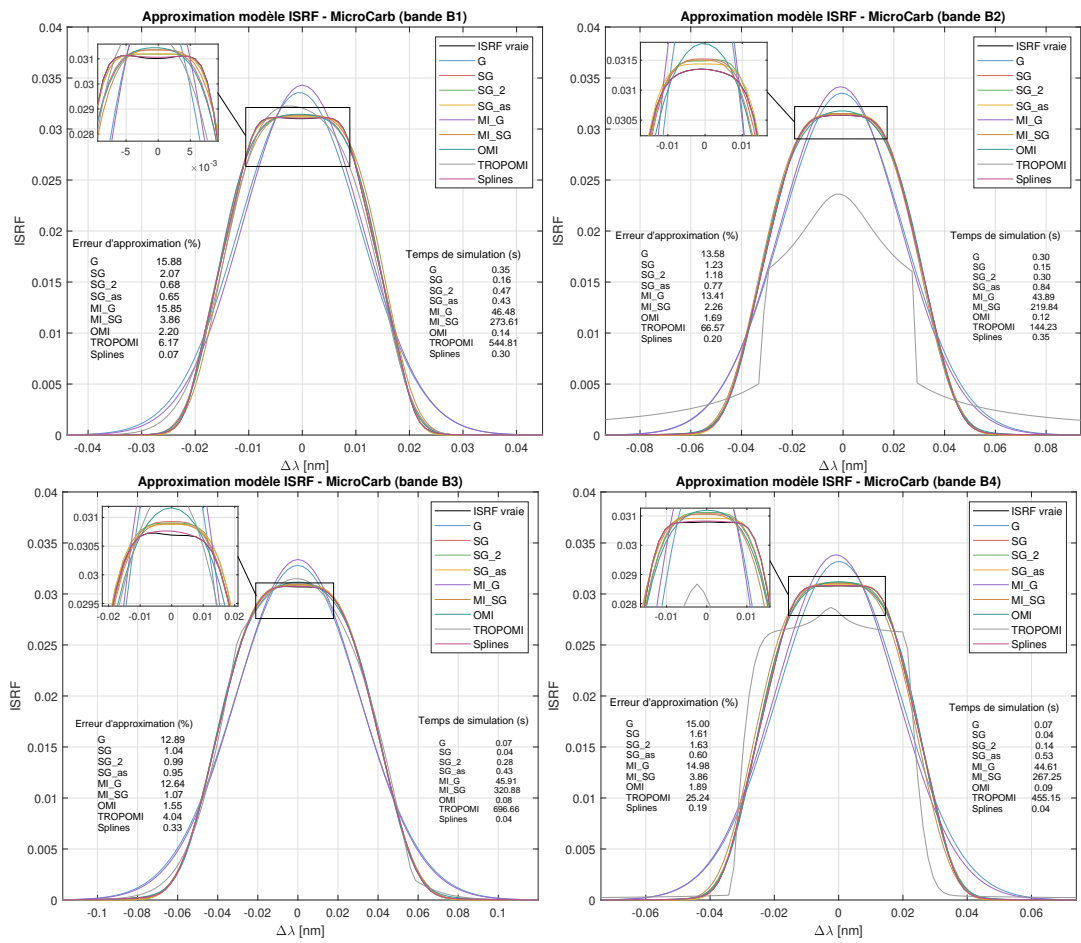


FIGURE 2.2 – Approximation des ISRFs associées à l'instrument MicroCarb (modèles paramétriques Gauss (S), Super-Gauss (SG), somme de deux super-gaussiennes (SG_2), super-gaussienne asymétrique (SG_as), modèle instrumental avec gaussiennes (MI_G), modèle instrumental avec super-gaussiennes (MI_SG), modèle ISRF OMI [29], modèle ISRF TROPOMI [30], paramétrisation avec splines.

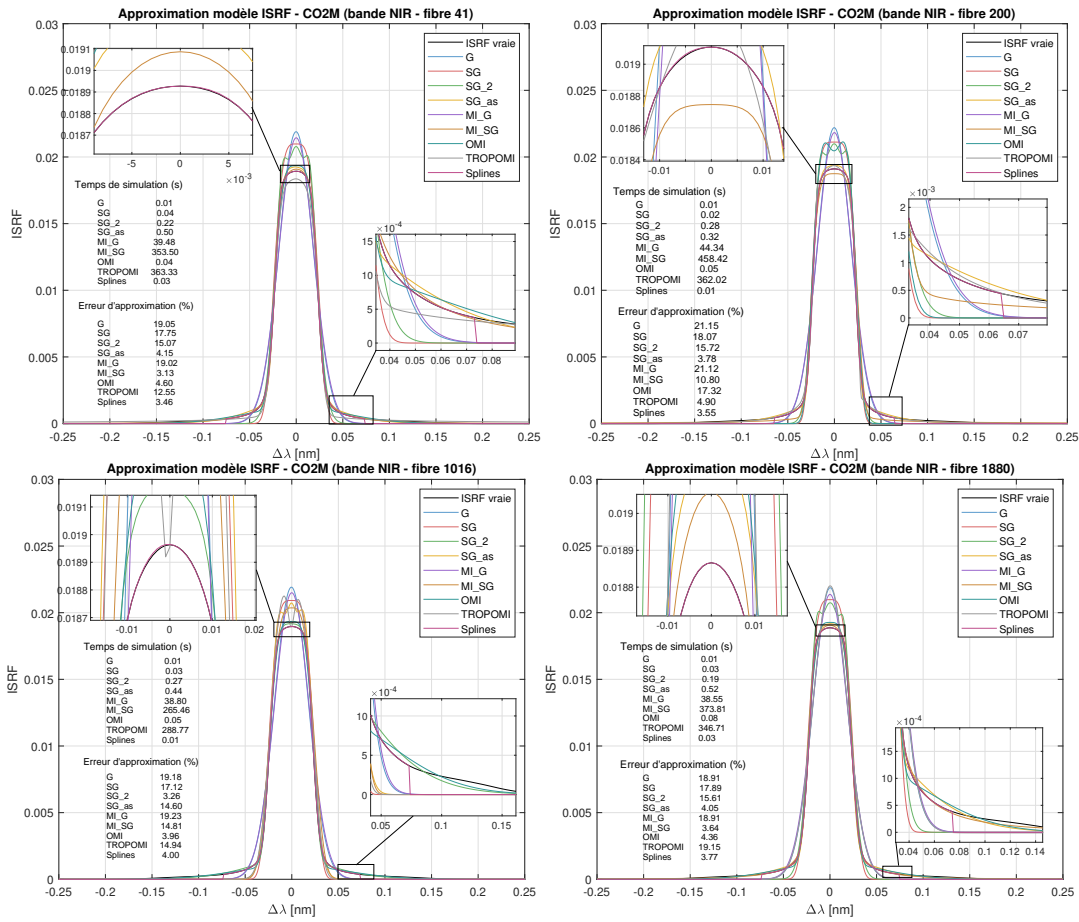


FIGURE 2.3 – Approximation des ISRFs associées à l'instrument CO2M (modèles paramétriques Gauss (S), Super-Gauss (SG), somme de deux super-gaussiennes (SG_2), super-gaussienne asymétrique (SG_as), modèle instrumental avec gaussiennes (MI_G), modèle instrumental avec super-gaussiennes (MI_SG), modèle ISRF OMI [29], modèle ISRF TROPOMI [30], paramétrisation avec splines.

TABLE 2.1 – Moyenne des erreurs d’approximation des ISRFs pour les instruments MicroCarb et CO2M en utilisant les modèles paramétriques (Gauss (S), Super-Gauss (SG), somme de deux super-gaussiennes (SG_2), super-gaussienne asymétrique (SG_as), modèle instrumental avec gaussiennes (MI_G), modèle instrumental avec super-gaussiennes (MI_SG), modèle ISRF OMI [29], modèle ISRF TROPOMI [30], splines) — en bleu : erreurs d’estimation des ISRFs sous le critère de mission.

		Erreur moyenne d’estimation des ISRFs (%)					
Intrument	Bande	G	SG	SG_2	SG_as	OMI	Splines
MicroCarb	B1	15.86	2.03	1.60	0.75	2.21	0.08
	B2	13.54	1.20	1.03	0.98	1.68	0.18
	B3	12.87	1.04	1.01	0.96	1.55	0.31
	B4	14.93	1.57	1.30	0.80	1.87	0.21
CO2M	fibre 43	18.59	17.61	13.56	7.03	6.25	3.20
	fibre 200	21.11	18.10	15.39	8.32	13.46	3.28
	fibre 1016	18.60	16.94	13.48	5.50	5.13	3.69
	fibre 1880	19.37	18.29	13.91	6.93	5.26	3.48

On observe que les performances des modèles dépendent à la fois de la forme des ISRFs à estimer (plus ou moins gaussiennes), mais également des bandes ou fibres analysées. Pour MicroCarb, les approximations gaussiennes — qu’elles soient issues du modèle analytique ou non — ainsi que la modélisation TROPOMI, présentent les plus faibles performances. Dans certains cas, comme pour la bande B2, l’approximation TROPOMI s’écarte fortement de la forme réelle de l’ISRF. À l’inverse, de meilleurs résultats sont obtenus avec les modèles à super-gaussienne simple, la somme de deux super-gaussiennes et la modélisation OMI. Les meilleurs résultats sont atteints avec les fonctions splines (qui surpassent tous les autres modèles) et les super-gaussiennes asymétriques, qui permettent d’obtenir des erreurs d’estimation inférieures à 1% sur l’ensemble des bandes. Pour l’instrument CO2M, les résultats sont légèrement différents. Les modèles gaussien et TROPOMI restent les moins performants, mais cette fois-ci, les modèles OMI, super-gaussienne et somme de super-gaussiennes ne parviennent pas non plus à réduire significativement l’erreur. Les modèles qui donnent les meilleures performances globales sont la super-gaussienne asymétrique, la super-gaussienne dérivée du modèle physique et les splines. Cependant, aucun des modèles paramétriques testés ne permet ici de descendre sous le seuil des 1% d’erreur, ce qui souligne la complexité de l’instrument CO2M et la nécessité potentielle de modèles plus flexibles ou hybrides.

En termes de temps de calcul, les méthodes les plus coûteuses sont celles basées sur le modèle physique de l’instrument (convolution d’une fonction rectangulaire avec deux gaussiennes ou super-gaussiennes), ainsi que le modèle TROPOMI. Cette complexité s’explique principalement par l’utilisation explicite de convolutions numériques et par le nombre élevé de paramètres à estimer. Viennent ensuite les méthodes basées sur la super-gaussienne asymétrique et la somme de deux super-gaussiennes, dont la complexité est également accrue en raison du nombre de paramètres à estimer, mais reste modérée et compatible avec une utilisation pratique. Enfin, les approches les plus rapides sont les modèles gaussiens, les super-gaussiennes simples, le modèle OMI, et les splines, ces dernières bénéficiant à la fois d’une bonne efficacité numérique et d’une grande flexibilité.

2.1.2 Représentation parcimonieuse des ISRFs

L’ISRF peut être difficile à modéliser analytiquement par un vecteur de paramètres de dimension faible car elle intègre un nombre important de “contributeurs” associés aux éléments optiques de l’instrument (fente, miroir, lentille, séparatrice, élément disperser) au détecteur et au mode d’acquisition. Les modèles gaussiens et super-gaussiens parviennent difficilement à prendre en compte les différentes formes d’ISRFs que l’on peut observer en pratique, même lorsque des asymétries sont introduites ou que la complexité du modèle est augmentée. De manière générale, ces modèles manquent de flexibilité pour représenter de manière précise la variabilité structurelle importante

des ISRFs rencontrées dans des cas d'usage réels. Ce constat nous a conduit à proposer une nouvelle méthode visant à approcher et estimer avec une grande précision les ISRFs des spectromètres. Dans cette optique, nous explorons l'utilisation de représentations parcimonieuses (sparse representations) dans une base (ou dictionnaire) d'atomes bien choisis. Les modèles fondés sur la parcimonie et l'apprentissage de dictionnaire ont connu un succès notable dans de nombreuses applications du traitement du signal et de l'image [32]. Parmi ces applications figurent notamment le débruitage, la classification et la reconstruction d'images, l'échantillonnage compressé (compressed sensing), ou encore la réduction de dimension. Ces techniques ont démontré leur capacité à modéliser une grande variété de signaux complexes [33, 34]. Cependant, à notre connaissance, leur utilisation dans le contexte des spectromètres, de la modélisation des ISRFs ou de l'estimation des paramètres instrumentaux n'a jamais été rapportée. C'est précisément l'objectif de cette partie.

Représentation des ISRFs et construction du dictionnaire

Les représentations parcimonieuses consistent à exprimer un signal donné comme une combinaison linéaire d'un petit nombre d'éléments issus d'un ensemble de motifs de référence, appelés atomes, formant un dictionnaire. Nous proposons ici de décomposer l'ISRF dans un dictionnaire d'atomes $\Phi \in \mathbb{R}^{(N+1) \times N_D}$, où $N + 1$ correspond au nombre d'échantillons de l'ISRF et N_D à la taille du dictionnaire, i.e. au nombre total d'atomes du dictionnaire. En vectorisant l'ISRF avec $\mathbf{I}_l \triangleq [I_l(-\frac{N}{2}\Delta_I), \dots, I_l(\frac{N}{2}\Delta_I)]^T \in \mathbb{R}^{N+1}$, on obtient l'équation suivante :

$$\mathbf{I}_l \approx \mathbf{I}_l^K = \Phi \boldsymbol{\alpha}_l = \sum_{k=1}^K \Phi_{\gamma_k} \alpha_{l,k}, \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (2.16)$$

où Φ_{γ_k} est le γ_k -ième atome sélectionné, i.e. la γ_k -ième colonne du dictionnaire Φ et $\alpha_{l,k}$ est le k -ième coefficient non nul du vecteur parcimonieux $\boldsymbol{\alpha}_l = [\alpha_{l,1}, \dots, \alpha_{l,K}]^T \in \mathbb{R}^{N_D}$. Le dictionnaire est construit de manière à ce que ses atomes (c'est-à-dire ses colonnes) permettent une représentation efficace du signal. Plusieurs méthodes ont été proposées dans la littérature pour construire un tel dictionnaire. Ces approches reposent notamment sur l'apprentissage probabiliste, le regroupement (clustering), la quantification vectorielle ou encore l'inférence bayésienne [34]. L'apprentissage du dictionnaire repose généralement sur une structure d'optimisation en deux étapes. La première consiste en une phase de codage parcimonieux, visant à déterminer le vecteur parcimonieux $\boldsymbol{\alpha}_l$ qui minimise la fonction objectif $\|\mathbf{I}_l - \Phi \boldsymbol{\alpha}_l\|_2^2$ pour un dictionnaire Φ fixé. La seconde étape correspond à une mise à jour du dictionnaire, au cours de laquelle Φ est ajusté en considérant $\boldsymbol{\alpha}_l$ comme fixé. Selon les applications, cette mise à jour du dictionnaire peut être réalisée à l'aide d'une solution analytique, ou obtenue à l'aide d'un algorithme de descente de gradient, ou à partir de données de référence (ground truth).

Dans cette section, différentes approches de construction du dictionnaire Φ sont étudiées. La première méthode consiste à construire Φ à partir des N_D vecteurs singuliers associés aux plus grandes valeurs singulières issues de la décomposition en valeurs singulières (SVD) d'une matrice formée d'exemples représentatifs d'ISRFs. Cette méthode est décrite dans l'algorithme 2 de l'annexe A. La seconde méthode repose sur l'algorithme K-SVD proposé dans [35], considéré comme une méthode de référence pour l'apprentissage de dictionnaires. Cet algorithme, rappelé dans l'algorithme 5 de l'annexe A, est une généralisation de l'algorithme des K-means. Il met à jour les colonnes du dictionnaire une à une, de manière séquentielle, en réalisant K décompositions en valeurs singulières sur une matrice d'erreur appropriée. Notons que l'utilisation de ces deux méthodes, SVD et K-SVD, permettent d'obtenir des dictionnaires orthonormaux. D'autres types de dictionnaires ont également été utilisés dans la littérature, notamment les dictionnaires d'ondelettes (e.g., Haar, Gabor) [36, 37], ainsi que des dictionnaires constitués d'atomes gaussiens ou super-gaussiens. Enfin, un dernier type de dictionnaire utilisé ici, appelé dictionnaire de type Dirac, est construit à partir d'exemples simulés d'ISRFs de type impulsion centrée (Dirac) positionnées à différentes longueurs d'onde. Ce dictionnaire sert de référence simple mais illustrative pour la représentation des ISRFs.

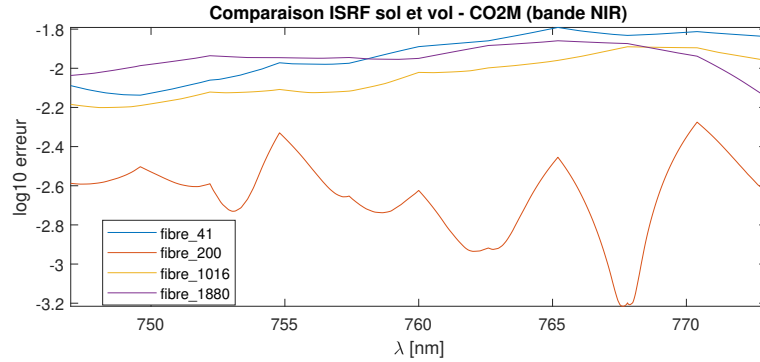


FIGURE 2.4 – Illustration des variations entre les ISRFs simulées au sol et celles en vol pour l’instrument CO2M pour chacune des quatre fibres sélectionnées.

Notons que pour l’instrument CO2M, deux jeux de données sont disponibles : ISRF sol (mesures effectuées au sol lors de la phase de calibration) et ISRF vol (mesures simulées ou obtenues en conditions de vol). Ces deux jeux de données prennent en compte des différences instrumentales, notamment liées aux déplacements optiques ou au vieillissement de l’instrument entre la calibration au sol et l’utilisation en orbite. La figure 2.4 illustre ces écarts à travers l’erreur définie dans l’équation (2.1). On observe que cette erreur varie selon les fibres considérées. Elle est la plus importante pour la fibre 41, avec une erreur moyenne supérieure à 1%, tandis que la fibre 200 présente les plus faibles écarts. Dans ce contexte, la construction des dictionnaires SVD et K-SVD pour l’instrument CO2M est réalisée à partir des ISRFs sol, tandis que les spectres mesurés utilisés dans les simulations sont générés à partir des ISRFs vol. Cette stratégie permet d’évaluer la robustesse de l’estimation face aux variations entre calibration et conditions réelles. Concernant les ISRFs de MicroCarb, un sous-ensemble de 103 ISRFs est extrait à partir du jeu complet de 1024 ISRFs pour la construction du dictionnaire, soit environ 10% des données disponibles.

La figure 2.5 illustre les premiers atomes des dictionnaires construits à l’aide des méthodes SVD et K-SVD, pour la bande B1 de MicroCarb (deux figures en haut) et la fibre 41 de CO2M (deux figures en bas). Ces dictionnaires présentent des structures similaires, en particulier pour les deux premiers atomes, qui correspondent aux vecteurs singuliers associés aux plus grandes valeurs propres. Le premier atome peut être interprété comme une approximation moyenne de l’ensemble des ISRFs utilisés pour l’apprentissage, tandis que le deuxième reflète une correction des largeurs des ISRFs en fonction de la longueur d’onde, comme observé dans la figure 2.1. Les autres atomes (d’ordres ≥ 2) bien que légèrement différents entre SVD et K-SVD, conservent des formes globalement proches. La figure 2.6 montre des atomes tirés aléatoirement des dictionnaires d’ondelettes : Gabor (1ère figure) et Haar (2-ième figure), et des atomes provenant des dictionnaires de gaussiennes (3-ième figure) et de super-gaussiennes (4-ième figure). Enfin, la dernière ligne représente des exemples d’atomes issus du dictionnaire de Dirac, où chaque atome correspond à une ISRF centrée à une longueur d’onde différente.

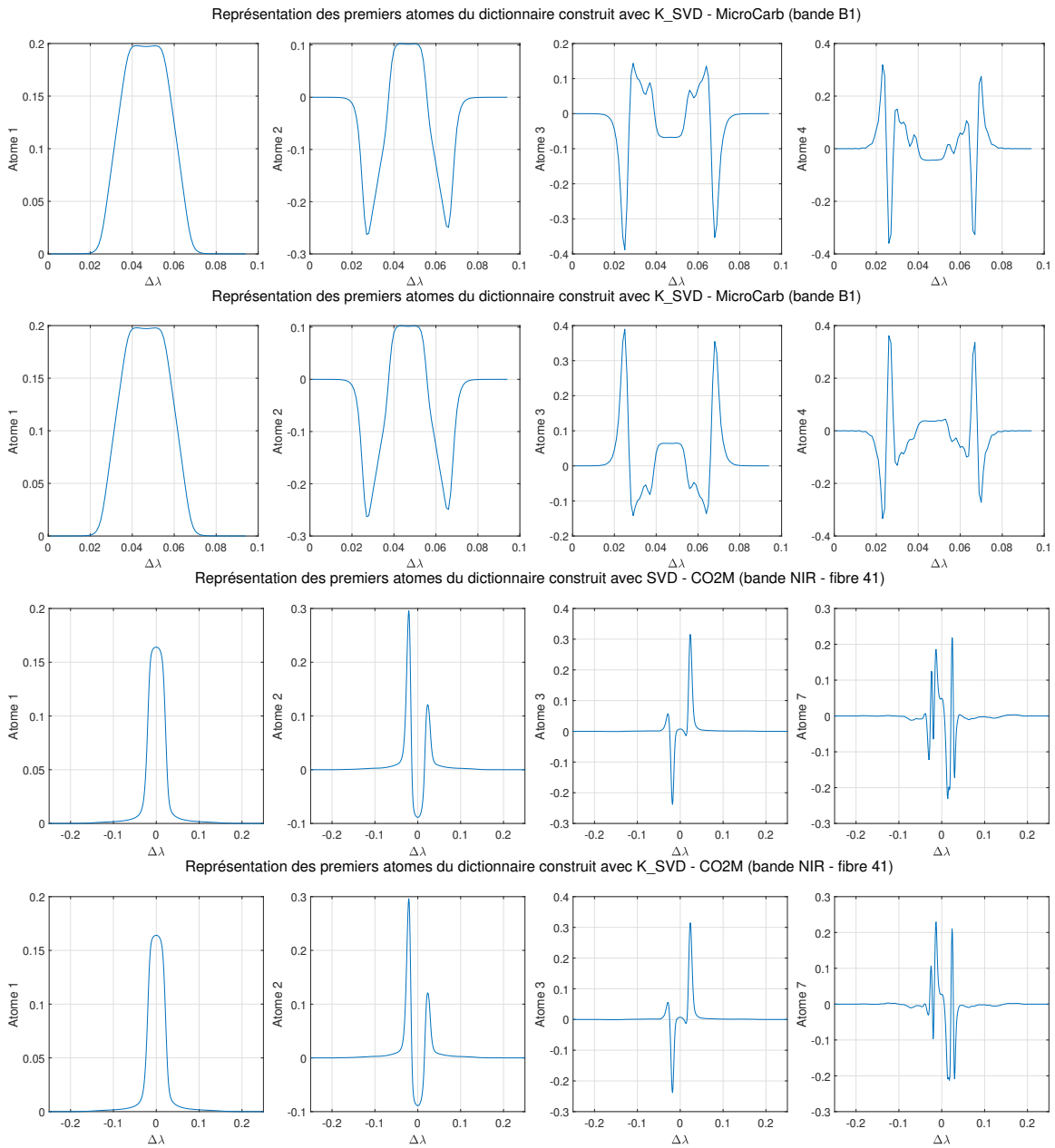


FIGURE 2.5 – Représentation des différents dictionnaires utilisés (SVD ou K-SVD avec les données Microcarb ou CO2M et le dictionnaire de Dirac) pour approcher les ISRFs.

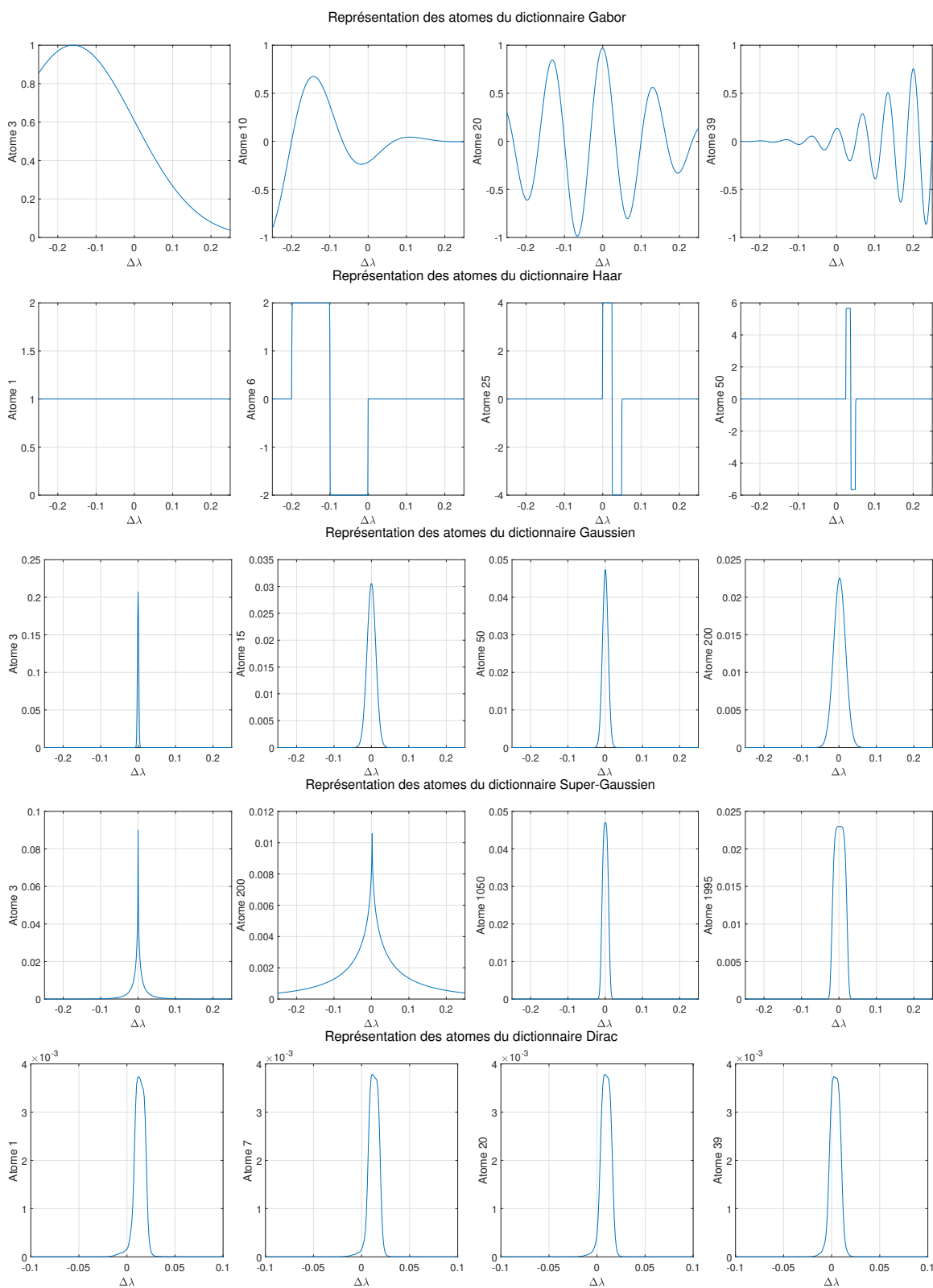


FIGURE 2.6 – Représentation des différents dictionnaires utilisés (le dictionnaire de Gabor, de Haar ou construit à partir de gaussiennes ou de super-gaussiennes) pour approcher les ISRFs.

Problème d'optimisation associé et résolution

À partir du dictionnaire obtenu, l'objectif est d'estimer les ISRFs avec la meilleure précision possible en recherchant, pour chaque ISRF \mathbf{I}_l , le vecteur de coefficients $\boldsymbol{\alpha}_l$ introduit dans l'équation (2.16). Ce problème s'inscrit dans le cadre du sparse coding, ou codage parcimonieux, dont le but est de représenter un signal comme une combinaison linéaire d'un nombre réduit d'atomes du dictionnaire. Ce problème a été formulé mathématiquement de plusieurs façons dans la littérature [32]. L'une des approches classiques repose sur l'utilisation de la pseudo-norme ℓ_0 , qui pénalise le nombre de coefficients non nuls du vecteur $\boldsymbol{\alpha}_l$. Le problème d'optimisation associé s'écrit alors :

$$\arg \min_{\boldsymbol{\alpha}_l} L_1(\boldsymbol{\alpha}_l, \mu) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}_l} \|\mathbf{I}_l - \Phi \boldsymbol{\alpha}_l\|_2^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}_l\|_0, \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (2.17)$$

où μ est un paramètre de régularisation qui contrôle le compromis entre erreur de reconstruction et parcimonie des coefficients. Ce problème étant non convexe et de complexité NP-difficile, de nombreuses méthodes approchées et heuristiques ont été proposées dans la littérature pour obtenir des solutions satisfaisantes. Une approche classique consiste à utiliser des algorithmes gloutons (greedy), tels que l'algorithme Orthogonal Matching Pursuit (OMP). L'algorithme OMP est une amélioration de la méthode Matching Pursuit (MP) initialement introduite dans [36, 37], qui ajoute une étape d'orthogonalisation à chaque itération, permettant ainsi une meilleure convergence. L'algorithme OMP est particulièrement bien adapté aux dictionnaires des méthodes SVD, K-SVD ou basés sur des ondelettes, car ces dictionnaires sont généralement bien conditionnés, voir orthonormaux, ce qui facilite la sélection des atomes les plus pertinents. En effet, le principe de l'algorithme OMP consiste à sélectionner de manière itérative les atomes du dictionnaire qui minimisent le résidu de reconstruction, c'est-à-dire qui approchent au mieux le terme d'erreur $\|\mathbf{I}_l - \Phi \boldsymbol{\alpha}_l\|_2^2$ à chaque étape. L'algorithme OMP utilisé dans ce travail est détaillé dans l'algorithme 3, en Annexe A.

Une autre approche consiste à remplacer la pseudo-norme ℓ_0 dans (2.17) par la norme ℓ_1 , ce qui conduit à un problème convexe connu sous le nom de LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) [38]. Ce problème peut s'écrire de la manière suivante :

$$\arg \min_{\boldsymbol{\alpha}_l} L(\boldsymbol{\alpha}_l, \mu) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}_l} \|\mathbf{I}_l - \Phi \boldsymbol{\alpha}_l\|_2^2 + \gamma \|\boldsymbol{\alpha}_l\|_1, \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (2.18)$$

où λ est un paramètre de régularisation contrôlant le niveau de parcimonie du vecteur $\boldsymbol{\alpha}_l$. Contrairement au problème basé sur la norme ℓ_0 , ce problème est convexe et admet une solution unique. Il peut être résolu efficacement à l'aide d'algorithmes d'optimisation comme la méthode du gradient projeté ou les méthodes de points intérieurs, étudiées par exemple dans [33, 39]. L'algorithme LASSO présente l'avantage d'une bonne stabilité numérique, notamment lorsque les colonnes du dictionnaire sont corrélées, bien qu'il tende à produire des solutions moins parcimonieuses, en raison notamment de l'introduction d'un biais de rétrécissement (shrinking bias), contrairement aux méthodes gloutonnes comme OMP.

Les algorithmes basés sur la représentation parcimonieuse offrent une décomposition très flexible de l'ISRF, car le choix du dictionnaire n'est pas contraint par une forme spécifique. En effet, les fonctions de base peuvent être apprises, par exemple, à l'aide de l'algorithme K-SVD combiné à des méthodes de type Matching Pursuit. L'un des principaux avantages de ces approches est qu'elles ne nécessitent aucune hypothèse préalable sur la forme des ISRFs. Les méthodes proposées permettent ainsi de s'affranchir de l'hypothèse de forme gaussienne et de s'adapter aux différentes formes d'ISRFs de manière totalement non paramétrique.

Résultats pour la modélisation des ISRFs

Les résultats d'approximation des ISRFs à l'aide de dictionnaires sont présentés dans cette section en utilisant l'algorithme OMP. Les figures 2.7 et 2.9 illustrent ces résultats pour un exemple d'ISRF estimée, respectivement sur les quatre bandes spectrales de MicroCarb et sur les quatre

fibres représentatives de l'instrument CO2M. Pour ces deux instruments, les figures 2.8 et 2.10 présentent les performances globales des méthodes en termes d'erreur moyenne d'estimation des ISRFs (en haut) et de temps de calcul par ISRF (en bas).

On observe tout d'abord que les méthodes basées sur des dictionnaires d'ondelettes, définies précédemment, ne permettent pas de reconstruire les ISRFs avec une précision suffisante, quel que soit l'instrument considéré. Les dictionnaires de type gaussien, super-gaussien, et Dirac — ce dernier donnant les meilleurs résultats parmi les trois — permettent d'améliorer les performances mais restent loin du seuil d'erreur cible fixé à 1%. Les meilleurs résultats sont obtenus avec les dictionnaires construits par SVD et K-SVD. Ils permettent d'atteindre des erreurs d'approximation inférieures à 1% pour les deux instruments à partir de seulement $K = 6$ atomes non nuls dans le pire des cas (notamment pour la fibre 200 de CO2M). En moyenne, $K = 3$ atomes suffisent pour obtenir une estimation satisfaisante. En ce qui concerne les temps de calcul pour l'estimation d'une ISRF, ils restent très faibles, quel que soit le dictionnaire ou le nombre d'atomes sélectionnés : le temps de calcul ne dépasse jamais 0.015s, même dans les cas les plus défavorables avec un grand nombre d'atomes. Pour les dictionnaires SVD ou K-SVD (en excluant la phase de construction du dictionnaire, réalisée en amont), les temps de simulation sont inférieurs à 0.003s. Ces performances sont bien meilleures que celles des modèles paramétriques, avec des temps d'exécution jusqu'à 10 fois plus rapides. Comme attendu, le temps de simulation augmente avec la cardinalité (c'est-à-dire le nombre d'atomes non nuls) du vecteur parcimonieux. Cela souligne l'intérêt de représentations efficaces avec un faible nombre d'atomes, qui réduisent encore le coût de calcul tout en maintenant une excellente précision.

On peut donc conclure que les méthodes basées sur des représentations parcimonieuses des ISRFs permettent de modéliser ces ISRFs de manière nettement plus précise que les différents modèles paramétriques étudiés précédemment. En particulier, l'utilisation des données réelles d'ISRFs pour la construction des dictionnaires permet de mieux capturer leurs variations spécifiques et de minimiser les erreurs d'approximation. Dans la suite, les résultats d'estimation seront présentés en utilisant les dictionnaires de type SVD et K-SVD, qui se sont révélés les plus performants. Ces résultats seront systématiquement comparés à ceux issus de la littérature [17], reposant sur des modèles paramétriques tels que la gaussienne, la super-gaussienne, et, dans certains cas, des modèles plus complexes comme la gaussienne asymétrique ou la somme de deux gaussiennes.

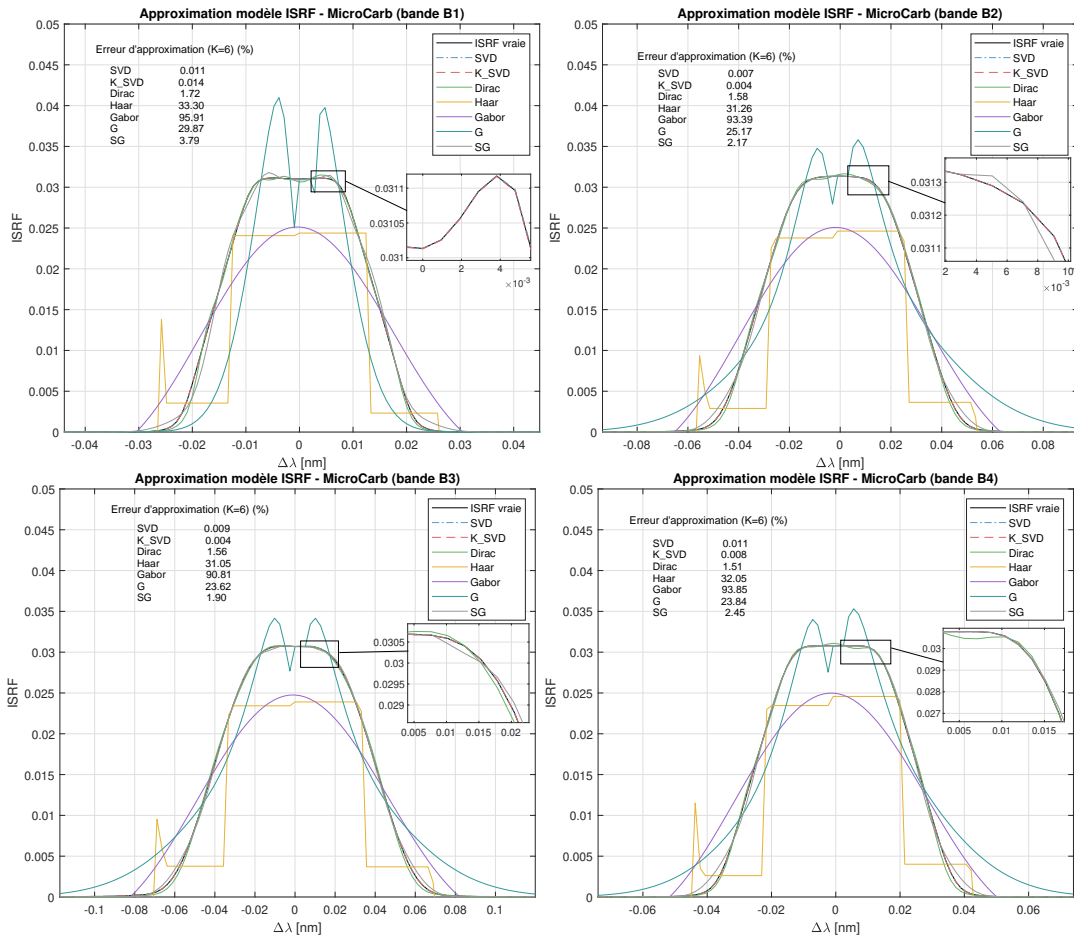


FIGURE 2.7 – Approximation des ISRFs associées à l'instrument MicroCarb en utilisant la représentation parcimonieuse avec dictionnaires SVD, K-SVD, Dirac, Haar, Gabor et Gauss (G) et Super-Gauss (SG).

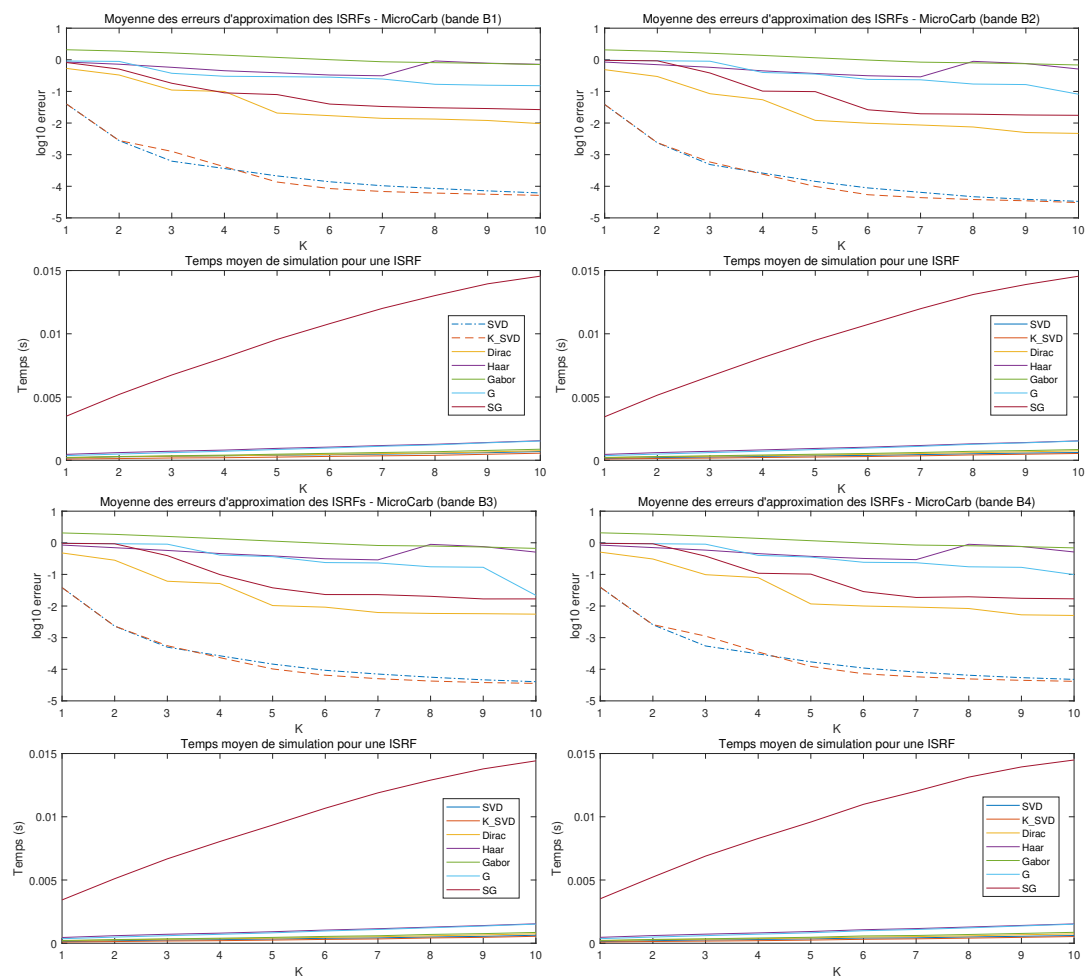


FIGURE 2.8 – Erreur d'estimation des ISRFs et temps de simulation des méthodes de représentation parcimonieuse avec dictionnaires SVD, K-SVD, Dirac, Haar, Gabor et Gauss (G) et Super-Gauss (SG) pour l'instrument MicroCarb.

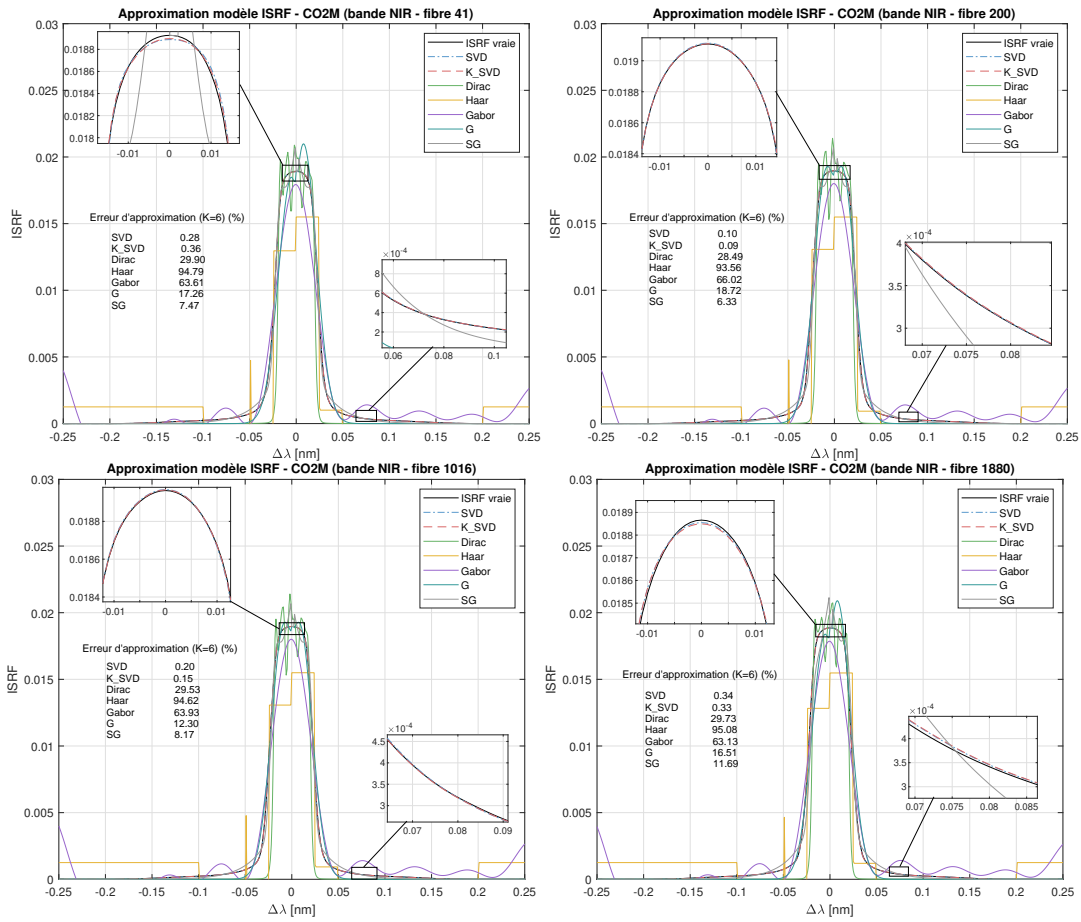


FIGURE 2.9 – Approximation des ISRFs associées à l'instrument MicroCarb en utilisant la représentation parcimonieuse avec dictionnaires SVD, K-SVD, Dirac, Haar, Gabor et Gauss (G) et Super-Gauss (SG).

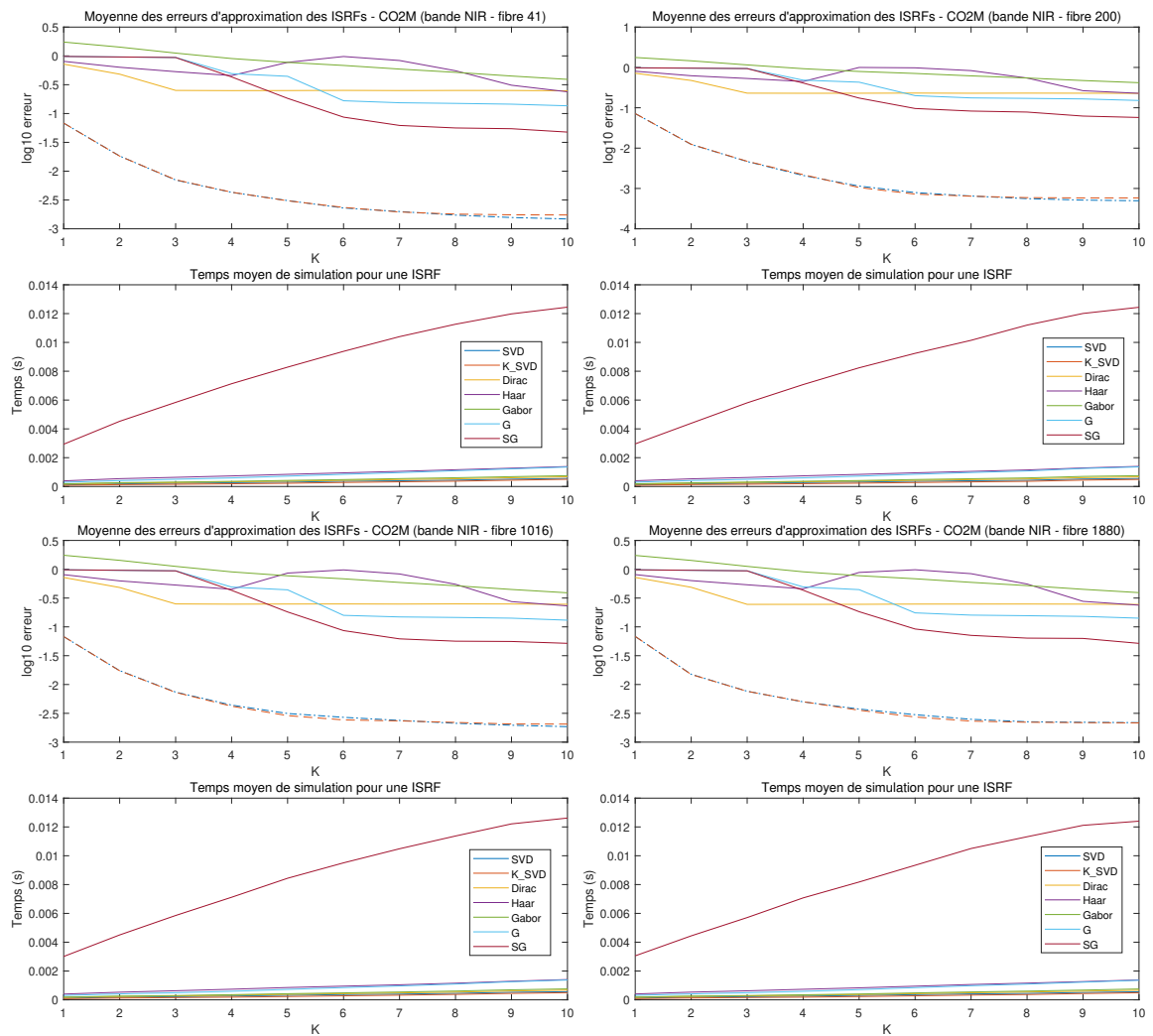


FIGURE 2.10 – Erreur d’estimation des ISRFs et temps de simulation des méthodes de représentation parcimonieuse avec dictionnaires SVD, K-SVD, Dirac, Haar, Gabor et Gauss (G) et Super-Gauss (SG) pour l’instrument CO2M.

2.1.3 Présence de bruit dans les mesures des ISRFs

Lors de la calibration au sol, le dispositif de mesure peut fortement dégrader la précision des ISRF estimées. En effet, chaque point de l’ISRF est mesuré indépendamment à l’aide d’un laser, et plusieurs sources d’erreurs peuvent provenir de ce système, notamment :

- Le bruit d’acquisition, qui peut entraîner une erreur d’approximation normalisée de l’ISRF comprise entre 0.5% et 5%.
- Les variations de stabilité de puissance du laser, qui peuvent entraîner une dérive liée à l’augmentation de la puissance du laser. En pratique, chaque point de l’ISRF est mesuré indépendamment, et à mesure que la puissance du laser augmente, une dérive peut apparaître : les points de l’ISRF peuvent être décalés verticalement. Ce décalage peut être linéaire entre deux mesures ou totalement aléatoire, et le degré d’aléa peut varier selon les points considérés. En pratique, ce décalage est compris entre 0.05 et 0.005 de la valeur maximale de l’ISRF.
- Les variations de stabilité en longueur d’onde, qui peuvent entraîner une incertitude sur

la connaissance précise de la longueur d'onde du laser. Cela peut introduire un décalage horizontal des mesures, c'est-à-dire un échantillonnage irrégulier de l'ISRF avec une grille d'échantillonnage inconnue. Le décalage est compris entre FWHM/100 et FWHM/1000 où FWHM est la largeur à mi-hauteur.

La figure 2.11 illustre ces quatre types d'erreurs : en haut pour la bande B1 de MicroCarb, et en bas pour la fibre 41 de CO2M. On y définit le cas limite comme le pire cas possible pour l'ensemble des trois erreurs possibles pour les deux instruments. Par exemple, pour les données MicroCarb, cela entraîne des erreurs totales simulées à 40.61% (le bruit d'acquisition entraînant une erreur d'approximation à 5.33%, les variations de stabilité de la puissance laser entraînant une erreur de 38.6% et les variations de connaissance de la longueur d'onde laser entraînant des erreurs limitées à 0.95%). On observe que les erreurs liées au laser peuvent fortement altérer la forme des ISRFs et introduire un bruit significatif dont il est nécessaire de s'affranchir. L'ISRF estimée \tilde{I}_l associée au pixel l et à la longueur d'onde λ_l peut être exprimée comme une version perturbée de la vraie ISRF I_l , comme suit :

$$\tilde{I}_l(\lambda_l) = I_l(\lambda_l + \delta_l) + \epsilon_l, \quad (2.19)$$

où ϵ_l représente le bruit d'acquisition ainsi que le décalage vertical, et δ_l correspond au décalage horizontal lors d'une mesure. Le problème de débruitage des ISRFs peut être résolu en minimisant la norme du résidu entre la mesure et un modèle d'ISRF. On peut à nouveau utiliser des modèles paramétriques (gaussien, super-gaussien [17], ou encore gaussienne asymétrique ou splines) ou des modèles basés sur la représentation parcimonieuse définie précédemment. En effet, ces modèles ont été utilisés avec succès dans plusieurs applications de traitement d'images, notamment pour le débruitage [40]. On représente de nouveau la l -ième ISRF bruitée comme un vecteur $\tilde{\mathbf{I}}_l \triangleq [\tilde{I}_l(-\frac{N}{2}\Delta_I), \dots, \tilde{I}_l(\frac{N}{2}\Delta_I)]^T \in \mathbb{R}^{N+1}$ et on cherche à la décomposer dans le dictionnaire d'atomes $\Phi \in \mathbb{R}^{(N+1) \times N_D}$ comme suit :

$$\tilde{\mathbf{I}}_l = \Phi \alpha_l, \quad (2.20)$$

où $\alpha_l \in \mathbb{R}^{N_D}$ est un vecteur parcimonieux qui est obtenu en résolvant le problème d'optimisation :

$$\arg \min_{\alpha_l} \|\tilde{\mathbf{I}}_l - \Phi \alpha_l\| + \mu \|\alpha_l\|_0. \quad (2.21)$$

Pour résoudre ce problème, les dictionnaires de type SVD et K-SVD sont utilisés, et l'algorithme employé pour le débruitage est l'Orthogonal Matching Pursuit (OMP) [36, 37]. Les estimations obtenues avec OMP sont comparées à celles issues des modèles paramétriques. Les résultats sont illustrés dans la figure 2.12 et conduisent aux observations suivantes. Dans le contexte du débruitage des ISRFs, les modèles à base de splines cubiques et les modèles gaussiens donnent globalement les pires résultats. Pour les deux instruments, la meilleure paramétrisation est la super-gaussienne asymétrique. Cependant, dans tous les cas, les performances restent loin de l'objectif attendu de 1% d'erreur. Les meilleurs résultats sont obtenus avec la méthode basée sur la représentation parcimonieuse, avec une cardinalité de $K = 2$ atomes non nuls dans le meilleur et le cas limite pour MicroCarb. Pour CO2M, dans la situation normale, les meilleurs résultats sont obtenus avec $K = 4$ atomes, tandis que dans le cas limite, la cardinalité varie entre $K = 2$ et $K = 3$. Dans tous les cas, l'erreur normalisée d'approximation de l'ISRF reste inférieure à 1%, ce qui démontre l'efficacité de la méthode pour le débruitage des ISRFs.

Dans le cas limite, des tentatives ont été menées pour améliorer les résultats en combinant des techniques classiques de débruitage à une représentation parcimonieuse dans un dictionnaire. Les résultats obtenus sont illustrés dans la figure 2.13. Ces méthodes visent à supprimer le bruit en exploitant les propriétés du signal dans différents domaines de transformation. Une fois le bruit réduit, le signal débruité est projeté dans le dictionnaire pour une meilleure approximation. Parmi les techniques testées, la transformée de Fourier (en rouge sur la figure) permet de passer dans le domaine fréquentiel afin de supprimer les composantes de haute fréquence associées au bruit. Cette méthode est particulièrement efficace face à un bruit large bande, bien qu'elle puisse atténuer les

détails fins du signal. Le filtre de Savitzky–Golay [41] (noté SG en vert) repose sur une régression polynomiale locale permettant de lisser le signal tout en préservant ses caractéristiques principales. Il est bien adapté aux signaux présentant des variations lentes et régulières. Dans notre cas, les meilleurs résultats ont été obtenus avec un polynôme d'ordre 2 et une fenêtre de taille 13. La méthode de variation totale [42] (notée TV en jaune) est une approche de régularisation très utilisée en traitement d'images pour supprimer le bruit tout en conservant les discontinuités (comme les bords). Elle vise à minimiser les variations du signal tout en préservant ses structures essentielles. Elle a ici été implémentée à l'aide de l'algorithme de point fixe itératif de Chambolle [43]. Le débruitage par ondelettes [44] (noté Wavelet en violet) repose sur une décomposition multi-échelle du signal. Cela permet de traiter séparément les composantes basse et haute fréquence, facilitant ainsi l'atténuation du bruit tout en conservant les détails pertinents. L'algorithme utilisé repose sur la fonction `denoise` de MATLAB, combinant les ondelettes Daubechies `bd6` avec une méthode bayésienne de seuillage [45]. Enfin, le filtre de Wiener [46] (en rose) est un filtre adaptatif conçu pour minimiser l'erreur quadratique moyenne entre le signal estimé et le signal réel. Il est particulièrement performant en présence de bruit gaussien, et peut s'appliquer dans divers domaines, y compris fréquentiel.

En appliquant ces techniques de débruitage, on observe à partir de la figure 2.13, que la cardinalité optimale K des atomes non nuls reste inchangée. Cependant, une analyse plus approfondie révèle que l'utilisation de méthodes telles que le filtre de Savitzky-Golay et le filtre de Wiener permet d'améliorer légèrement la solution, notamment pour `MicroCarb`, indépendamment du dictionnaire utilisé. Pour `CO2M`, l'application de techniques de débruitage supplémentaires améliore davantage la solution, avec le filtre de Savitzky-Golay offrant les meilleurs résultats. D'autres méthodes de débruitage pourraient également être envisagées dans la suite de ce travail. En particulier, les modèles de diffusion pour le débruitage [47] suscitent actuellement un fort intérêt dans la littérature. Ces approches reposent sur des processus génératifs probabilistes permettant de reconstruire un signal propre à partir d'une version bruitée via une série d'étapes stochastiques inverses. Elles ont notamment été largement utilisées dans le domaine biomédical, par exemple pour le débruitage de signaux ECG [48], et pourraient être adaptées au contexte du traitement des ISRFs en raison de leur grande capacité de modélisation et de leur robustesse face à différents types de bruit.

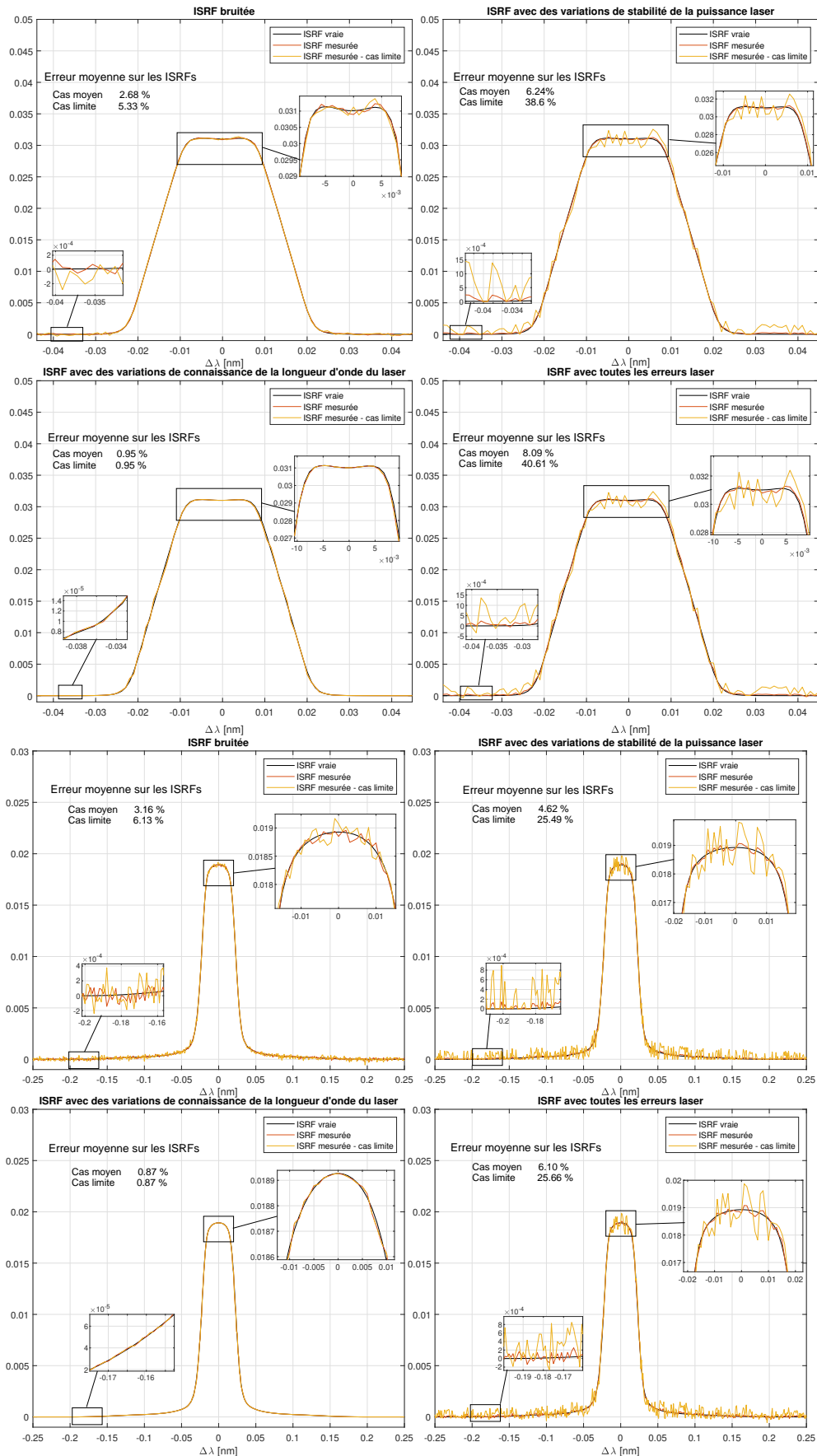


FIGURE 2.11 – Exemple des impacts possibles des erreurs de mesure avec le laser sur les ISRFs pour la bande B1 de MicroCarb (4 figures du haut) et la fibre 41 de CO2M (4 figures du bas).

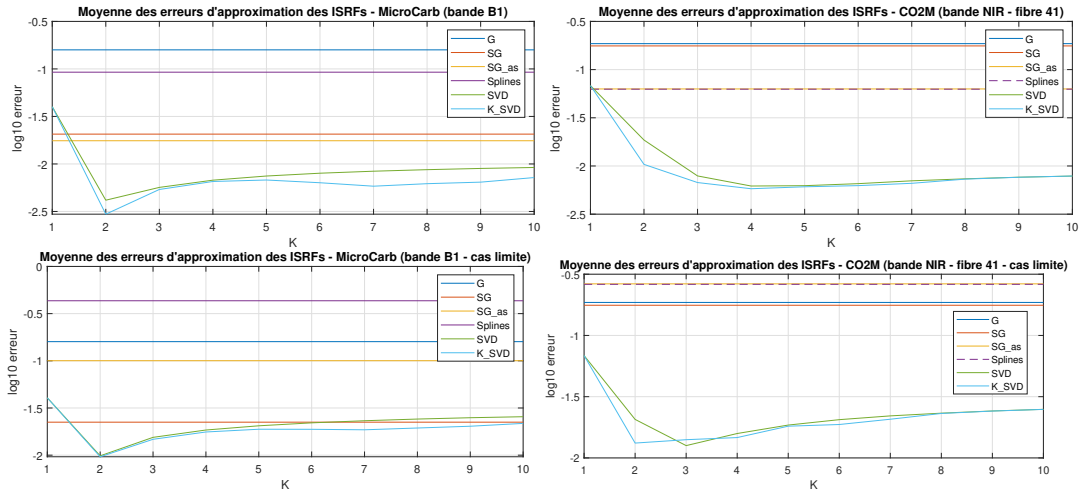


FIGURE 2.12 – Résultats de l'estimation des ISRFs dans le cas bruité avec les ISRFs associé à la bande B1 de MicroCarb et à la fibre 41 de CO2M.

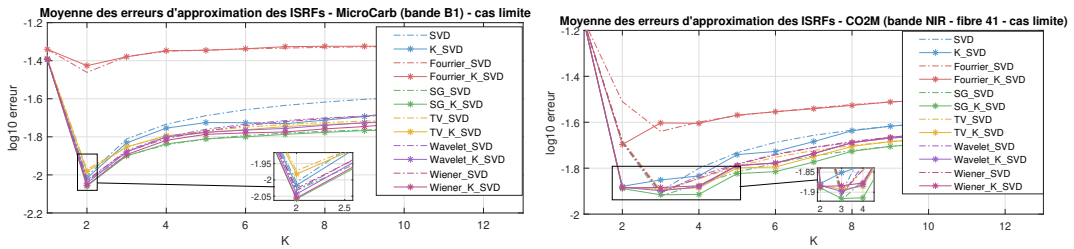


FIGURE 2.13 – Résultats de l'estimation des ISRFs dans le cas bruité et en ajoutant des méthodes de débruitage avec les ISRFs associé à la bande B1 de MicroCarb et à la fibre 41 de CO2M.

2.1.4 Conclusion sur la modélisation des ISRFs

Dans cette partie, nous avons proposé une nouvelle modélisation des ISRFs basée sur leur représentation parcimonieuse dans un dictionnaire adapté. Cette approche a été comparée à différents modèles issus de la littérature. Seuls les modèles de type super-gaussien asymétrique, les splines cubiques et les modèles fondés sur la somme de deux gaussiennes permettent d'obtenir des résultats compétitifs, mais ils restent significativement moins précis que ceux obtenus par la représentation parcimonieuse pour les deux instruments MicroCarb et CO2M.

Différents types de dictionnaires ont été testés. Parmi eux, les dictionnaires construits via les méthodes SVD et K-SVD se sont révélés être les plus performants. Non seulement ils permettent de réduire considérablement l'erreur d'estimation des ISRFs en dessous du seuil de 1%, mais ils sont également les plus rapides en termes de temps de calcul. Les meilleures performances sont généralement atteintes avec une cardinalité faible, autour de $K = 3$ à 6 atomes non nuls, selon la bande spectrale et la mission. Dans certains cas, les erreurs d'approximation descendent même en dessous de 0.1%.

Par ailleurs, les méthodes proposées ont été appliquées au problème du débruitage des ISRFs. Les résultats montrent que la représentation parcimonieuse conserve de bonnes performances globales, même dans des conditions bruitées plus extrêmes (cas limite), bien que les performances puissent légèrement se dégrader. Il a également été démontré qu'il est possible d'améliorer les résultats en combinant la représentation parcimonieuse avec des techniques classiques de débruitage (comme Savitzky-Golay ou le filtre de Wiener), ce qui permet dans certains cas d'obtenir des estimations

légèrement plus précises, selon l'instrument considéré. Il serait intéressant, dans le cadre de travaux futurs, d'explorer l'intégration de méthodes de débruitage issues de l'apprentissage automatique, telles que les autoencodeurs ou les modèles de diffusion, qui ont récemment montré de très bonnes performances dans divers contextes de traitement de signal, notamment en environnement bruité.

Dans la suite, nous utiliserons les méthodes classiques de la littérature, telles que les modélisations gaussiennes et super-gaussiennes, que nous comparerons aux méthodes parcimonieuses basées sur des dictionnaires de type SVD ou K-SVD, dans le cadre de l'estimation des ISRFs en vol à partir de spectres mesurés et de spectres de référence.

2.2 Estimation des ISRFs en vol : un problème inverse

2.2.1 Formulation du problème inverse

L'estimation en vol des ISRFs repose sur l'observation de scènes supposées parfaitement connues sur les plans radiométrique et spectral (comme le Soleil, la Lune, ou encore des scènes uniformes telles que des déserts), que l'on désigne par spectres théoriques (ou spectres de référence). Ce spectre de référence correspond au spectre à l'entrée de l'instrument et est supposé connu lors du processus de calibration. Le principe de l'estimation consiste à déterminer, pour chaque longueur d'onde λ_l , l'ISRF $I_l(\lambda)$ qui minimise une mesure de similarité entre le spectre mesuré $s(\lambda_l)$ et le spectre théorique $r(\lambda)$ convolué avec l'ISRF [49, 29] :

$$s(\lambda_l) = (r * I_l)(\lambda_l) = \int_{\mathbb{R}} r(\lambda_l - u) I_l(u) du, \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (2.22)$$

où $*$ désigne la convolution, et N_λ est le nombre total de longueurs d'onde centrales λ_l , chacune étant associée à une ISRF I_l et un pixel du détecteur l . Après discrétisation, cette équation peut s'écrire :

$$s(\lambda_l) \approx \sum_{n=-N/2}^{N/2} r(\lambda_l - n\Delta) I_l(n\Delta_I), \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (2.23)$$

où Δ_I est la période d'échantillonnage (séparant deux points consécutifs de l'ISRF) supposée constante. Il serait envisageable d'estimer les fonctions ISRF à partir de plusieurs spectres théoriques. Toutefois, cela nécessiterait de disposer de spectres de référence à la fois nombreux, bien caractérisés, et présentant des variations spectrales suffisamment marquées et diverses. En l'absence de telles conditions, notamment dans les zones spectrales plates où l'information spectrale est faible, il devient difficile d'estimer précisément les ISRFs. Dans ce contexte, on fait l'hypothèse, (vérifiée empiriquement) que les ISRFs varient peu d'une longueur d'onde à l'autre. Autrement dit, on considère qu'elles sont localement constantes. Cette hypothèse permet d'estimer les ISRFs sur une fenêtre glissante, en supposant que celles-ci ne changent pas significativement au sein de cette fenêtre. Pour cela, on utilise une fenêtre d'observation centrée autour de la longueur d'onde λ_l , définie par $\mathcal{W}_l = \left\{ \lambda_{l-\frac{L}{2}}, \dots, \lambda_{l+\frac{L}{2}} \right\}$, contenant ainsi $L + 1$ observations.

En injectant l'expression parcimonieuse de l'ISRF dans un dictionnaire (cf. équation (2.16)) dans (2.23), le problème revient alors à résoudre un problème inverse linéaire, que l'on peut formuler et résoudre en s'appuyant sur la représentation parcimonieuse des ISRFs dans un dictionnaire :

$$\mathbf{s}_l = \mathbf{R}_l \mathbf{I}_l = \mathbf{R}_l \Phi \boldsymbol{\alpha}_l, \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (2.24)$$

où $\mathbf{s}_l = \left[s\left(\lambda_{l-\frac{L}{2}}\right), \dots, s\left(\lambda_{l+\frac{L}{2}}\right) \right]^T \in \mathbb{R}^{L+1}$ est le spectre mesuré dans la fenêtre glissante et $\mathbf{R}_l = \left[\mathbf{r}_{l-\frac{L}{2}}, \dots, \mathbf{r}_{l+\frac{L}{2}} \right]^T \in \mathbb{R}^{(L+1) \times (N+1)}$ est une matrice contenant le spectre de référence interpolé aux longueurs d'onde de la fenêtre glissante. Le calcul de cette interpolation est décrit dans l'annexe A avec l'algorithme 1. On peut définir un nouveau dictionnaire en utilisant la matrice

du spectre de référence et le dictionnaire des ISRFs, i.e. $\Psi_l = \mathbf{R}_l \Phi \in \mathbb{R}^{(L+1) \times (N_D)}$ et le problème d'estimation des ISRFs se ramène à la recherche du vecteur parcimonieux α_l qui minimise le résidu $\|\mathbf{s}_l - \Psi_l \alpha_l\|_2^2$. Une particularité importante de cette formulation réside dans le fait que le dictionnaire résultant n'est plus nécessairement bien conditionné, contrairement au cas d'estimation directe des ISRFs. En effet, dans le cas d'une estimation directe des ISRFs, le dictionnaire Φ est construit à partir de la SVD d'un ensemble représentatif d'ISRFs. Cette construction garantit une certaine orthogonalité entre les atomes du dictionnaire, ce qui favorise un bon conditionnement et facilite l'identification des composantes parcimonieuses. Cependant, dans la formulation utilisée ici, cette propriété d'orthogonalité n'est plus valide. En particulier, pour chaque fenêtre glissante de taille $L + 1$ utilisée dans le processus d'inversion, le dictionnaire original Φ est multiplié par une matrice contenant les spectres de référence associés à la fenêtre, notée \mathbf{R}_l . Ce produit matriciel donne naissance à un nouveau dictionnaire effectif, noté $\Psi_l = \mathbf{R}_l \Phi$. Or, cette opération a pour effet de dégrader les propriétés de conditionnement initialement assurées par la SVD. Le dictionnaire Ψ_l ainsi obtenu peut devenir mal conditionné, rendant la résolution du problème inverse plus difficile numériquement, et potentiellement plus instable. Une étude du pré-conditionnement du dictionnaire sera par ailleurs effectuée lors de la partie théorique de ce manuscrit au chapitre 4.

2.2.2 Résolution en utilisant la représentation parcimonieuse

Un nouveau problème de codage parcimonieux peut être formulé comme dans l'équation (2.17). On peut utiliser une régularisation avec la pseudo-norme l_0 , notée $\|\cdot\|_0$, avec un paramètre de pénalité γ , ce qui conduit au problème suivant :

$$\arg \min_{\alpha_l} L_1(\alpha_l, \gamma) = \arg \min_{\alpha_l} \|\mathbf{s}_l - \Psi_l \alpha_l\|_2^2 + \gamma \|\alpha_l\|_0, \quad l = 1, \dots, N_\lambda. \quad (2.25)$$

Nous rappelons que ce problème reste non convexe et de complexité NP-difficile. Même si Ψ_l n'est plus orthonormal, il est toujours possible d'utiliser des heuristiques efficaces pour approcher une solution, comme les méthodes gloutonnes. Plus particulièrement, dans ce chapitre nous utiliserons l'algorithme Orthogonal Matching Pursuit (OMP) [36, 37] dont le pseudo-code est rappelé en annexe A (Algorithme 3). Dans cet algorithme, à chaque itération, l'atome du dictionnaire Ψ_l sélectionné est celui qui permet de mieux approximer le terme de fidélité aux données, défini comme $\|\mathbf{s}_l - \Psi_l \alpha_l\|_2^2$. L'algorithme itère jusqu'à minimisation du résidu d'erreur restant.

Par ailleurs, on peut à nouveau remplacer la pseudo-norme l_0 dans l'équation (2.25) par la norme l_1 , ce qui permet de reformuler le problème en la version convexe nommée LASSO [38] :

$$\arg \min_{\alpha_l} L_2(\alpha_l, \gamma) = \arg \min_{\alpha_l} \|\mathbf{s}_l - \Psi_l \alpha_l\|_2^2 + \gamma \|\alpha_l\|_1, \quad l = 1, \dots, N_\lambda. \quad (2.26)$$

L'utilisation du terme $\gamma \|\alpha_l\|_1$ dans la méthode LASSO comme approximation de $\gamma \|\alpha_l\|_0$ dans (2.25) s'explique par le fait que la pseudo-norme l_0 est fortement discontinue et non convexe, rendant l'optimisation instable. À l'inverse, la norme l_1 est convexe et continue, ce qui permet de calculer facilement son opérateur proximal. Pour résoudre ce second problème, nous utilisons l'algorithme "LASSO" de MATLAB, auquel nous appliquons une procédure permettant de sélectionner le nombre approprié de coefficients non nuls. Cette procédure est détaillée dans l'algorithme 4 de l'annexe A. Nous rappelons qu'une particularité de cette relaxation est qu'elle introduit un biais de rétrécissement "shrinking bias" bien connu, qui peut dégrader les performances de l'estimation, en particulier pour des valeurs élevées de γ nécessaires à l'obtention de solutions très parcimonieuses, c'est-à-dire avec un faible nombre d'atomes K . Comme montré dans nos premières expériences, notre objectif est d'estimer correctement les ISRFs avec un nombre réduit de paramètres ; or, comme vu précédemment, l'algorithme OMP donne déjà de bons résultats pour de faibles valeurs de K . Ainsi, LASSO tend à donner de moins bonnes performances sur l'ensemble des valeurs du paramètre γ : de faibles valeurs de γ entraînent des représentations avec beaucoup d'atomes, tandis que de fortes valeurs de γ introduisent un biais de rétrécissement qu'il faut ensuite corriger une fois les atomes sélectionnés.

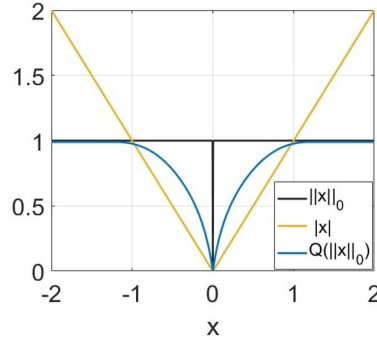


FIGURE 2.14 – Illustration des trois différentes régularisations (ℓ_0 , ℓ_1 et basée sur les enveloppes quadratiques) en 1D.

Récemment, une famille plus flexible de régularisations basée sur les enveloppes quadratiques a été introduite [50]. L'utilisation de cette régularisation permet d'obtenir un problème final convexe tout en se rapprochant davantage du comportement de la norme ℓ_0 . En effet, la figure 2.14 illustre, dans un cas unidimensionnel, les trois types de régularisation considérés : la norme ℓ_0 , la norme ℓ_1 et la régularisation fondée sur les enveloppes quadratiques. La norme ℓ_1 constitue une relaxation convexe de la norme ℓ_0 , ce qui permet de rendre le problème optimisable plus facilement, mais elle est relativement éloignée du comportement réel de la norme ℓ_0 . En revanche, la régularisation par enveloppes quadratiques permet non seulement de conserver la convexité du problème, mais aussi de mieux approximer la forme de la norme ℓ_0 , comparée à la relaxation ℓ_1 . Elle offre ainsi la possibilité d'obtenir des représentations parcimonieuses contenant exactement K coefficients non nuls, sans introduire de biais significatif [51]. En remplaçant $\gamma\|\alpha_l\|_0$ par l'enveloppe quadratique, on obtient la formulation suivante :

$$\arg \min_{\alpha_l} L_3(\alpha_l, \gamma) = \arg \min_{\alpha_l} \|\mathbf{s}_l - \Psi_l \alpha_l\|_2^2 + \mathcal{Q}_\gamma(\|\alpha_l\|_0)(\alpha_l), \quad (2.27)$$

où l'enveloppe quadratique $\mathcal{Q}_\gamma(\|\cdot\|_0)$ est définie comme le supremum point par point de toutes les fonctions quadratiques de la forme $\alpha_l \mapsto r - \frac{\gamma}{2}|\alpha_l - \beta|^2$ telles que cette fonction soit inférieure à $\|\alpha_l\|_0$, avec $\gamma > 0$ un paramètre de régularisation. Il a été montré que, sous certaines conditions, notamment sur γ , cette régularisation conserve le même minimum global que la fonctionnelle d'origine, i.e. les minima globaux de (2.27) et (2.25) sont identiques. L'application de cette pénalité a été largement étudiée théoriquement dans divers contextes (voir par exemple [51, 52, 53, 54]), et il a été démontré qu'elle donne de manière consistante de meilleurs résultats que les méthodes concurrentes. En pratique, pour minimiser (2.27) à l'aide d'algorithmes tels que ISTA ou son accélération FISTA, il est nécessaire de calculer l'opérateur proximal de $\mathcal{Q}_\gamma(\|\cdot\|_0)$. Les détails sur le calcul de cet opérateur proximal sont disponibles dans [55] ou dans le fichier readme du dépôt <https://github.com/Marcus-Carlsson/Quadratic-Envelopes>, où l'implémentation de cet opérateur peut également être téléchargée. Dans ce chapitre, nous avons recours à l'algorithme FISTA pour résoudre ce problème. Les détails de son implémentation dans le cadre de l'estimation des ISRFs sont présentés dans l'algorithme 6, en annexe A.

L'approche proposée pour estimer les ISRFs en résolvant l'un des problèmes (2.25), (2.26), et (2.27) sera désignée par l'acronyme SPIRIT, pour "SParse representation of Instrument spectral Response Functions using a dIcTionary".

2.3 Résultats obtenus pour le problème inverse

La section suivante présente les résultats obtenus pour l'estimation des ISRFs. Les performances des différentes méthodes sont évaluées à la fois en termes de qualité de l'estimation des ISRFs et de

résidu entre les spectres mesurés et les spectres reconstruits. La qualité de l'estimation des ISRFs est quantifiée à l'aide de l'erreur absolue entre l'ISRF réelle et son estimation :

$$E_l = \sum_{n=-N/2}^{N/2} |I_l(n\Delta_I) - \hat{I}_l(n\Delta)|.$$

Notons que pour l'instrument considéré, les ISRFs (simulées ou reconstruites) sont supposées normalisées à une aire unitaire. Le résidu entre les mesures spectrales et leurs reconstructions est défini par :

$$\rho = \frac{1}{N_\lambda} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\mathbf{s}_l - \mathbf{r}_l \hat{\mathbf{I}}_l\|_2^2.$$

Nous rappelons que pour la mission MicroCarb, les ISRFs sont considérées comme bien estimées lorsque leur erreur normalisée vérifie $E_l < 1\%$ pour chaque longueur d'onde. Cette exigence de précision découle de la nécessité d'estimer de manière fiable les concentrations de CO_2 . Cet objectif $E_l < 1\%$ tient compte des incertitudes, du bruit d'acquisition et des erreurs d'interpolation, mais il reste difficile à atteindre en pratique à partir de données réelles. La méthode SPIRIT proposée est comparée à des méthodes paramétriques basées sur des modèles gaussien, super-gaussien, super-gaussien asymétrique ou somme de deux super-gaussiennes. Les paramètres de ces modèles sont estimés par moindres carrés non-linéaires à l'aide de l'algorithme de Nelder-Mead [56] à l'aide de la fonction *fminsearch* de MATLAB. Cet algorithme itératif nécessite une initialisation et un critère d'arrêt. Pour le modèle gaussien, les paramètres initiaux sont : μ_0^G (moyenne empirique des ISRFs), σ_0^G (écart type obtenu à partir de la FWHM) et $A_0^G = (2\pi\sigma_0^G)^{-1/2}$ (amplitude). Pour le modèle super-gaussien, l'initialisation est donnée par : $\mu_0^{SG} = \mu_0^G$, $k_0^{SG} = 2$, $w_0^{SG} = \sqrt{2}\sigma_0^G$, et $A_0^{SG} = \frac{k_0^{SG}}{2w_0^{SG}} \Gamma(1/k_0^{SG})$, avec Γ la fonction gamma. L'algorithme est arrêté après un maximum de 20000 itérations.

La méthode SPIRIT nécessite quant à elle la construction d'un dictionnaire Φ à partir de réponses spectrales représentatives. Les dictionnaires utilisés reprennent ceux précédemment introduits utilisant la SVD ou la K-SVD. Deux méthodes de codage parcimonieux sont ensuite testées : LASSO [57] et OMP. Pour LASSO, nous utilisons l'implémentation MATLAB avec un paramètre $\mu > 0$ ajusté pour obtenir un nombre cible d'atomes. Les coefficients non nuls issus de LASSO sont ensuite ré-estimés afin de réduire le biais de rétrécissement bien connu [58]. L'algorithme LASSO permettant d'obtenir un nombre précis de coefficients non nuls est présenté en Annexe A, Algorithme 4. Les résultats obtenus sont également comparés à ceux d'autres approches reposant sur les enveloppes quadratiques. Les performances des méthodes sont quantifiées, suivies d'une évaluation de leur robustesse. Les approches d'estimation des ISRFs ont été testées sur six instruments distincts pour valider leur généralisation à d'autres missions. Une analyse des écarts modèle-mesure est conduite afin d'évaluer les potentielles limitations des méthodes, notamment liées à l'échantillonnage, à l'hypothèse de fenêtres glissantes, et à la sensibilité vis-à-vis de la connaissance du spectre théorique. Pour toutes les expériences, le bruit ϵ ajouté aux mesures est un bruit gaussien additif généré avec un rapport signal sur bruit (SNR) spécifié, selon la relation suivante :

$$\epsilon = \sqrt{10^{-\text{SNR}/10} \frac{\|\mathbf{s}_l\|_2}{\|\mathbf{n}_0\|_2}} \mathbf{n}_0, \quad (2.28)$$

où $\mathbf{n}_0 \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1})$ est de même dimension que \mathbf{s}_l et $\mathbf{1}$ est la matrice identité. Il aurait été possible de modéliser le bruit comme un bruit de Poisson associé à la luminance, auquel s'ajouterait un bruit d'acquisition. Toutefois, la gaussienne est une bonne approximation pour une loi de Poisson P_λ de paramètre λ grand (ou associé à beaucoup de photons. Par ailleurs, l'objectif ici est d'analyser la sensibilité des différentes méthodes au bruit. En pratique, la méthode est appliquée à des spectres mesurés pour lesquels le bruit a déjà été réduit. En effet, un binning spatial peut être réalisé afin d'améliorer le rapport signal sur bruit (SNR). Ce binning consiste à diviser arbitrairement la zone

imagée au sol en différents champs de vue (FOV, Field Of View) — typiquement trois pour la mission MicroCarb. Le spectre mesuré pour chaque FOV est alors obtenu comme la moyenne des spectres mesurés à l’intérieur de ce champ, selon la formule suivante : $s(\lambda_l) = \frac{1}{C} \sum_{c=1}^C s_c(\lambda_l)$, où $s_c(\lambda_l)$ est la valeur du spectre mesuré à la longueur d’onde λ_l pour le pixel spatial c dans le FOV. On suppose dans ce chapitre que les ISRFs varient peu selon l’axe transverse (across-track) par rapport à l’axe longitudinal (along-track). Pour la mission MicroCarb, par exemple, le binning représente un compromis entre l’obtention d’un bon SNR et le maintien d’une résolution spatiale acceptable, fixée à 13,5 km en transverse et 9 km en longitudinal. Pour toutes les expériences, le niveau de bruit est fixé à 55 dB, ce qui correspond aux attentes pour ce type de mission après binning.

2.3.1 Résolution du problème inverse par moindres carrés

On suppose ici que l’ISRF est constante sur l’ensemble de la bande spectrale considérée, et l’objectif est de l’estimer. Dans ce contexte, l’utilisation d’une fenêtre glissante n’est pas nécessaire. On dispose de $N_\lambda = 1024$ points mesurés du spectre, et l’on cherche à reconstruire environ $N = 800$ points de l’ISRF. Le problème inverse associé peut être résolu de manière directe, par inversion du système linéaire via la méthode des moindres carrés.

La figure 2.15 présente les résultats obtenus dans deux configurations distinctes. Dans le premier cas, représenté par la courbe jaune, le spectre mesuré est généré selon le modèle linéaire défini en (2.24). Concrètement, on effectue le produit matriciel entre la matrice \mathbf{R} , contenant les valeurs du spectre de référence pour les $N_\lambda = 1024$ longueurs d’onde, et l’ISRF \mathbf{I}_l que l’on souhaite estimer, de taille $N = 800$. Dans le second cas, représenté par la courbe orange, le spectre simulé est généré de manière plus réaliste, en se rapprochant des conditions expérimentales. Il est obtenu par convolution, pour chaque longueur d’onde, entre le spectre de référence r et l’ISRF I_l , selon le modèle décrit en (2.22). Ce spectre simulé est donc construit à partir d’un échantillonnage beaucoup plus fin, reposant sur la grille du spectre de référence. La principale différence entre ces deux approches réside donc dans la grille d’échantillonnage. La courbe noire de la figure 2.15 correspond à l’ISRF vraie. Le premier cas, parfaitement cohérent avec le modèle d’inversion, permet une reconstruction quasi exacte de l’ISRF (erreur 1.03×10^{-9}). La courbe jaune est confondue avec la courbe noire représentant l’ISRF vraie. En revanche, dans le second cas, plus réaliste, l’ISRF reconstruite est fortement bruitée et dégradée. Ces résultats soulignent, d’une part, que la méthode des moindres carrés ne permet pas de reconstruire les ISRFs avec une précision satisfaisante dans un cas réaliste, et, d’autre part, l’importance de l’échantillonnage ainsi que la nécessité d’une modélisation précise des ISRFs pour garantir une estimation fiable, même lorsqu’elles sont supposées constantes sur la bande spectrale.

2.3.2 Estimation des ISRFs

Dans cette partie, les différentes méthodes d’estimation introduites précédemment — qu’elles soient paramétriques ou fondées sur la représentation parcimonieuse (i.e. SPIRIT) — sont appliquées à l’estimation des ISRFs pour les différentes bandes spectrales et fibres des instruments MicroCarb et CO2M. Parmi les méthodes paramétriques, on distingue les approches classiques de la littérature : la méthode gaussienne (notée G), la super-gaussienne (SG) [17], ainsi que deux variantes introduites pour améliorer la flexibilité du modèle : la super-gaussienne asymétrique (SG_a) et la somme de deux gaussiennes (SG_2). Ces méthodes sont comparées à la méthode SPIRIT, qui repose sur la représentation parcimonieuse à l’aide des algorithmes OMP et LASSO, associés à deux types de dictionnaires : SVD et K-SVD. Dans un second temps, une étude comparative des méthodes de représentation parcimonieuse est menée, incluant l’utilisation de l’enveloppe quadratique. L’objectif global est de proposer une comparaison aussi exhaustive que possible entre les approches paramétriques et non paramétriques basées sur la parcimonie, dans le cadre spécifique de l’estimation des ISRFs.

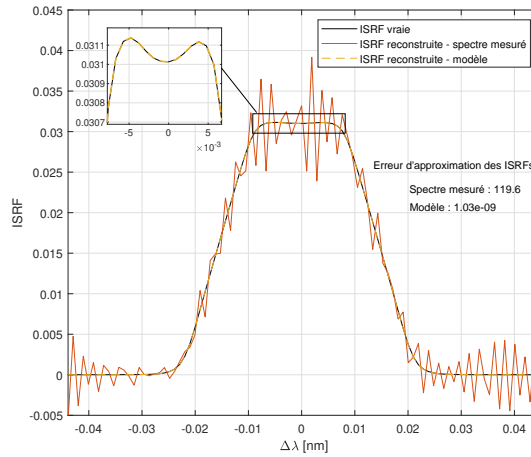


FIGURE 2.15 – Illustration de l'estimation d'une ISRF dont le spectre mesuré est obtenu soit suivant le modèle soit en effectuant une convolution.

Modèles paramétriques et représentation parcimonieuse

Dans un premier temps, une comparaison est effectuée entre les modèles paramétriques (gaussien, super-gaussien, super-gaussien asymétrique et somme de super-gaussiennes) et la méthode SPIRIT (basée sur les algorithmes OMP et LASSO, avec des dictionnaires construits via SVD ou K-SVD). Les résultats obtenus pour les quatre bandes de l'instrument MicroCarb sont présentés dans les figures 2.16 et 2.17, tandis que ceux correspondant à quatre fibres de l'instrument CO2M sont illustrés dans 2.18 et 2.19. Dans ces figures, pour chaque bande (ou fibre), le spectre mesuré est d'abord affiché, suivi de l'analyse des différences entre ce spectre et ses reconstructions obtenues par les différentes méthodes. Pour chacune d'elles, les résidus locaux (par fenêtre glissante) ainsi que les résidus globaux sont reportés. Enfin, les deux dernières figures montrent les résultats en termes d'erreur d'approximation des ISRFs en fonction de la longueur d'onde et pour une cardinalité K qui minimise l'erreur d'estimation des ISRFs, et d'erreur moyenne selon la cardinalité K , c'est-à-dire le nombre d'atomes non nuls sélectionnés dans le dictionnaire.

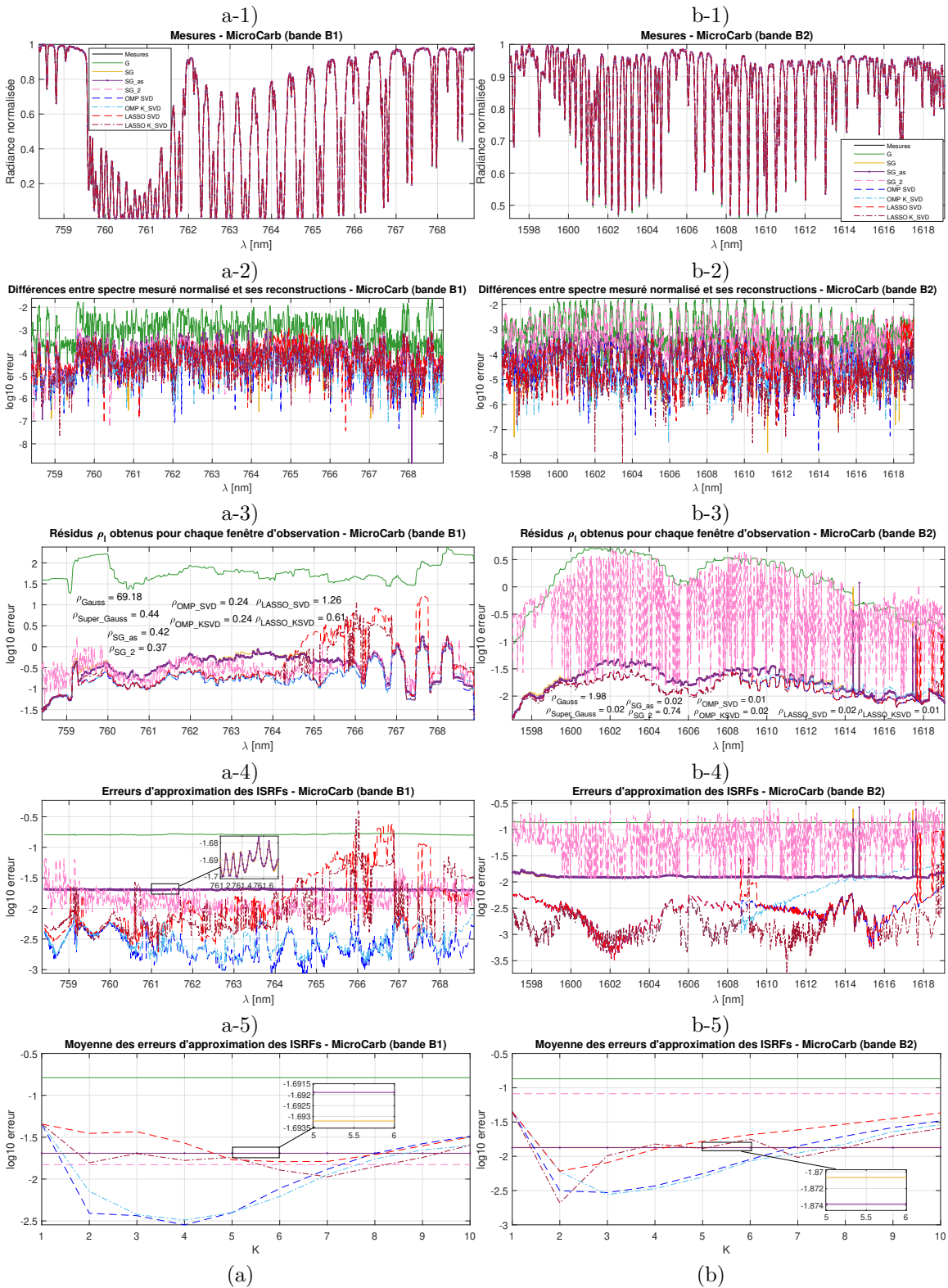


FIGURE 2.16 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), des résidus ρ_l pour chaque longueur d'onde (3), de l'erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation de l'ISRF en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP, LASSO, SVD et KSVD) et pour les bandes B1 (a) et B2 (b) de MicroCarb.

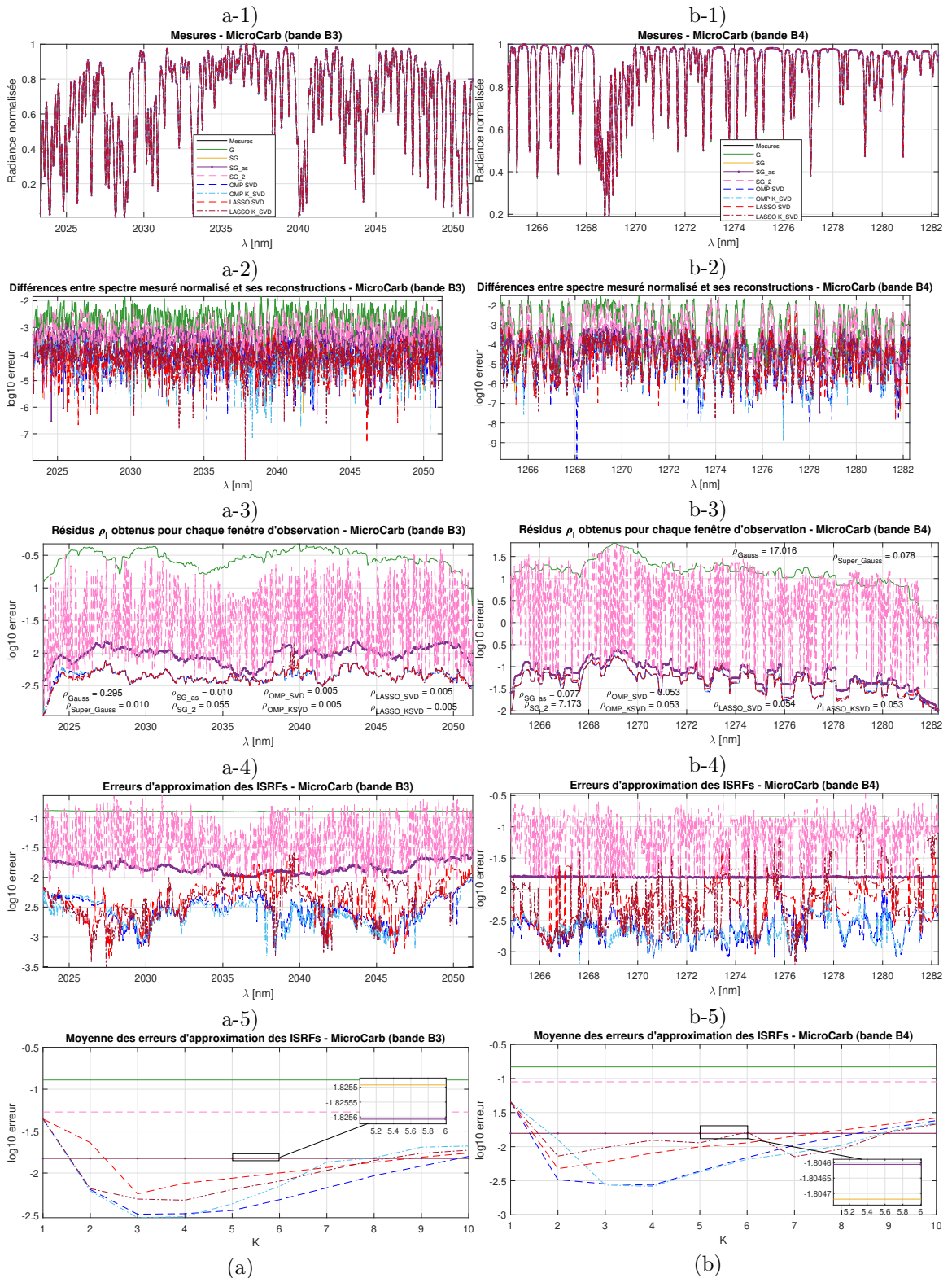


FIGURE 2.17 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), des résidus ρ_i pour chaque longueur d’onde (3), de l’erreur d’approximation de l’ISRF en fonction de la longueur d’onde (4) et de l’erreur moyenne d’approximation de l’ISRF en fonction du nombre d’atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP, LASSO, SVD et KSVD) et pour les bandes B3 (a) et B4 (b) de MicroCarb.

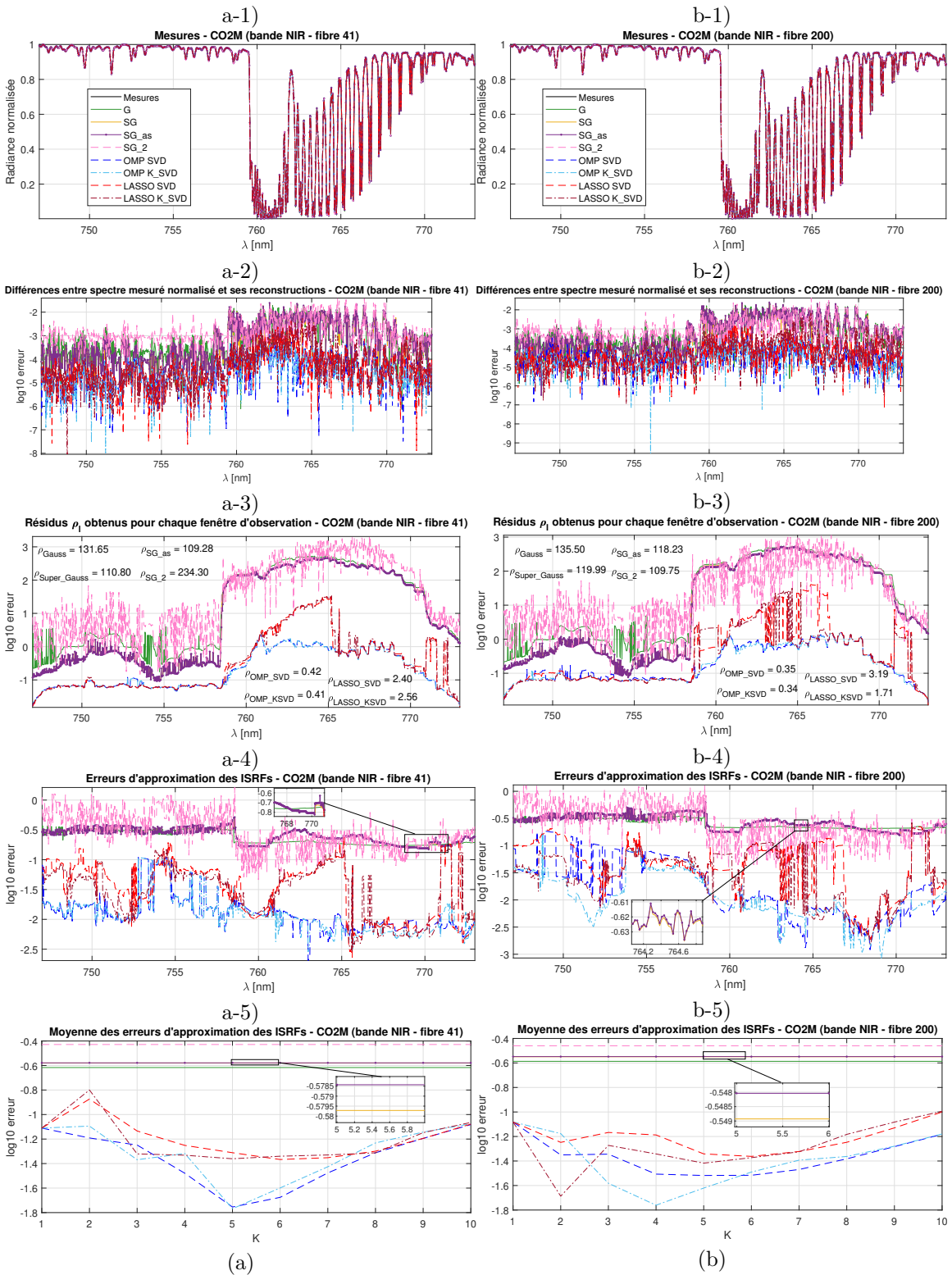


FIGURE 2.18 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), des résidus ρ_l pour chaque longueur d'onde (3), de l'erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation de l'ISRF en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP, LASSO, SVD et KSVD) et pour les fibres 41 (a) et 200 (b) de CO2M.

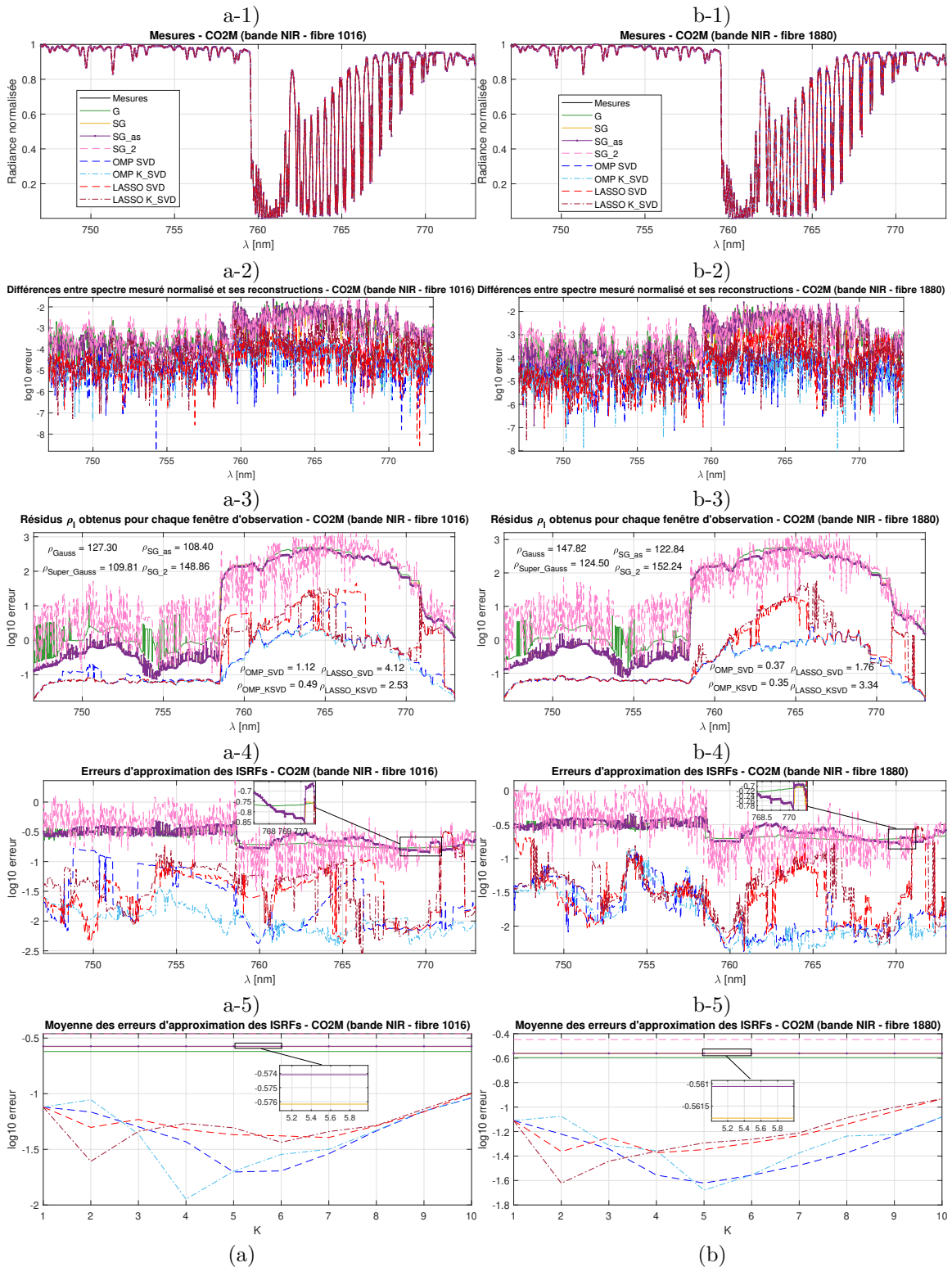


FIGURE 2.19 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), des résidus ρ_l pour chaque longueur d'onde (3), de l'erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation de l'ISRF en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP, LASSO, SVD et KSVD) et pour les fibres 1016 (a) et 1880 (b) de CO2M.

Les résultats obtenus varient fortement selon l'instrument considéré, mais également selon les bandes (pour MicroCarb) ou les fibres (pour CO2M). De manière générale, le modèle gaussien donne les moins bonnes performances. Comme le montre l'étude de [17], le modèle super-gaussien permet d'améliorer l'ajustement, mais les erreurs restent globalement bien supérieures au seuil de 1% requis pour les missions. Pour la bande B1 de MicroCarb, la somme de deux super-gaussiennes permet de réduire davantage l'erreur d'approximation des ISRFs. Cependant, même dans ce cas, l'erreur reste supérieure au seuil de 1%. Par ailleurs, cette méthode n'apporte pas d'amélioration significative pour les autres bandes de MicroCarb ni pour les fibres de CO2M. De même, l'introduction d'un paramètre d'asymétrie dans le modèle super-gaussien n'entraîne pas de gain notable, les performances restant comparables à celles du modèle symétrique.

En revanche, les méthodes de représentation parcimonieuse regroupées sous l'approche SPIRIT, qu'elles reposent sur OMP ou LASSO, surpassent clairement les approches paramétriques, quelle que soit la nature du dictionnaire utilisé (SVD ou K-SVD). Les meilleures performances globales sont obtenues avec SPIRIT basé sur OMP, les dictionnaires SVD et K-SVD produisant des résultats similaires. Cette tendance se vérifie aussi bien pour MicroCarb que pour CO2M. Concernant CO2M, les erreurs d'approximation des ISRFs restent légèrement supérieures au seuil de 1%, sans jamais le franchir totalement. Une analyse plus fine montre que ces erreurs sont concentrées en début de spectre, entre 740 et 758 nm, tandis qu'elles deviennent nettement plus faibles au-delà, atteignant même 0.1% pour certaines longueurs d'onde et certaines fibres — notamment la fibre 200, qui présente le plus faible écart entre les ISRFs sol et vol. Deux facteurs peuvent expliquer cette difficulté locale : 1) le dictionnaire construit à partir des ISRFs sol pourrait être moins adapté pour représenter les ISRFs vol, en particulier dans cette plage spectrale ou 2) cela pourrait s'expliquer par la forme du spectre mesuré pour CO2M. En effet, l'analyse des spectres mesurés montre que cette portion (740-758 nm) est relativement plate, avec peu de variations, ce qui rend l'estimation des ISRFs plus délicate du fait d'une moindre sensibilité du signal aux variations instrumentales.

Extension à d'autres méthodes de résolution pour la représentation parcimonieuse

Nous avons montré dans [21] que dans une configuration particulière où les ISRFs sont supposées constantes au sein de la fenêtre glissante, et pour un nombre d'observations fixé à $L = 40$ avec un dictionnaire de taille $N_D = 50$, l'utilisation d'une régularisation basée sur l'enveloppe quadratique permet d'améliorer significativement la qualité de l'estimation des ISRFs. L'objectif de cette section est donc de se concentrer plus en détail sur les méthodes de représentation parcimonieuse et d'évaluer l'apport potentiel de nouvelles régularisations, en particulier celles basées sur des enveloppes quadratiques, dans le cadre de l'estimation des fonctions de réponse spectrale instrumentale. Les résultats sont de nouveau présentés pour l'ensemble des bandes de MicroCarb (figure 2.20) et des fibres de CO2M (figure 2.21). Les mêmes indicateurs que précédemment sont affichés : les résidus obtenus pour chaque fenêtre d'observation, l'erreur d'approximation des ISRFs en fonction de la longueur d'onde (pour la valeur de cardinalité K minimisant l'erreur moyenne), ainsi que l'erreur moyenne en fonction de K . L'utilisation de l'enveloppe quadratique nécessite de fixer deux paramètres clés, le paramètre de régularisation γ et le pas d'itération ρ pour l'opérateur proximal. Des valeurs appropriées de ces paramètres, cohérentes avec la conjecture discutée dans la partie technique de [51] sont :

$$\gamma = \frac{|\Psi_l|^2}{1.2} \text{ et } \rho = \frac{|\Psi_l|^2}{0.9}.$$

Cependant, dans notre contexte, la sélection de ces paramètres s'avère complexe et pourrait nécessiter un ajustement plus fin pour optimiser les performances. En effet, ces paramètres devraient idéalement être estimés de manière spécifique pour chacune des 1024 fenêtres glissantes, ce qui rend l'optimisation difficile. Cela est particulièrement visible sur les résultats obtenus pour les bandes B2 et B3 de MicroCarb ainsi que pour les fibres 41 et 1016 de CO2M : on y observe des pics localisés d'erreur d'approximation des ISRFs à certaines longueurs d'onde, vraisemblablement dus à une mauvaise calibration des paramètres γ et ρ . Ce comportement met en évidence un aspect délicat de

l'approche : la sensibilité aux réglages de la régularisation, ce qui peut constituer un défi pour une application robuste et automatisée sur l'ensemble du spectre.

Globalement, les résultats obtenus pour l'ensemble des bandes de MicroCarb, ainsi que pour certaines fibres de CO2M (notamment les fibres 200 et 1880), montrent que l'utilisation d'une régularisation basée sur l'enveloppe quadratique permet de réduire significativement l'erreur d'approximation des ISRFs par rapport aux régularisations ℓ_0 et ℓ_1 . Pour MicroCarb, cette approche permet d'atteindre des erreurs extrêmement faibles, parfois inférieures à 0,1% selon la bande spectrale et la longueur d'onde considérée. Concernant CO2M, les erreurs restent généralement supérieures au seuil de 1%, mais des performances proches de ce seuil sont atteintes, notamment pour la fibre 1880, y compris en début de bande, où l'estimation est généralement plus difficile.

Les figures 2.22, 2.23, 2.24 et 2.25 synthétisent les performances des différentes méthodes de représentation parcimonieuse (OMP, LASSO, régularisation par enveloppe quadratique) en affichant, pour chaque longueur d'onde : en haut, le résidu ρ_l entre le spectre mesuré et sa reconstruction, pour la valeur de K minimisant le résidu, en bas à gauche, l'erreur d'approximation des ISRFs en fonction de la longueur d'onde, pour cette même valeur optimale de K , en bas à droite, la valeur de la cardinalité K minimisant l'erreur d'approximation des ISRFs pour chaque fenêtre glissante. Pour MicroCarb, on observe que le résidu est minimisé pour des valeurs de cardinalité relativement élevées, pouvant aller jusqu'à $K = 10$, tandis que l'erreur d'approximation des ISRFs est souvent minimisée pour un nombre d'atomes plus faible (entre 2 et 7, avec quelques pics à $K = 1$ ou $K = 10$ pour LASSO). Dans le cas de CO2M, les valeurs optimales de K pour minimiser le résidu restent relativement élevées, mais l'écart avec les valeurs optimales de K minimisant l'erreur d'approximation des ISRFs est moins marqué que pour MicroCarb.

Les temps de simulation moyens pour l'estimation d'une ISRF donnée et pour une cardinalité K fixée sont présentés dans le tableau 2.2. La méthode OMP se distingue par sa rapidité d'exécution, étant la plus efficace parmi toutes les approches testées. En comparaison, la méthode LASSO est environ dix fois plus lente, en raison de sa nature itérative et du coût lié à l'ajustement du paramètre de régularisation. La méthode fondée sur l'enveloppe quadratique est encore plus coûteuse en temps de calcul, ce qui s'explique par son recours à une descente de gradient pour la résolution du problème inverse, une procédure naturellement plus longue.

TABLE 2.2 – Temps de simulation moyen pour l'estimation d'une ISRF selon les différentes méthodes pour la bande B1 de MicroCarb (OMP et SVD, OMP et K-SVD, LASSO et SVD, LASSO et K-SVD, EnvQuad et SVD, EnvQuad et K-SVD, soft et SVD, soft et K-SVD, hard et SVD, hard et K-SVD) et cardinalité K associée.

	Temps de simulation moyen (s)
OMP et SVD	3.69e-04 (K=4)
OMP et K-SVD	2.84e-04 (K=4)
LASSO et SVD	0.0073 (K=6)
LASSO et K-SVD	0.0067 (K=7)
EnvQuad et SVD	1.57 (K=3)
EnvQuad et K-SVD	1.57 (K=3)

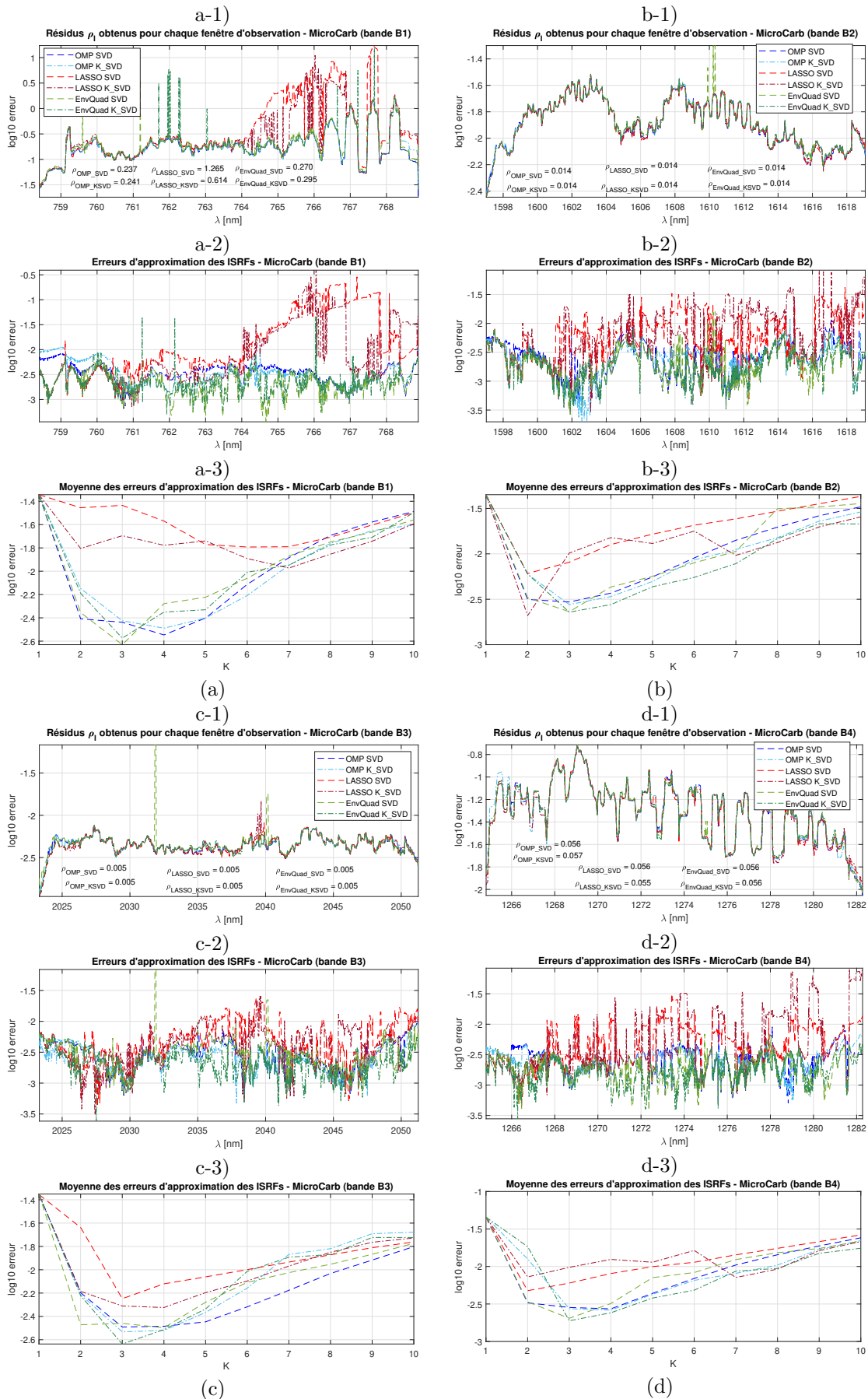


FIGURE 2.20 – Résidus ρ_l par longueur d'onde (1), erreur d'approximation de l'ISRF selon la longueur d'onde pour $K = 3$ (2) et erreur moyenne en fonction du nombre d'atomes (3), pour les méthodes parcimonieuses (OMP, LASSO, Enveloppe quadratique) et dictionnaires (SVD, K-SVD) sur MicroCarb bandes B1 (a), B2 (b), B3 (c) et B4 (d).

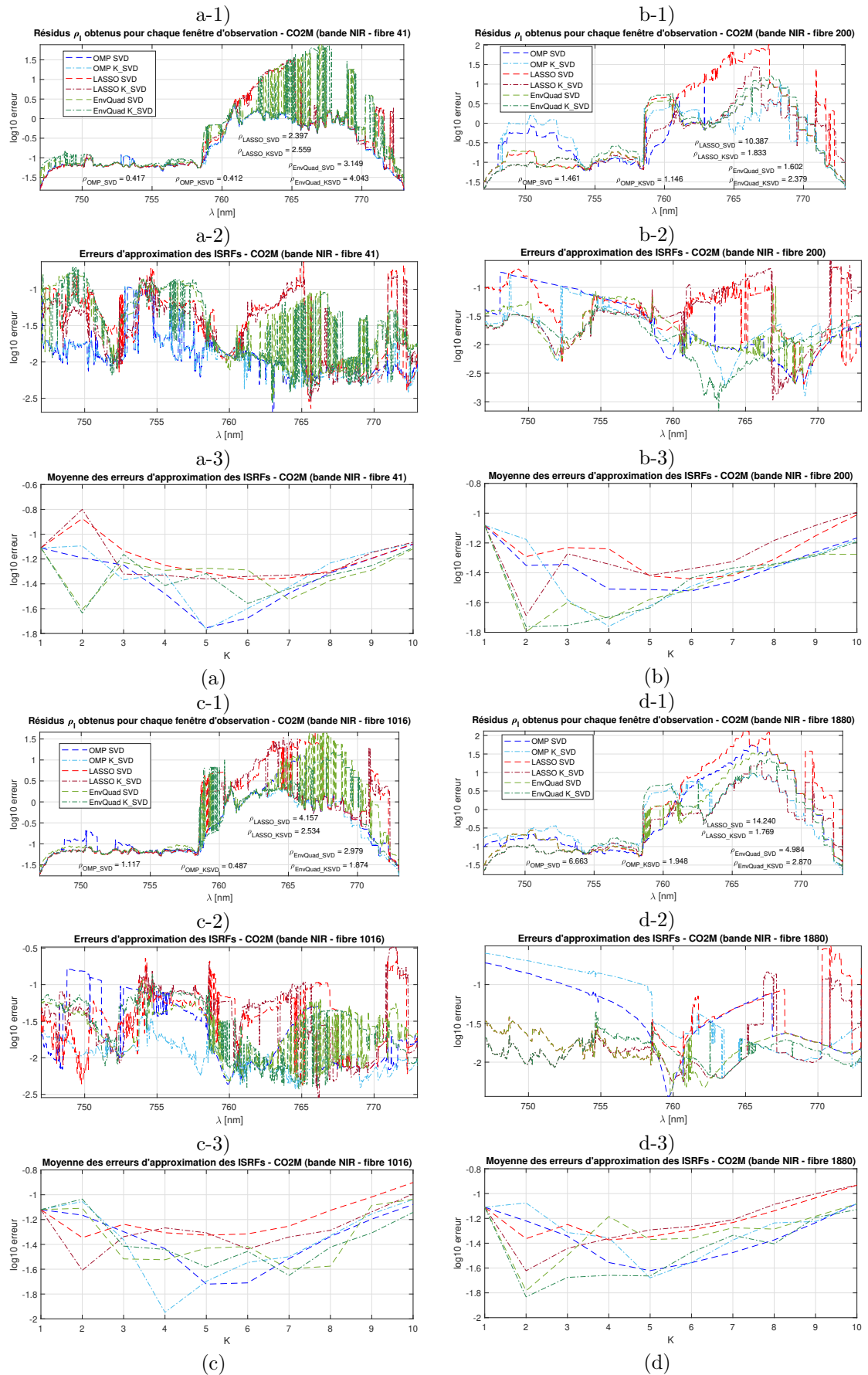


FIGURE 2.21 – Résidus ρ_l par longueur d'onde (1), erreur d'approximation de l'ISRF selon la longueur d'onde (2) pour $K = 5$ (a), $K = 2$ (b et d), $K = 4$ (c) et erreur moyenne en fonction du nombre d'atomes (3), pour les méthodes parcimonieuses (OMP, LASSO, Enveloppe quadratique) et dictionnaires (SVD, K-SVD) sur CO2M fibres 41 (a), 200 (b), 1016 (c) et 1880 (d).

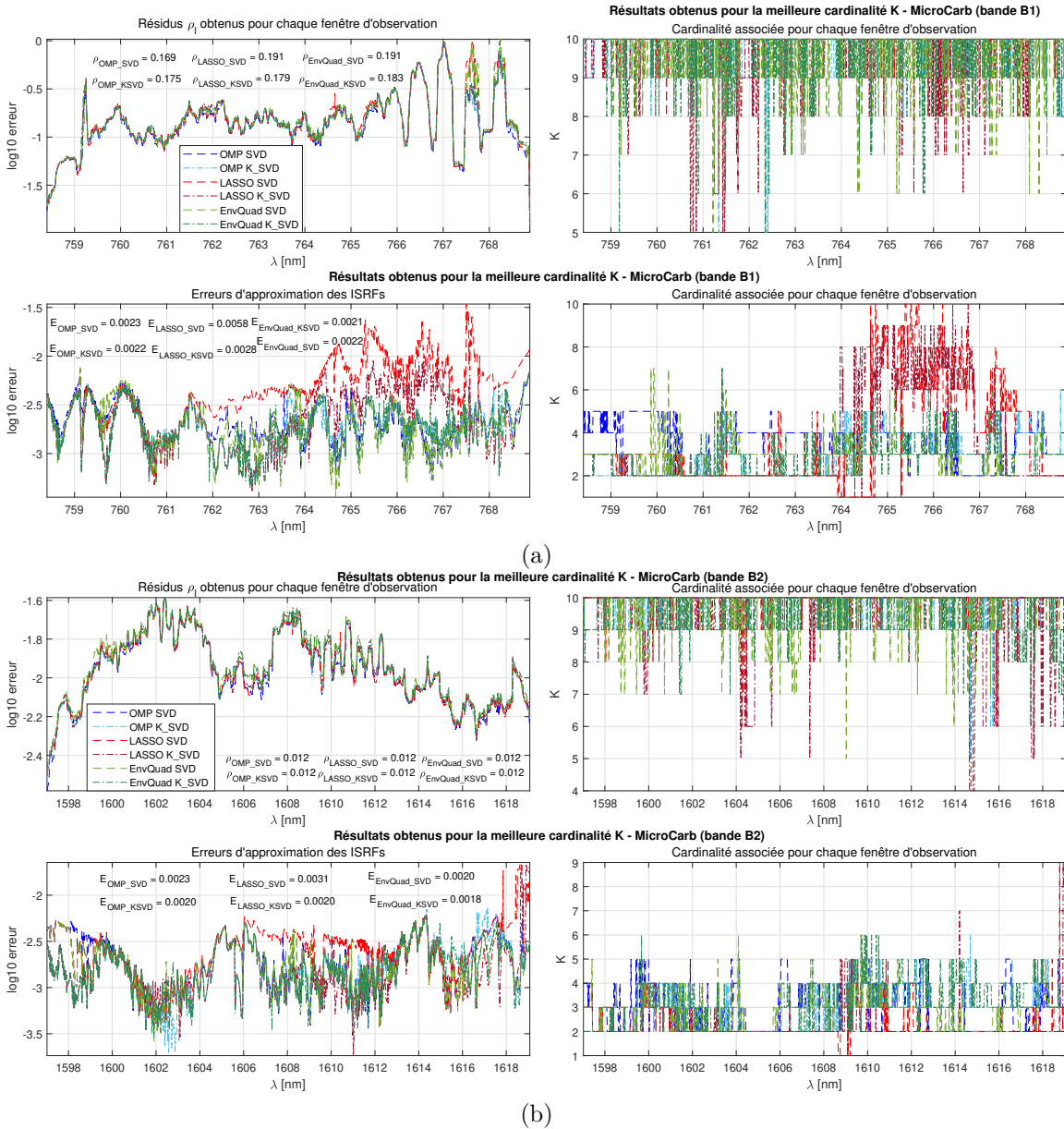


FIGURE 2.22 – Illustration des résidus ρ_i par longueur d'onde (gauche) pour la meilleure cardinalité K (droite), et de l'erreur d'approximation des ISRFs selon la longueur d'onde (en bas à gauche) avec la meilleure cardinalité K associée (en bas à droite), pour différentes méthodes (OMP, LASSO, Enveloppe Quadratique) et dictionnaires (SVD, KSVD) sur MicroCarb bandes B1 (a), B2 (b).

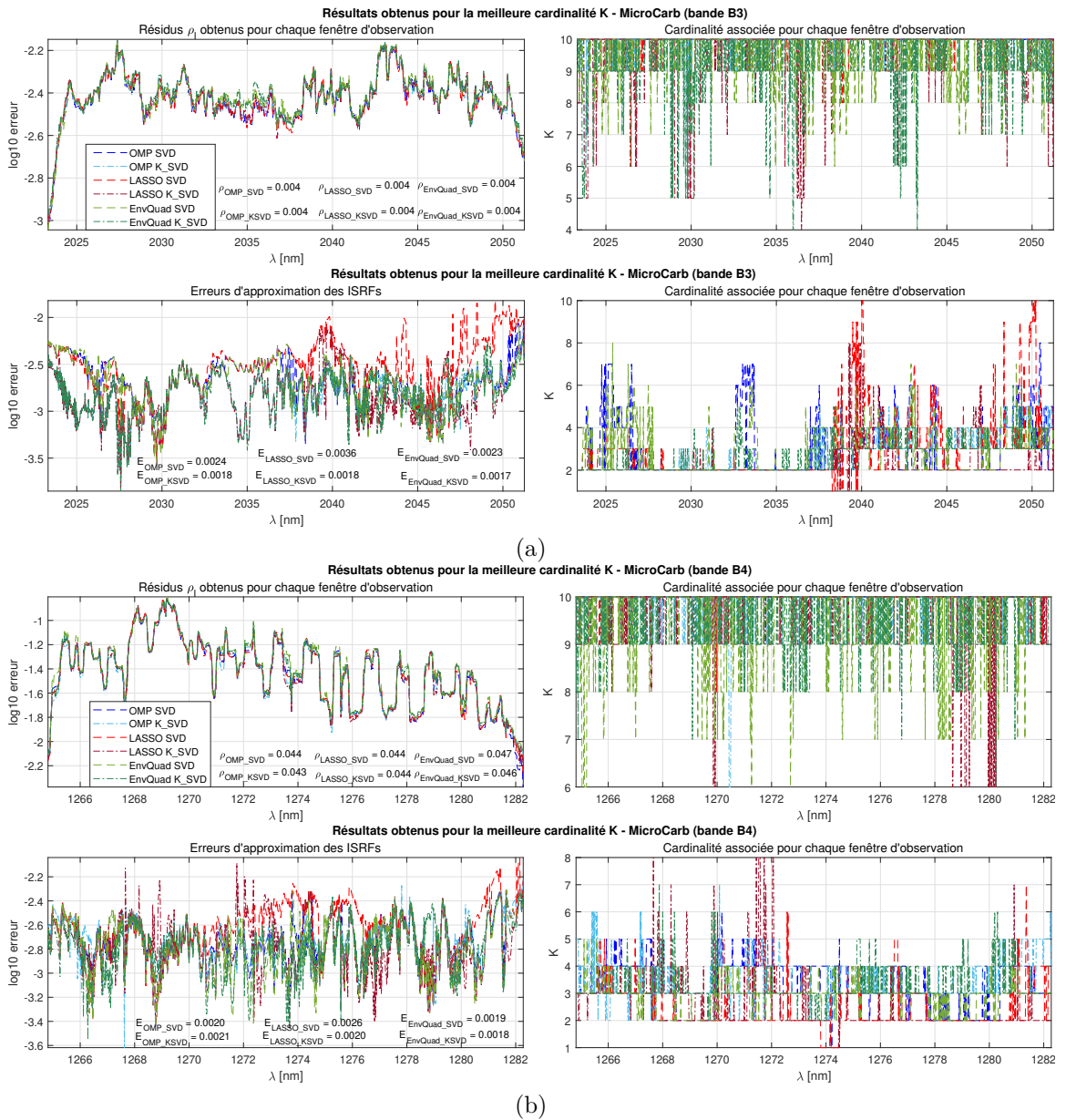


FIGURE 2.23 – Illustration des résidus ρ_l par longueur d'onde (gauche) pour la meilleure cardinalité K (droite), et de l'erreur d'approximation des ISRFs selon la longueur d'onde (en bas à gauche) avec la meilleure cardinalité K associée (en bas à droite), pour différentes méthodes (OMP, LASSO, Enveloppe Quadratique) et dictionnaires (SVD, KSVD) sur MicroCarb bandes B3 (a) et B4 (b).

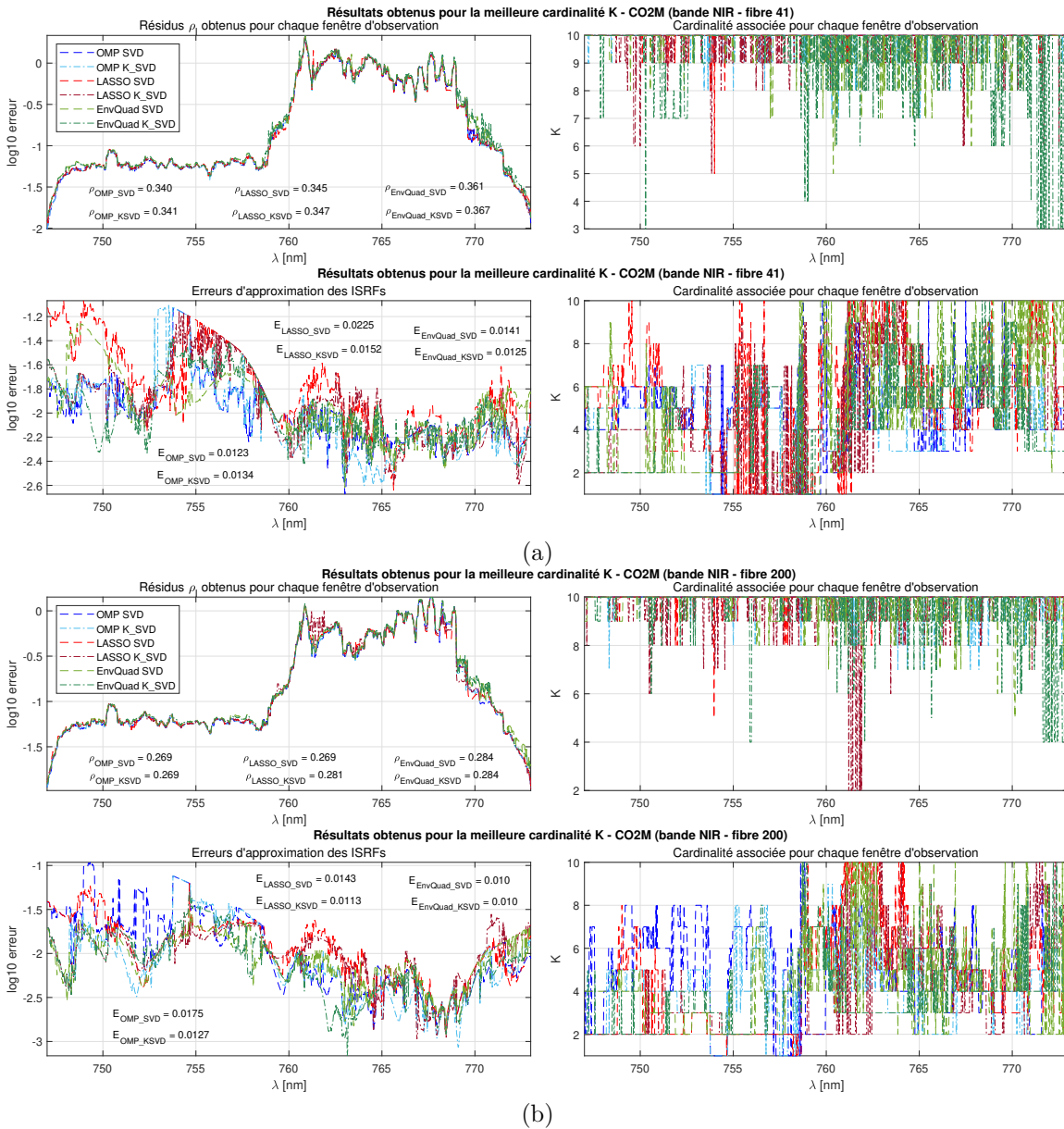


FIGURE 2.24 – Illustration des résidus ρ_i par longueur d'onde (gauche) pour la meilleure cardinalité K (droite), et de l'erreur d'approximation des ISRFs selon la longueur d'onde (en bas à gauche) avec la meilleure cardinalité K associée (en bas à droite), pour différentes méthodes (OMP, LASSO, Enveloppe Quadratique) et dictionnaires (SVD, KSVD) sur CO2M fibres 41 (a), 200 (b).

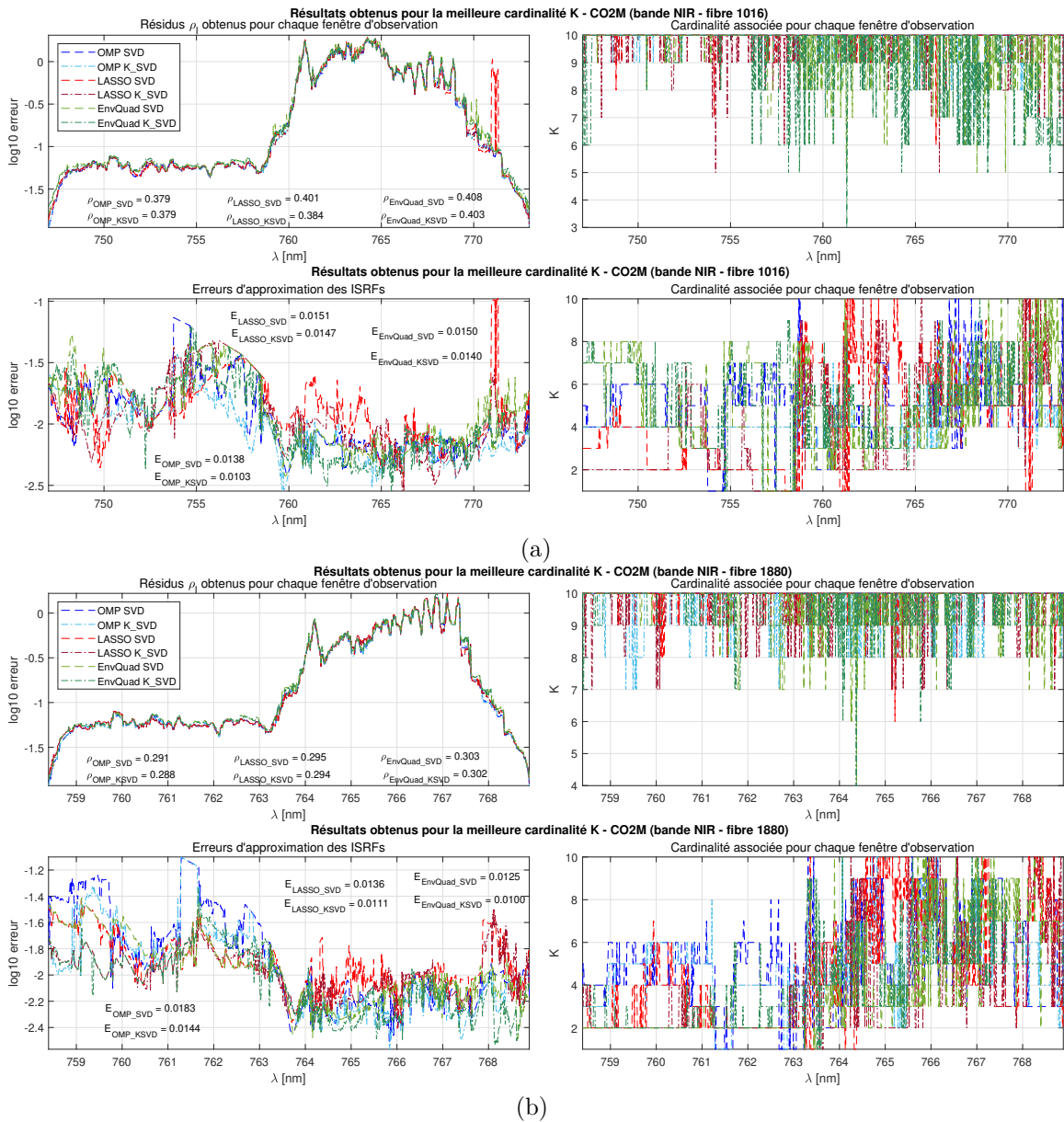


FIGURE 2.25 – Illustration des résidus ρ_l par longueur d'onde (gauche) pour la meilleure cardinalité K (droite), et de l'erreur d'approximation des ISRFs selon la longueur d'onde (en bas à gauche) avec la meilleure cardinalité K associée (en bas à droite), pour différentes méthodes (OMP, LASSO, Enveloppe Quadratique) et dictionnaires (SVD, KSVD) sur CO2M fibres 1016 (a) et 1880 (b).

Conclusion sur les méthodes utilisées

En définitive, cette partie a été consacrée à effectuer une comparaison entre les modèles paramétriques et les modèles de type SPIRIT (basés sur la représentation parcimonieuse). Il en ressort que, pour les modèles paramétriques, l'utilisation de la somme de super-gaussiennes et d'une super-gaussienne asymétrique ne permet pas d'améliorer de manière significative les résultats d'estimation des ISRFs. Dans tous les cas étudiés, les méthodes de type SPIRIT permettent d'améliorer largement les performances d'estimation, que ce soit au niveau de la reconstruction du spectre, des résidus ou des erreurs d'estimation des ISRFs en fonction de la longueur d'onde. Une autre méthode de régularisation a été testée, basée sur la régularisation par enveloppe quadratique, qui permet notamment de minimiser encore davantage l'erreur d'estimation des ISRFs. Cependant, les paramètres de cette méthode peuvent être difficiles à régler dans le contexte des ISRFs variant d'une longueur d'onde à une autre.

En ce qui concerne les temps de calculs, l'utilisation des enveloppes quadratiques nécessite le réglage de ses paramètres, ce qui entraîne des temps de simulation plus longs. Les résultats obtenus avec l'algorithme OMP sont déjà très performants, avec un temps de simulation très court. Par conséquent, pour les objectifs de la mission, si l'enjeu est d'estimer les ISRFs le plus précisément possible sans contrainte de temps de calcul, l'utilisation de la régularisation par enveloppe quadratique sera recommandée (avec une attention particulière portée au paramétrage). En revanche, si une estimation rapide des fonctions est nécessaire tout en conservant une bonne précision, l'algorithme OMP est préférable.

Dans la suite, différents tests de sensibilité aux paramètres (taille du dictionnaire, taille de la fenêtre glissante, robustesse au bruit, etc.) sont effectués, et les résultats obtenus avec les algorithmes OMP et LASSO (les plus rapides) sont comparés à deux modèles issus de la littérature (Gauss et Super-Gauss) [17].

2.3.3 Sensibilité aux paramètres

L'approche proposée nécessite le choix de paramètres, notamment la taille de la fenêtre glissante $L + 1$, la taille du dictionnaire N_D et le nombre d'atomes K . Le nombre d'atomes K a été discuté précédemment et il a été constaté que les meilleurs résultats sont obtenus pour $K \approx 3 - 5$, quel que soit l'instrument, la bande ou la fibre considérés. Cette section étudie plus en détail l'impact de L et N_D sur les erreurs d'approximation des ISRFs. À cet effet, les figures 2.26 et 2.27 pour les 4 bandes de MicroCarb et 2.28 et 2.29 pour les 4 fibres de CO2M présentent les erreurs d'approximation (en échelle \log_{10}) en fonction de L pour les paramétrisations gaussienne et super-gaussienne, ainsi qu'en fonction de (L, N_D) pour les méthodes basées sur la représentation parcimonieuse. Les résultats sont moyennés sur l'ensemble des ISRFs. Comme attendu, les erreurs d'estimation des ISRFs diminuent lorsque L augmente. Cette diminution est toutefois plus marquée pour les méthodes parcimonieuses : par exemple, pour la bande B1 de MicroCarb et pour $L = 80$, les erreurs moyennes d'ISRF sont d'environ 16% pour la gaussienne, 2% pour la super-gaussienne, alors qu'elles sont égales à 0.29% pour OMP/SVD, 0.33% pour OMP/K-SVD, 1.23% pour LASSO/SVD et 1.40% pour LASSO/K-SVD, ce qui illustre l'intérêt d'exploiter la parcimonie pour l'estimation des ISRFs. On remarque également, d'après les résultats affichés dans ces deux figures, qu'il n'est pas recommandé d'utiliser des dictionnaires trop grands, car les erreurs d'estimation des ISRFs sont relativement élevées pour de grandes valeurs de N_D . Ceci est particulièrement vrai pour l'instrument CO2M. Sur cette base, la valeur $N_D = 25$ a été retenue pour toutes les autres expériences et la taille de la fenêtre glissante est fixée à $L = 80$.

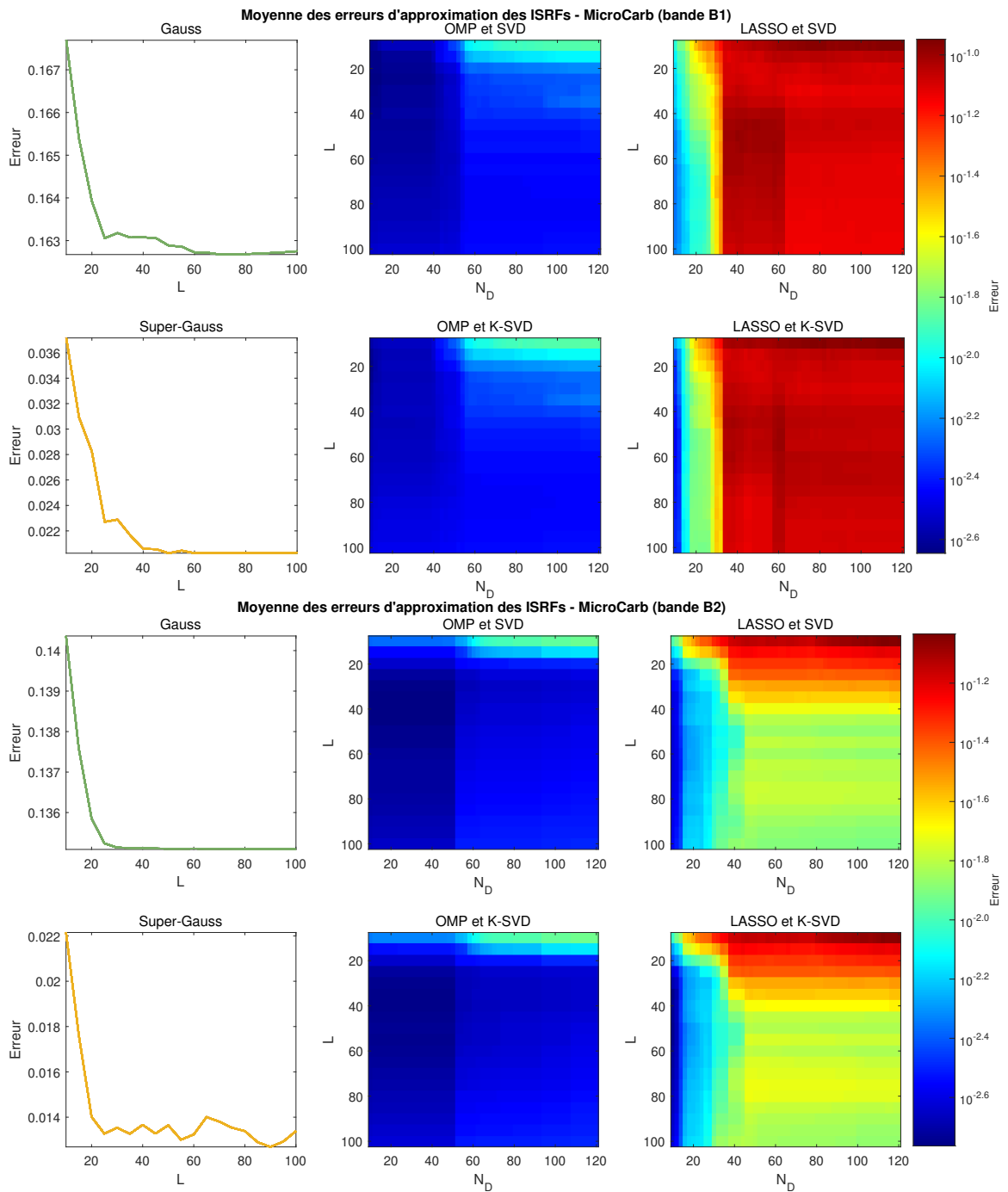


FIGURE 2.26 – Illustration de l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs avec les différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP et LASSO avec dictionnaire SVD ou K-SVD) en fonction des paramètres N_D et $L + 1$ pour la mission MicroCarb (bande B1 et B2).

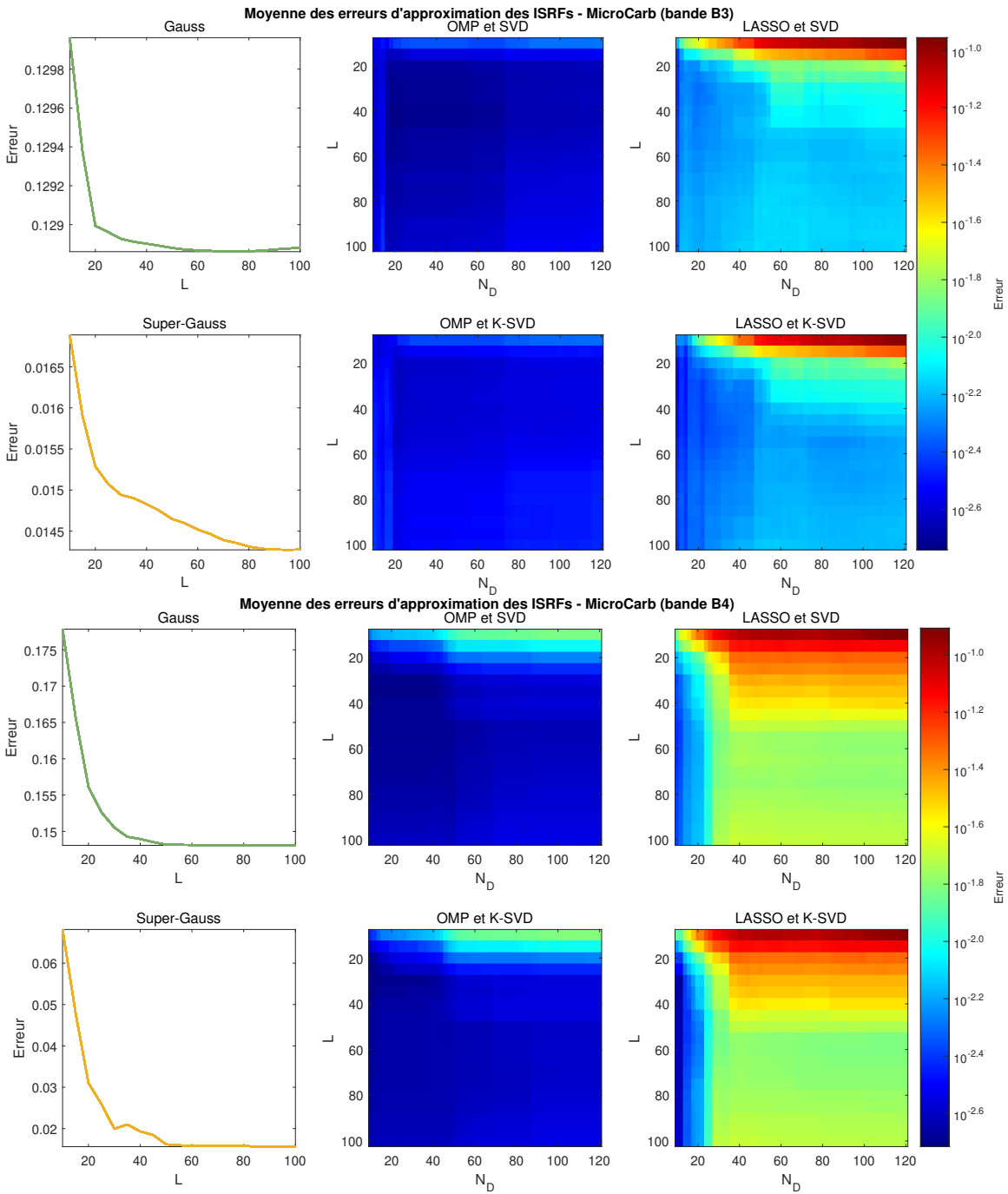


FIGURE 2.27 – Illustration de l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs avec les différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP et LASSO avec dictionnaire SVD ou K-SVD) en fonction des paramètres N_D et $L + 1$ pour la mission MicroCarb (bande B3 et B4).

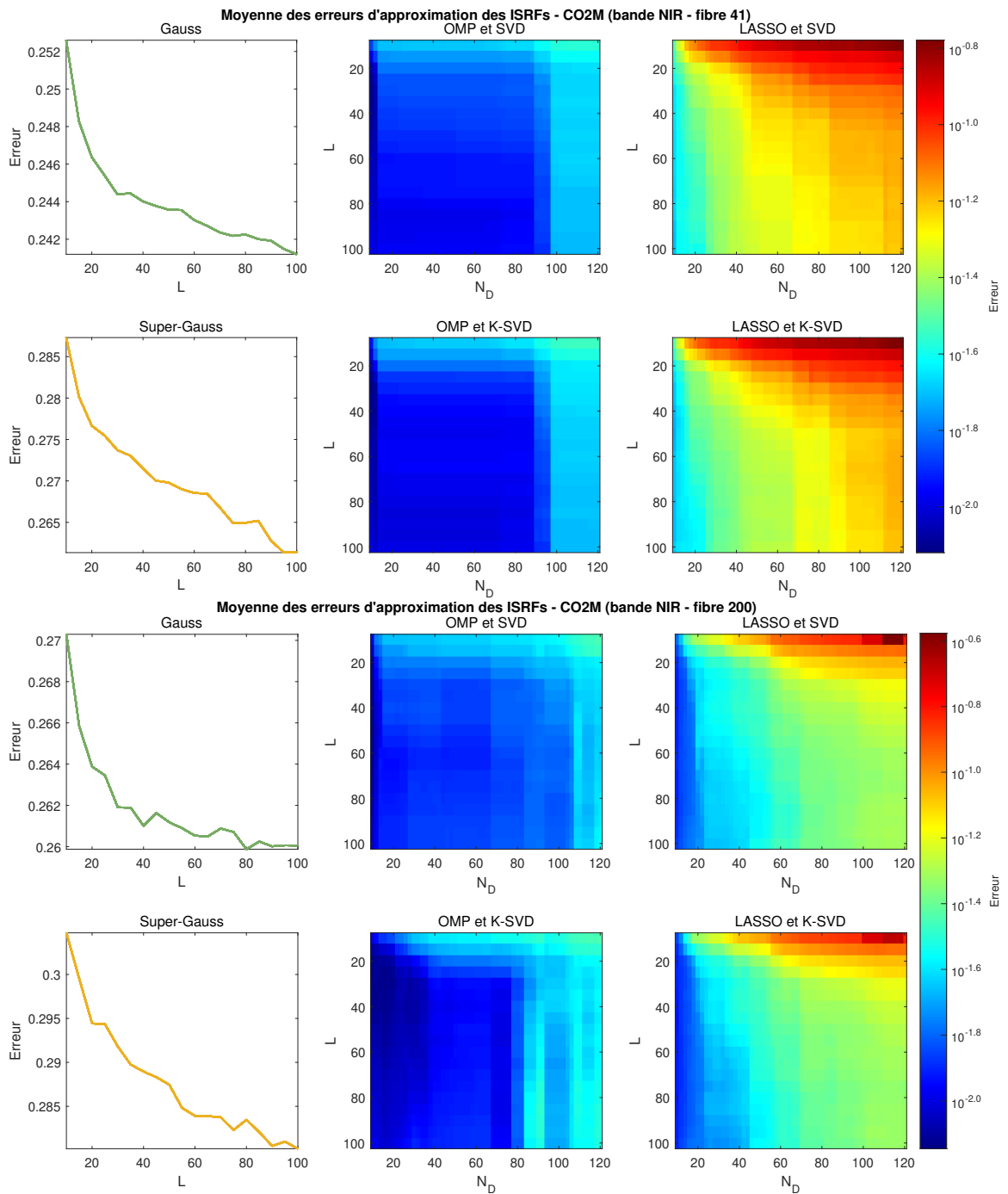


FIGURE 2.28 – Illustration de l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs avec les différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP et LASSO avec dictionnaire SVD ou K-SVD) en fonction des paramètres N_D et $L + 1$ pour la mission CO2M (fibre 41 et 200).

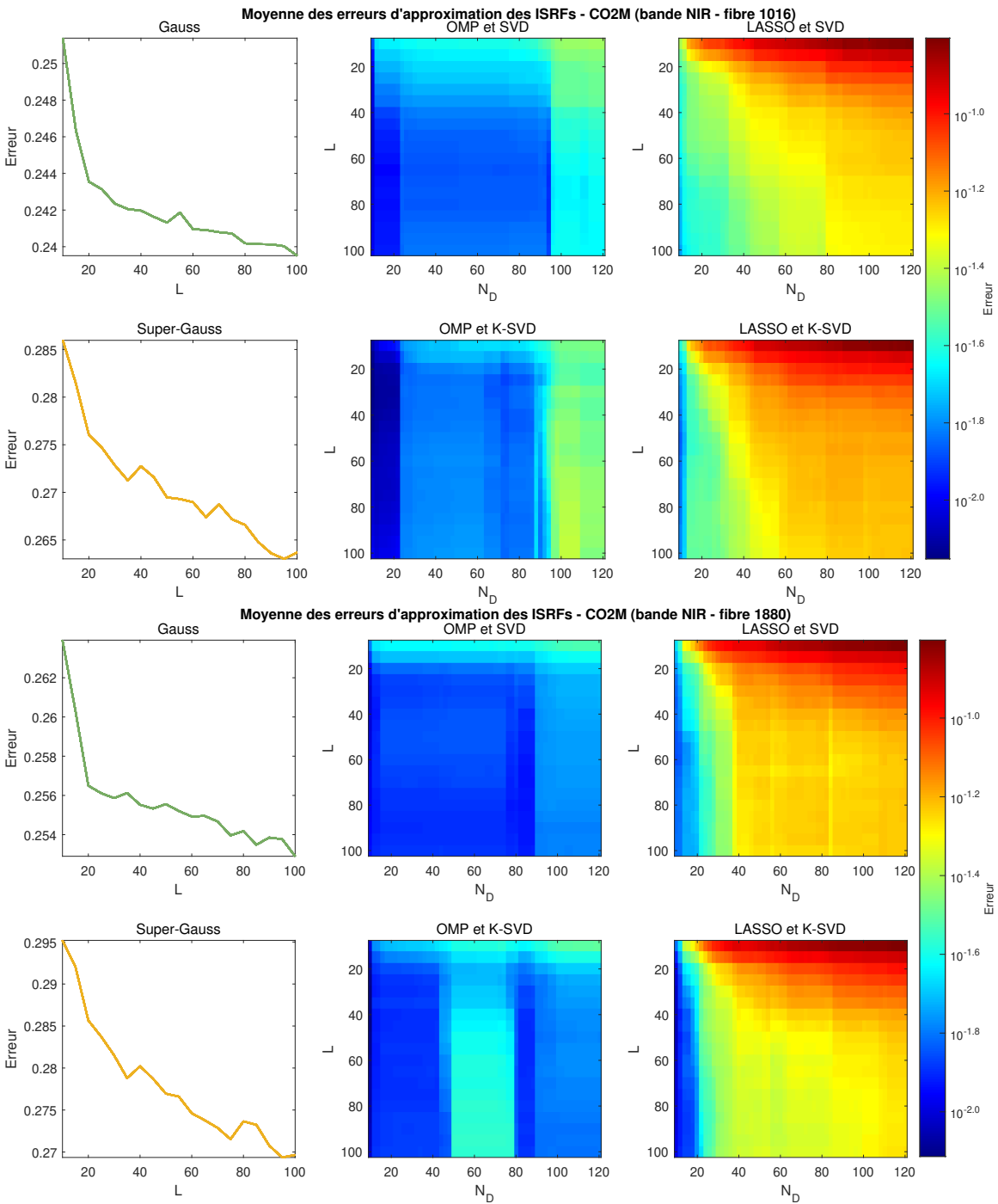


FIGURE 2.29 – Illustration de l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs avec les différentes méthodes (gaussienne, super-gaussienne, OMP et LASSO avec dictionnaire SVD ou K-SVD) en fonction des paramètres N_D et $L + 1$ pour la mission CO2M (fibre 1016 et 1880).

2.3.4 Analyse de la robustesse à la présence de bruit

Cette section étudie la robustesse des méthodes pour l'estimation des ISRFs à la présence de bruit additif. Pour cela, un bruit blanc gaussien a été ajouté aux mesures spectrales selon différents niveaux de rapport signal sur bruit (SNR). La table 2.3 présente les erreurs de résidu ainsi que les erreurs d'approximation normalisées des ISRFs pour les instruments MicroCarb et CO2M. Les erreurs inférieures à 1% sont indiquées en bleu. Les résultats montrent que, pour MicroCarb, les méthodes basées sur la représentation parcimonieuse permettent d'obtenir des erreurs normalisées inférieures à 1% dès que le SNR dépasse 20 dB. L'algorithme OMP se révèle plus performant que LASSO, qui donne des erreurs plus élevées pour ce spectromètre. Pour CO2M, seule la combinaison OMP avec le dictionnaire K-SVD permet d'atteindre une erreur d'estimation inférieure à 1%, et ce uniquement pour un SNR très élevé de 120 dB. Cela souligne la plus grande sensibilité de cet instrument au bruit. Toutefois, dès que le SNR dépasse 40 dB, les méthodes SPIRIT surpassent les modèles paramétriques à la fois en termes de précision d'approximation des ISRFs et de réduction du résidu. Enfin, les modèles paramétriques montrent peu de variation face au bruit, ce qui suggère que leurs erreurs proviennent majoritairement d'un mauvais ajustement du modèle plutôt que du bruit lui-même.

En résumé, l'algorithme OMP couplé à une estimation du dictionnaire par SVD pour MicroCarb et par K-SVD pour CO2M offre globalement les meilleurs résultats pour l'estimation des ISRFs, y compris en présence de bruit additif.

TABLE 2.3 – Erreur moyenne d’approximation des ISRFs et résidu moyen selon le SNR et la méthode (G, SG, OMP, LASSO, SVD, K-SVD) pour MicroCarb et CO2M — en bleu : erreurs d’estimation des ISRFs sous le critère de mission ; en gras : meilleurs résultats

Instrument / SNR		Erreur d’approximation (%)						Résidu					
		G	SG	OMP SVD	OMP K-SVD	LASSO SVD	LASSO K-SVD	G	SG	OMP SVD	OMP K-SVD	LASSO SVD	LASSO K-SVD
MicroCarb bande B1	20 dB	16.28	3.39	4.58	4.37	14.38	14.23	185.5	116.4	112.3	112.4	112.7	112.9
	40 dB	16.27	2.04	0.54	0.56	2.05	2.37	70.2	1.56	1.32	1.32	1.53	1.70
	55 dB	16.27	2.03	0.29	0.33	1.33	1.66	69.21	0.43	0.23	0.24	0.38	0.61
	80 dB	16.27	2.03	0.28	0.32	1.27	1.68	69.2	0.39	0.20	0.20	0.34	0.60
	120 dB	8.03	7.79	0.51	0.55	0.83	0.73	45.07	37.32	1.11	1.13	1.14	1.13
MicroCarb bande B2	20 dB	14.01	8.92	8.65	8.73	40.22	38.75	28.04	25.79	25.25	25.30	24.94	25.06
	40 dB	13.51	1.67	0.84	0.80	3.33	4.22	2.24	0.27	0.260	0.2601	0.258	0.258
	55 dB	13.51	1.34	0.29	0.27	0.84	1.03	1.990	0.023	0.014	0.014	0.014	0.014
	80 dB	13.51	1.36	0.19	0.21	0.56	0.73	1.98	0.015	0.006	0.006	0.006	0.006
	120 dB	13.51	1.36	0.19	0.21	0.55	0.73	1.98	0.016	0.006	0.006	0.006	0.006
MicroCarb bande B3	20 dB	13.30	8.74	7.04	6.77	19.35	17.55	9.25	8.82	8.59	8.61	8.59	8.61
	40 dB	12.89	1.71	0.73	0.68	1.84	1.80	0.39	0.095	0.088	0.088	0.090	0.089
	55 dB	12.89	1.44	0.33	0.30	0.53	0.55	0.298	0.01	0.004	0.004	0.005	0.004
	80 dB	12.89	1.43	0.29	0.27	0.43	0.41	0.30	0.007	0.002	0.002	0.002	0.002
	120 dB	12.89	1.43	0.29	0.27	0.43	0.42	0.30	0.007	0.002	0.002	0.002	0.002
MicroCarb bande B4	20 dB	14.97	4.60	7.87	7.51	23.37	38.33	69.66	51.73	49.65	49.93	49.02	49.37
	40 dB	14.81	1.70	0.85	0.78	2.50	4.34	17.62	0.59	0.54	0.54	0.53	0.53
	55 dB	14.81	1.57	0.27	0.26	0.91	1.40	17.09	0.08	0.05	0.05	0.05	0.05
	80 dB	14.81	1.56	0.23	0.23	0.80	1.12	17.08	0.06	0.04	0.04	0.04	0.04
	120 dB	14.81	1.58	0.23	0.23	0.80	1.12	17.07	0.06	0.04	0.04	0.04	0.04
CO2M fibre 41	20 dB	27.69	31.08	29.22	43.32	130.64	75.08	307.6	284.8	157.8	164.8	170.4	168.0
	40 dB	24.32	26.78	7.23	6.06	22.08	10.80	133.64	112.71	2.02	2.02	9.94	4.26
	55 dB	24.25	26.49	4.83	1.76	10.25	4.04	131.93	110.98	0.45	0.42	8.29	2.63
	80 dB	24.18	26.50	4.64	0.97	8.85	3.06	131.89	110.92	0.40	0.36	8.28	2.56
	120 dB	24.21	26.52	4.66	0.96	8.84	3.04	131.87	110.93	0.40	0.36	8.27	2.56
CO2M fibre 200	20 dB	29.37	32.24	38.30	123.8	143.2	137.6	311.4	293.9	152.1	159.5	158.6	162.3
	40 dB	26.14	28.41	8.16	17.03	20.65	17.05	137.4	121.8	1.86	1.85	5.54	2.02
	55 dB	26.11	28.17	4.71	3.43	8.18	3.96	135.78	120.2	0.35	0.30	4.25	0.44
	80 dB	26.00	28.26	4.30	1.01	5.64	2.15	135.7	120.1	0.29	0.25	4.13	0.37
	120 dB	26.01	28.32	4.26	0.98	5.63	2.14	135.7	120.1	0.29	0.25	4.13	0.37
CO2M fibre 1016	20 dB	27.21	30.81	28.27	76.55	99.05	74.71	303.15	283.7	158.4	164.2	167.6	167.4
	40 dB	24.18	26.77	7.37	10.44	17.29	11.36	129.2	111.7	2.42	2.04	8.82	3.91
	55 dB	24.02	26.60	4.70	2.38	8.10	5.11	127.5	110.0	0.85	0.45	7.48	2.36
	80 dB	24.03	26.77	4.03	1	6.94	3.79	127.49	109.95	0.79	0.40	7.51	2.28
	120 dB	24.01	26.62	4.01	0.98	6.93	3.77	127.49	110.0	0.79	0.40	7.51	2.28
CO2M fibre 1880	20 dB	28.39	31.23	29.76	75.91	122.5	99.08	323.74	298.49	157.7	164.0	165.9	168.0
	40 dB	25.43	27.50	7.34	9.93	25.11	13.30	149.8	126.4	2.04	1.94	6.04	4.82
	55 dB	25.41	27.37	4.94	2.24	9.17	5.24	148.1	124.7	0.50	0.34	4.28	3.30
	80 dB	25.43	27.25	4.35	1.07	7.08	4.03	148.1	124.7	0.45	0.29	4.20	3.21
	120 dB	25.40	27.36	4.32	1.06	7.04	4.04	148.1	124.7	0.45	0.29	4.19	3.22

2.3.5 Application à d’autres instruments

Cette partie évalue les performances des méthodes d’estimation des ISRFs proposées dans cette thèse pour d’autres instruments que MicroCarb et CO2M, afin d’évaluer leur généricité et leur capacité à s’adapter à différents spectromètres. Cette démarche vise à montrer que la méthode

proposée peut être étendue à divers instruments tout en restant robuste et précise, contrairement aux modèles paramétriques classiques, généralement spécifiques à chaque instrument.

Présentation des instruments

Les instruments considérés dans cette partie incluent : l'instrument OCO-2, également dédié à la mesure des concentrations de CO_2 , ainsi que les instruments Avantes, GOME-2, OMI et TROPOMI, tels que décrits dans [17]. Les caractéristiques principales de ces instruments sont résumées dans le tableau 2.4. Pour chaque instrument, les ISRFs sont générées à partir des jeux de données qui leur sont respectivement associés. On rappelle que pour identifier les ISRFs aux longueurs d'onde nominales manquantes λ_l une interpolation linéaire entre deux longueurs d'onde nominales spécifiées, λ_a et λ_b a été utilisée. Cette interpolation est définie par :

$$I_l = \frac{\lambda_l - \lambda_a}{\lambda_b - \lambda_a} I_b + \frac{\lambda_b - \lambda_l}{\lambda_b - \lambda_a} I_a.$$

Une interpolation par splines a ensuite été utilisée pour générer les ISRFs sur N_λ longueurs d'onde, avec une taille d'échantillon N . Il convient de noter que le nombre N_λ de longueurs d'onde peut différer du nombre de pixels de l'instrument, notamment dans les cas où les ISRFs associées aux premiers et/ou derniers pixels ne sont pas disponibles.

TABLE 2.4 – Caractéristiques des instruments OCO-2, Avantes, GOME-2, OMI and TROPOMI.

Caractéristiques	Instruments considérés				
	OCO-2	Avantes	GOME-2	OMI	TROPOMI
Nombre de pixels spectraux	3 spectromètres	2048	- 4 canaux - 4 détecteurs 1024 pixels	- 2 détecteurs CCD 1024 pixels	4 spectromètres 4 détecteurs
Domaines spectraux	O_2A (757-772nm) WCO_2 (1594 - 1627nm) SCO_2 (2043 - 2087nm)	UV,VIS,NIR (296-459nm)	UV (240-790nm)	UV(UV1-270-310nm, UV2 :310-380nm) VIS(350-500nm)	UV (270-320nm) UVIS(320-500nm) NIR(675-775nm) SWIR(2305-2385nm)
Résolution	0.04nm 0.08nm 0.10nm	0.09-20nm	0.26 to 0.51nm	0.5nm	0.45-0.5nm 0.45-0.65nm 0.35-0.45nm 0.225-0.227nm
Nombre N_λ de longueurs d'onde	859 (O_2A)	1741	877 (397-604-nm)	750 (VIS)	994 (UVIS (305-499nm))
Taille N de l'ISRF	895	199	705	299	257

Mission OCO-2 OCO-2 est une mission satellitaire d'observation de la Terre de la NASA, lancée en juillet 2014, dédiée à l'étude du dioxyde de carbone atmosphérique (CO_2) et de l'oxygène. Cette mission vise à caractériser les cycles saisonniers globaux du CO_2 ainsi qu'à quantifier les sources et puits de carbone. La caractérisation des ISRFs est particulièrement complexe et cruciale en raison de la haute résolution spectrale de l'instrument. Les ISRFs sont mesurées pour chaque pixel à l'aide d'un laser à diode tunable lors de la calibration pré-vol [59], et les résultats sont stockés dans une table de consultation (look-up table). Les données utilisées peuvent être téléchargées sur le site EarthDATA de la NASA. Le produit considéré dans cette étude est l'OCO-2 Level 1B Version 11r pour la science, acquis en mars 2023, et la quatrième footprint est utilisée. Les spécifications relatives à ce produit de données sont disponibles dans [60].

Mission Avantes Avantes [61] est un spectromètre à fibres optiques avec un très faible niveau de lumière parasite. Les données utilisées pour ce spectromètre ont été mesurées en avril 2015, et sept ISRFs ont été mises à disposition dans le matériel complémentaire de [17].

Mission GOME-2 Le Global Ozone Monitoring Experiment-2 (GOME-2) est un spectromètre optique lancé à bord du satellite Metop-A d'EUMETSAT en octobre 2006. Toutes les informations concernant la conception et la caractérisation du spectromètre sont détaillées dans [62]. La mission GOME-2 a pour objectif d'obtenir des informations sur la concentration en gaz en mesurant la radiance diffusée par la Terre dans la partie UV du spectre (240-790 nm). Les données des ISRFs ont été mises à disposition par EUMETSAT¹. Les ISRFs ont été obtenues en janvier 2007 en utilisant le modèle FM3 [63].

Mission OMI L'Ozone Monitoring Instrument (OMI) est un imageur hyperspectral embarqué à bord du satellite Aura du système d'observation terrestre de la NASA, lancé en juillet 2004. La mission vise à déterminer la concentration en certains gaz à haute résolution spectrale et spatiale, tant dans l'atmosphère que dans la troposphère, afin de caractériser la composition atmosphérique de la Terre et de constituer un enregistrement global de longue durée de l'ozone. Les ISRFs de l'instrument OMI ont été déterminées à partir de la caractérisation pré-vol pour chaque pixel spectral [29]. Les ISRFs du spectromètre OMI sont disponibles pour les bandes UV-2 et VIS dans les données² issues des projets réalisés en 2014 au KNMI situé à De Bilt aux Pays-Bas. Les réponses spectrales du spectromètre sont obtenues en moyennant les lignes 17 à 47 et sont issues de la paramétrisation décrite dans le rapport RP-OMIE-KNMI-704. Plus d'informations sur la calibration de l'instrument sont disponibles dans [64], et la performance en vol a été évaluée dans [65].

Mission TROPOMI L'instrument de surveillance troposphérique (TROPOMI) a été lancé à bord du satellite Sentinel-5 Precursor en octobre 2017. Cet instrument fait partie de la nouvelle génération d'instruments de télédétection atmosphérique et a été conçu pour poursuivre les missions GOME-2, SCIAMACHY et OMI avec des résolutions spatiale et spectrale améliorées [66]. Les ISRFs ont d'abord été déterminées lors d'une campagne de calibration au sol approfondie [30] et ont ensuite été modélisées comme la convolution d'une loi normale et d'une loi uniforme. Les ISRFs considérées dans ce travail ont été extraites des fichiers TROPOMI Calibration Key Data, dont la troisième version a été réalisée en 2018 par le KNMI pour les bandes spectrales UV-VIS-NIR, et en 2016 par le SRON pour la bande SWIR. Plus de détails sur ces données sont décrits dans [67] tandis que des informations complémentaires sur le spectromètre sont disponibles dans [68].

Estimation des ISRFs

Illustration pour une ISRF Des exemples d'ISRFs et de leurs estimations sont présentés dans la figure 2.30. Il est tout d'abord intéressant de noter que la forme des ISRFs peut varier de manière significative selon la bande spectrale et l'instrument considérés. Cette observation suggère qu'il est nécessaire d'adapter le dictionnaire aux différents spectromètres. Les résultats illustrés dans la figure 2.30. mettent clairement en évidence l'intérêt d'utiliser SPIRIT pour l'estimation des ISRFs, permettant d'atteindre des erreurs d'estimation normalisées inférieures à 1%, ce qui est nettement inférieur aux erreurs obtenues avec les méthodes paramétriques. Enfin, une comparaison entre les différentes méthodes d'approximation parcimonieuse (OMP, LASSO) et les différents dictionnaires (SVD, K-SVD) exploitables dans SPIRIT montre que l'algorithme OMP donne souvent de meilleurs résultats que LASSO, y compris dans les cas illustrés ici.

1. Données disponibles à l'adresse <ftp://ftp.eumetsat.int/pub/EPS/out/GOME/Calibration-Data-Sets/Slit-Function-Key-Data/FM3-Metop-A/>.

2. Données disponibles sur <https://www.knmiprojects.nl/projects/ozone-monitoring-instrument/data-products>

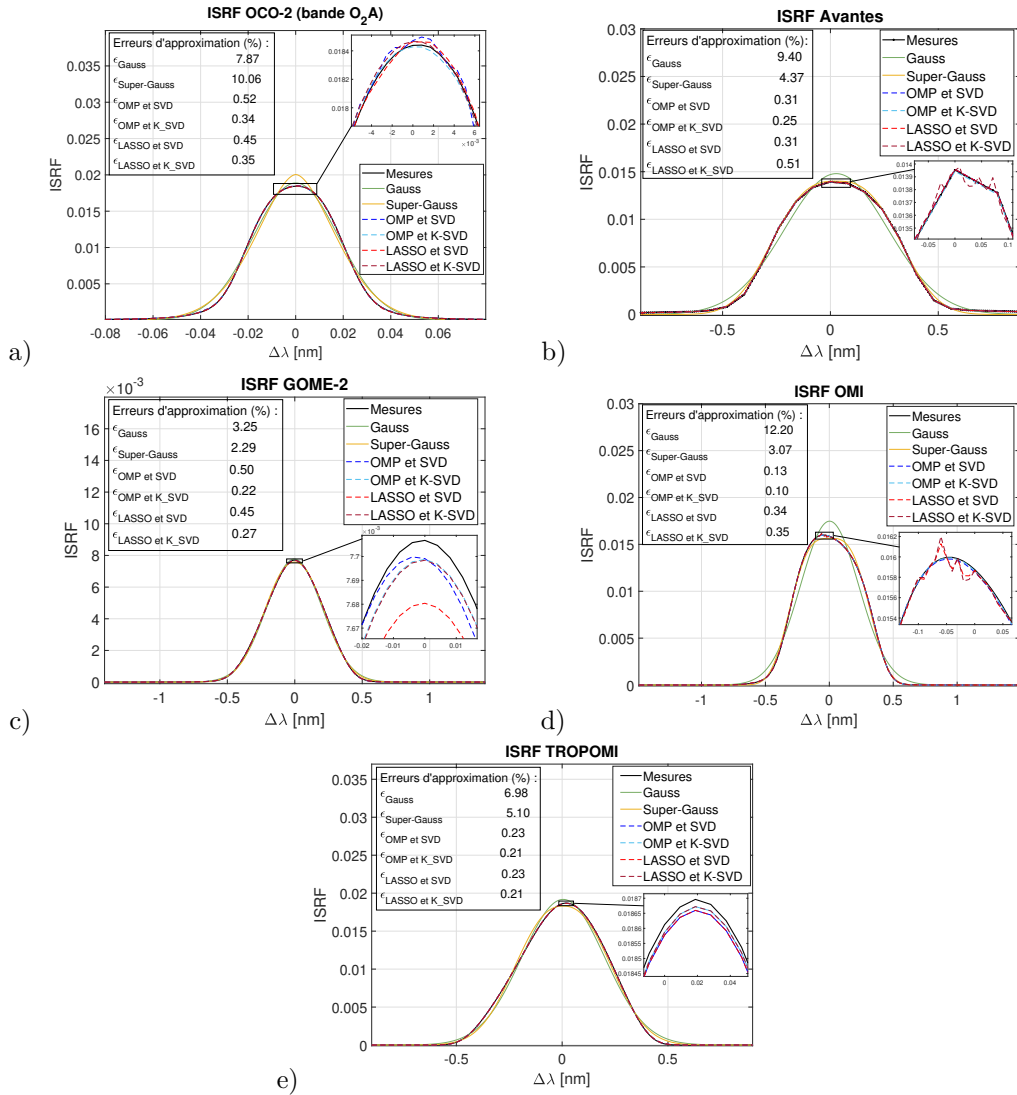


FIGURE 2.30 – Exemples d'ISRFs et de leur estimation utilisant les différentes méthodes (Gauss, Super-Gauss, OMP et LASSO avec les dictionnaires SVD et K-SVD) pour les missions OCO-2, Avantes, GOME-2, OMI et TROPOMI.

Performance en fonction des longueurs d'onde Les figures 2.31, 2.32 et 2.33 présentent les performances des différentes méthodes d'estimation sur l'ensemble des longueurs d'onde, selon la méthodologie décrite dans la section 2.3.2. Chaque figure affiche, de haut en bas : les spectres mesurés et leur reconstruction, les différences absolues (en échelle logarithmique) entre les spectres mesurés et estimés, les erreurs d'approximation des ISRFs en fonction des longueurs d'onde, ainsi que l'erreur moyenne d'approximation en fonction du nombre d'atomes K sélectionnés dans le dictionnaire. Pour chaque instrument, environ 10% des ISRFs disponibles ont été utilisées pour construire le dictionnaire. Le paramètre K utilisé dans les trois premières lignes correspond à celui qui minimise l'erreur moyenne d'approximation des ISRFs.

Nos conclusions sont résumées ci-dessous :

- Pour OCO-2, les données correspondent à la bande O₂ (757–772 nm). Les reconstructions obtenues avec les modèles gaussien et super-gaussien montrent que ce dernier est légèrement

plus performant, bien qu'il reste limité notamment pour les longueurs d'onde basses où la forme des ISRFs est plus proche d'une gaussienne. Ces méthodes paramétriques atteignent des erreurs d'approximation proches de 10%. En comparaison, les approches par représentation parcimonieuse (notamment OMP avec un dictionnaire SVD) permettent une bien meilleure reconstruction des mesures, avec des erreurs d'approximation inférieures à 1%.

- Les mesures utilisées pour Avantes couvrent la bande 400–410 nm, ce qui permet une comparaison directe avec les résultats de [17]. Le modèle super-gaussien est plus précis que le modèle gaussien, comme attendu, mais la méthode SPIRIT permet d'atteindre des erreurs normalisées inférieures à 1%, nettement meilleures que celles des modèles paramétriques. OMP offre des performances légèrement supérieures à LASSO, tandis que la différence entre dictionnaires SVD et K-SVD est négligeable.
- Pour GOME-2, les longueurs d'onde considérées vont de 420 à 440 nm. Les résultats montrent une fois encore que le modèle super-gaussien est plus performant que le modèle gaussien, mais reste loin derrière l'approche parcimonieuse. K-SVD fournit ici de meilleurs résultats que SVD, notamment entre 428 nm et 435 nm.
- Concernant OMI et TROPOMI, les mesures sont également prises entre 420 et 440 nm. Pour OMI, la figure 2.33 met clairement en évidence les limites du modèle gaussien. Le modèle super-gaussien améliore les résultats, mais les méthodes parcimonieuses, en particulier OMP avec un dictionnaire SVD, réduisent l'erreur d'approximation moyenne jusqu'à 0.1%. Pour TROPOMI, la figure 2.33b montre que les méthodes basées sur les représentations parcimonieuses nécessitent moins d'atomes pour atteindre de très faibles erreurs, confirmant ainsi leur efficacité. SPIRIT surpasse ici également toutes les autres méthodes, avec des erreurs inférieures d'un ordre de grandeur à celles obtenues avec les modèles paramétriques.

En résumé, les modèles super-gaussiens sont systématiquement meilleurs que les modèles gaussiens, comme le confirment les travaux précédents, mais leurs erreurs restent supérieures à 1% pour la plupart des instruments. À l'inverse, la méthode SPIRIT, basée sur des représentations parcimonieuses dans des dictionnaires adaptés, permet une estimation beaucoup plus précise des ISRFs. Cette amélioration s'explique par la capacité du dictionnaire à s'adapter à la variabilité des ISRFs selon l'instrument et la bande spectrale. Enfin, la méthode basée sur une SVD d'ISRFs représentatives pour la construction du dictionnaire fournit de bon résultats dans la plupart des cas d'application. L'algorithme OMP est plus performant que LASSO pour l'estimation des paramètres de la représentation parcimonieuse des ISRFs.

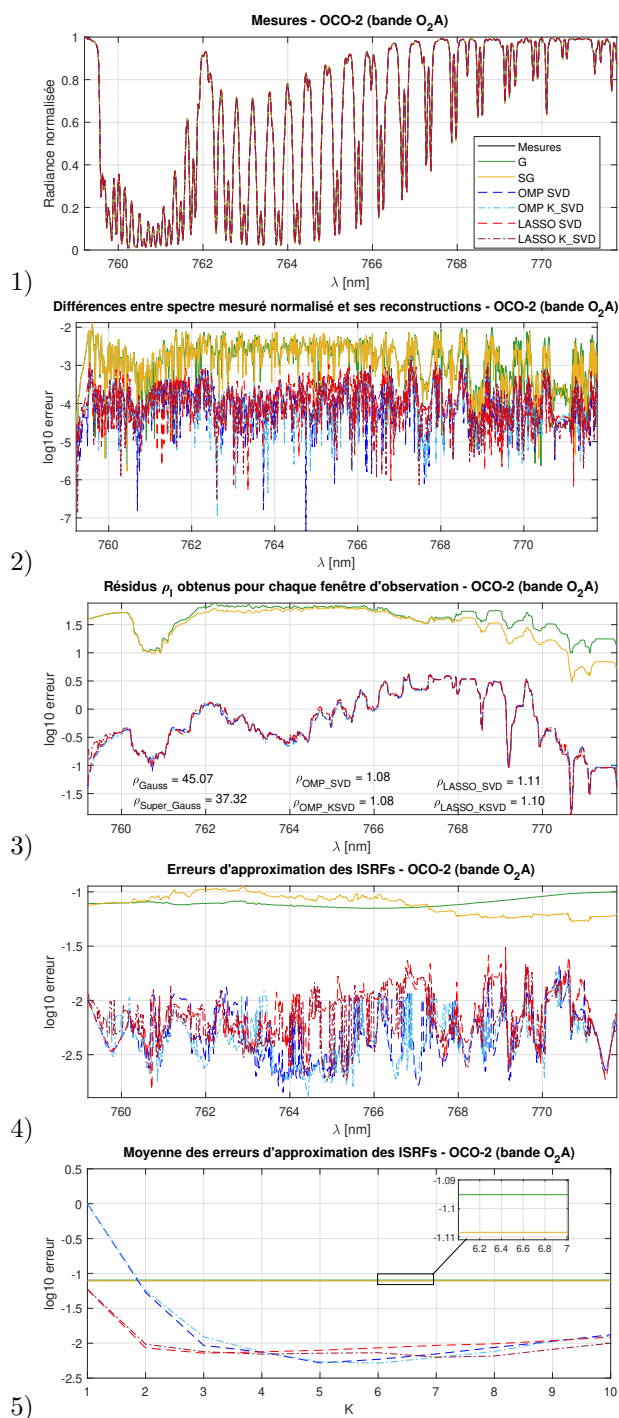


FIGURE 2.31 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), des résidus ρ_l par longueur d'onde (3), de l'erreur d'approximation des ISRFs en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation des ISRFs en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (Gauss, Super-Gauss, OMP, LASSO, SVD et KSVD), pour l'instrument OCO-2.

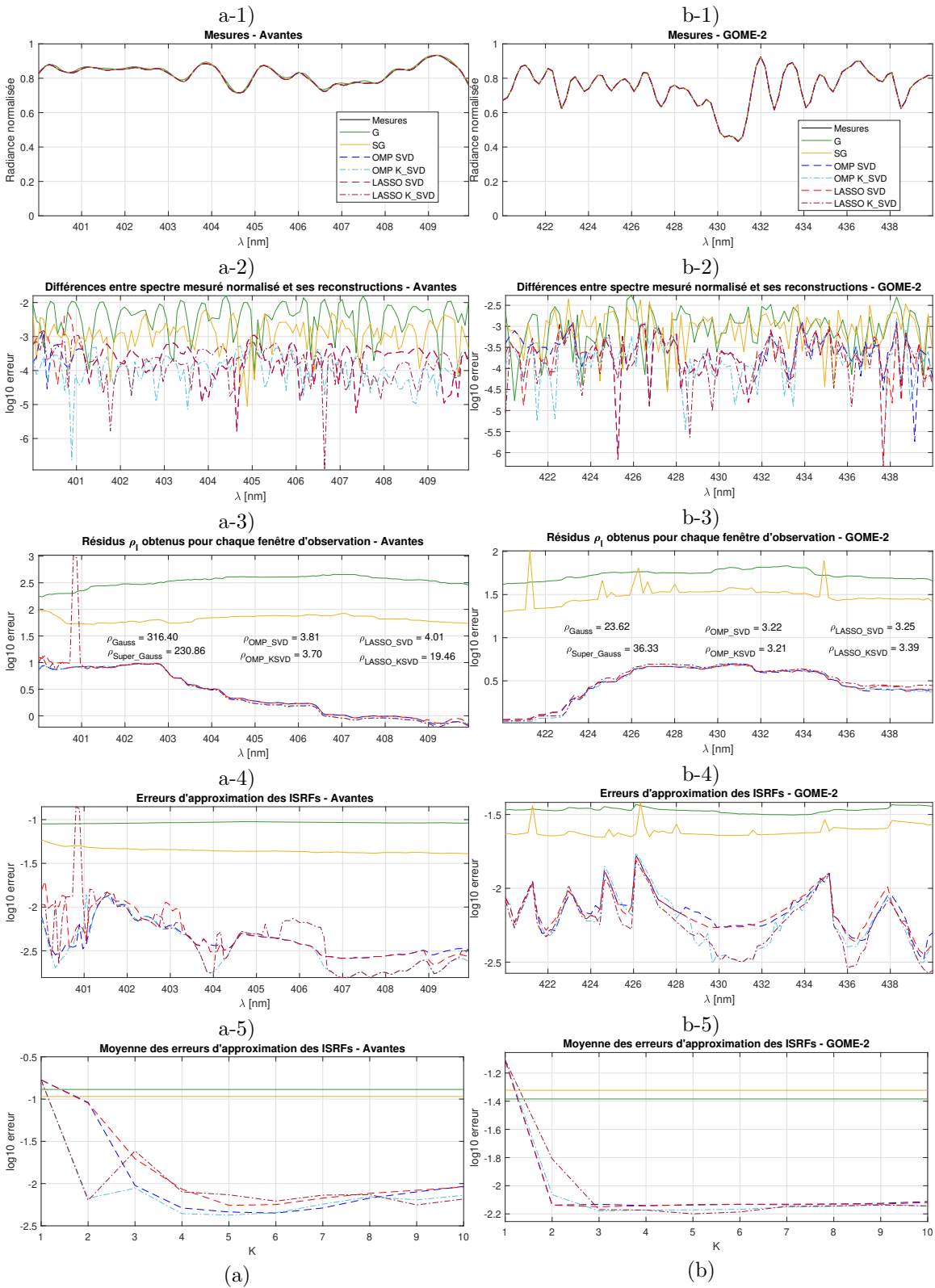


FIGURE 2.32 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), des résidus ρ_1 par longueur d'onde (3), de l'erreur d'approximation des ISRFs en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation des ISRFs en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (Gauss, Super-Gauss, OMP, LASSO, SVD et KSVD), pour les instruments Avantes (a) et GOME-2 (b).

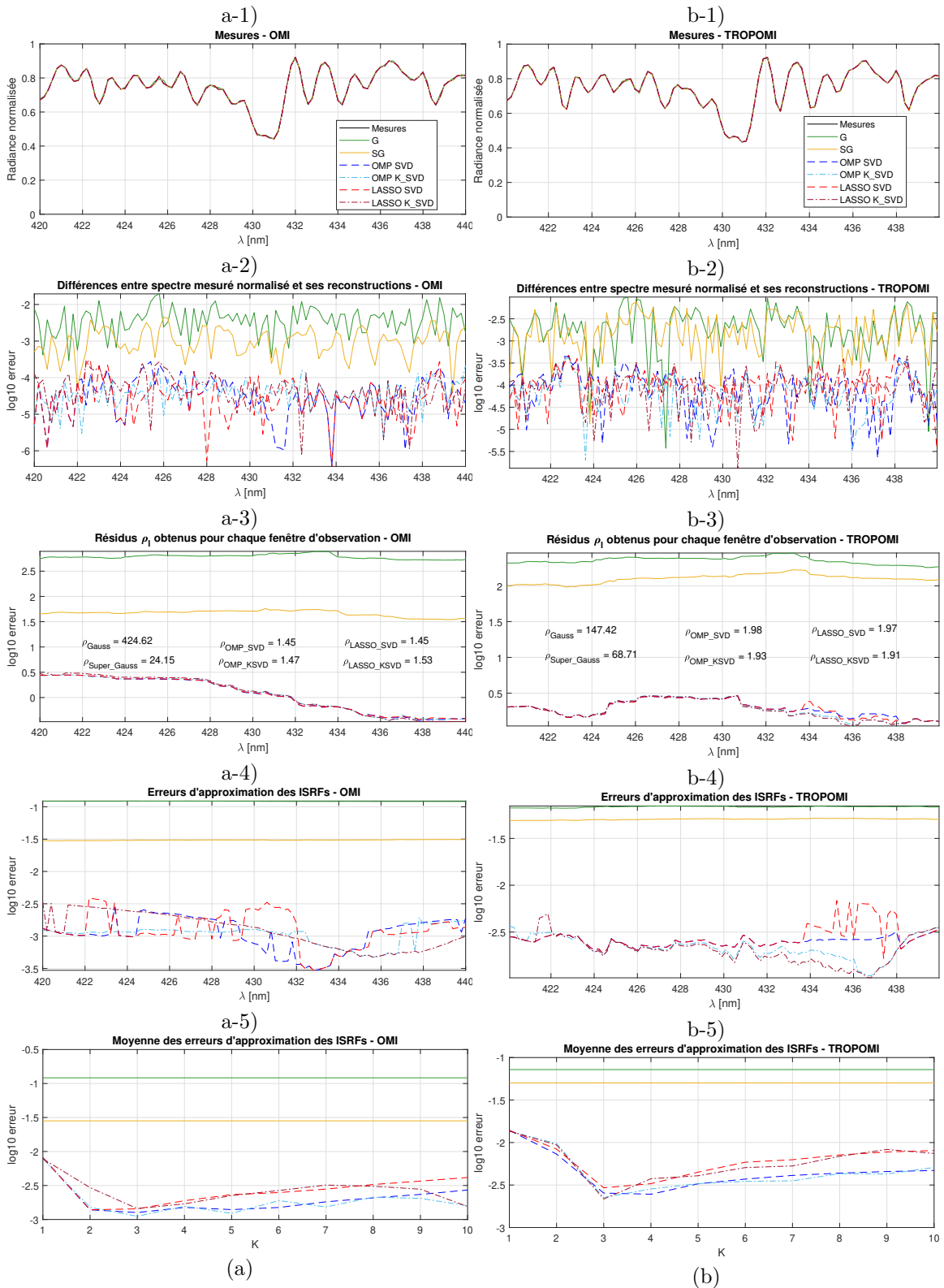


FIGURE 2.33 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), des résidus ρ_l par longueur d'onde (3), de l'erreur d'approximation des ISRFs en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation des ISRFs en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (Gauss, Super-Gauss, OMP, LASSO, SVD et KSVD), pour les instruments OMI (a) et TROPOMI (b).

Robustesse au bruit

Le tableau 2.5 présente les erreurs résiduelles ainsi que les erreurs d'approximation normalisées des ISRFs obtenues pour différentes valeurs du rapport signal sur bruit (SNR). Un bruit gaussien blanc a été ajouté aux mesures spectrales afin d'évaluer la robustesse des différentes méthodes d'estimation des ISRFs face au bruit. Les erreurs d'approximation inférieures à 1% sont mises en évidence en bleu. Les résultats montrent que les méthodes d'estimation proposées fournissent des erreurs normalisées inférieures à 1% pour des SNR supérieurs à 20 dB. Parmi ces méthodes, l'algorithme OMP surpasse systématiquement LASSO, quel que soit l'instrument considéré, ce qui confirme la recommandation d'utiliser OMP pour le codage parcimonieux. Globalement, les méthodes basées sur les représentations parcimonieuses produisent les erreurs d'approximation et résiduelles les plus faibles, surpassant nettement les modèles paramétriques. Il est également important de noter que les erreurs des méthodes paramétriques varient peu avec le niveau de bruit (sauf pour les SNR très faibles), ce qui indique que les erreurs liées à une mauvaise adéquation du modèle sont généralement plus importantes que celles induites par le bruit. En conclusion, la combinaison de l'algorithme OMP avec un dictionnaire appris par SVD offre les meilleures performances pour l'estimation des ISRFs, y compris en présence de bruit additif.

TABLE 2.5 – Erreur moyenne d'approximation des ISRFs et résidu moyen pour différents niveaux de bruit (SNR) et méthodes (Gauss, Super-Gauss, OMP et LASSO avec dictionnaires SVD et K-SVD), appliquées aux instruments OCO-2, Avantes, GOME-2, OMI et TROPOMI — en bleu : erreurs sous le critère de mission ; en gras : meilleurs résultats

Instrument / SNR		Erreur d'approximation (%)						Résidu					
		G	SG	OMP SVD	OMP K-SVD	LASSO SVD	LASSO K-SVD	G	SG	OMP SVD	OMP K-SVD	LASSO SVD	LASSO K-SVD
OCO-2 bande O ₂ A	20 dB	8.11	8.10	4.50	3.98	6.58	6.16	174.6	165.1	121.2	122.0	120.8	121.8
	40 dB	8.04	7.80	0.79	0.73	1.12	1.04	46.35	38.60	2.33	2.35	2.34	2.35
	55 dB	8.03	7.79	0.54	0.56	0.84	0.76	45.11	37.36	1.15	1.17	1.18	1.16
	80 dB	8.03	7.79	0.52	0.55	0.83	0.73	45.07	37.32	1.11	1.13	1.14	1.13
	120 dB	8.03	7.79	0.51	0.55	0.83	0.73	45.07	37.32	1.11	1.13	1.14	1.13
Avantes	20 dB	9.27	4.78	3.06	3.30	6.04	5.89	645.5	351.7	271.1	270.3	311.1	303.2
	40 dB	9.22	4.45	0.50	0.51	0.80	0.83	351.2	70.06	6.50	6.40	15.21	15.13
	55 dB	9.22	4.45	0.46	0.43	0.65	0.65	347.6	67.23	3.87	3.78	12.64	12.58
	80 dB	9.22	4.45	0.46	0.42	0.65	0.64	347.3	67.12	3.79	3.70	12.57	12.49
	120 dB	9.22	4.45	0.46	0.42	0.65	0.64	347.3	67.12	3.79	3.70	12.57	12.49
GOME-2	20 dB	3.47	2.76	2.63	2.54	2.61	2.38	342.1	321.2	264.4	265.8	266.3	269.1
	40 dB	3.39	2.49	0.72	0.65	0.74	0.65	57.26	37.45	6.04	6.08	6.08	6.25
	55 dB	3.39	2.46	0.69	0.59	0.69	0.58	54.42	32.79	3.42	3.50	3.46	3.62
	80 dB	3.39	2.44	0.69	0.58	0.69	0.58	54.32	30.33	3.33	3.42	3.38	3.53
	120 dB	3.39	2.45	0.69	0.58	0.69	0.58	54.32	32.00	3.32	3.42	3.38	3.53
OMI	20 dB	12.18	3.30	2.71	2.95	6.48	6.68	904.6	329.3	261.4	265.6	255.5	259.3
	40 dB	12.17	3.06	0.30	0.28	0.68	0.71	619.0	49.39	3.97	4.04	3.94	3.97
	55 dB	12.17	3.06	0.15	0.12	0.26	0.26	616.4	46.88	1.43	1.46	1.43	1.45
	80 dB	12.17	3.06	0.15	0.11	0.25	0.24	616.3	46.84	1.35	1.38	1.35	1.37
	120 dB	12.17	3.06	0.15	0.11	0.25	0.24	616.3	46.84	1.35	1.38	1.35	1.37
TROPOMI	20 dB	6.88	5.16	2.16	2.17	3.39	3.42	517.6	410.9	273.9	275.1	274.2	276.5
	40 dB	6.87	5.07	0.30	0.34	0.41	0.38	230.9	129.7	4.70	4.74	4.69	4.61
	55 dB	6.87	5.07	0.25	0.26	0.33	0.33	228.2	127.1	2.04	2.05	2.02	1.96
	80 dB	6.87	5.07	0.25	0.26	0.34	0.33	228.1	127.1	1.96	1.99	1.95	1.88
	120 dB	6.87	5.07	0.25	0.26	0.34	0.33	228.1	127.1	1.96	1.99	1.95	1.88

Sensibilité au choix des paramètres

Cette dernière partie est consacrée à l'étude de la sensibilité des performances à deux paramètres clés : la taille du dictionnaire N_D et le nombre d'observations $L + 1$ dans la fenêtre glissante pour l'ensemble des instruments considérés. Les résultats sont présentés dans la figure 2.34. On observe globalement les mêmes tendances que pour MicroCarb et CO2M : réduire la taille du dictionnaire N_D permet généralement d'améliorer les performances, tandis qu'augmenter le nombre d'observations L dans la fenêtre glissante contribue également à une meilleure estimation des ISRFs. Toutefois, cette amélioration liée à L ne se vérifie que jusqu'à un certain seuil. En effet, pour certains spectromètres tels que OCO-2, GOME-2 ou TROPOMI, on constate qu'au-delà d'une certaine taille de fenêtre, l'erreur d'approximation augmente. Ce phénomène peut s'expliquer par une plus forte variabilité des ISRFs au sein de la bande spectrale, ce qui rend l'hypothèse selon laquelle les ISRFs ne varient pas dans la fenêtre d'observation moins valide lorsque celle-ci est trop large.

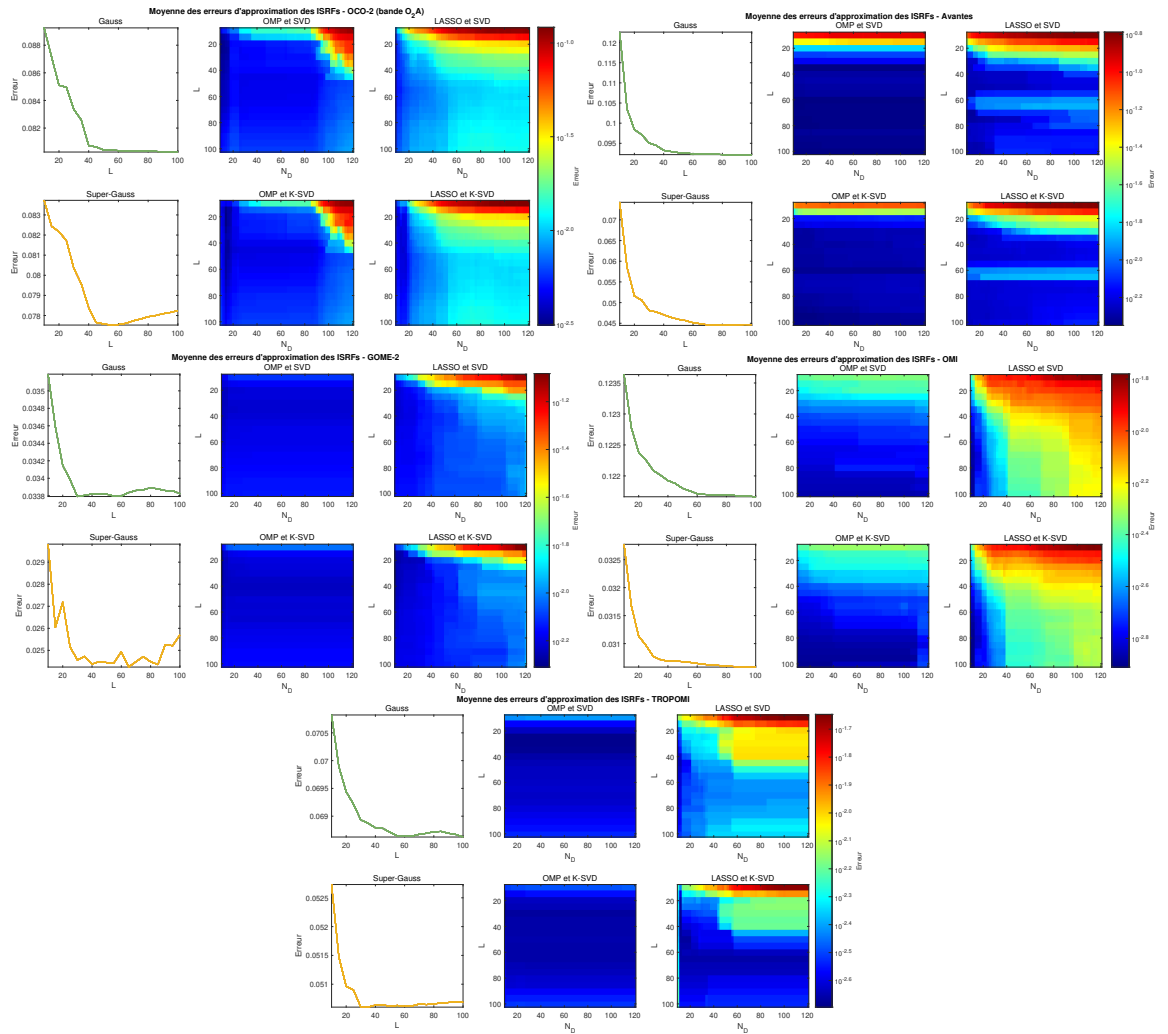


FIGURE 2.34 – Illustration de l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs pour les différentes méthodes (Gauss, Super-Gauss, OMP et LASSO avec les dictionnaires SVD et K-SVD) en fonction des paramètres N_D et $L + 1$ pour les missions OCO-2, Avantes, GOME-2, OMI, TROPOMI.

Conclusion sur les instruments

Les méthodes d'estimation des ISRFs basées sur SPIRIT ont été étendues dans cette section à d'autres instruments spectrométriques tels que OCO-2, Avantes, GOME-2, OMI et TROPOMI. Les performances ont été évaluées en termes de qualité d'estimation des ISRFs avec une attention particulière pour leur robustesse au bruit et leur sensibilité aux paramètres clés que sont le nombre d'atomes du dictionnaire N_D et la longueur de la fenêtre d'observation glissante $L + 1$. Les résultats confirment globalement les observations faites précédemment sur MicroCarb et CO2M. En particulier, les méthodes SPIRIT surpassent systématiquement les modèles paramétriques classiques (comme les gaussiennes et super-gaussiennes), que ce soit en termes de précision d'approximation, de résidus ou de stabilité face au bruit. L'approche parcimonieuse s'avère donc particulièrement robuste et efficace, indépendamment de l'instrument ou de la configuration spectrale. Ces travaux valident ainsi l'intérêt d'utiliser des représentations parcimonieuses pour l'estimation des ISRFs dans un large éventail de contextes instrumentaux, ouvrant la voie à une utilisation de la méthode SPIRIT dans les chaînes opérationnelles de traitement des données issues de spectromètres.

2.3.6 Impact des incertitudes ou de possibles écarts modèle–observations

Dépendance des ISRFs à la scène

Comme indiqué dans le chapitre 1, la conception de l'instrument MicroCarb rend les ISRFs sensibles à l'illumination de la fente pendant le temps d'intégration. En effet, les ISRFs utilisées jusqu'à présent (notées "ISRF IN") ont été obtenues à partir de scènes uniformes. Cependant, ces fonctions peuvent varier en fonction du contenu de la scène observée. La figure 2.35 illustre cette variabilité en montrant, à gauche, des ISRFs issues de scènes uniformes sélectionnées aléatoirement parmi 1024, et à droite, des ISRFs simulées à partir de scènes non-uniformes sélectionnées parmi huit cas typiques répartis sur trois champs de vue (FOV). Pour chaque scène non-uniforme, un spectre de référence est simulé en utilisant une ISRF asymétrique. Il est important de noter qu'en pratique, aucune information directe sur la non-uniformité d'une scène n'est disponible dans les spectres mesurés. Ce n'est qu'au moment de l'inversion, lors de l'estimation des ISRFs, que l'on peut constater leur modification. Des détails supplémentaires sont disponibles dans [28].

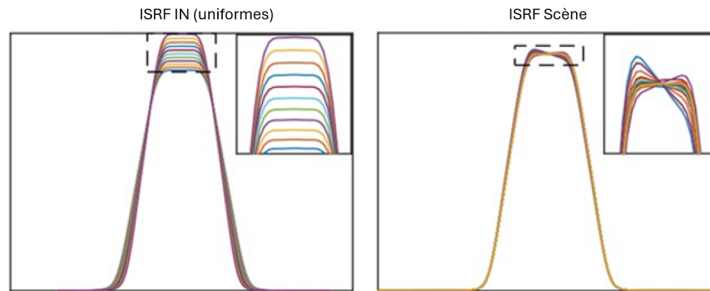


FIGURE 2.35 – Exemples d'ISRFs de scènes uniformes (ISRF IN - gauche) et de scènes non-uniformes affichées en figure 2.36 et pour différents champs de vue (FOVs) pour l'instrument MicroCarb (bande B1).

La figure 2.36 présente huit scènes représentatives de la surface terrestre observée par la fente du spectromètre, dans la direction ACT. Chaque image est divisée en trois zones égales (FOV1, FOV2, FOV3), chacune correspondant à un regroupement (binning) spatial de pixels détectés, pour augmenter le SNR spectral. Les ISRFs simulées pour chaque FOV sont affichées dans la même figure. On remarque que certaines scènes, comme le désert, produisent des ISRFs proches de celles issues de scènes uniformes, tandis que d'autres, comme un profil côtier horizontal, peuvent entraîner une

ISRF fortement asymétrique, du fait d'une occultation partielle de la fente. Deux jeux de données ont été étudiés :

- Le premier contient les 8 ISRFs issues de scènes non-uniformes simulées pour chacun des 3 FOVs, soit 24 ISRFs au total. Les résultats d'estimation sont présentés dans la figure 2.37.
- Le second jeu de données intègre la fréquence d'occurrence des scènes durant une orbite complète de MicroCarb. Certaines scènes sont observées jusqu'à 99% du temps, tandis que d'autres beaucoup plus rarement (50%). Il est donc essentiel que les erreurs d'estimation des ISRFs restent faibles pour les scènes observées le plus fréquemment. Les résultats correspondants sont présentés dans la figure 2.38, pour des acquisitions représentatives de scènes vues à 99%, 90% et 50% du temps.

Dans les deux cas, les performances de SPIRIT (avec OMP et un dictionnaire SVD appris sur les ISRFs de type IN) sont d'abord évaluées en utilisant un dictionnaire construit uniquement à partir de scènes uniformes. Les résultats montrent que cette approche est insuffisante : les erreurs normalisées dépassent souvent 1%, en particulier pour les scènes les plus fréquemment observées par l'instrument, ce qui compromet la fiabilité de l'estimation. Cela suggère que certaines ISRFs non-uniformes — notamment celles associées à des scènes comme la cote horizontale ou la cote inclinée — ne peuvent pas être représentées avec suffisamment de précision par un dictionnaire basé uniquement sur des scènes uniformes. Pour améliorer les performances, une solution consiste à construire un dictionnaire plus diversifié. Celui-ci est formé en combinant 103 ISRFs IN (sur 1024 disponibles) avec 3 ISRFs issues de scènes non-uniformes (sur 24), soit un total de 106 ISRFs permettant de créer un dictionnaire de $N_D = 25$ atomes. Les résultats montrent que l'ajout de ces trois ISRFs permet de faire chuter les erreurs sous le seuil de 1% dans tous les cas, atteignant ainsi les exigences de précision de la mission, aussi bien pour les scènes uniformes que non-uniformes. Comme précédemment, les meilleures performances sont obtenues pour une cardinalité K comprise entre 3 et 6 atomes.

En conclusion, cette étude montre que l'intégration d'une plus grande diversité d'ISRFs (provenant de scènes réalistes non-uniformes) dans la construction du dictionnaire améliore significativement la qualité de l'estimation. Cela souligne l'intérêt d'un apprentissage représentatif des conditions d'observation pour garantir des performances robustes et précises. Il est important de noter que l'effet des scènes non-uniformes sur la forme des ISRFs ne touche généralement pas un unique pixel spectral, mais la totalité des pixels. L'utilisation d'une fenêtre glissante reste donc valide dans ce contexte.

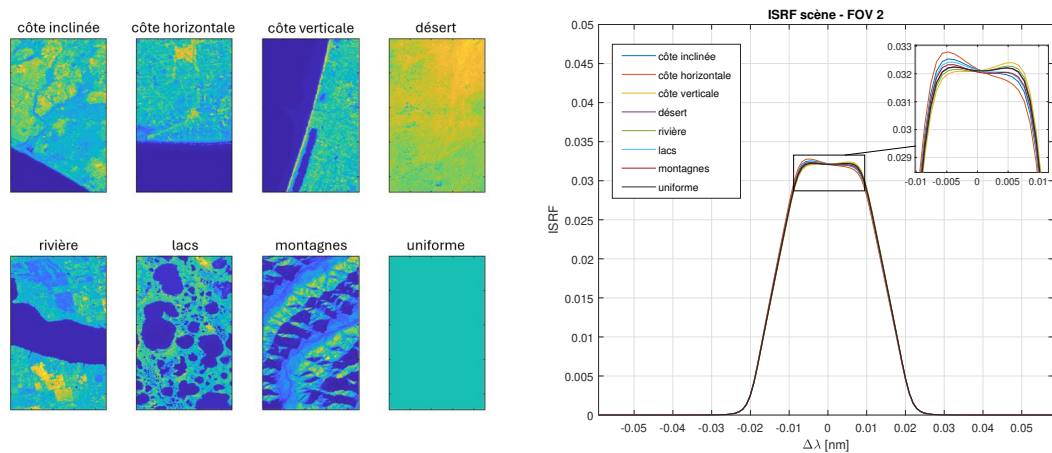


FIGURE 2.36 – Illustration de huit types de scène (gauche) avec les ISRFs associées (FOV 2) pour l'instrument MicroCarb.

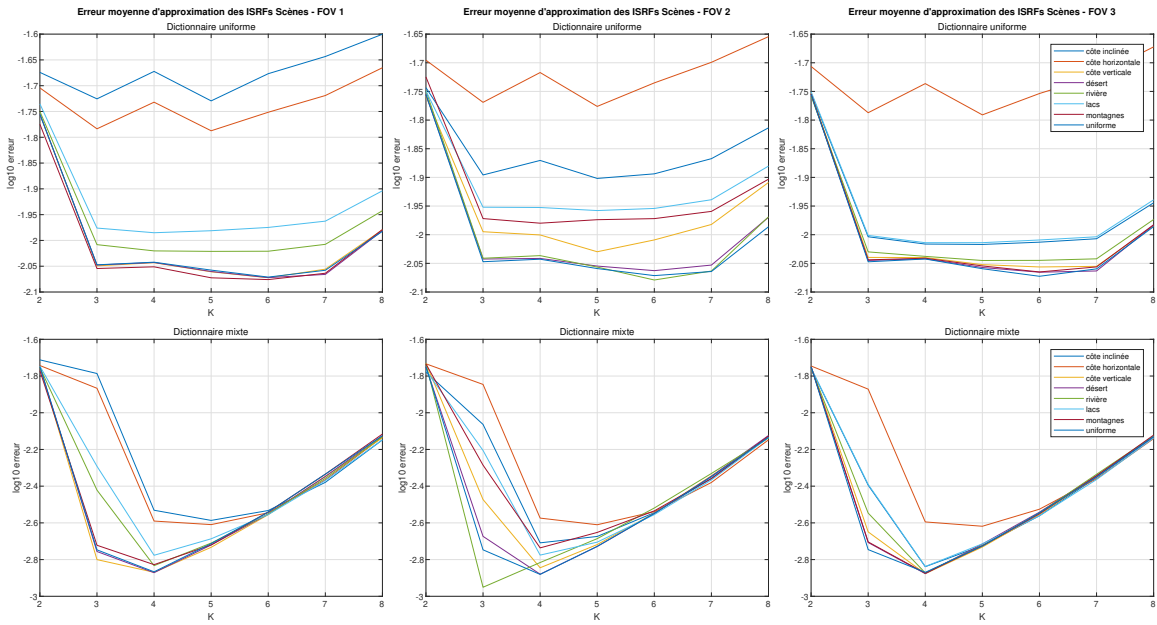


FIGURE 2.37 – Erreurs d'approximation des ISRFs pour les 8 exemples de scènes considérés et avec un dictionnaire construit à partir de scènes uniformes ou scènes mixtes.

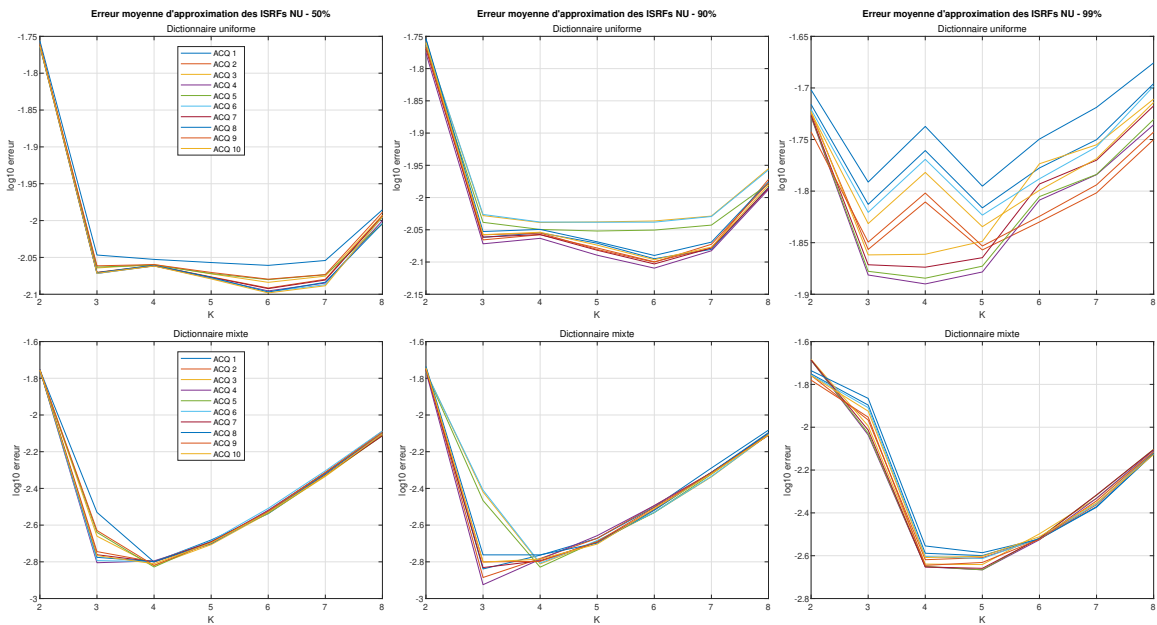


FIGURE 2.38 – Erreurs d'approximation des ISRFs pour 10 acquisitions associées à des scènes non-uniformes en fonction du pourcentage du temps où la scène est vue par l'instrument MicroCarb (99%, 90% ou 50% du temps) lors de la période de révolution du satellite et avec un dictionnaire construit à partir de scènes uniformes ou scènes mixtes.

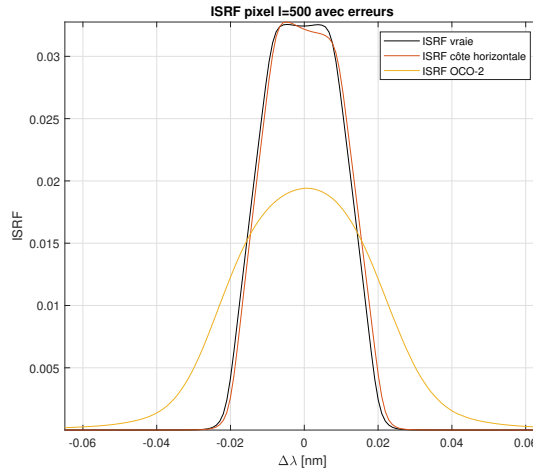


FIGURE 2.39 – Illustration des potentielles erreurs d’ISRF (ISRF asymétrique ou ISRF construite en prenant l’ISRF de l’instrument OCO-2) pour un pixel donné ($l = 500$ associée à la longueur d’onde $\lambda_l = 763.71$ nm).

Robustesse à des erreurs pixels

Nous considérons à présent un nouveau type d’anomalie : une erreur localisée sur un unique pixel spectral. Dans ce contexte, il est pertinent d’associer l’anomalie à une erreur du détecteur. Ce cas est intéressant car il permet de vérifier les performances de l’estimation lorsqu’un pixel devient défaillant lors de la mission. Ces pixels sont appelés “bad pixels”. Pour illustrer ce cas, une erreur volontaire a été introduite au pixel $l = 500$, correspondant à la longueur d’onde $\lambda_l = 763.71$ nm. L’ISRF associée à ce pixel a été remplacée, lors de la génération du spectre, soit par une ISRF asymétrique issue d’une scène non-uniforme (comme un profil côtier horizontal), soit par une ISRF radicalement différente, telle que celle correspondant au même pixel pour l’instrument OCO-2. Ces situations sont illustrées dans la figure 2.39.

La figure 2.40 montre la variation moyenne de la forme des ISRFs dans une fenêtre glissante de $N_{\text{obs}} = 80$ observations. On y compare les trois cas :

1. Scénario sans erreur : les variations d’ISRF dans la fenêtre sont faibles (environ 1 %), validant l’hypothèse selon laquelle les ISRFs varient peu dans la fenêtre glissante.
2. Scénario avec une ISRF de scène non-uniforme au pixel central : des perturbations apparaissent mais sont localisées autour du pixel $l = 500$.
3. Scénario avec une ISRF issue d’OCO-2 : les perturbations s’étendent sur une plus grande portion de la fenêtre glissante.

Les écarts entre les formes des ISRFs se répercutent sur les performances d’estimation, comme le montre la figure 2.41. On observe une augmentation de l’erreur d’approximation des ISRFs et des résidus, proportionnelle à l’amplitude de la perturbation. L’erreur reste localisée et limitée dans le cas d’une ISRF asymétrique réaliste, mais devient bien plus marquée lorsque l’ISRF provient d’un instrument très différent, comme OCO-2. Dans ce cas, il est difficile, voire impossible, d’estimer correctement l’ISRF fautive, mais cela impacte aussi l’estimation des ISRFs voisines associées aux pixels autour du pixel défaillant. En effet, en examinant les résidus, on observe une augmentation brusque centrée sur l’ISRF défectueuse, formant un plateau d’amplitude élevée d’environ la taille de la fenêtre glissante. Cela peut permettre de détecter l’erreur. En définitive, les résultats suggèrent que les approches basées sur une représentation parcimonieuse des ISRFs peuvent permettre de détecter ce type d’anomalies instrumentales. Ainsi, un pixel présentant une erreur atypique au niveau du résidu peut être identifié comme défectueux (mauvais pixel) et exclu de la fenêtre glissante d’estimation. Une fois ce pixel écarté, les performances d’estimation des ISRFs sont satisfaisantes.

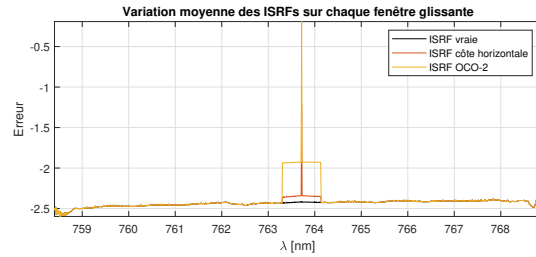


FIGURE 2.40 – Illustration des variations des ISRFs en terme d’erreur moyenne entre l’ISRF du pixel central et les autres ISRFs de la fenêtre glissante pour chaque longueur d’onde.

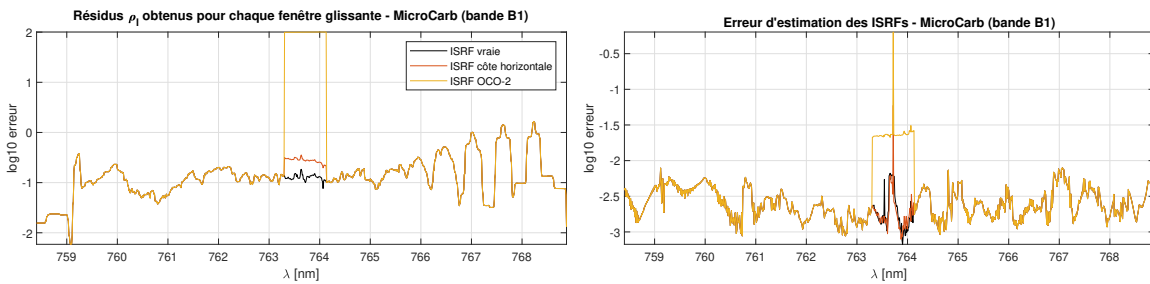


FIGURE 2.41 – Résultats obtenus en terme de résidus et d’erreur d’approximation des ISRFs en fonction de la longueur d’onde pour les cas d’erreur pixel considérés (sans erreur, erreur ISRF asymétrique et erreur ISRF OCO-2).

Incertitude sur la fenêtre glissante

Comme vu précédemment, une variation locale des ISRFs (par exemple due à une erreur sur un pixel) peut entraîner une dégradation notable des performances d’estimation. Deux raisons principales peuvent expliquer ce phénomène : d’une part, l’ISRF erronée ne figure pas dans le dictionnaire utilisé ; d’autre part, l’hypothèse selon laquelle les ISRFs varient peu au sein de la fenêtre glissante n’est alors plus valide. L’objectif de cette section est d’examiner l’impact de variations plus importantes des ISRFs au sein de la fenêtre glissante d’observation. La figure 2.42 illustre ce cas. En haut, on observe l’ampleur moyenne des variations introduites, qui sont nettement plus élevées que dans les situations précédemment étudiées. En bas, sont présentées les erreurs d’estimation des ISRFs en fonction de la longueur d’onde pour deux méthodes : la méthode paramétrique utilisant un modèle d’ISRF super-gaussien (le plus performant parmi les modèles paramétriques) et la méthode SPIRIT avec OMP et SVD.

On constate que la méthode SPIRIT reste plus performante que les méthodes paramétriques, mais les erreurs sont supérieures à 1 %. Ces erreurs restent proches des variations moyennes observées dans les ISRFs, ce qui confirme les observations précédentes : lorsque l’hypothèse selon laquelle les ISRFs ne varient pas fortement au sein de la fenêtre glissante n’est plus vérifiée, il devient difficile d’atteindre une estimation très précise. Pour remédier à cette limitation, une piste possible serait de modéliser explicitement les variations des ISRFs dans la bande spectrale, et de les estimer conjointement avec les ISRFs elles-mêmes. Ce travail, toutefois complexe, est laissé pour de futures recherches. Une autre approche pourrait consister à utiliser plusieurs spectres théoriques pour estimer les ISRFs.

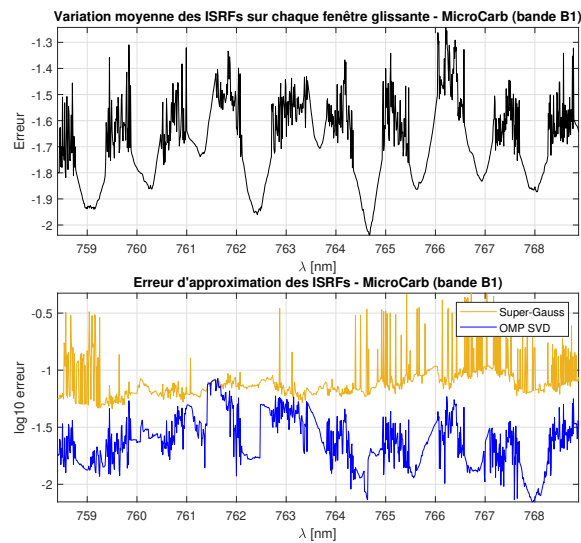


FIGURE 2.42 – variations des ISRFs en terme d’erreur moyenne entre l’ISRF du pixel central et les autres ISRFs de la fenêtre glissante pour chaque longueur d’onde (en haut) et résultats obtenus pour l’approximation des ISRFs en fonction de la longueur d’onde en utilisant la paramétrisation super-gaussienne et l’OMP avec dictionnaire SVD (en bas).

Incertitude lors de la construction du dictionnaire

Comme mentionné précédemment, tous les dictionnaires ne sont pas adaptés à la modélisation des ISRFs. Un dictionnaire pertinent peut s’obtenir en effectuant une SVD ou une K-SVD sur une collection d’ISRFs bien caractérisées au sol. Dans les applications pratiques, l’instrument est calibré à partir de spectres mesurés pour certaines scènes de référence dont le spectre est bien connu (par exemple, le Soleil, la Lune, ou certaines scènes uniformes comme les déserts). Cependant, des erreurs peuvent survenir lors de la construction du dictionnaire, notamment si certaines ISRFs utilisées sont bruitées, comme cela peut être le cas lors de leur mesure au sol avec un laser accordable. Ce point a d’ailleurs été évoqué dans la section 2.1, lors du débruitage des ISRFs. Cette partie propose une analyse de l’impact de tels artefacts (ou “mismatches”) sur l’estimation des ISRFs lorsque le dictionnaire est construit à partir de données bruitées. Pour cela, un bruit gaussien est ajouté à un tiers des ISRFs utilisées dans la phase d’apprentissage du dictionnaire, avec des rapports signal sur bruit (SNR) fixés à 20 dB, 40 dB et 60 dB.

Les erreurs d’approximation des ISRFs, présentées dans la figure 2.43, confirment que l’augmentation du niveau de bruit dans les ISRFs utilisées pour constituer le dictionnaire peut dégrader les performances d’estimation. Cependant, cette dégradation reste très limitée pour des rapports signal sur bruit (SNR) réalistes, c’est-à-dire supérieurs à 40 dB. En effet, en pratique, les mesures d’ISRFs au sol sont réalisées avec des instruments de très haute précision, rendant peu probable l’existence d’ISRFs avec un SNR aussi faible que 20 dB. Dans ce dernier cas où le bruit est plus important, les erreurs augmentent significativement. Il est toutefois important de noter que, dans tous les cas, les erreurs obtenues restent inférieures à celles issues des modèles paramétriques précédemment étudiés. Cette augmentation des erreurs pour SPIRIT s’explique notamment par le fait que le bruit modifie la forme des atomes du dictionnaire, impactant ainsi la qualité de l’approximation. D’autres types de “mismatch” peuvent survenir en fonctionnement de l’instrument : des différences entre les ISRFs mesurées en vol et celles caractérisées au sol peuvent apparaître, dues à des variations liées à la scène observée ou à des déplacements de l’instrument. Ce phénomène a été abordé dans les sections précédentes, notamment lors de l’estimation des ISRFs de CO2M à partir d’un autre jeu de données d’ISRFs caractérisées au sol, ainsi que dans la section 2.3.6, où les variations des ISRFs en fonction de la scène sont prises en compte pour l’instrument MicroCarb.

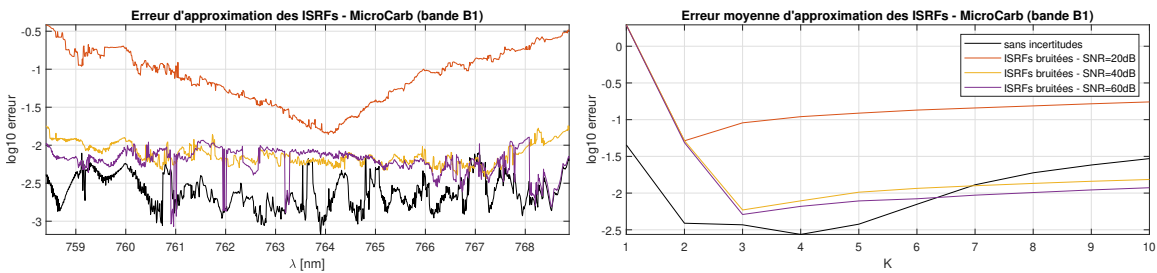


FIGURE 2.43 – Résultats obtenus en utilisant OMP et SVD pour différents scénarios de dictionnaires construits avec des ISRFs bruitées ($SNR = 20dB$, $SNR = 40dB$ ou $SNR = 60dB$).

Incertitude sur le spectre théorique

Une mauvaise connaissance du spectre théorique peut provenir d'un positionnement imprécis du satellite, d'une connaissance partielle des conditions atmosphériques locales, ou encore d'une mauvaise estimation des concentrations en gaz. Cette section propose une analyse préliminaire de l'impact de ces erreurs potentielles sur l'estimation des ISRFs lorsque le spectre théorique est imparfait. Dans une première expérience, un bruit gaussien a été ajouté au spectre de référence avec des rapports signal sur bruit (SNR) de 20 dB, 40 dB et 60 dB. Comme on peut l'observer dans les résultats présentés dans la figure 2.44, une augmentation du bruit dans le spectre de référence dégrade, comme attendu, la qualité de l'estimation des ISRFs. Néanmoins, la méthode reste globalement robuste au bruit : même avec un SNR de 20dB, l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs demeure inférieure à 1%. À ce niveau de bruit, la meilleure performance est atteinte pour une cardinalité $K = 2$. De plus, les erreurs obtenues restent systématiquement inférieures à celles des approches paramétriques.

Une seconde expérience a été conduite pour analyser l'impact d'un mauvais choix du spectre de référence. Plus précisément, on suppose que le spectre mesuré a été généré à partir d'un certain spectre de référence (en noir sur la figure de gauche de 2.45), mais qu'on effectue l'estimation en supposant un autre spectre théorique. La convolution de ce second spectre théorique avec les ISRFs produit un nouveau spectre simulé, affiché en orange. On observe des différences notables entre les deux spectres, notamment une accentuation des raies spectrales à partir de la longueur d'onde $\lambda_l = 759.5$ nm. Au niveau de l'erreur d'estimation des ISRFs, les résultats sont obtenus en utilisant un modèle d'ISRF super-gaussien et la méthode SPIRIT avec l'algorithme OMP ($K = 4$ et $K = 1$ atomes non-nuls). On remarque que jusqu'à $\lambda_l = 759.5$ nm, les deux spectres étant similaires, les erreurs d'estimation restent faibles (inférieures à 1%). En revanche, au-delà de cette longueur d'onde, les erreurs augmentent significativement, aussi bien pour le modèle super-gaussien que pour la méthode SPIRIT avec OMP ($K = 4$ atomes). Les meilleures performances dans cette configuration sont obtenues avec $K = 1$, mais l'erreur reste malgré tout nettement supérieure au seuil de 1%.

Ces résultats mettent en évidence une limitation majeure : la connaissance du spectre de référence utilisé comme entrée du modèle est cruciale. Toute erreur significative sur ce spectre peut compromettre la qualité de l'estimation des ISRFs, et ce, même avec les méthodes avancées utilisant une représentation parcimonieuse des ISRFs. Notons que la dernière expérience ne correspond pas à une situation artificielle, mais cible un cas réaliste dans lequel le spectre de référence peut être inconnu, ou présenter un décalage par rapport à celui utilisé en simulation. Il pourra être envisageable de modéliser ce type d'erreur en utilisant une fonction - potentiellement non-linéaire - appliquée au spectre de référence. Il est alors possible d'établir une analogie entre la modélisation des erreurs sur les spectres de référence et celle des erreurs radiométriques ou spectrales, ces dernières affectant le spectre mesuré. Une étude plus détaillée de ces erreurs de mesure sera présentée dans le chapitre 3.

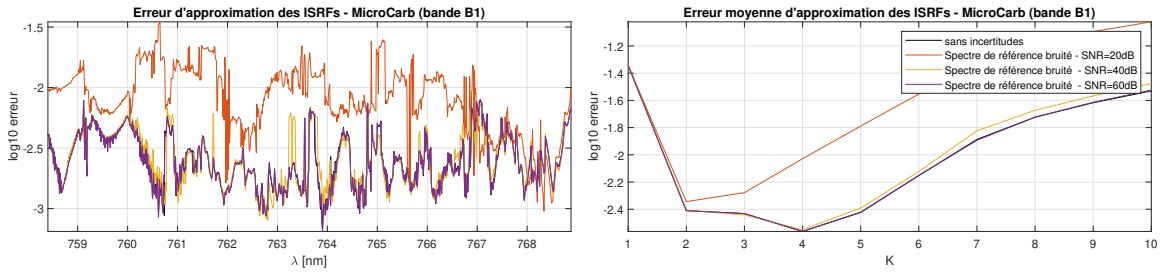


FIGURE 2.44 – Résultats obtenus en utilisant OMP et SVD pour différents scénarios avec spectres de références bruités ($SNR = 20dB, SNR = 40dB$ ou $SNR = 60dB$).

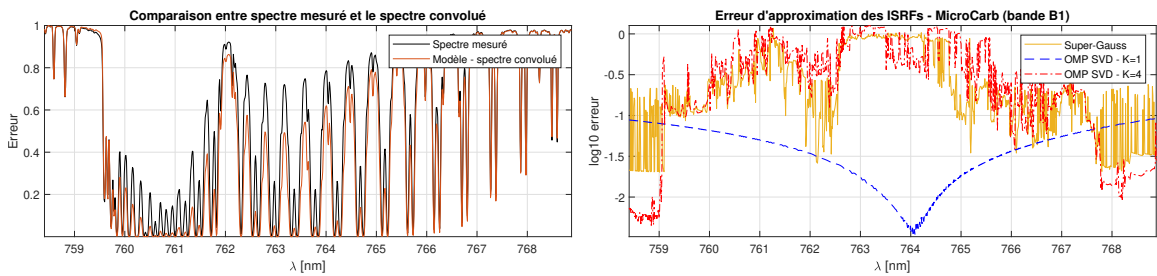


FIGURE 2.45 – Comparaison entre le spectre mesuré et le modèle du spectre mesuré convolué et résultats d'estimation des ISRFs en utilisant les méthodes Super-Gauss et OMP avec une cardinalité de $K = 1$ ou $K = 4$.

2.4 Conclusion et limites de la méthode

Ce premier chapitre a pour objectif de dresser un état de l'art des méthodes d'estimation des fonctions de réponse spectrale des instruments (ISRFs) et de proposer une nouvelle approche de modélisation de ces fonctions fondée sur leur représentation parcimonieuse dans un dictionnaire appris à partir d'exemples. Les méthodes classiques, majoritairement paramétriques (telles que les modèles gaussiens ou super-gaussiens) sont peu flexibles et ne s'adaptent pas à la diversité des formes que peuvent prendre les ISRFs selon les instruments. Nous avons donc introduit une nouvelle méthode d'estimation, nommée SPIRIT, qui repose sur une modélisation plus souple et générique. L'approche développée ici consiste à approximer les ISRFs à partir d'une décomposition parcimonieuse dans un dictionnaire construit à partir de mesures issues de données réelles ou de simulations réalistes (ici d'exemples d'ISRFs). Cette méthode présente plusieurs atouts : elle ne repose pas sur un modèle spécifique d'instrument et peut s'appliquer à tout problème d'estimation pouvant être formulé comme un problème inverse linéaire et pour lequel des exemples d'ISRFs sont disponibles. Il est néanmoins essentiel de disposer, d'une part, d'un nombre suffisant d'observations permettant d'estimer les ISRFs (par exemple en supposant que les ISRFs ne varient pas beaucoup dans une fenêtre d'observation glissante), et d'autre part, d'un dictionnaire suffisamment riche constitué d'ISRFs bien caractérisées au sol. Pour étudier la méthode, des résultats ont été présentés pour des données associées aux missions MicroCarb et CO2M, mais d'autres instruments (OCO-2, Avantes, GOME-2, OMI, TROPOMI) ont également été considérés.

L'estimation en vol des ISRFs repose sur la connaissance d'un couple spectre mesuré / spectre de référence. Le problème est modélisé comme une convolution discrète entre le spectre de référence et les ISRFs, résultant en un problème inverse linéaire. Les résultats montrent que la méthode SPIRIT permet d'atteindre une erreur relative inférieure à 1% sur une large plage de longueurs d'onde, tout en minimisant les résidus de reconstruction. Deux techniques ont été testées pour effectuer la décomposition : l'algorithme OMP (Orthogonal Matching Pursuit) et la méthode LASSO, ainsi qu'une variante basée sur une régularisation utilisant les enveloppes quadratiques qui permet d'obtenir de meilleures performances au prix d'un coût de calcul plus élevé.

Nos conclusions concernant l'estimation des ISRFs avec la méthode SPIRIT sont résumées ci-dessous :

- L'étude du nombre d'atomes nécessaires à la représentation parcimonieuse des ISRFs montre qu'un petit nombre d'atomes (entre 3 et 6) permet une estimation efficace des ISRFs dans les différents scénarios. Les performances sont par ailleurs robustes vis-à-vis de la taille du dictionnaire, à condition qu'elle reste raisonnable (nous avons retenu $N_D = 25$), et dépendent également de la taille de la fenêtre d'observation, que nous avons fixée à $L = 80$.
- Une analyse de robustesse au bruit a mis en évidence que la méthode SPIRIT reste très performante tant que le bruit n'est pas trop élevé, avec des erreurs toujours en dessous du seuil de 1% pour MicroCarb. Cependant, dès que le SNR diminue fortement (par exemple à 20 dB), la méthode commence à atteindre ses limites. Ces résultats encouragent à explorer, dans des travaux futurs, de nouvelles méthodes de débruitage, qu'il s'agisse de traiter les ISRFs mesurées avec laser ou les spectres mesurés. Des approches issues du machine learning comme les modèles de diffusion pour le débruitage ou les auto-encodeurs variationnels pourraient être particulièrement pertinentes.
- Nous avons ensuite examiné l'impact de certains écarts possibles entre le modèle et les observations. Lorsque le dictionnaire est mal adapté, par exemple parce que certaines ISRFs n'ont pas été incluses (comme dans le cas de MicroCarb où elles dépendent de la scène), il suffit souvent d'ajouter un petit nombre d'atomes pertinents dans le dictionnaire pour retrouver une bonne précision. En effet, la méthode SPIRIT présente une bonne robustesse vis-à-vis de la forme des ISRFs, et permet une estimation précise même lorsque celles-ci varient sensiblement selon les scènes. Si les ISRFs utilisées pour construire le dictionnaire sont très bruitées, cela dégrade les performances, ce qui souligne l'importance de bien calibrer ces fonctions au sol.
- Une autre hypothèse importante est celle selon laquelle les ISRFs varient peu d'un pixel à l'autre, permettant de définir une fenêtre glissante. Lorsque cette hypothèse ne tient plus, comme en présence d'un pixel erroné ou de variations importantes des ISRFs dans la bande, l'erreur d'estimation augmente. En effet, dans le cas où un pixel défaillant est inclus dans la fenêtre d'observation, cela perturbe fortement l'estimation. Toutefois, bien que la méthode ne permette pas d'estimer correctement l'ISRF du pixel défaillant, elle permet néanmoins de le détecter, et donc de l'exclure a posteriori. Lorsque les variations des ISRFs sont très fortes selon la longueur d'onde, l'algorithme OMP reste toujours plus performant que les modèles paramétriques, mais il devient difficile de maintenir une erreur inférieure à 1 %. Ce constat ouvre des pistes de recherche sur la modélisation explicite des variations des ISRFs le long de la bande spectrale, ce qui permettrait de s'affranchir de l'utilisation stricte d'une fenêtre glissante.
- L'un des résultats majeurs de ce chapitre concerne la dépendance forte des performances de la méthode d'estimation des ISRFs à la connaissance du spectre de référence. Lorsque ce dernier est légèrement bruité, les performances restent acceptables. En revanche, lorsqu'un spectre de référence incorrect est utilisé (par exemple, provenant d'une scène différente ou déformée), l'estimation est fortement biaisée et les erreurs augmentent brutalement. Cela constitue une hypothèse fondamentale du cadre proposé. Une voie prometteuse consisterait à explorer des stratégies d'inversion aveugle, dans lesquelles le spectre de référence et les ISRFs seraient estimés conjointement, à la manière de certaines approches en traitement d'images où l'on estime à la fois l'image et sa fonction de flou (PSF). Notons par ailleurs que ces erreurs sur le spectre de référence pourraient être modélisées comme des erreurs radiométriques, appliquées non pas sur le spectre mesuré dans son ensemble, mais uniquement sur le spectre théorique.

Dans le chapitre suivant, ce travail sera étendu en intégrant des sources d'erreurs pouvant contaminer les ISRFs comme des erreurs de calibration radiométrique ou des décalages spectraux. Ces erreurs sont généralement non-linéaires et peuvent affecter plus particulièrement certaines longueurs d'onde. L'objectif est de développer des algorithmes capables de corriger ces erreurs tout en estimant les ISRFs.

Chapitre 3

Calibration spectrale et radiométrique

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux différents types de défauts instrumentaux susceptibles d'affecter les spectres mesurés et, par conséquent, l'estimation des ISRFs. Les erreurs associées à ces défauts sont illustrées dans la figure 3.1 et peuvent être regroupées en deux grandes catégories. La première, illustrée à gauche dans la figure 3.1, concerne les défauts spectraux. Ceux-ci se traduisent par des décalages sur l'axe des longueurs d'onde dûs à une mauvaise association entre les pixels du détecteur et les longueurs d'onde correspondantes. Elles peuvent résulter d'une mauvaise caractérisation du barycentre de l'ISRF associée à chaque pixel, ou être induites par des phénomènes liés aux conditions de vol. Parmi ceux-ci, on peut citer l'effet Doppler, causé par le mouvement du satellite, ainsi que des déformations mécaniques, par exemple d'origine thermoélastique. Ces erreurs spectrales peuvent également varier en fonction des conditions dans lesquelles les spectres de référence sont acquis par l'instrument. Il peut donc être nécessaire, dans certains cas, d'estimer les décalages spectraux pour chaque jeu de données (spectre de référence / spectre mesuré). La seconde catégorie correspond aux défauts radiométriques, illustrés dans la partie droite de la figure 3.1. Ces défauts peuvent être modélisés par des gains non linéaires spécifiques à chaque pixel de l'instrument. Plus précisément, les défauts radiométriques peuvent évoluer lentement dans le temps, notamment en lien avec le vieillissement de certains composants électroniques. Ils sont intrinsèques à l'instrument et ne sont pas supposés varier, ou très peu, en fonction des spectres de référence. Il est important de noter que ces deux types de défauts n'affectent pas de la même manière l'ensemble du spectre. En effet, les erreurs spectrales ont peu d'impact dans les zones "plates" du spectre, mais elles peuvent être plus facilement identifiées et corrigées dans les parties du spectre contenant des raies spectrales. À l'inverse, les erreurs radiométriques sont plus difficiles à estimer dans les intervalles contenant des raies, en raison de la forte variabilité locale du signal, mais elles sont plus facilement détectables dans les régions où le spectre est "plat".

En reprenant les notations introduites au chapitre 2, on peut formuler un modèle d'observation modifié qui prend en compte à la fois les erreurs de décalage spectral, notées g , et les erreurs radiométriques, notées f_l , spécifiques à chaque pixel l . L'équation de ce modèle s'écrit alors :

$$y(\lambda_l) = f_l (r * g(I_l))(\lambda_l) = f_l \left(\int_{\mathbb{R}} r(\lambda_l - u) g(I_l(u)) du \right), \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (3.1)$$

où $y(\lambda_l) \in \mathbb{R}$ est la valeur du spectre mesuré à la longueur d'onde λ_l tenant compte des défauts spectraux. Le terme $r(\lambda)$ est une fonction qui désigne le spectre de référence (ou spectre théorique), tandis que I_l est la fonction de réponse spectrale instrumentale (ISRF) associée au pixel l , centrée sur la longueur d'onde λ_l .

Dans une première partie de ce chapitre, nous nous concentrerons sur la modélisation des décalages spectraux, ainsi que sur l'estimation conjointe de ces défauts avec les ISRFs. Dans une seconde

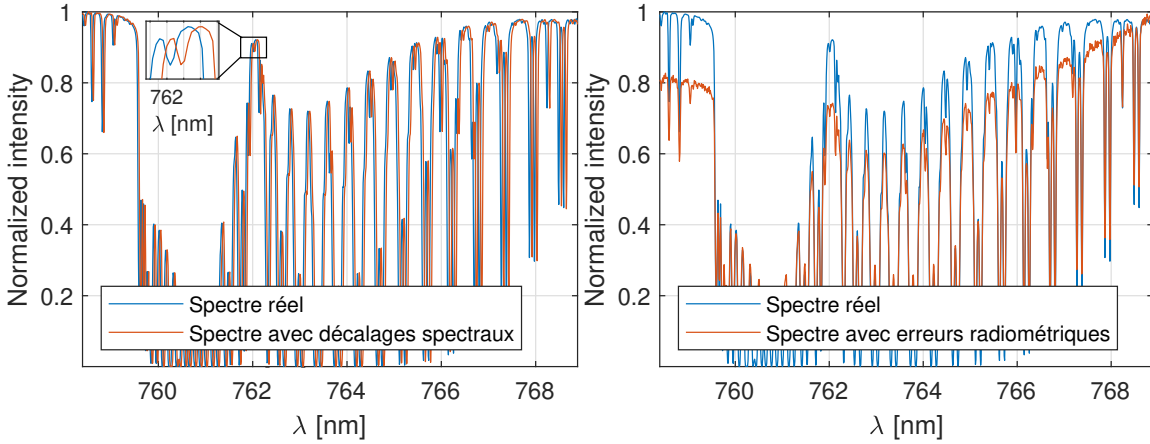


FIGURE 3.1 – Illustration de l’impact des défauts (décalages spectraux (gauche) et erreurs radiométriques (droite)) sur le spectre mesuré.

partie, nous aborderons la modélisation et l’estimation des erreurs radiométriques, en développant à nouveau une approche d’estimation conjointe des ISRFs et des défauts. Enfin, la dernière partie sera dédiée à l’estimation conjointe des ISRFs, des décalages spectraux et des erreurs radiométriques, en s’appuyant sur les méthodes introduites dans les deux sections précédentes. Nous y retiendrons les approches donnant les meilleurs résultats, tant en termes de précision d’estimation des ISRFs, que de temps de calcul.

3.1 Calibration spectrale

Dans cette partie, nous nous intéressons à la calibration spectrale des instruments. Les erreurs radiométriques sont supposées avoir été corrigées, ce qui signifie que les fonctions f_l introduites dans l’équation (3.1) sont telles que $f_l(x) = x$ (fonction identité). Le modèle d’observation (3.1) se simplifie donc et s’écrit :

$$y(\lambda_l) = (r * g(I_l))(\lambda_l) = \int_{\mathbb{R}} r(\lambda_l - u) g(I_l(u)) du, \quad l = 1, \dots, N_\lambda. \quad (3.2)$$

Ce modèle permet de se concentrer sur l’estimation des ISRFs et des décalages spectraux en négligeant les effets radiométriques. L’objectif est de proposer des méthodes permettant de corriger les erreurs spectrales et d’estimer au mieux les ISRFs. On rappelle que chaque pixel l du détecteur est associé à une ISRF I_l spécifique, qui peut varier selon la longueur d’onde. La longueur d’onde λ_l attribuée à un pixel correspond généralement au barycentre de l’ISRF I_l . Cette caractérisation des longueurs d’onde λ_l et des ISRFs I_l est en général réalisée lors de la calibration au sol, à l’aide d’un laser accordable fournissant une lumière monochromatique [69]. Cependant, plusieurs phénomènes peuvent affecter cette calibration lors des mesures en vol : erreurs de calibration initiale, effet Doppler dû au mouvement du satellite, variations thermiques dans l’instrument ou encore déformations thermo-élastiques [70, 71]. Nous proposons de modéliser ces décalages spectraux de manière paramétrique. Dans un premier temps, nous formulons le problème d’estimation conjointe des ISRFs et du décalage spectral dans ce cadre. Nous présenterons ensuite différentes méthodes d’estimation ou de recalage.

3.1.1 Estimation des ISRFs avec prise en compte des décalages spectraux

Formulation du problème

De la même manière que dans le chapitre 2, l'équation 3.2 peut être discrétisée de la façon suivante :

$$y(\lambda_l) = \sum_{n=-N/2}^{N/2} r(\lambda_l - n\Delta_I)g(I_l(n\Delta_I)) + \epsilon_l, \quad (3.3)$$

où l'on rappelle que Δ_I est l'espacement entre les $N + 1$ points de la grille de l'ISRF, et que ϵ_l représente un bruit gaussien sur la mesure au pixel l . Dans ce modèle, la fonction g représente un décalage spectral appliqué à l'ISRF, qui est alors recentrée sur une nouvelle longueur d'onde $\lambda'_l = \lambda_l + \delta(l)$, où $\delta(l)$ désigne le décalage spectral associé au pixel l . Formellement, ce décalage est tel que :

$$g(I_l(n\Delta_I)) = I_l(n\Delta_I + \delta(l)).$$

Ainsi, le produit entre l'ISRF et le spectre de référence s'effectue à une position décalée, ce qui introduit une erreur sur le spectre mesuré. Il devient alors nécessaire de réaligner le spectre mesuré avec le spectre modélisé, en s'appuyant sur les longueurs d'onde connues λ_l afin de corriger ces erreurs et d'améliorer la précision de l'estimation.

Nous reprenons l'hypothèse selon laquelle les ISRFs varient peu sur une fenêtre d'observation autour du pixel l , où l'on cherche à estimer l'ISRF I_l . En reprenant les notations du chapitre 2, on introduit une nouvelle fenêtre glissante

$$\mathcal{W}_l(\delta) = \left\{ \lambda_{l-\frac{L}{2}} + \delta \left(l - \frac{L}{2} \right), \dots, \lambda_{l+\frac{L}{2}} + \delta \left(l + \frac{L}{2} \right) \right\}, \quad (3.4)$$

contenant ainsi $L + 1$ observations du spectre mesuré, cette fois-ci aux longueurs d'onde décalées $\lambda'_l = \lambda_l + \delta(l)$. En effet, du point de vue de la modélisation, un décalage de l'ISRF de $\delta(l)$ peut s'interpréter comme un décalage équivalent du spectre de référence. On peut alors introduire ce décalage lors de la construction de la matrice

$$\mathbf{R}_l(\delta) \triangleq \pi(\mathbf{r}, \mathcal{W}(\delta)) \in \mathbb{R}^{(L+1) \times (N+1)}, \quad (3.5)$$

où $\pi : \mathbb{S} \times \mathbb{W} \rightarrow \mathbb{R}^{(L+1) \times (N+1)}$ est une fonction d'interpolation qui retourne une matrice composée de versions décalées du spectre de référence vectorisé \mathbf{r} , centrées sur les longueurs d'onde interpolées correspondant à la fenêtre glissante $\mathcal{W}_l(\delta)$. Le vecteur $\mathbf{I}_l \in \mathbb{R}^{N+1}$ représentant l'ISRF à estimer peut alors être conservé sans modification par rapport au chapitre 2. On peut à nouveau écrire la représentation de l'ISRF sous forme vectorisée \mathbf{I}_l dans le dictionnaire $\Phi \in \mathbb{R}^{(N+1) \times N_D}$ de la manière suivante :

$$\mathbf{I}_l = \Phi \boldsymbol{\alpha}_l, \quad (3.6)$$

où $\boldsymbol{\alpha}_l$ est un vecteur parcimonieux que l'on cherche à estimer. Le problème d'optimisation global, visant l'estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux, s'écrit alors :

$$\arg \min_{\mathbf{A}, \delta} R_1(\mathbf{A}, \delta) = \arg \min_{\mathbf{A}, \delta} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\mathbf{y}_l - \mathbf{R}_l(\delta) \Phi \boldsymbol{\alpha}_l\|_2^2 + \mu \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\boldsymbol{\alpha}_l\|_0, \quad (3.7)$$

$$\mathbf{R}_l(\delta) \triangleq \pi(\mathbf{r}, \mathcal{W}(\delta)),$$

où \mathbf{y}_l est le spectre mesuré vectorisé sur la fenêtre glissante et $\mathbf{A} = [\boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \boldsymbol{\alpha}_{N_\lambda}] \in \mathbb{R}^{N_D \times N_\lambda}$ la matrice contenant les vecteurs parcimonieux à estimer.

Modélisation paramétrique des décalages spectraux

Nous proposons ici de considérer que la fonction des décalages spectraux δ à estimer est une fonction paramétrique, notée $\delta_{\mathbf{c}}$, dépendant d'un vecteur de paramètres $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^P$. La longueur d'onde décalée s'écrit alors $\lambda'_l = \lambda_l + \delta_{\mathbf{c}}(l)$ et l'estimation des décalages spectraux revient à estimer le paramètre \mathbf{c} . Différents modèles peuvent être utilisés pour $\delta_{\mathbf{c}}$. Nous supposons dans cette thèse que les décalages peuvent être modélisés par un polynôme de degré P :

$$\delta_{\mathbf{c}}(l) = \sum_{p=0}^P c_p \left(\frac{l}{l_{\max}} \right)^p, \quad (3.8)$$

où l_{\max} est le nombre de pixels dans la bande. Une justification théorique de ce choix de modèle repose sur le fait qu'il est bien connu que toute fonction continue définie sur un intervalle peut être uniformément approchée par une fonction polynomiale, selon le théorème d'approximation de Stone-Weierstrass [72]. D'un point de vue plus pratique, l'utilisation de modèles polynomiaux pour ces décalages est largement répandue dans la littérature. Par exemple, un polynôme d'ordre 1 est employé pour le spectromètre GOSAT [70], un polynôme d'ordre 2 dans [73], tandis que des polynômes jusqu'à l'ordre 5 sont utilisés pour d'autres instruments tels que OCO-2 [71]. Lorsque les décalages sont très faibles, largement inférieurs à la largeur d'un pixel, une linéarisation par développement de Taylor est pertinente, comme démontré dans [74]. Cependant, des décalages pouvant atteindre jusqu'à 3 pixels ont été observés [71], ce qui nécessite un modèle plus robuste pour leur estimation en vol. Par conséquent, la linéarisation n'a pas été étudiée dans cette thèse.

En injectant l'expression du décalage $\delta_{\mathbf{c}}$ dans l'équation (3.7), on obtient alors :

$$\arg \min_{\mathbf{A}, \mathbf{c}} R_2(\mathbf{A}, \mathbf{c}) = \arg \min_{\mathbf{A}, \mathbf{c}} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\mathbf{s}_l - \mathbf{R}_l(\mathbf{c}) \Phi \boldsymbol{\alpha}_l\|_2^2 + \mu \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\boldsymbol{\alpha}_l\|_0, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{R}_l(\mathbf{c}) \triangleq \pi \left(\mathbf{r}, \mathcal{W}_l \left(\sum_{p=0}^P c_p \left(\frac{\cdot}{l_{\max}} \right)^p \right) \right).$$

La section suivante présente des méthodes permettant d'estimer conjointement la matrice \mathbf{A} et le vecteur \mathbf{c} à partir du spectre mesuré \mathbf{y} et des longueurs d'onde caractérisées au sol λ_l .

3.1.2 Estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux

Optimisation alternée

Le problème (3.9) est non convexe et NP-difficile, notamment en raison de la norme ℓ_0 appliquée aux coefficients $\boldsymbol{\alpha}_l$ comme présenté dans le chapitre 2. Il devient cependant plus difficile à résoudre avec l'introduction des erreurs spectrales. Dans ce contexte, nous proposons d'utiliser une méthode alternée qui itère entre l'estimation des décalages spectraux (permettant un recalage entre observations et modèle) et l'estimation des vecteurs parcimonieux. Plus précisément, les deux étapes sont les suivantes :

1. Estimation des décalages spectraux $\boldsymbol{\delta}$ (ou des coefficients \mathbf{c}) en fixant les ISRFs. L'optimisation est réalisée en fonction de la méthode choisie (voir section précédente).
2. Estimation des vecteurs parcimonieux $\boldsymbol{\alpha}_l$ à partir du dictionnaire interpolé, en fixant les décalages. L'estimation des vecteurs $\boldsymbol{\alpha}_l$ est réalisée à l'aide de l'algorithme Orthogonal Matching Pursuit (OMP) [36, 37], adapté aux représentations parcimonieuses.

À chaque itération, on met à jour successivement les décalages et les coefficients jusqu'à convergence. Cette méthode est décrite dans l'algorithme 7 de l'annexe A. Notons que deux stratégies d'initialisation peuvent être adoptées pour la première étape : (i) en supposant qu'aucune erreur n'affecte les longueurs d'onde : on initialise les décalages à zéro et on commence par estimer les ISRFs à partir

des données observées, ou (ii) en supposant qu'il existe un décalage spectral déterminé à partir d'un profil moyen d'ISRF représenté par le premier atome du dictionnaire Φ .

Cette méthode peut être considérée comme une extension du cadre SPIRIT développé dans le chapitre 2, en intégrant cette fois un modèle explicite de décalage spectral. Elle repose sur une représentation parcimonieuse des réponses spectrales dans un dictionnaire fixe, tout en permettant de corriger les erreurs de positionnement spectral. La méthode complète est appelée SPIRITUS, pour "SParse representation of Instrument spectral Responses usIng a dicTionary and accoUning for spectral Shifts".

Utilisation du transport optimal

La distance à minimiser dans la formulation (3.9) est la norme ℓ_2 . Cependant, l'utilisation d'une telle norme dans certains contextes peut s'avérer inadaptée, notamment en présence de grands décalages spectraux ou de spectres complexes (avec de nombreuses raies comme dans la bande B2 de MicroCarb). Dans ces cas, cette fonction de coût présente de nombreux minima locaux. Il devient alors pertinent d'envisager des distances alternatives à la norme ℓ_2 , potentiellement plus robustes aux décalages spectraux, permettant de convexifier le problème d'optimisation. Le transport optimal (OT) a été utilisé dans de nombreuses applications, notamment en imagerie sismique haute résolution [75]. En facilitant la convexification de la fonction de coût, la distance de Wasserstein peut avantageusement remplacer la norme ℓ_2 pour l'estimation des décalages spectraux. Les fondements théoriques du transport optimal sont par exemple détaillés dans [76] qui introduit les problèmes de Monge et la relaxation de Kantorovich. Cette partie résume certains résultats qui seront utilisés pour l'estimation conjointe des ISRFs et des défauts spectraux.

Considérons deux densités positives $\eta, \xi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$, normalisées telles que :

$$\int_{\mathbb{R}} \eta(\lambda) d\lambda = \int_{\mathbb{R}} \xi(\lambda) d\lambda = \mu,$$

pour une certaine valeur de $\mu > 0$. La distance de Wasserstein-2 (voir [77]) entre η et ξ est alors définie par :

$$W_2(\eta, \xi) = \left(\inf_{\substack{T: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \\ T_{\#} \eta = \xi}} \int_{\mathbb{R}} (\lambda - T(\lambda))^2 d\lambda \right)^{1/2},$$

où T est le transport optimal, aussi appelé application de Monge, et $T_{\#} \eta$ l'image de η par T . Si η et ξ sont absolument continues, le transport optimal existe et admet une expression explicite (voir [78, Thm. 2.9]) :

$$T = F_{\xi}^{[-1]} \circ F_{\eta},$$

où F_{η} et F_{ξ} désignent les fonctions de répartition de η et ξ et F_{ξ}^{-1} la pseudo-inverse généralisée. On obtient alors la forme intégrale suivante :

$$W_2(\eta, \xi) = \left(\int_0^{\mu} \left(F_{\eta}^{[-1]}(y) - F_{\xi}^{[-1]}(y) \right)^2 dy \right)^{1/2}. \quad (3.10)$$

Dans notre cas, η et ξ correspondent respectivement aux spectres mesurés \mathbf{y}_l et reconstruits β_l . Cette intégrale est approchée par des sommes de Riemann, ce qui nécessite une interpolation fine lorsque les décalages spectraux sont faibles (sous-pixel).

Notons que dans la pratique, les spectres ne sont pas nécessairement de même masse. Comme discuté dans [76], cela peut être traité par des variantes du transport optimal dites "unbalanced", résolues via des régularisations entropiques et l'algorithme de Sinkhorn. Néanmoins, cette approche est plus coûteuse à mettre en œuvre. Pour simplifier, nous normalisons les spectres à une masse unitaire, ce qui permet d'appliquer directement la formulation (3.10).

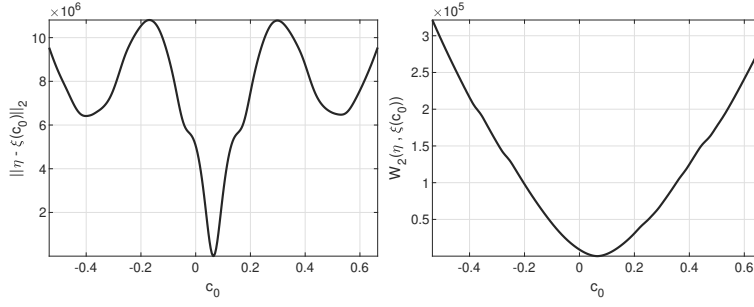


FIGURE 3.2 – Distance entre les mesures \mathbf{y}_l et le modèle $\mathbf{R}_l(\mathbf{c})\mathbf{I}_l$ en fonction du décalage spectral δ , pour un décalage constant sur tous les pixels : comparaison entre la norme ℓ_2 (à gauche) et la distance de Wasserstein (à droite).

La Fig. 3.2 illustre l'évolution des distances $\|\eta - \xi(\mathbf{c})\|_2$ et $W_2(\eta, \xi(\mathbf{c}))$ en fonction du décalage spectral δ , avec des ISRFs supposées connues. Un décalage constant de 0,065 nm est simulé (i.e. $P = 0$, $c_0 = 0,065$). On observe que la norme ℓ_2 introduit plusieurs minima locaux, alors que la distance de Wasserstein fournit une fonction de coût plus régulière, sans minima locaux, ce qui en fait un critère plus adapté. L'estimation des décalages spectraux, à partir du paramètre \mathbf{c} dans ce contexte, peut alors être reformulée comme suit :

$$\arg \min_{\mathbf{c}} R_{OT}(\mathbf{c}) = \arg \min_{\mathbf{c}} \sum_{l=1}^{N_\lambda} W_2(\mathbf{y}_l, \mathbf{R}_l(\mathbf{c})\mathbf{I}_l). \quad (3.11)$$

Notons que le minimum obtenu peut être moins précis (c'est-à-dire présenter une forme moins pointue du terme d'attache aux données (comme illustré dans la figure de droite de Fig. 3.2) que celui obtenu avec la norme ℓ_2 .

Dans ce travail, la distance de Wasserstein est utilisée uniquement pour estimer les décalages spectraux et améliorer la robustesse du recalage entre les spectres mesurés et les modèles ISRFs. Cependant, elle pourrait aussi être exploitée pour l'estimation des vecteurs parcimonieux $\boldsymbol{\alpha}_l$. Plusieurs études récentes explorent cette piste : [79] propose un apprentissage de dictionnaire non linéaire par interpolation par déplacement d'atomes pour reconstruire des histogrammes, [80] introduit la projection robuste Wasserstein pour régulariser cette distance dans des cadres d'optimisation et enfin, [81] applique la transportation spectrale optimale à la transcription musicale avec un cadre parcimonieux. Ces approches offrent des perspectives prometteuses pour enrichir notre modèle, notamment en intégrant la distance de Wasserstein pour estimer les coefficients parcimonieux contenus dans \mathbf{A} , et donc les ISRFs. Cependant, ces extensions dépassent le cadre de cette thèse et seront explorées ultérieurement.

3.1.3 Autres approches non-paramétriques pour le recalage spectral

D'autres méthodes non paramétriques sont envisagées pour estimer les décalages spectraux. Plutôt que de chercher les coefficients d'une fonction paramétrique, l'objectif est ici de recalibrer deux spectres : le spectre mesuré avec décalages spectraux \mathbf{y} , et le spectre modélisé défini par $\boldsymbol{\beta}(\delta) = \text{diag}(\mathbf{R}(\delta)\mathbf{I})$ où $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times (N+1)}$ est la matrice du spectre de référence sur l'ensemble des N_λ longueurs d'onde lorsque le décalage, et $\mathbf{I} = [\mathbf{I}_1, \dots, \mathbf{I}_{N_\lambda}] \in \mathbb{R}^{(N+1) \times N_\lambda}$ contient toutes les ISRFs. L'opérateur diag extrait la diagonale de la matrice $\mathbf{R}(\delta)\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times N_\lambda}$. Le but est de construire un modèle de recalage spectral permettant d'aligner ces deux spectres. Ce recalage consiste à déterminer les valeurs de la fonction $\delta(l)$, pour $l = 1, \dots, N_\lambda$, qui minimisent l'écart entre \mathbf{y} et $\boldsymbol{\beta}(\delta)$. Selon l'approche adoptée, cette minimisation peut être effectuée globalement sur l'ensemble des pixels ou localement à l'aide d'une fenêtre glissante \mathcal{W}_l centrée en λ_l , en supposant l'absence de décalage spectral (i.e. $\delta(l) = 0$, $l = 1, \dots, N_\lambda$).

Méthodes de recalage spectral

L'estimation des décalages spectraux dans les mesures satellitaires de dioxyde de carbone, comme pour GOSAT, a pu être réalisée par corrélation croisée entre spectres observés et spectre de référence [70]. En astronomie, cette méthode est également utilisée pour estimer les décalages Doppler, par exemple dans [82], où le maximum de la corrélation croisée indique le décalage. Le maximum de la corrélation croisée normalisée est défini dans notre contexte entre le spectre mesuré \mathbf{y} et le spectre sans décalage $\boldsymbol{\beta}$ (i.e. $\delta = 0$) par :

$$\arg \max_k R_{CC}(k) = \arg \max_k \frac{\sum_{l=1}^{N_\lambda} y_l \beta_{l+k}}{\sqrt{\sum_{l=1}^{N_\lambda} y_l \sum_{l=1}^{N_\lambda} \beta_l}}. \quad (3.12)$$

La corrélation croisée $R_{CC}(k)$ est calculée efficacement avec une transformée de Fourier rapide (FFT) permettant une estimation rapide d'un décalage global supposé constant sur toute la bande spectrale. Lorsque les décalages varient localement, cette approche globale devient insuffisante. Une version locale, dite WCC (Windowed Cross-Correlation), applique la corrélation dans des fenêtres glissantes de taille L centrées sur les longueurs d'onde [83]. Le décalage optimal dans chaque fenêtre correspond à la valeur de k maximisant $R_{CC}(k)$. Pour une précision sub-pixellique, un rééchantillonnage par interpolation (splines) est utilisé. Notons que cette approche a été utilisée avec succès en élastographie spectrale [84].

D'autres méthodes de recalage spectral ont été proposées, notamment dans [85], qui présente une revue des approches utilisées en résonance magnétique nucléaire (RMN), telles que la corrélation croisée via FFT, les modèles basés sur la distance entre pics successifs ou sur Dynamic Time Warping (DTW). Ce dernier, couramment utilisé en chromatographie [86], aligne des signaux présentant des distorsions non linéaires en déformant élastiquement deux séries pour minimiser une distance d'alignement globale. Une revue détaillée des variantes de DTW est disponible dans [87]. À notre connaissance, le DTW n'a pas été appliqué à l'estimation des décalages spectraux dans notre contexte, malgré son efficacité démontrée dans de nombreux domaines (reconnaissance vocale, écriture manuscrite, séries temporelles, bioinformatique, audio). Ici, il permet d'aligner le spectre mesuré \mathbf{y} avec le spectre modélisé sans défauts $\boldsymbol{\beta}$ à partir d'une matrice de coût local $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times N_\lambda}$, où les coefficients $c_{i,j}$ mesurent une dissimilarité locale définie par $c_{i,j} = (y_i - \beta_j)^2$. L'algorithme recherche alors un chemin d'alignement optimal ξ respectant les contraintes de frontière, de monotonie et de pas contraint, et minimisant la fonction d'erreur correspondante :

$$\arg \min_{\xi \in \Xi} R_{DTW}(\xi) = \arg \min_{\xi} \sum_{(i,j) \in \xi} (y_i - \beta_j)^2, \quad (3.13)$$

où Ξ est l'ensemble de tous les chemins admissibles. Dans notre application, l'estimation de décalages sous-pixels est améliorée en interpolant le spectre $\boldsymbol{\beta}$ — dont la grille spectrale λ_l est connue — afin de le sur-échantillonner sur la grille du spectre de référence. Cela permet une estimation plus précise des décalages δ , et donc des longueurs d'onde corrigées $\lambda'_l = \lambda_l + \delta(l)$. Par ailleurs, des extensions récentes comme le soft-DTW [88], version lissée et différentiable du DTW, sont mieux adaptées à l'apprentissage automatique. Leur exploration est laissée à de futurs travaux.

Les méthodes de recalage spectral par interpolation présentent une limite majeure : elles modélisent les décalages uniquement comme des translations sur l'axe des longueurs d'onde, en alignant directement le spectre mesuré \mathbf{y} et le spectre provenant du modèle sans défauts $\boldsymbol{\beta}$, sans considérer l'impact de ces décalages sur la forme du spectre. Or, dans la pratique, le spectre mesuré résulte d'une convolution entre le spectre de référence et une ISRF décalée. Le décalage affecte donc le processus de convolution lui-même, modifiant à la fois la position et la forme des raies spectrales — des effets difficilement capturables par un simple réalignement. Une approche simple de type brute force (BF) est présentée dans la partie suivante pour répondre à ces limitations.

Modélisation par décalage sur une grille spectrale à résolution accrue

La modélisation brute force (BF) vise à estimer localement les décalages spectraux en s'appuyant sur la grille fine du spectre de référence, notée Δ_R . Pour chaque fenêtre glissante \mathcal{W}_l , on définit une fenêtre haute résolution $\mathcal{HW}(\lambda_l) = \{\lambda_l - \frac{M}{2}, \dots, \lambda_l + \frac{M}{2}\} \in \mathbb{R}^{M+1}$, dont la taille est fixée selon l'erreur maximale attendue (e.g. 3 pixels). On cherche alors, pour chaque pixel l , le décalage $\delta_l = m\Delta_R$, $m \in \mathcal{HW}(\lambda_l)$, qui minimise l'erreur entre le spectre mesuré et celui reconstruit par convolution :

$$\arg \min_m R_{\text{BF}}(m) = \arg \min_m \sum_{l' \in \mathcal{W}(\lambda_l)} \left(y_{l'} - \sum_{n=-N/2}^{N/2} r(\lambda_{l'} + m\Delta_R - n\Delta_I) I_l(n\Delta_I) \right)^2, \quad l = 1, \dots, N_\lambda.$$

En pratique, l'erreur est calculée pour tous les déplacements m possibles, puis la valeur de m minimisant l'erreur est retenue. Cette recherche exhaustive et non optimisée sera appelée "BF" (Brute Force). Une alternative plus efficace consiste à utiliser l'algorithme DTW pour estimer les décalages entre le spectre mesuré et une version à haute résolution du modèle, notée "DTW_R".

3.1.4 Comparaison des méthodes d'estimation du décalage spectral

Les méthodes présentées diffèrent par leur modélisation des décalages spectraux et leur fidélité au modèle physique. Les approches non paramétriques, utilisant la corrélation croisée ou la transformation DTW, estiment les décalages localement, sans modèle a priori. En revanche, les méthodes prenant en compte la convolution — comme BF (Brute Force) ou DTW_R — offrent une modélisation plus fidèle mais plus coûteuse en calcul. En comparaison, la première formulation repose sur un modèle paramétrique des décalages, souvent polynomial dans la pratique, ce qui n'est pas le cas des autres méthodes. Pour garantir une comparaison équitable, il est possible d'ajuster a posteriori un modèle global sur les estimations ponctuelles obtenues avec les méthodes non paramétriques. Par exemple, à partir des décalages estimés par BF, on peut ajuster une fonction polynomiale, ce qui donne la méthode dite "BF_P", le suffixe "_P" indiquant ce post-traitement polynomial. D'autres méthodes peuvent être utilisées pour réaliser cet ajustement, notamment :

- La régression par noyaux gaussiens, où la fonction de décalage $\delta(l)$ est estimée dans un espace de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS) [89]. La fonction s'exprime comme une combinaison pondérée de noyaux gaussiens $\Gamma(l_i, l_j) = \exp\left(-\frac{(l_i - l_j)^2}{2\gamma}\right) \mathbf{I}$, avec γ un paramètre de bande passante. L'estimation est réalisée par moindres carrés. Cette méthode sera désignée par le suffixe "_K".
- La régression par vecteurs supports (SVR) introduite dans [90] cherche une fonction prédictive encadrée par une marge d'erreur ϵ . En formulation duale avec noyau gaussien, la fonction s'écrit :

$$\delta(l, e, e^*) = \sum_{i=1}^{N_\lambda} (e_i^* - e_i) \Gamma(\mathbf{l}, l_i) + b$$

où e, e^* sont des multiplicateurs de Lagrange et b un biais. Cette méthode permet d'apprendre des modèles de décalage lisses tout en régularisant leur complexité. En pratique, elle peut être mise en œuvre via la fonction MATLAB *fitrsvm* et sera désignée par le suffixe "_SVR".

Ces approches permettent de combiner la précision locale des méthodes non paramétriques avec une régularisation globale, favorisant ainsi des estimations plus robustes et physiquement cohérentes des décalages spectraux.

3.1.5 Expérimentations

Cette partie présente les résultats obtenus pour l'estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux. Les performances des différentes méthodes sont évaluées à la fois en termes de qualité de l'estimation des ISRFs, d'erreur entre les spectres mesurés et les spectres reconstruits et d'estimation

des décalages spectraux. Nous rappelons que la qualité de l'estimation des ISRFs est quantifiée à l'aide de l'erreur absolue entre l'ISRF réelle et son estimation :

$$E_l = \sum_{n=-N/2}^{N/2} \left| I_l(n\Delta_I) - \hat{I}_l(n\Delta_I) \right|.$$

L'erreur d'estimation des décalages spectraux est obtenue par :

$$\frac{1}{N_\lambda} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\delta(l) - \hat{\delta}(l)\|_2^2.$$

Nous rappelons que, pour la mission MicroCarb, les ISRFs sont considérées comme correctement estimées lorsque leur erreur normalisée vérifie $E_l < 1\%$ pour chaque longueur d'onde. Différentes méthodes de recalage, paramétriques (basées sur la norme ℓ_2 ou sur le transport optimal) ou non paramétriques (CC , WCC , WCC_P , WCC_K , WCC_SVR , DTW , DTW_P , DTW_K , DTW_SVR , BF , BF_P , BF_K , BF_SVR , DTW_R , DTW_RP , DTW_RK , DTW_RSVR), sont étudiées et comparées. Une première étude est menée dans un cas idéalisé où les ISRFs sont connues, afin d'évaluer la capacité des méthodes à recaler précisément le spectre afin d'assurer une bonne estimation par la suite des ISRFs. Les meilleures méthodes sont ensuite utilisées dans le cas de l'estimation conjointe des ISRFs et du recalage spectral. Pour la représentation parcimonieuse des ISRFs dans l'algorithme SPIRITUS, il a été décidé de conserver uniquement l'algorithme OMP, en construisant le dictionnaire Φ à l'aide de la SVD appliquée à un ensemble de réponses spectrales représentatives. Cette méthode avait permis d'obtenir les meilleurs résultats au chapitre 2.

Pour l'ensemble des expériences, nous rappelons que le bruit ϵ ajouté aux mesures est un bruit gaussien additif, généré pour respecter un rapport signal sur bruit (SNR) spécifié, selon la relation suivante :

$$\epsilon = \sqrt{10^{-\text{SNR}/10} \frac{\|\mathbf{s}_l\|_2}{\|\mathbf{n}_0\|_2}} \mathbf{n}_0, \quad (3.14)$$

où $\mathbf{n}_0 \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1}_{L+1})$ est de même dimension que \mathbf{s}_l . Comme au chapitre 2, le niveau de bruit est fixé à $\text{SNR}=55$ dB.

Estimation préliminaire - sans prise en compte de décalages spectraux

Dans un premier temps, des erreurs spectrales sont introduites, puis les ISRFs sont estimées à l'aide de l'algorithme OMP, sans les prendre en compte. La figure 3.3 présente les résultats obtenus avec $K = 4$ atomes non nuls pour la bande B1 de MicroCarb, valeur identifiée comme optimale pour l'estimation des ISRFs au chapitre 2. On constate que la méthode échoue à reconstruire correctement le spectre mesuré et à estimer les ISRFs, avec des erreurs d'estimation très importantes. Ce résultat souligne la nécessité de prendre en compte les décalages spectraux et d'estimer conjointement ces erreurs et les ISRFs.

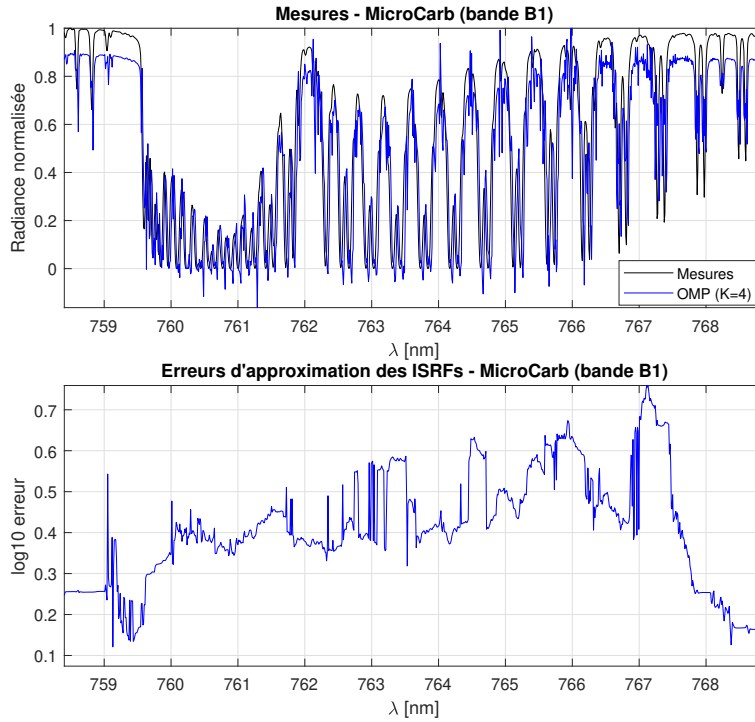


FIGURE 3.3 – Illustration du spectre mesuré avec décalage spectral et du spectre reconstruit utilisant l’algorithme OMP (haut), et erreur d’approximation de l’ISRF en fonction de la longueur d’onde pour un nombre d’atomes sélectionnés à $K = 4$ (bas) pour la bande B1 de MicroCarb.

Estimation des décalages spectraux en supposant les ISRFs connues

Nous avons montré qu’une estimation précise des décalages spectraux est essentielle afin d’estimer les ISRFs. Dans cette partie nous supposons que les ISRFs sont connues. Nous évaluons différentes méthodes d’estimation des décalages. Celles-ci incluent des approches paramétriques (*SPIRITUS* $_{\ell_2}$ et *SPIRITUS* $_{OT}$) et non paramétriques (*CC*, *WCC*, *WCC_P*, *WCC_K*, *WCC_SVR*, *DTW*, *DTW_P*, *DTW_K*, *DTW_SVR*, *BF*, *BF_P*, *BF_K*, *BF_SVR*, *DTW_R*, *DTW_RP*, *DTW_RK*, *DTW_RSVR*). Les performances sont évaluées selon trois critères : l’erreur d’estimation du décalage spectral, le résidu en norme ℓ_2 , et la qualité de l’estimation des ISRFs. En effet, lorsque le recalage est effectué, nous effectuons de nouveau l’estimation des ISRFs avec l’algorithme OMP. L’objectif est de vérifier qu’une estimation fiable des décalages permet également une reconstruction précise des ISRFs. Les méthodes ne remplissant pas ce dernier critère ne seront pas considérées dans la suite. Trois différents scénarios de décalage maximal (noté δ_{\max}) sont considérés. Ce décalage peut être faible ($\delta_{\max} < 3$ pixels), modéré (environ 3 pixels), ou plus important dans un cas extrême ($\delta_{\max} = 38$ pixels). Ce dernier cas, bien que peu probable en pratique, permet d’évaluer la robustesse de la méthode face à des erreurs spectrales importantes.

La figure 3.4 présente les résultats obtenus pour un décalage spectral constant ou polynomial d’ordre 3, en utilisant les deux méthodes paramétriques. On observe que lorsque $\delta_{\max} \leq 3$ pixels, les méthodes basées sur la norme ℓ_2 comme sur le transport optimal permettent toutes deux d’estimer correctement les décalages spectraux ainsi que les ISRFs. En revanche, lorsque le décalage devient plus important (38 pixels), seule la méthode fondée sur le transport optimal parvient à le retrouver avec une précision suffisante pour permettre une estimation fiable des ISRFs.

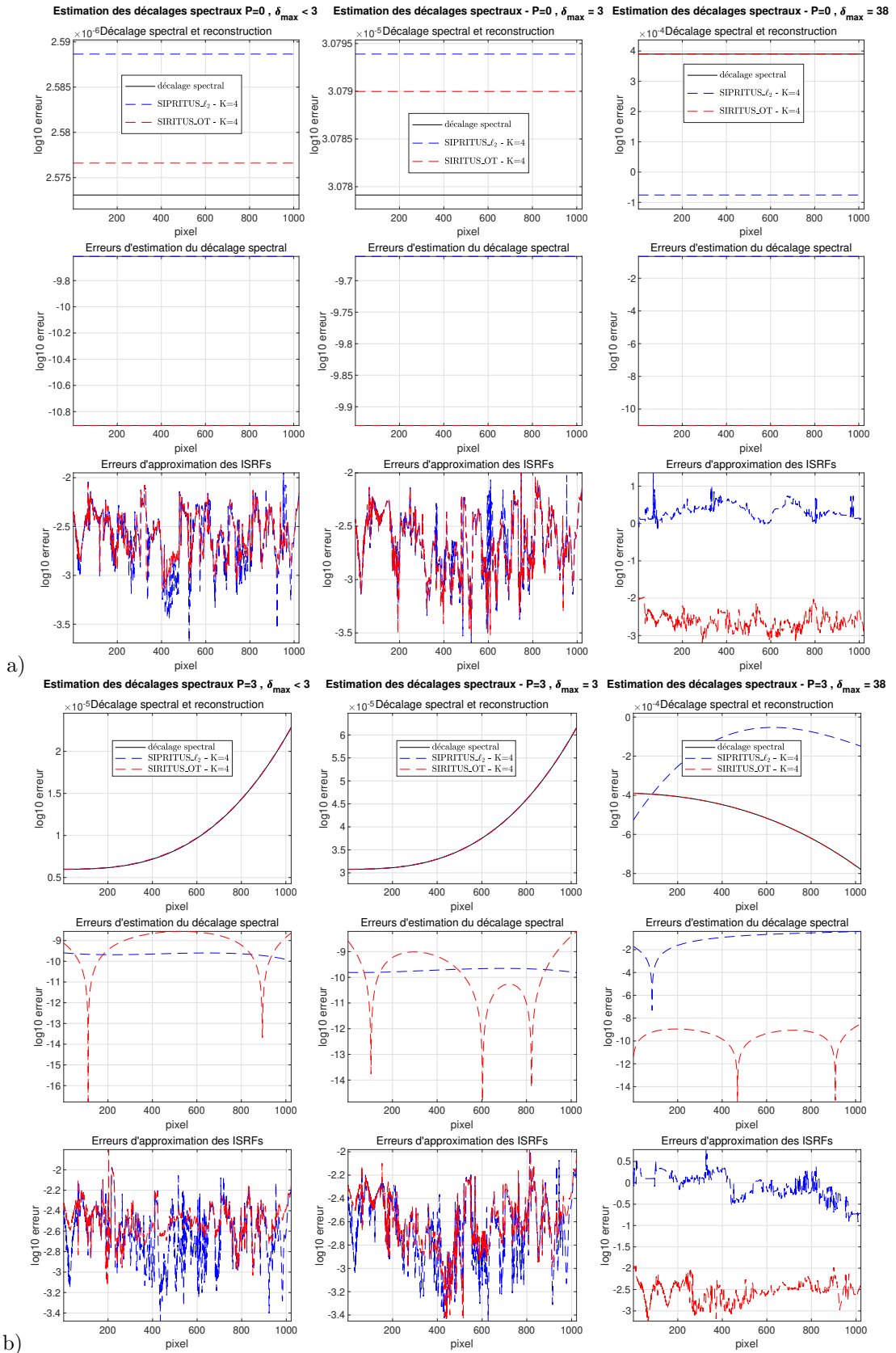


FIGURE 3.4 – Décalage spectral et reconstruction par méthodes paramétriques (haut), erreur d'estimation du décalage spectral (milieu) et des ISRFs (bas), pour un décalage de degré $P = 0$ (a) ou $P = 3$ (b), simulé selon trois niveaux (inférieur à 3 pixels, égal à 3 pixels, égal à 38 pixels), pour la bande B1 de MicroCarb.

La figure 3.5 présente les résultats obtenus dans le cas non paramétrique. On observe que, lorsqu’aucun ajustement n’est utilisé — ni polynomial, ni par noyaux — le décalage estimé n’est pas lisse le long de la bande spectrale. L’application d’un ajustement agit alors comme un débruitage, améliorant la régularité du décalage estimé. La méthode de type Brute Force BF fournit les meilleurs résultats dans plusieurs configurations (sans ajustement, avec ajustement polynomial, ou avec ajustement utilisant les noyaux), avec des erreurs d’estimation des ISRFs inférieures au critère imposé par la mission. Dans le cas d’un décalage constant, la méthode utilisant les corrélations croisées CC donne également de bons résultats, ce qui est attendu puisqu’elle repose sur l’estimation d’une seule valeur globale. Enfin, la méthode DTW_R , combinée à un ajustement polynomial ou par noyaux, permet également d’atteindre de bonnes performances. Les autres méthodes ne semblent pas permettre d’obtenir de résultats satisfaisants. Notons par ailleurs que l’ajout d’une fenêtre glissante à la méthode de corrélation croisée améliore les résultats dans le cas d’un décalage de degré $P = 3$. Toutefois, on reste loin des performances attendues, même avec un ajustement polynomial ou à noyaux. En définitive, il semble qu’un recalage simple entre deux spectres ne soit pas suffisant pour garantir la précision requise. En revanche, les méthodes exploitant explicitement la grille du spectre de référence et les ISRFs (comme BF et DTW_R) donnent les meilleurs résultats.

Pour terminer, la figure 3.6 présente les résultats obtenus avec les meilleures méthodes paramétriques et non paramétriques. Dans le cas d’un décalage constant, toutes les méthodes donnent des erreurs similaires, sauf lorsque le décalage devient important ($\delta_{\max} = 38$ pixels), où seule la méthode basée sur la norme ℓ_2 échoue à atteindre une bonne précision. Dans le cas d’un décalage polynomial de degré 3, les méthodes paramétriques ainsi que la méthode BF (avec potentiel ajustement polynomial ou avec des noyaux) permettent d’obtenir de bons résultats, à condition que le décalage reste modéré (au plus 3 pixels). Il est important de noter que seule la méthode paramétrique utilisant le transport optimal permet d’atteindre systématiquement une erreur inférieure à 1 % même avec 38 pixels de décalage maximal.

Le tableau 3.1 présente les résultats obtenus pour $\delta_{\max} = 3$ pixels, avec des polynômes de degrés $P \in \{0, \dots, 5\}$ alors que la table 3.2 présente les résultats pour toutes les bandes pour un degré $P = 3$. On observe, une fois de plus, que les méthodes paramétriques offrent les meilleures performances globales. Toutefois, la méthode BF peut dans certains cas produire des résultats comparables. Les meilleures performances de BF sont systématiquement obtenues avec un ajustement polynomial. Ces observations soulignent l’importance cruciale de disposer d’un modèle paramétrique adapté pour estimer les décalages spectraux, recalcr précisément les spectres, et, en conséquence, obtenir des estimations fiables des ISRFs.

Au niveau du temps de calcul, le tableau 3.3 les méthodes paramétriques ainsi que la méthode BF sont plus gourmandes que les méthodes de recalage classique mais permettent de trouver les meilleures solutions, ce qui constitue un compromis. Il est cependant important de souligner qu’en pratique, l’utilisation de la méthode BF nécessite la construction d’un tableau spécifique pour chacune des 1024 ISRFs, contenant les N_R valeurs du spectre de référence. Cette étape peut s’avérer coûteuse en ressources mémoire, en particulier lorsqu’on utilise plusieurs jeux de données (spectres mesurés / spectres de référence). Dans la suite, nous appliquerons les méthodes BF et celles paramétriques pour effectuer l’estimation conjointe.

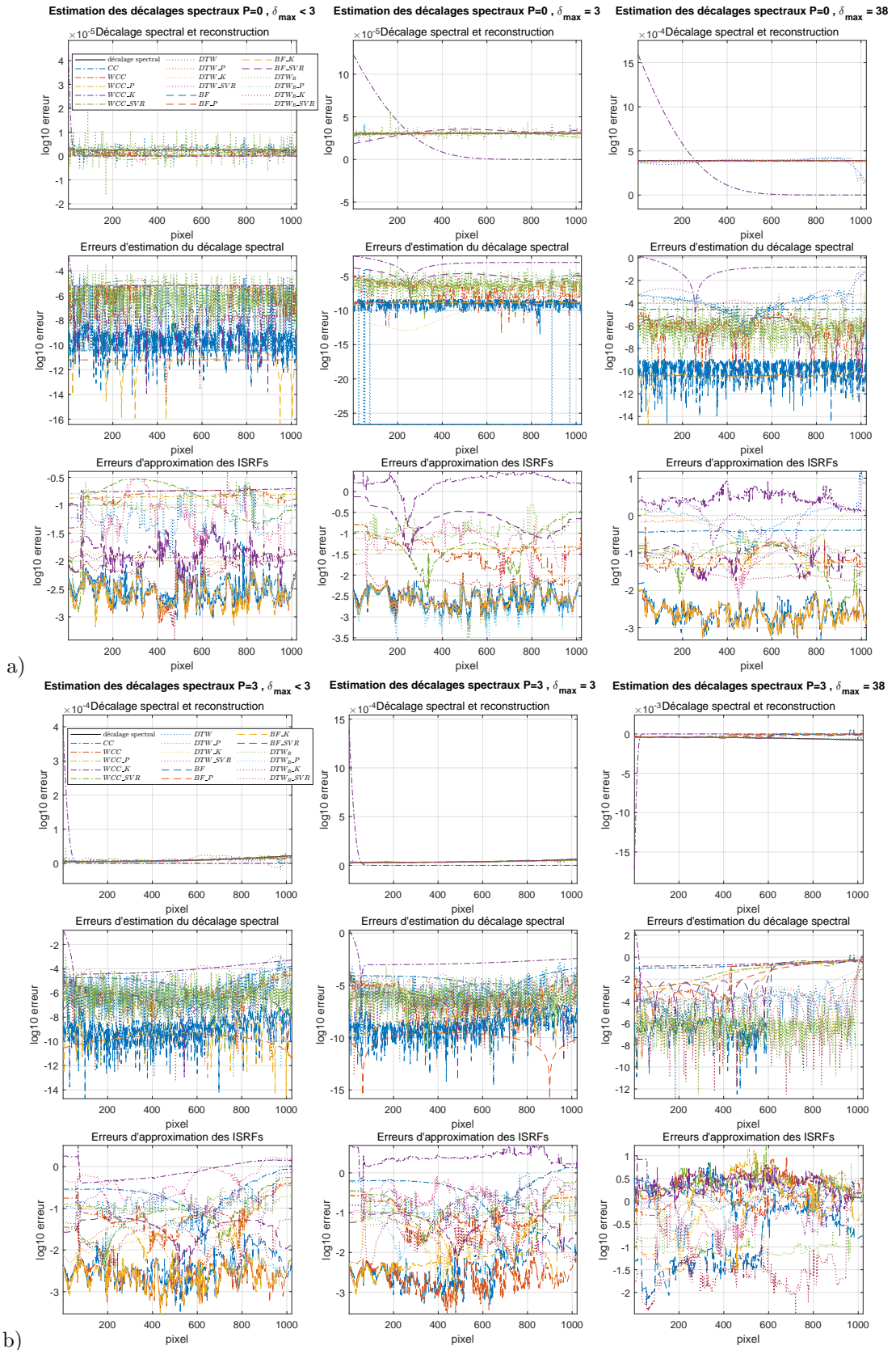


FIGURE 3.5 – Décalage spectral et reconstruction par méthodes non-paramétriques (haut), erreur d’estimation du décalage spectral (milieu) et des ISRFs (bas), pour un décalage de degré $P = 0$ (a) ou $P = 3$ (b), simulé selon trois niveaux (inférieur à 3 pixels, égal à 3 pixels, égal à 38 pixels), pour la bande B1 de MicroCarb.

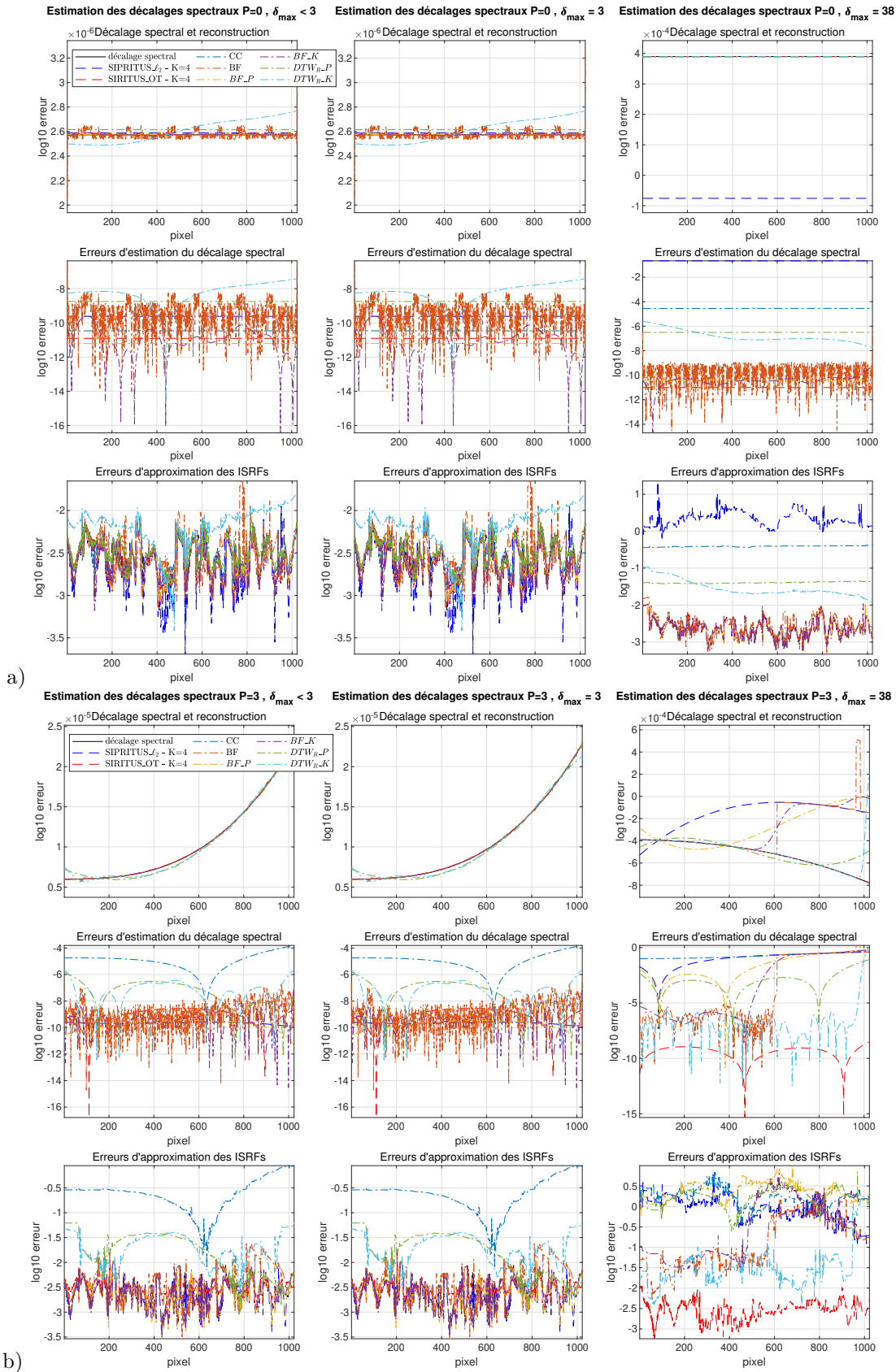


FIGURE 3.6 – Décalage spectral et reconstruction par méthodes paramétriques et non-paramétriques (haut), erreur d’estimation du décalage spectral (milieu) et des ISRFs (bas), pour un décalage de degré $P = 0$ (a) ou $P = 3$ (b), simulé selon trois niveaux (inférieur à 3 pixels, égal à 3 pixels, égal à 38 pixels), pour la bande B1 de MicroCarb.

TABLE 3.1 – Erreur d’estimation des décalages spectraux et moyenne des erreurs d’approximation des ISRFs en utilisant les méthodes paramétriques ($SPIRITUS_{\ell_2}$, noté S_{ℓ_2} , $SPIRITUS_{OT}$ noté S_{OT}) et non-paramétriques (CC , WCC , WCC_P , WCC_K , WCC_{SVR} , DTW , DTW_P , DTW_K , DTW_{SVR} , BF , BF_P , BF_K , BF_{SVR} , DTW_R , DTW_{RP} , DTW_{RK} , DTW_{RSVR}) pour des décalages de degré $P = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ et de 3 pixels pour la bande B1 de MicroCarb - en bleu : méthode permettant d’obtenir une erreur d’estimation des ISRFs sous le critère de mission.

Méthode	Erreur d’estimation des décalages spectraux (log10 erreur)					
	$P = 0$	$P = 1$	$P = 2$	$P = 3$	$P = 4$	$P = 5$
S_{ℓ_2}	-9.66	-9.62	-9.63	-9.72	-9.67	-9.57
S_{OT}	-9.93	-9.06	-8.98	-9.22	-8.59	-8.49
CC	-26.65	-4.09	-4.08	-4.11	-4.10	-4.13
WCC	-6.13	-5.82	-5.22	-5.31	-5.65	-5.08
WCC_P	-6.46	-6.40	-5.34	-5.41	-5.80	-5.13
WCC_K	-2.94	-1.14	-2.02	-1.66	-1.67	-1.76
WCC_{SVR}	-3.80	-4.51	-4.08	-4.93	-4.90	-4.83
DTW	-5.91	-4.43	-4.51	-4.58	-4.45	-4.55
DTW_P	-8.79	-5.48	-5.00	-5.54	-5.25	-4.92
DTW_K	-8.48	-5.24	-4.85	-5.17	-5.18	-4.86
DTW_{SVR}	-8.79	-4.39	-4.26	-4.06	-4.19	-4.11
BF	-8.64	-8.11	-7.99	-7.94	-8.08	-7.85
BF_P	-8.92	-9.81	-9.38	-9.87	-9.77	-9.77
BF_K	-8.92	-7.23	-7.03	-6.70	-7.09	-7.24
BF_{SVR}	-8.89	-4.10	-4.86	-6.02	-4.93	-5.43
DTW_R	-4.79	-4.74	-5.16	-4.71	-4.73	-5.11
DTW_{R_P}	-10.05	-7.29	-8.02	-6.20	-6.02	-7.42
DTW_{R_K}	-7.89	-6.32	-7.24	-5.81	-6.20	-6.77
$DTW_{R_{SVR}}$	-4.74	-4.10	-4.10	-4.30	-4.09	-5.07
	Erreur moyenne d’estimation des ISRFs (%)					
Méthode	$P = 0$	$P = 1$	$P = 2$	$P = 3$	$P = 4$	$P = 5$
S_{ℓ_2}	0.27	0.28	0.27	0.26	0.28	0.26
S_{OT}	0.27	0.31	0.32	0.30	0.36	0.36
CC	0.30	57.95	59.24	56.99	57.29	53.98
WCC	4.67	6.17	13.09	11.60	8.08	16.82
WCC_P	4.28	3.86	11.01	10.17	6.71	15.72
WCC_K	185.76	280.79	135.28	257.22	276.88	187.93
WCC_{SVR}	81.53	36.86	59.40	20.02	21.69	23.27
DTW	0.30	22.60	20.49	19.86	23.41	25.26
DTW_P	0.33	11.10	18.73	7.42	8.48	17.30
DTW_K	0.41	9.99	16.58	7.39	9.50	16.14
DTW_{SVR}	0.33	28.67	45.79	53.80	42.43	57.54
BF	0.33	0.62	0.61	0.74	0.57	0.78
BF_P	0.31	0.29	0.28	0.28	0.30	0.29
BF_K	0.31	0.80	1.04	1.17	0.86	0.55
BF_{SVR}	0.28	57.32	24.32	6.54	23.23	12.97
DTW_R	13.01	13.65	12.37	11.84	12.05	11.51
DTW_{R_P}	0.28	1.63	0.69	4.23	4.23	1.01
DTW_{R_K}	0.73	3.18	1.35	3.49	2.63	2.04
$DTW_{R_{SVR}}$	20.75	54.30	58.70	42.10	55.64	14.21

TABLE 3.2 – Erreur d'estimation des décalages spectraux et moyenne des erreurs d'approximation des ISRFs en utilisant les méthodes paramétriques (*SPIRITUS* $_{\ell_2}$, noté S_{ℓ_2} , *SPIRITUS* $_{OT}$ noté S_{OT}) et non-paramétriques (*CC*, *WCC*, *WCC_P*, *WCC_K*, *WCC_SVR*, *DTW*, *DTW_P*, *DTW_K*, *DTW_SVR*, *BF*, *BF_P*, *BF_K*, *BF_SVR*, *DTW_R*, *DTW_RP*, *DTW_RK*, *DTW_RSVR*) pour un décalage spectral de degré $P = 3$ et de 3 pixels pour les bandes (B1, B2, B3 et B4) de MicroCarb - en bleu : méthode permettant d'obtenir une erreur d'estimation des ISRFs sous le critère de mission.

Méthode	Erreur d'estimation des décalages spectraux (log10 erreur)			
	bande B1	bande B2	bande B3	bande B4
S_{ℓ_2}	-9.72	-9.83	-9.62	-9.34
S_{OT}	-9.22	-7.23	-8.11	-8.04
<i>CC</i>	-4.11	-3.42	-3.26	-3.56
<i>WCC</i>	-5.31	-5.60	-5.04	-5.23
<i>WCC_P</i>	-5.41	-6.54	-5.38	-5.38
<i>WCC_K</i>	-1.66	-0.99	-0.53	-1.44
<i>WCC_SVR</i>	-4.93	-4.84	-4.60	-5.04
<i>DTW</i>	-4.58	-4.85	-4.46	-3.60
<i>DTW_P</i>	-5.54	-5.52	-5.38	-4.69
<i>DTW_K</i>	-5.17	-5.52	-5.37	-4.53
<i>DTW_SVR</i>	-4.06	-3.94	-3.86	-3.50
<i>BF</i>	-7.94	-7.18	-7.18	-6.84
<i>BF_P</i>	-9.87	-9.16	-9.72	-8.92
<i>BF_K</i>	-6.70	-6.07	-5.85	-6.39
<i>BF_SVR</i>	-6.02	-5.39	-5.18	-5.68
<i>DTW_R</i>	-4.71	-3.87	-4.19	-1.58
<i>DTW_R_P</i>	-6.20	-5.42	-6.19	-1.71
<i>DTW_R_K</i>	-5.81	-5.38	-5.74	-1.62
<i>DTW_R_SVR</i>	-4.30	-3.54	-3.52	-1.57
Erreur moyenne d'estimation des ISRFs (%)				
Méthode	bande B1	bande B2	bande B3	bande B4
S_{ℓ_2}	0.26	0.42	0.39	0.30
S_{OT}	0.30	0.73	0.43	0.43
<i>CC</i>	56.99	48.27	56.01	47.40
<i>WCC</i>	11.60	3.36	4.39	5.86
<i>WCC_P</i>	10.17	1.52	3.88	5.10
<i>WCC_K</i>	257.22	161.47	212.30	157.08
<i>WCC_SVR</i>	20.02	12.13	10.13	8.52
<i>DTW</i>	19.86	12.02	10.82	33.47
<i>DTW_P</i>	7.42	5.03	3.83	13.93
<i>DTW_K</i>	7.39	4.82	3.99	15.76
<i>DTW_SVR</i>	53.80	28.74	19.76	45.59
<i>BF</i>	0.74	0.54	0.58	0.95
<i>BF_P</i>	0.28	0.36	0.40	0.31
<i>BF_K</i>	1.17	1.38	1.41	1.08
<i>BF_SVR</i>	6.54	6.24	6.36	5.96
<i>DTW_R</i>	11.84	19.61	9.93	17.74
<i>DTW_R_P</i>	4.23	3.67	1.80	95.77
<i>DTW_R_K</i>	3.49	4.30	2.27	32.04
<i>DTW_R_SVR</i>	42.10	42.31	44.45	87.87

TABLE 3.3 – Temps de calcul moyenne pour un polynôme de degré $P = 3$ en utilisant les méthodes paramétriques ($SPIRITUS_{\ell_2}$, noté S_{ℓ_2} , $SPIRITUS_{OT}$ noté S_{OT}) et non-paramétriques (CC , WCC , WCC_P , WCC_K , WCC_{SVR} , DTW , DTW_P , DTW_K , DTW_{SVR} , BF , BF_P , BF_K , BF_{SVR} , DTW_R , DTW_{RP} , DTW_{RK} , DTW_{RSVR})

	Temps de simulation moyen (s)
S_{ℓ_2}	102
S_{OT}	312
CC	0.130
WCC	1.10
WCC_P	1.11
WCC_K	2.23
WCC_{SVR}	768
DTW	0.84
DTW_P	0.85
DTW_K	0.88
DTW_{SVR}	978
BF	195
BF_P	195
BF_K	195
BF_{SVR}	891
DTW_R	50
DTW_{R_P}	50
DTW_{R_K}	50
$DTW_{R_{SVR}}$	50

Estimation conjointe des ISRFs et erreurs spectrales

À présent, nous considérons le cas où les ISRFs et les décalages spectraux sont inconnus et estimés de manière conjointe. Dans les cas considérés, les ISRFs sont initialisées en utilisant le premier atome du dictionnaire.

Estimation en fonction du pixel. Nous réalisons ici l'estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux pour les quatre bandes spectrales. Les résultats sont présentés en termes de : reconstruction du spectre mesuré, erreur d'estimation des décalages spectraux et erreur d'estimation des ISRFs, pour un décalage polynomial de degré $P = 3$, dans différents scénarios : (i) décalage faible ($\delta_{\max} < 3$ pixels), (ii) décalage modéré ($\delta_{\max} = 3$ pixels), (iii) décalage important ($\delta_{\max} = 38$ pixels). En complément, la moyenne des erreurs d'approximation des ISRFs pour le scénario médian ($\delta_{\max} = 3$ pixels) est également analysée. Les résultats sont présentés dans les figures 3.7 et 3.8 pour les méthodes paramétriques, et dans la figure 3.9 pour les méthodes non paramétriques de type BF avec ajustement polynomial ou par noyaux.

On observe que, pour la bande B1, les résultats sont globalement similaires à ceux obtenus dans le cas où les ISRFs sont supposées connues. Les méthodes paramétriques donnent de bonnes performances, sauf lorsque le décalage devient important ($\delta_{\max} = 38$ pixels), où la précision se dégrade et seule la méthode basée sur le transport optimal parvient à retrouver correctement les bons décalages. Pour les bandes B2 et B4, les résultats sont plus nuancés : dès $\delta_{\max} = 3$ pixels, la méthode basée sur la norme ℓ_2 ne parvient plus à estimer correctement les décalages, contrairement à la méthode utilisant le transport optimal, qui reste efficace. Cette différence s'explique par une variabilité plus importante du spectre de référence dans ces bandes spectrales. En revanche, lorsque le décalage maximal atteint $\delta_{\max} = 38$ pixels, aucune des méthodes testées ne parvient à estimer correctement ni les spectres corrigés ni les ISRFs. En effet, un décalage très important entraîne un déplacement de plusieurs raies spectrales, rendant le problème d'estimation nettement plus complexe. Il convient toutefois de souligner qu'un tel niveau de décalage reste peu probable une fois le satellite en orbite. Pour la bande B3, les deux méthodes paramétriques donnent des résultats comparables : elles res-

tent efficaces jusqu'à $\delta_{\max} = 3$ pixels, mais échouent toutes deux à restituer des estimations fiables lorsque le décalage atteint 38 pixels. Enfin, concernant les méthodes non paramétriques de type *BF* (avec ajustement polynomial ou par noyaux), les performances globales restent satisfaisantes. Bien que les erreurs d'estimation des décalages spectraux soient généralement plus élevées, et que les erreurs sur les ISRFs soient légèrement supérieures à celles obtenues avec les méthodes paramétriques, ces approches permettent tout de même d'obtenir de bonnes estimations des ISRFs pour les quatre bandes, tant que le décalage reste modéré ($\delta_{\max} \leq 3$ pixels). En revanche, elles échouent systématiquement à fournir des résultats exploitables lorsque le décalage atteint $\delta_{\max} = 38$ pixels, quel que soit le type d'ajustement utilisé.

Robustesse au bruit. Nous analysons à présent la robustesse des méthodes à la présence d'autres niveaux de bruit que les 55 dB précédemment fixé. Comme dans le chapitre 2, un bruit gaussien additif est appliqué aux données, avec des niveaux de rapport signal sur bruit (SNR) fixés à 20dB, 40dB et 80dB. Les résultats sont présentés dans la table 3.4. Les conclusions rejoignent celles du cas sans défauts spectraux : à 20 dB, l'estimation des ISRFs n'est pas suffisamment précise pour répondre aux exigences de la mission ; toutefois à partir de 40 dB, les ISRFs sont correctement estimées, avec une très bonne précision. Ces résultats confirment que, même en présence de bruit, la méthode d'estimation conjointe reste robuste et efficace.

TABLE 3.4 – Erreur d'estimation des décalages spectraux et moyenne des erreurs d'approximation des ISRFs pour différents niveaux de bruit (*SNR*) et différentes méthodes (*SPIRITUS* $_{\ell_2}$ noté *S* $_{\ell_2}$ et *SPIRITUS* $_{OT}$ noté *S* $_{OT}$) pour un décalage spectral de degré $P = 3$ et de 3 pixels pour les quatre bandes de l'instrument MicroCarb - en bleu : méthode permettant d'obtenir une erreur d'estimation des ISRFs sous le critère de mission.

		Décalages spectraux (log10)		Erreur d'approximation des ISRFs (%)	
Bande	/ SNR	<i>S</i> $_{\ell_2}$	<i>S</i> $_{OT}$	<i>S</i> $_{\ell_2}$	<i>S</i> $_{OT}$
bande B1	20 dB	-7.84	-6.76	5.65	6.49
	40 dB	-9.28	-9.34	0.63	0.60
	55 dB	-9.75	-9.66	0.30	0.30
	80 dB	-9.89	-10.05	0.30	0.30
bande B2	20 dB	-0.77	-5.60	75.33	14.09
	40 dB	-0.77	-7.11	78.14	2.04
	55 dB	-0.77	-8.06	77.08	0.65
	80 dB	-0.77	-8.02	77.38	0.60
bande B3	20 dB	-6.29	-4.82	8.37	10.69
	40 dB	-8.35	-6.52	0.84	1.63
	55 dB	-9.66	-7.27	0.31	0.73
	80 dB	-10.12	-7.41	0.25	0.65
bande B4	20 dB	-1.01	-6.77	25.57	8.48
	40 dB	-0.93	-8.94	13.89	0.76
	55 dB	-1.01	-9.00	13.19	0.36
	80 dB	-1.02	-9.00	17.73	0.27

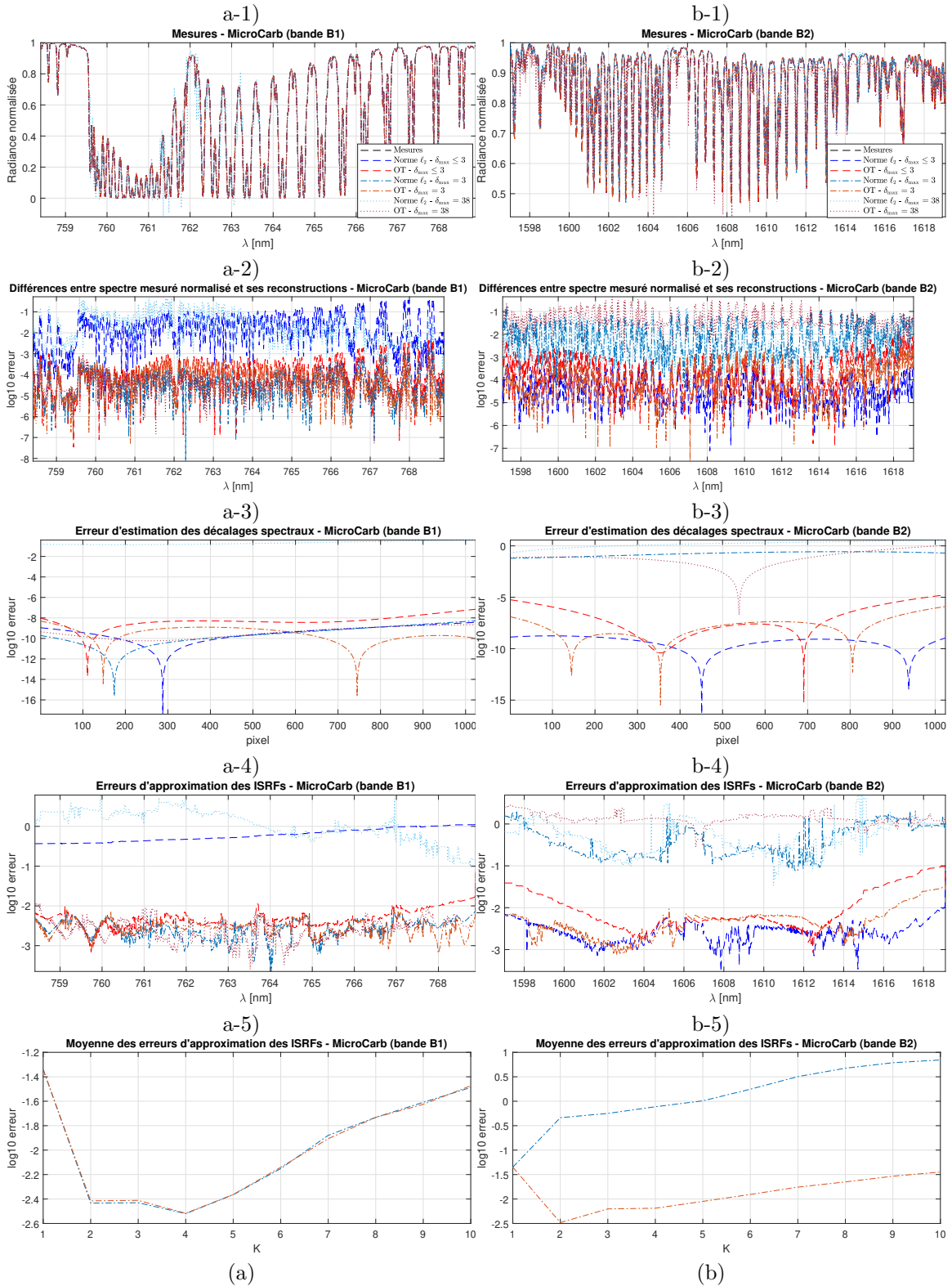


FIGURE 3.7 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), de l’erreur d’estimation des décalages spectraux (3), de l’erreur d’approximation de l’ISRF en fonction de la longueur d’onde (4) et de l’erreur moyenne d’approximation de l’ISRF en fonction du nombre d’atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (norme ℓ_2 et OT) et différents scénarios (<3 pixels, $=3$ pixels, $=38$ pixels) pour les bandes B1 (a) et B2 (b) de MicroCarb.

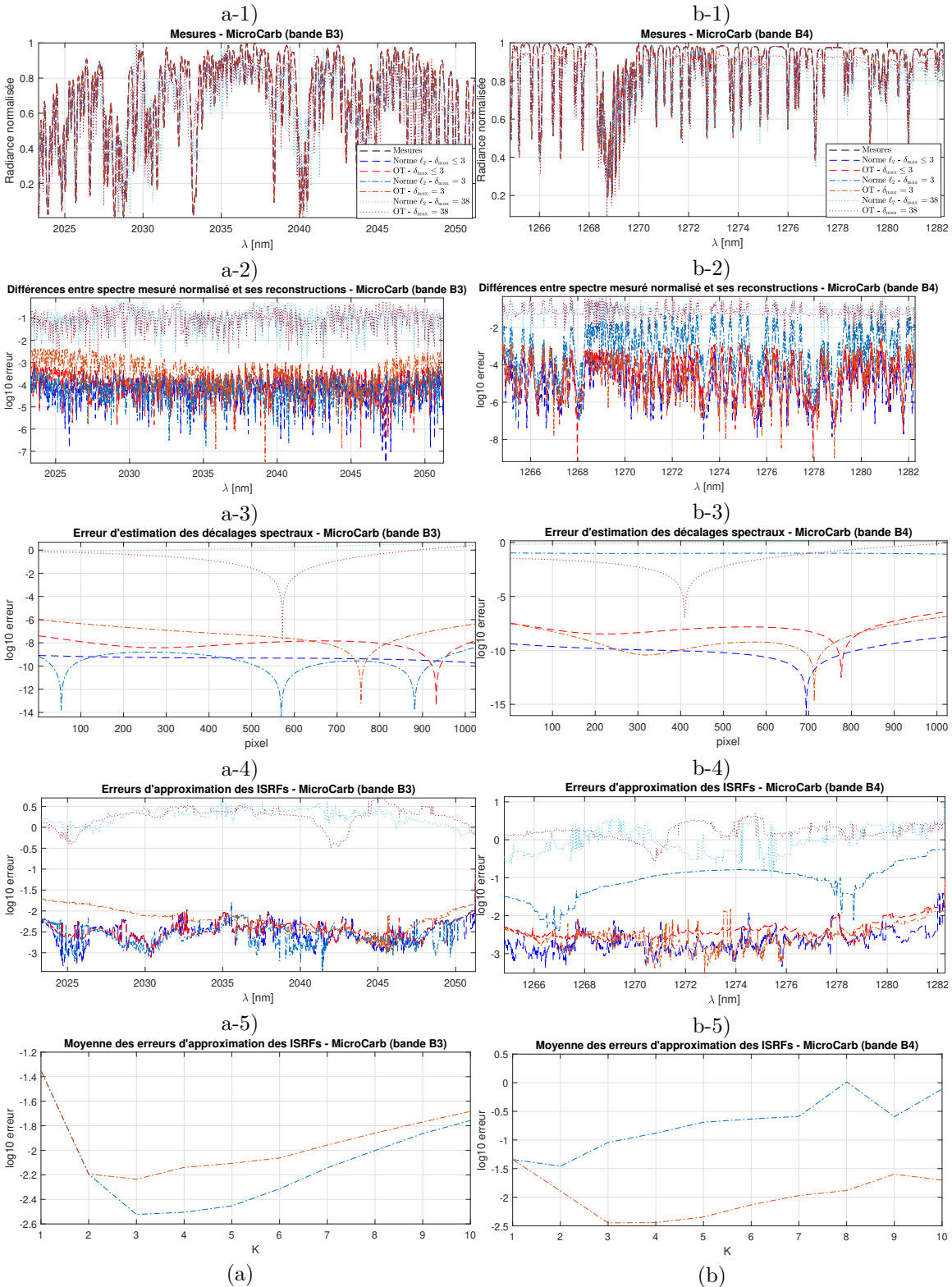


FIGURE 3.8 – Illustration du spectre mesuré (1), de la différence entre le spectre mesuré et les spectres reconstruits (2), de l'erreur d'estimation des décalages spectraux (3), de l'erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation de l'ISRF en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5), pour différentes méthodes (norme ℓ_2 et OT) et différents scénarios (<3 pixels, $=3$ pixels, $=38$ pixels) pour les bandes B3 (a) et B4 (b) de MicroCarb.

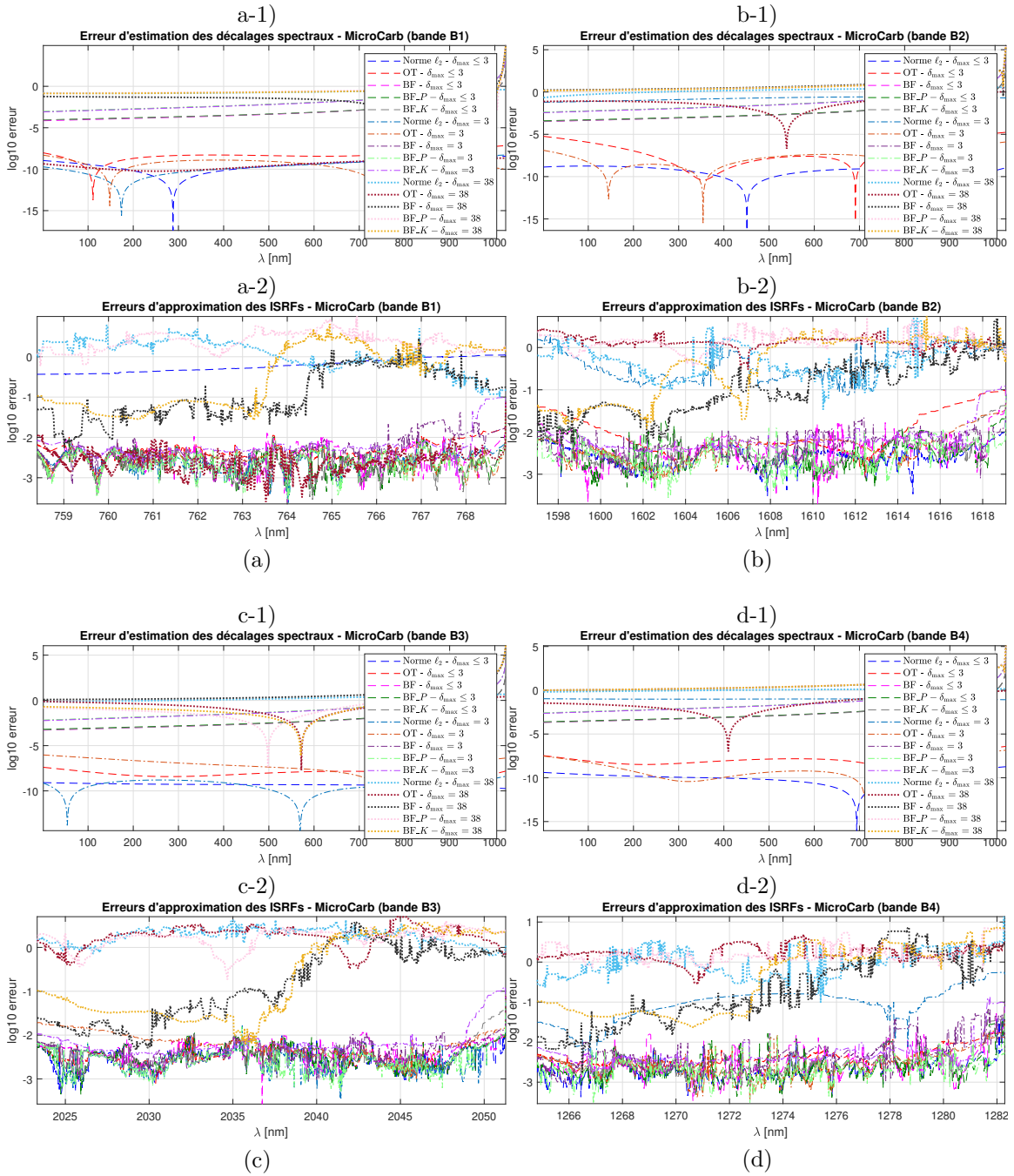


FIGURE 3.9 – Erreur d'estimation des décalages spectraux (1) et erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (2) pour différentes méthodes paramétriques (norme ℓ_2 et OT) et non-paramétrique (BF , BF_P et BF_K) et dans différents scénarios (<3 pixels, $=3$ pixels, $=38$ pixels) pour les bandes B1 (a), B2 (b), B3 (c) et B4 (d) de MicroCarb.

Robustesse à une méconnaissance a priori du degré du polynôme modélisant le décalage spectral. En pratique, le degré du polynôme décrivant les décalages spectraux n'est pas nécessairement connu à l'avance et plusieurs tests sont effectués. Nous proposons donc ici de simuler un décalage polynomial de degré $P = 3$ et d'évaluer les performances des deux méthodes paramétriques pour différents degrés utilisés pour l'estimation $P_e \in \{0, \dots, 5\}$, avec un décalage maximal fixé à 3 pixels. Les résultats sont présentés dans la figure 3.10. Comme attendu, les meilleures performances sont obtenues lorsque le degré estimé correspond au degré simulé ($P_e = 3$). Toutefois, on remarque qu'à partir d'un degré estimé $P_e = 2$, les ISRFs sont déjà estimées avec une précision assez satisfaisante. Par ailleurs, lorsque le degré estimé augmente au-delà du degré réel, l'erreur d'estimation n'augmente que très légèrement : un sur-ajustement reste donc peu pénalisant dans ce cas. Les performances restent globalement stables, et les résultats sont similaires pour les deux méthodes paramétriques considérées.

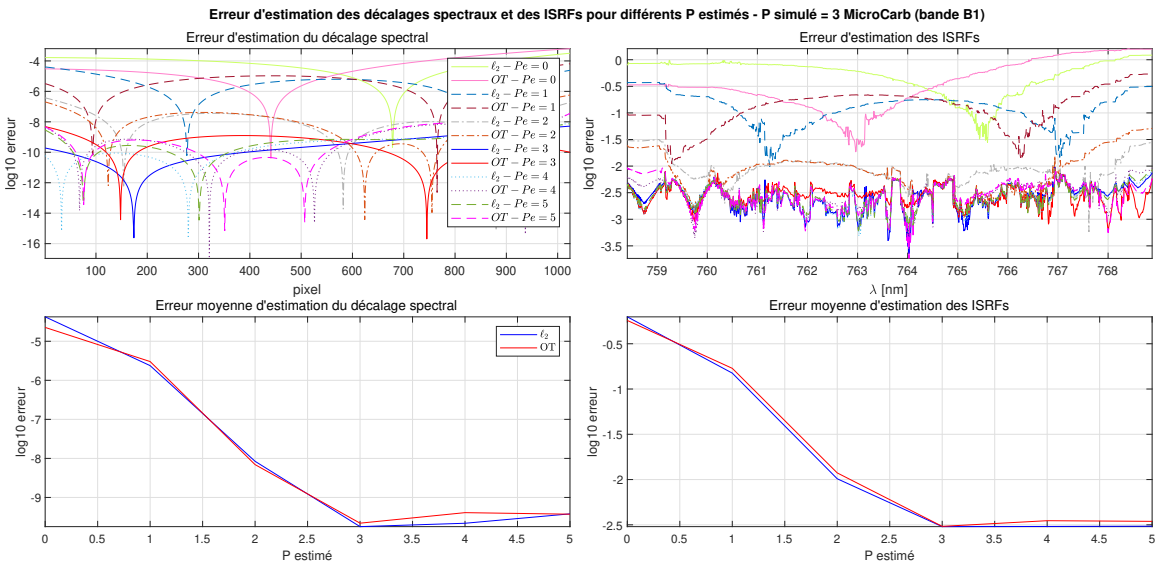


FIGURE 3.10 – Erreurs d'estimation des décalages spectraux et des ISRFs pour différents degrés estimés P_e , avec des décalages spectraux simulés selon un polynôme de degré $P = 3$ et un décalage maximal de 3 pixels, pour la bande B1 de MicroCarb.

Estimation pour des décalages polynomiaux de degrés différents. À présent, nous supposons que le degré du polynôme modélisant les décalages spectraux est connu, c'est-à-dire qu'il a été estimé au préalable, par exemple via une procédure de sélection itérative comme décrite précédemment. Nous analysons les performances des méthodes paramétriques dans le cas où le degré du polynôme utilisé pour simuler les décalages varie, avec $P \in \{0, \dots, 5\}$, et un décalage maximal fixé à 3 pixels. On observe que, pour des degrés $P \leq 4$, les deux méthodes paramétriques permettent d'estimer les ISRFs avec une très bonne précision. Toutefois, lorsque le degré atteint $P = 5$, la méthode basée sur le transport optimal montre une légère dégradation des performances et l'estimation des ISRFs devient moins précise. À l'inverse, la méthode fondée sur la norme ℓ_2 se révèle plus stable dans ce cas, avec des erreurs d'estimation des ISRFs quasi identiques pour l'ensemble des degrés testés, y compris pour $P = 5$, ce qui constitue un résultat particulièrement intéressant. Une autre explication pourrait être liée aux coefficients des polynômes qui pourraient aussi impacter la solution.

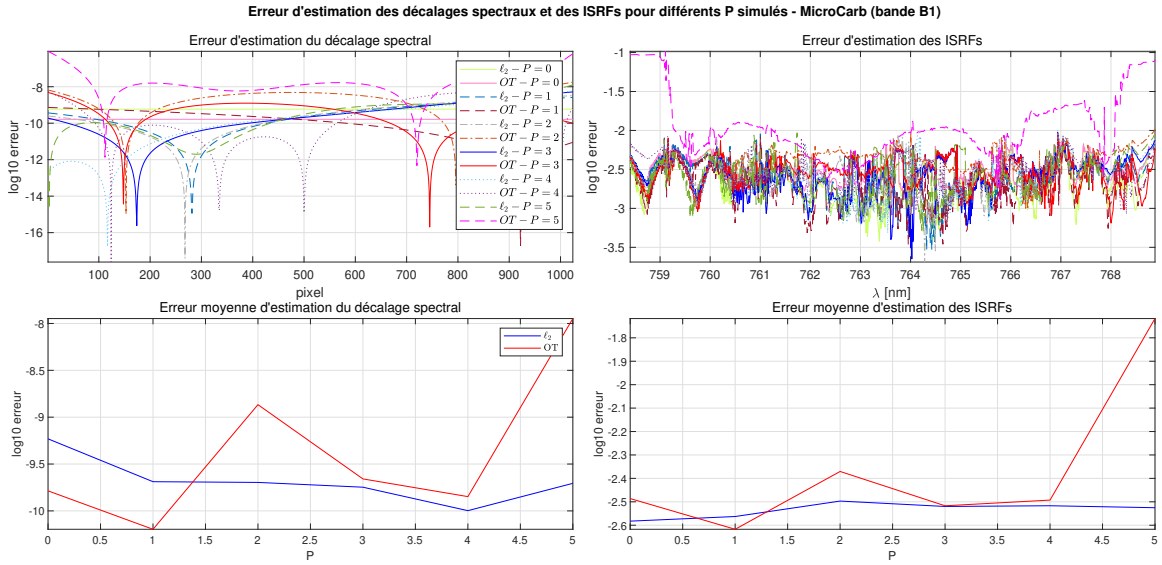


FIGURE 3.11 – Erreurs d’estimation des décalages spectraux et des ISRFs pour des décalages spectraux simulés à l’aide de polynômes de degrés $P = 0, \dots, 5$, avec un décalage maximal de 3 pixels, pour la bande B1 de MicroCarb.

Impact de l’initialisation. Il est important de souligner le rôle crucial de l’initialisation des ISRFs dans le cadre de l’estimation conjointe. En effet, de très faibles variations des décalages spectraux peuvent induire des erreurs significatives sur l’estimation des ISRFs, et la procédure d’optimisation utilisée peut facilement converger vers des minima locaux. Dans les algorithmes précédemment utilisés, les ISRFs sont initialisées à l’aide du premier atome du dictionnaire, correspondant à une ISRF moyenne sur la bande considérée. L’estimation conjointe s’effectue alors de manière alternée, en commençant par l’estimation des décalages spectraux. Dans cette section, nous testons une autre stratégie : les ISRFs ne sont pas initialisées explicitement, mais estimées à partir de l’hypothèse qu’il n’y a pas de défauts spectraux, en utilisant un dictionnaire de taille $K = 4$. Les résultats obtenus avec ces deux approches d’initialisation sont présentés dans la table 3.5. On observe que le choix de l’initialisation a un impact majeur sur les performances : avec la seconde approche, les ISRFs ne sont pas correctement estimées. Ces résultats montrent qu’une initialisation adéquate des ISRFs ou des décalages spectraux est essentielle pour garantir la convergence de l’estimation conjointe. Dans le cas étudié, une simple initialisation avec un seul atome (correspondant à une ISRF moyenne) suffit à obtenir de bonnes performances.

TABLE 3.5 – Erreur d’estimation des décalages spectraux et erreur moyenne d’approximation des ISRFs pour deux stratégies d’initialisation différentes : (i) en utilisant le premier atome du dictionnaire (ISRF moyenne), (ii) en supposant l’absence de défauts spectraux, pour la bande B1 de l’instrument MicroCarb - en bleu : méthode permettant d’obtenir une erreur d’estimation des ISRFs sous le critère de mission.

	Décalages spectraux (\log_{10})		Erreur d’approximation des ISRFs (%)	
	S_{l_2}	S_{OT}	S_{l_2}	S_{OT}
1 atome	-7.48	0.29	-9.29	0.31
sans défauts	-4.44	53.98	-4.00	79.22

3.1.6 Conclusion sur l'estimation des ISRFs et décalages spectraux

Dans cette partie, nous avons analysé l'impact des erreurs liées aux décalages spectraux sur l'estimation des ISRFs, ainsi que la performance des méthodes d'estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux. Les décalages spectraux ont été modélisés à l'aide de polynômes, et différentes approches ont été étudiées : des méthodes paramétriques, reposant soit sur la norme ℓ_2 , soit sur le transport optimal (OT) pour définir une distance entre spectres ; et différentes méthodes non-paramétriques dont la plus performante est celle de type brute force (*BF*), qui toutefois présente un coût mémoire significatif.

En conclusion, l'estimation des décalages spectraux, même dans le cas où les ISRFs sont supposées connues, est bien plus complexe qu'un simple recalage entre deux spectres (spectre mesuré et spectre issu d'un modèle). Le spectre mesuré résulte en réalité de la convolution des ISRFs avec le spectre de référence, mais décalé spectralement, souvent à des positions différentes de celles du spectre de référence. Il est donc essentiel de tenir compte de ce mécanisme dans les méthodes d'estimation. Il est également important de souligner qu'un décalage spectral, même extrêmement faible, peut avoir un impact significatif sur la forme estimée des ISRFs. Cela justifie pleinement l'emploi de méthodes spécifiques d'estimation et de modélisation fine des décalages spectraux. Dans le cas de l'estimation conjointe, les méthodes paramétriques proposées, utilisant la norme ℓ_2 ou la distance issue du transport optimal, ont démontré leur efficacité sur une gamme de degrés polynomiaux et leur robustesse au bruit, sous réserve d'une initialisation adéquate. À ce titre, une initialisation simple à partir du premier atome du dictionnaire (correspondant à une ISRF moyenne) s'est révélée suffisante dans les cas testés.

Enfin, il convient de noter que d'autres types d'erreurs spectrales peuvent également affecter la forme des ISRFs, notamment les effets de smile. Ceux-ci se traduisent par une variation de la forme de l'ISRF au sein d'un même canal spectral, ce qui modifie son barycentre et, par conséquent, la longueur d'onde associée. Ces erreurs peuvent ainsi induire non seulement des décalages spectraux, mais également des distorsions dans l'axe spatial, en particulier lors de l'étape de binning (moyennage spatial) qui combine les réponses de plusieurs champs de vue pour améliorer le rapport signal sur bruit (SNR). Ce phénomène peut alors altérer la forme moyenne des ISRFs obtenues après binning. Les méthodes de recalage spectral étudiées ici pourraient être adaptées à ce nouveau contexte, mais cela est laissé à de futurs travaux.

3.2 Calibration radiométrique

À présent, nous nous intéressons à la calibration radiométrique des instruments. Dans cette seconde partie, nous supposons que les erreurs de décalage spectral ont été corrigées en amont. Autrement dit, le décalage modélisé par la fonction g dans l'équation (3.1) est supposé être l'identité. L'objectif devient alors de réaliser une calibration radiométrique précise, tout en continuant à estimer conjointement les ISRFs. Le modèle d'observation présenté en (3.1) se simplifie donc, et s'écrit désormais sous la forme :

$$y(\lambda_l) = f_l (r * I_l) (\lambda_l) = f_l \left(\int_{\mathbb{R}} r(\lambda_l - u) I_l(u), du \right), \quad l = 1, \dots, N_\lambda. \quad (3.15)$$

Ce modèle réduit permet de se concentrer exclusivement sur les défauts radiométriques induits par le détecteur de l'instrument, que nous chercherons à modéliser et à estimer. Contrairement aux décalages spectraux, ces défauts étant propres à l'instrument et donc invariants d'un spectre à l'autre, une estimation individuelle par spectre n'est pas requise. En revanche, une fonction non linéaire f_l par pixel doit être estimée, soit un total de N_λ fonctions. Les erreurs radiométriques liées à l'optique de l'instrument sont généralement estimées à partir de mesures de lampes à différents niveaux de luminance, réalisées lors de campagnes de calibration en chambre à vide thermique, simulant les conditions en orbite [91]. Une fois en vol, ces erreurs doivent être surveillées régulièrement, à l'aide de mesures en obscurité, d'observations solaires ou encore de lampes embarquées. Dans l'état

de l'art, l'estimation des ISRFs et des erreurs radiométriques sont menées séparément avant le lancement, via des séquences de mesures dédiées [92]. Nous proposons dans cette partie d'effectuer l'estimation conjointe des ISRFs et des erreurs radiométriques non-linéaires. Dans un premier temps, nous présenterons les défauts radiométriques ainsi que la formulation du problème d'estimation conjointe des ISRFs et des erreurs radiométriques. Nous décrirons ensuite la méthode de résolution proposée, avant de discuter les résultats obtenus et les performances de la méthode d'estimation que nous proposons.

3.2.1 Estimation des ISRFs et des défauts radiométriques

Défauts radiométriques

Les erreurs radiométriques considérées dans ce travail sont modélisées de la manière suivante :

Gains linéaires. Un modèle de gain linéaire peut comprendre deux composantes : un gain absolu et un gain relatif interpixel. Le gain absolu, noté $G_{\text{abs},l}$, permet la conversion des nombres numériques (en LSB) mesurés au niveau du pixel l en unités physiques de radiance ($\text{W}/\text{m}^2/\text{sr}/\mu\text{m}$). Ce gain prend en compte la transmission de l'instrument et dépend de la longueur d'onde. Le gain relatif interpixel, noté $G_{\text{lin},l}$, est indépendant de la luminance et s'applique uniquement au signal utile, à l'exclusion du courant d'obscurité (N_{dark}). Contrairement au gain absolu, il n'est pas fonction de la longueur d'onde, mais on dispose d'une valeur distincte pour chaque pixel.

Courant d'obscurité. Le courant d'obscurité correspond au signal mesuré par le spectromètre en l'absence de lumière à l'entrée de l'instrument. Il s'agit d'une erreur additive, qui vient s'ajouter au spectre après l'application des deux gains linéaires (absolu et relatif). Ce signal parasite est spécifique à chaque pixel, et dépend du temps d'intégration t_i . Il est par exemple modélisé avec une relation affine : $N_{\text{dark},l} = DS0_l + DS1_l t_i$ où $DS0_l$ est l'offset du courant d'obscurité au pixel l , et $DS1_l$ est le coefficient de dérive avec le temps d'intégration.

Offset. Biais du détecteur (identique sur tous les pixels).

Gain non-linéaire. Le gain non linéaire modélise les non-linéarités de réponse du détecteur. Il est défini, pour chaque pixel, comme une fonction de la luminance incidente, et s'applique dans notre cas sur l'ensemble du signal détecté, après l'ajout du courant d'obscurité et l'application des gains linéaires. On note cette fonction de réponse $G_{\text{nonlin},l}(\cdot)$ qui doit être estimée pour chaque pixel. Dans cette thèse, nous faisons l'hypothèse que cette non-linéarité peut être modélisée avec précision de manière paramétrique. L'utilisation d'un polynôme peut être justifiée à la fois théoriquement, grâce au théorème de Stone-Weierstrass [72], et pratiquement, car des polynômes de faible degré permettent une approximation efficace de la réponse réelle. La figure 3.12 illustre plusieurs exemples typiques de courbes de réponse non-linéaires observées pour trois pixels distincts au sein d'une même fenêtre glissante, ainsi que leurs approximations par des polynômes de degré 2. Ces approximations restituent correctement la forme des non-linéarités présentes. On observe également que le modèle de gains considéré comporte des variations rapides d'un pixel à l'autre, ce qui montre qu'une estimation commune pour l'ensemble des pixels d'une fenêtre glissante n'est pas suffisante. Il est donc nécessaire d'estimer les non-linéarités pixel par pixel afin de capturer précisément ces variations. Dans certains cas, la courbe du gain non-linéaire peut présenter des points d'inflexion liés à la coexistence de plusieurs régimes. Deux régimes sont souvent pris en compte : un bas flux et un haut flux. La non-linéarité impacte souvent plus fortement les bas flux et les hauts flux, les détecteurs ayant un régime plus linéaire dans la zone intermédiaire. Cette transition dépend de la technologie du détecteur, et varie d'un instrument à l'autre. Un modèle polynomial par morceaux peut alors être envisagé pour capturer ces changements de comportement. Enfin, le régime de bas flux pose des difficultés particulières de modélisation : le rapport signal sur bruit y est faible, ce qui accroît l'incertitude sur la non-linéarité. Or, cette zone est critique dans le cas où les raies d'absorption atmosphériques sont très creuses, voire saturées. Une modélisation rigoureuse des erreurs radiométriques dans ce régime est donc essentielle.

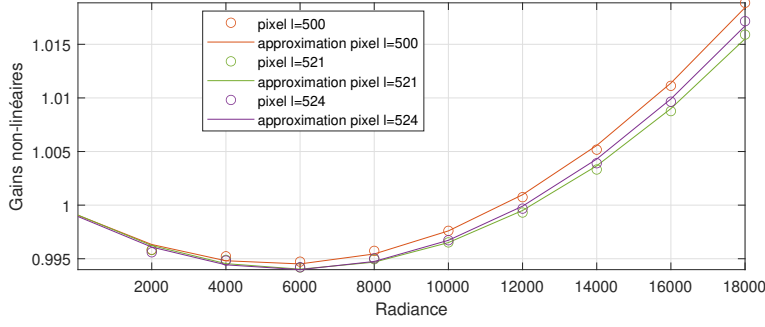


FIGURE 3.12 – Exemple de gains non-linéaires et estimation polynomiale.

On définit la réponse radiométrique d'un pixel comme la fonction décrivant l'ensemble des erreurs radiométriques affectant ce pixel ainsi que la transmission du signal. En l'absence de gains non linéaires, cette réponse est simplement affine. En revanche, lorsque des gains non linéaires sont présents, elle devient non linéaire. L'objectif ici est d'estimer la réponse radiométrique pour chaque pixel, afin de pouvoir ensuite estimer les ISRFs avec précision.

Formulation du problème

Dans cette partie, on cherche à estimer de manière conjointe les ISRFs ainsi que les réponses radiométriques à partir des mesures, en supposant qu'il n'y a pas de décalages spectraux, c'est-à-dire que le pixel l est directement associé à la longueur d'onde λ_l . Toutefois, contrairement à l'estimation des ISRFs, il n'est pas possible d'estimer les erreurs radiométriques en utilisant la fenêtre glissante \mathcal{W}_l , car celles-ci varient trop fortement d'un pixel à l'autre. Nous enlevons donc pour l'instant l'hypothèse sur les fenêtres glissantes et introduisons une nouvelle hypothèse : nous disposons d'un ensemble suffisamment grand de Q spectres de référence et mesurés associés, tous affectés par les mêmes erreurs radiométriques et la même ISRF. Ces spectres mesurés peuvent notamment être obtenus lors de phases de calibration au sol et en vol, à partir de scènes spécifiques (comme le Soleil, la Lune, etc.) pour lesquelles le spectre théorique est bien connu ou de scènes plates en utilisant des lampes de radiances différentes ou encore des scènes d'obscurité.

Comme précédemment, on représente l'ISRF du pixel l sous forme vectorielle : $\mathbf{I}_l \in \mathbb{R}^{N+1}$. On définit la matrice associée au q -ième spectre de référence $\mathbf{R}^{(q)} \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times (N+1)}$ où chaque ligne l correspond au spectre interpolé aux longueurs d'onde λ_l . Puis, en supposant un modèle polynomial pour les gains non-linéaires, on en déduit que les réponses radiométriques sont également polynomiales, mais d'un degré supérieur prenant en compte les gains linéaires et le courant d'obscurité. Le modèle d'observation est le suivant :

$$y_{l,q} = f_l(s_{l,q}; d_p^l) = \sum_{p=0}^P d_p^l (s_{l,q})^p = \sum_{p=0}^P d_p^l \left(\mathbf{R}^{(q)}(l, :) \mathbf{I}_l \right)^p, \quad q = 1, \dots, Q, \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (3.16)$$

où $y_{l,q}$ et $s_{l,q}$ désignent respectivement la l -ième mesure du q -ième spectre mesuré respectivement avec ou en l'absence d'erreurs radiométriques, f_l est un polynôme de degré P représentant la réponse radiométrique du pixel l , et $\mathbf{R}^{(q)}(l, :)$ représente la l -ième ligne de la matrice $\mathbf{R}^{(q)}$.

En utilisant la notation suivante :

$$\mathbf{M}_l(\mathbf{I}_l) \triangleq \begin{bmatrix} \left(\mathbf{R}^{(1)}(l, :) \mathbf{I}_l \right)^0 & \cdots & \left(\mathbf{R}^{(1)}(l, :) \mathbf{I}_l \right)^P \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\mathbf{R}^{(Q)}(l, :) \mathbf{I}_l \right)^0 & \cdots & \left(\mathbf{R}^{(Q)}(l, :) \mathbf{I}_l \right)^P \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(Q) \times (P+1)},$$

il est possible d'écrire le problème d'optimisation associé à 3.16 sous forme vectorielle de la façon suivante :

$$\arg \min_{\mathbf{I}, \mathbf{d}} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\mathbf{y}_l - \mathbf{M}_l(\mathbf{I}_l) \mathbf{d}_l\|_2^2, \quad (3.17)$$

où $\mathbf{y}_l = [y_{l,1}, \dots, y_{l,Q}]^T \in \mathbb{R}^Q$ est le vecteur associé à la l -ième mesure pour tous les spectres théoriques, $\mathbf{d}_l = [d_0^l \dots d_P^l]^T \in \mathbb{R}^{P+1}$ sont les coefficients de la réponse radiométrique associée au pixel l , $\mathbf{I} = [\mathbf{I}_1, \dots, \mathbf{I}_{N_\lambda}] \in \mathbb{R}^{(N+1) \times N_\lambda}$ la matrice contenant toutes les ISRFS et $\mathbf{d} = [\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_{N_\lambda}] \in \mathbb{R}^{(P+1) \times N_\lambda}$ la matrice des coefficients polynomiaux \mathbf{d}_l . Remarquons que si $\mathbf{d}_l = [0, 1, 0, \dots, 0]^T$, nous retrouvons le modèle inverse linéaire traité au chapitre 2, ce qui peut être acceptable pour certaines longueurs d'onde.

Si nous disposons d'un nombre suffisant de spectres de référence, présentant une variabilité suffisante, il serait envisageable d'estimer conjointement les coefficients \mathbf{d}_l ainsi que les ISRFS \mathbf{I}_l à partir des mesures associées aux Q spectres de référence. En remarquant que le problème est quadratique par rapport au vecteur \mathbf{d}_l , mais non linéaire par rapport aux ISRFS \mathbf{I}_l , il devient possible d'exprimer \mathbf{d}_l comme une fonction de \mathbf{I}_l , de la manière suivante :

$$\mathbf{d}_l(\mathbf{I}_l) = (\mathbf{M}_l(\mathbf{I}_l)^* \mathbf{M}_l(\mathbf{I}_l))^{-1} \mathbf{M}_l(\mathbf{I}_l)^* \mathbf{y}_l. \quad (3.18)$$

Enfin, en remplaçant cette expression dans l'équation 3.17, et en considérant la représentation parcimonieuse des ISRFS dans le dictionnaire Φ , le problème final s'écrit :

$$\arg \min_{\mathbf{I}, \mathbf{d}} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\mathbf{y}_l - \mathbf{M}_l(\Phi \alpha_l) (\mathbf{M}_l(\Phi \alpha_l)^* \mathbf{M}_l(\Phi \alpha_l))^{-1} \mathbf{M}_l(\Phi \alpha_l)^* \mathbf{y}_l\|_2^2 + \mu \|\alpha_l\|_0. \quad (3.19)$$

Il serait alors possible de résoudre (3.19) en utilisant, par exemple, des méthodes de type descente de gradient proximal. Néanmoins, une des limites dans notre contexte d'estimation conjointe des ISRFS et des réponses radiométriques réside dans le fait que nous ne disposons pas d'un nombre suffisant de spectres de référence présentant une variabilité suffisante pour permettre une telle inversion en pratique, en particulier pour l'estimation des ISRFS. Nous proposons donc d'utiliser les Q spectres de référence pour estimer les coefficients \mathbf{d}_l pour chaque pixel l , ce qui revient à résoudre (3.17) uniquement selon \mathbf{d}_l . Les ISRFS, quant à elles, seront estimées à l'aide des Q spectres de référence ainsi que des fenêtres glissantes \mathcal{W}_l . Afin de formaliser cette démarche, nous introduisons les notations suivantes pour chaque fenêtre glissante \mathcal{W}_l ¹ :

- $\mathbf{S}_l \triangleq [s_{l',q}]_{l-\frac{L}{2} \leq l' \leq l+\frac{L}{2}, q=1, \dots, Q} \in \mathbb{R}^{(L+1) \times Q}$ la matrice des mesures en absence d'erreurs radiométriques,
- $\mathbf{Y}_l \triangleq [y_{l',q}]_{l-\frac{L}{2} \leq l' \leq l+\frac{L}{2}, q=1, \dots, Q} \in \mathbb{R}^{(L+1) \times Q}$ la matrice des mesures en présence d'erreurs radiométriques,
- $\mathbf{R}_l^{(q)} \triangleq \left[\mathbf{R}^{(q)}(l - \frac{L}{2}, :) \dots \mathbf{R}^{(q)}(l + \frac{L}{2}, :) \right] \in \mathbb{R}^{(L+1) \times (N+1)}$, $q = 1, \dots, Q$ la matrice des spectres de référence.

La convolution entre le q -ième spectre théorique et l'ISRFS \mathbf{I}_l peut alors s'exprimer pour tout spectre de référence q à l'aide de la décomposition parcimonieuse des ISRFS dans un dictionnaire introduit dans le chapitre 2, ce qui conduit à :

$$\mathbf{S}_l(:, q) \approx \mathbf{R}_l^{(q)} \mathbf{I}_l^K = \Psi_l^{(q)} \alpha_l, \quad (3.20)$$

où $\mathbf{S}_l(:, q)$ est la q -ième colonne de la matrice \mathbf{S}_l . On remarquera que de nouveaux dictionnaires sont obtenus pour les spectres de référence, soit $\Psi_l^{(q)} \triangleq \mathbf{R}_l^{(q)} \Phi \in \mathbb{R}^{(L+1) \times N_D}$. Notons à présent

1. Notons par ailleurs que cette approche peut s'avérer pertinente dans le cadre de certaines missions où les erreurs radiométriques varient peu à l'intérieur d'une fenêtre glissante. Ce principe sera d'ailleurs approfondi dans le chapitre 4.

$\Psi_l \in \mathbb{R}^{Q(L+1) \times N_D}$ la matrice contenant l'ensemble des dictionnaires $\Psi_l^{(q)}$. L'estimation des ISRFs à partir des spectres sans erreurs radiométriques, concaténés dans \mathbf{S}_l , peut s'effectuer par résolution du problème d'optimisation suivant :

$$\arg \min_{\alpha_l} L(\alpha_l, \mu) = \arg \min_{\alpha_l} \|\text{vec}(\mathbf{S}_l) - \Psi_l \alpha_l\|_2^2 + \mu \|\alpha_l\|_0. \quad (3.21)$$

où l'opérateur $\text{vec}(\cdot)$ est introduit pour vectoriser les matrices, c'est-à-dire transformer une matrice en un vecteur colonne en empilant ses colonnes les unes à la suite des autres et où $\|\alpha_l\|_0$ assure que la solution est parcimonieuse. Les mesures corrigées des erreurs radiométriques $s_{l,q}$ permettant de construire $\text{vec}(\mathbf{S}_l)$ est obtenu à partir des mesures $y_{l,q}$ en minimisant les problèmes suivant :

$$\arg \min_{s_{l,q}} \left(y_{l,q} - \sum_{p=0}^P d_p^l (s_{l,q})^p \right)^2. \quad (3.22)$$

3.2.2 Estimation alternée des ISRFs et des erreurs radiométriques

Le problème d'estimation considéré est non convexe et NP-difficile, notamment en raison de la norme ℓ_0 appliquée aux coefficients de parcimonie α_l , comme cela a été détaillé dans le chapitre 2. L'introduction des erreurs radiométriques dans le modèle complexifie encore davantage le problème. Dans ce contexte, à l'instar de l'approche adoptée pour l'estimation conjointe des ISRFs et des erreurs spectrales, nous proposons une méthode alternée, qui procède par itérations successives entre trois étapes principales : l'estimation des erreurs radiométriques, la correction des observations bruitées, et la ré-estimation des vecteurs parcimonieux représentant les ISRFs. Deux stratégies d'initialisation peuvent être envisagées : (i) supposer l'absence d'erreurs radiométriques : on initialise alors les spectres corrigés comme égaux aux observations mesurées, puis on estime directement les ISRFs ou (ii) utiliser une initialisation simple des ISRFs à l'aide d'un seul atome (typiquement le premier atome du dictionnaire Φ , représentant une ISRF moyenne), et commencer par estimer les réponses radiométriques. Une fois cette initialisation effectuée, l'algorithme procède de manière itérative jusqu'à convergence. Plus précisément, chaque itération comprend les étapes suivantes :

1. Estimation des erreurs radiométriques à partir des ISRFs estimées en résolvant un problème des moindres carrés pour chacune des longueurs d'onde appartenant à la fenêtre d'analyse \mathcal{W}_l . En pratique, dans le cas des erreurs polynomiales, le vecteur \mathbf{d}_l est estimé à l'aide de la fonction *polyfit* de MATLAB.
2. Correction des erreurs radiométriques en déterminant les racines des équations $\mathbf{Y}_l(l', :) - f_{l'}[\mathbf{S}_l(l', :)]$. Cette opération a pour objectif de corriger les erreurs radiométriques présentes dans les observations \mathbf{Y}_l , en estimant les valeurs corrigées des spectres sans défauts. En pratique, cette recherche de racines est effectuée pour un modèle polynomial à l'aide de la fonction *roots* de MATLAB.
3. Ré-estimation du vecteur parcimonieux α_l à partir des mesures corrigées des erreurs radiométriques. Cette estimation est effectuée à l'aide de l'algorithme OMP qui a montré de bons résultats dans le chapitre 2.

L'arrêt de l'algorithme peut être déclenché selon deux critères : soit lorsqu'un nombre maximal d'itérations est atteint, soit lorsque le résidu devient inférieur à un seuil prédéfini. Cette méthode est décrite dans l'algorithme 8, présenté dans l'annexe A.

Cette méthode constitue une nouvelle extension du cadre SPIRIT, développé au chapitre 2, en intégrant cette fois explicitement des non-linéarités dans les mesures. Elle repose sur une représentation parcimonieuse des réponses spectrales dans un dictionnaire fixe, tout en permettant de corriger les erreurs radiométriques. La méthode complète est ainsi baptisée SPIRITUAL, pour "SParse representation of Instrument spectral Responses usIng a dicTionary assUming polynomiAL radiometric errors". Cette approche sera étudiée plus en détail d'un point de vue théorique au chapitre 4, où elle

sera étendue à d'autres formes de non-linéarités paramétriques, dans le cadre plus général de la résolution de problèmes inverses non linéaires sous contrainte de parcimonie. Dans ce chapitre 4, il n'y a pas de notion de pixel. On suppose, comme ici, plusieurs observations pour chaque non-linéarité (ici, pour Q spectres).

3.2.3 Expérimentations

Cette section présente les résultats obtenus pour l'estimation des ISRFs en présence d'erreurs radiométriques. Les performances sont de nouveau évaluées à la fois en termes de qualité de l'estimation des ISRFs, d'erreur entre les spectres mesurés et les spectres reconstruits et d'estimation des réponses radiométriques. L'erreur d'estimation des réponses radiométriques est définie par :

$$\frac{1}{N_\lambda Q} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \sum_{q=1}^Q \|\mathbf{Y}_l(:, q) - f(\mathbf{S}_l(:, q); \hat{\mathbf{d}}_l)\|_2^2.$$

De même que dans le cas des erreurs spectrales, une première étude est menée dans un cas idéalisé où les ISRFs sont supposées connues, afin d'évaluer la capacité de la méthode à estimer les réponses radiométriques afin d'assurer une bonne estimation par la suite des ISRFs. Lors de l'estimation conjointe, l'algorithme OMP est utilisé et le dictionnaire Φ est de nouveau construit avec la SVD et le niveau de bruit est fixé à SNR = 55 dB. Les spectres de référence utilisés proviennent à la fois de scènes atmosphériques supposées connues, telles que celles observées lors de la calibration en vol (par exemple via le Soleil ou la Lune), mais également de scènes dites plates, obtenues à l'aide d'une source lumineuse artificielle (lampe) dont la radiance est relativement constante sur l'ensemble du spectre. Ces scènes plates permettent de disposer de spectres de référence présentant peu de variations spectrales, facilitant ainsi l'estimation des réponses radiométriques.

Impact des erreurs radiométriques sur l'estimation des ISRFs

De la même manière que pour la partie consacrée aux erreurs spectrales, nous simulons ici des erreurs radiométriques afin d'évaluer leur impact sur l'estimation des ISRFs. Pour cela, l'algorithme OMP est utilisé sans prise en compte explicite des erreurs radiométriques, c'est-à-dire en supposant que les mesures sont exemptes de défauts. Les résultats obtenus sont présentés dans la figure 3.13. On observe que l'on ne parvient pas à estimer les ISRFs avec la précision requise (inférieure au critère de mission de 1%) lorsque les erreurs radiométriques ne sont pas incorporées dans le problème d'estimation. On peut cependant noter que la présence d'erreurs radiométriques impacte moins l'estimation d'ISRFs que les erreurs spectrales (voir Section 3.1.5).

Estimation de la réponse radiométrique

Dans cette section, nous supposons que les ISRFs sont connues et nous nous intéressons à l'estimation des réponses radiométriques pour chaque pixel. La figure 3.14 montre un exemple de réponse radiométrique obtenue pour un spectre de la bande B1 de MicroCarb, ainsi que les ajustements polynomiaux réalisés pour différents degrés $P_e \in \{1, \dots, 4\}$. Les erreurs d'estimation de la réponse radiométrique et des ISRFs sont également présentées. Un ajustement polynomial à partir du degré $P_e = 3$ permet d'obtenir une estimation satisfaisante de la réponse radiométrique. Il est important de souligner que le gain non-linéaire avait initialement été approché par un polynôme de degré 2. L'estimation d'un polynôme de degré 3 permet ici de prendre en compte à la fois le gain linéaire et le courant d'obscurité, en plus des gains non-linéaires. Ainsi, le degré $P_e = 3$ sera retenu pour la suite des analyses.

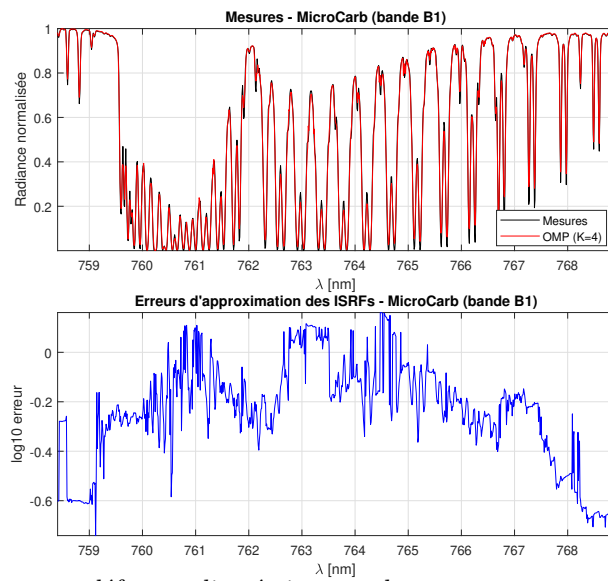


FIGURE 3.13 – Spectre sans défaut radiométrique et du spectre reconstruit utilisant l'algorithme OMP (haut), et erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde pour un nombre d'atomes sélectionnés à $K = 4$ (bas) pour la bande B1 de MicroCarb.

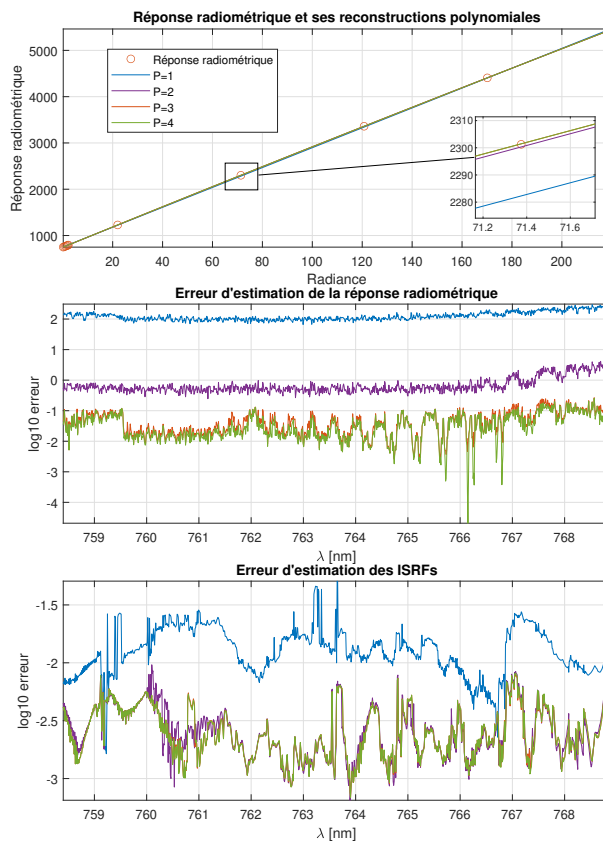


FIGURE 3.14 – Estimation de la réponse radiométrique avec des polynômes de degré $P_e \in \{1, \dots, 4\}$, erreur d'estimation et erreur d'estimation des ISRFs pour un pixel de la bande B1 de MicroCarb.

Estimation conjointe des ISRFs et des réponses radiométriques

Cette section s'intéresse à l'estimation conjointe des ISRFs et des réponses radiométriques, en suivant la méthodologie décrite précédemment. Pour l'ensemble des résultats, le nombre de spectres de référence utilisé est $Q = 13$. Une étude plus précise sur le choix de ces spectres sera présentée ultérieurement. Nous réalisons ici l'estimation pour les quatre bandes spectrales. Les figures 3.15 et 3.16 présentent les résultats obtenus en termes de : reconstruction du spectre mesuré, erreur d'estimation des réponses radiométriques, erreur d'estimation des ISRFs, et moyenne des erreurs d'approximation des ISRFs. Ces résultats sont obtenus à l'aide de la méthode SPIRITUAL, pour une cardinalité K choisie en cohérence avec celle ayant permis la meilleure performance dans le chapitre 2 ($K = 4$ pour les bandes B1, B3 et B4 et $K = 3$ pour la bande B2). On observe que, pour l'ensemble des quatre bandes, la reconstruction du spectre mesuré est de très bonne qualité, et l'erreur moyenne d'estimation des ISRFs reste inférieure à 1 % dans la plupart des cas. De légères erreurs d'estimation sont visibles ponctuellement, en particulier pour certaines ISRFs de la bande B4, mais les performances globales demeurent plus que satisfaisantes. Enfin, il est intéressant de noter pour cette bande que quand l'erreur minimale était obtenue pour $K = 4$ atomes non nuls dans le chapitre 2, ici, les meilleures performances sont atteintes pour $K = 3$. Par ailleurs, on peut noter que les erreurs d'estimation des réponses radiométriques peuvent être relativement importantes. Cela s'explique par les fortes amplitudes des spectres non normalisés, pouvant atteindre des valeurs de l'ordre de 6×10^3 pour les bandes B1 et B4, et jusqu'à 5×10^4 pour les bandes B2 et B3.

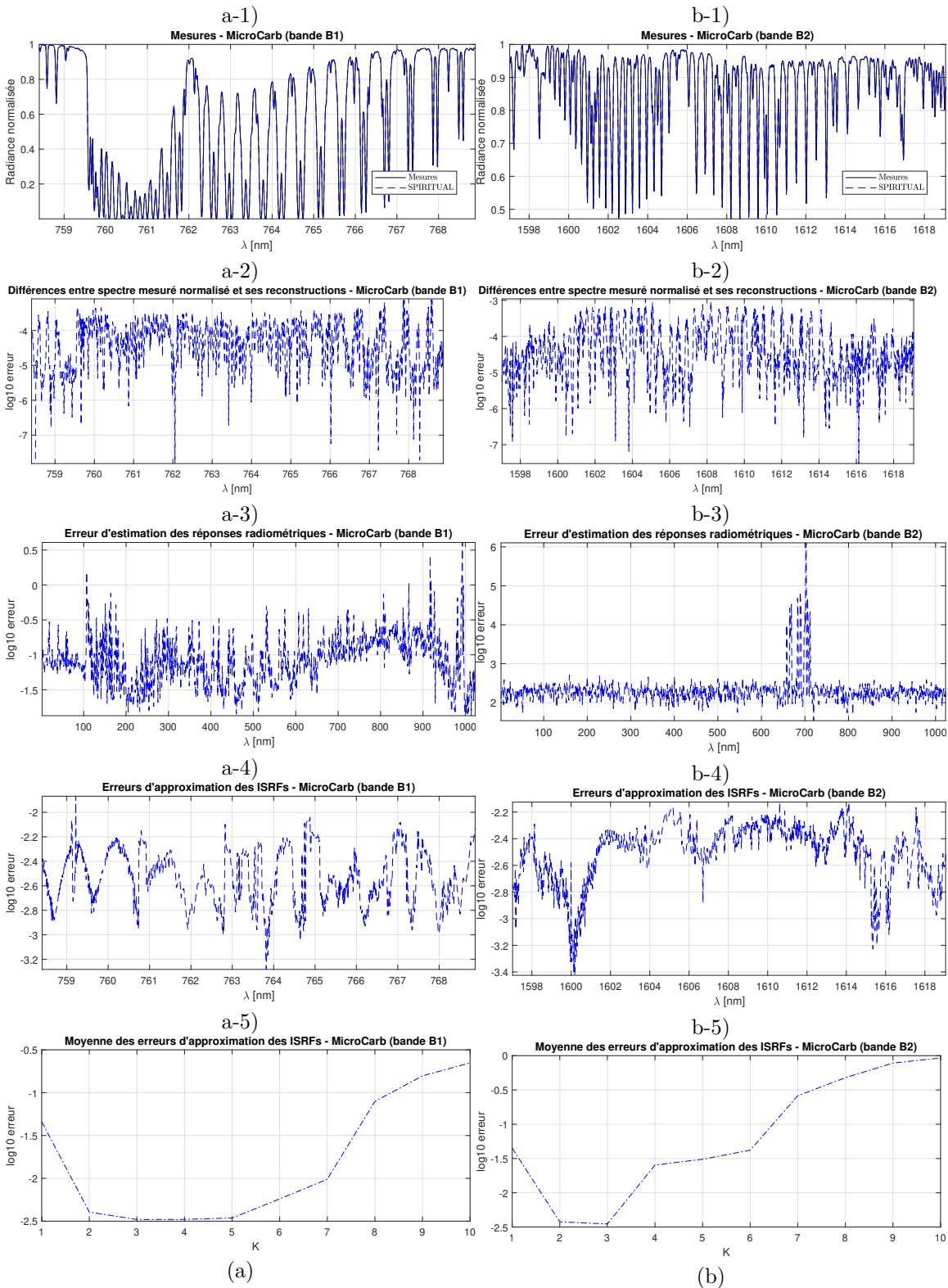


FIGURE 3.15 – Illustration du spectre mesuré sans défauts (1), de la différence entre le spectre mesuré sans défauts et le spectre reconstruit avec SPIRITUAL (2), des erreurs d'estimations des réponses radiométriques (3), de l'erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation de l'ISRF en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5) pour les bandes B1 (a) et B2 (b) de MicroCarb.

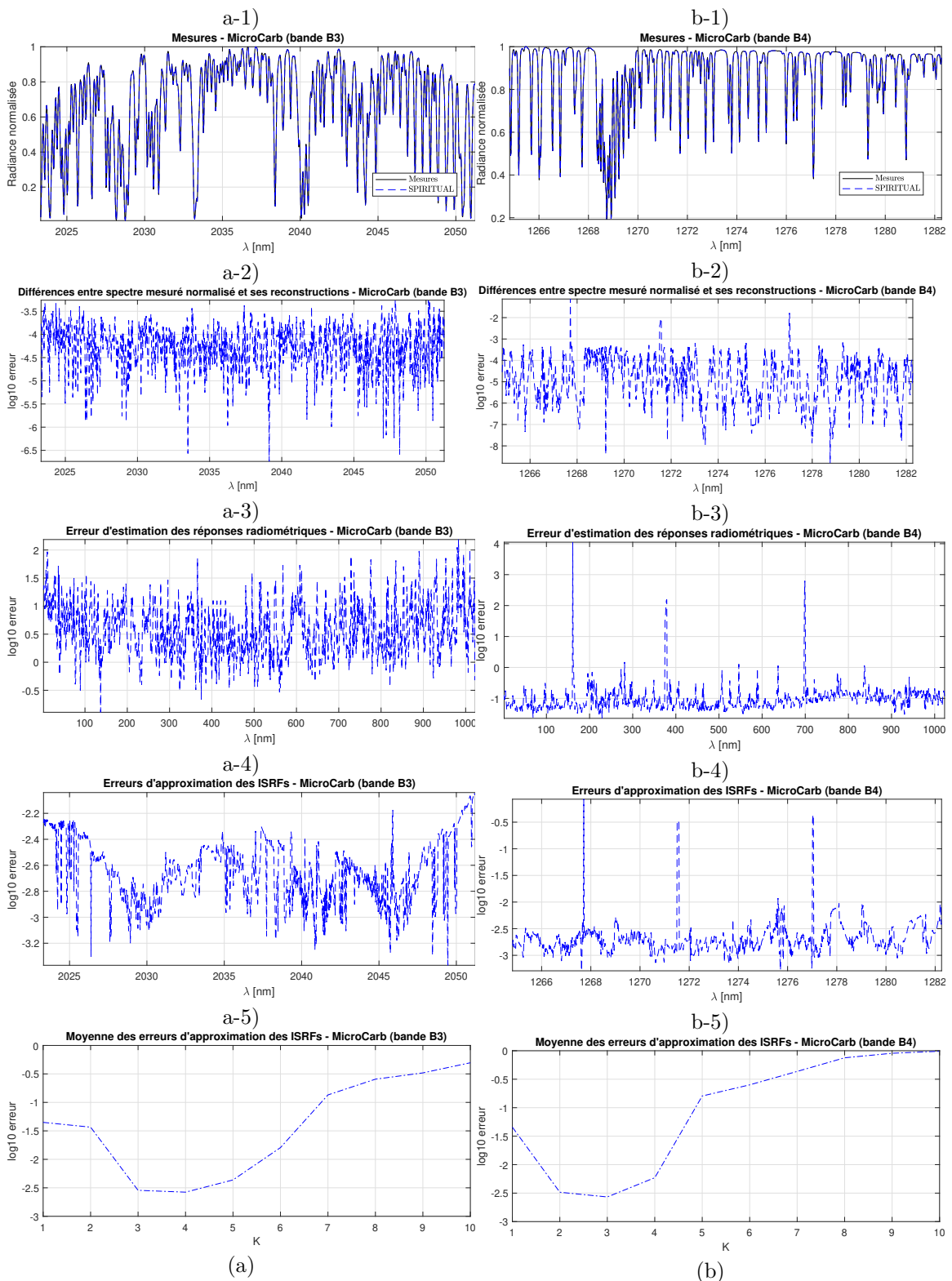


FIGURE 3.16 – Illustration du spectre mesuré sans défauts (1), de la différence entre le spectre mesuré sans défauts et le spectre reconstruit avec SPIRITUAL (2), des erreurs d'estimations des réponses radiométriques (3), de l'erreur d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (4) et de l'erreur moyenne d'approximation de l'ISRF en fonction du nombre d'atomes sélectionnés (5) pour les bandes B3 (a) et B4 (b) de MicroCarb.

Robustesse au bruit. On s'intéresse à présent à la robustesse de la méthode SPIRITUAL à la présence de niveaux de rapport signal sur bruit (SNR) — 20 dB, 40 dB, 55 dB et 80 dB — qui sont ajoutés aux mesures. Les erreurs d'estimation des ISRFs et des réponses radiométriques sont déterminées et les résultats affichés dans la table 3.6 montrent une augmentation globale des erreurs lorsque le SNR diminue, comme attendu. Toutefois, un résultat particulièrement remarquable apparaît pour un niveau de bruit de 20 dB : malgré ce fort bruit, les erreurs d'estimation restent très faibles. Plus précisément, pour les bandes B2 et B3, les erreurs moyennes sont inférieures au critère mission, et pour les bandes B1 et B4, elles en sont très proches. Ce résultat contraste fortement avec ceux obtenus dans le chapitre 2, où un tel niveau de bruit rendait difficile l'estimation précise des ISRFs. L'utilisation de plusieurs spectres de référence pourrait expliquer cette amélioration observée dans l'estimation des ISRFs en présence d'un niveau de bruit plus élevé. Il sera intéressant d'analyser ce phénomène dans des travaux futurs.

TABLE 3.6 – Moyenne des erreurs d'estimation des réponses radiométriques et moyenne des erreurs d'approximation des ISRFs pour différents niveaux de bruit (*SNR*) pour les quatre bandes de l'instrument MicroCarb - en bleu : méthode permettant d'obtenir une erreur d'estimation des ISRFs sous le critère de mission.

		Réponses radiométriques (log10)	Erreur d'approximation des ISRFs (%)
bande	/ SNR	<i>SPIRITUAL</i>	<i>SPIRITUAL</i>
bande B1	20 dB	1.02	1.01
	40 dB	-0.69	0.29
	55 dB	-0.97	0.27
	80 dB	-0.98	0.27
bande B2	20 dB	2.38	0.46
	40 dB	2.29	0.35
	55 dB	2.29	0.35
	80 dB	2.29	0.35
bande B3	20 dB	2.41	0.37
	40 dB	0.95	0.27
	55 dB	0.90	0.27
	80 dB	0.92	0.26
bande B4	20 dB	1.34	1.10
	40 dB	1.10	0.63
	55 dB	1.09	0.59
	80 dB	1.09	0.59

Robustesse à une méconnaissance a priori du degré des polynômes modélisant les réponses radiométriques. De même que pour les décalages spectraux, le degré du polynôme modélisant les erreurs radiométriques n'est généralement pas connu en pratique. Nous proposons donc ici de simuler les réponses radiométriques à l'aide d'un polynôme de degré $P = 3$, puis d'estimer conjointement les ISRFs et les réponses radiométriques à l'aide de la méthode SPIRITUAL, pour différents degrés utilisés lors de l'estimation $P_e \in \{1, \dots, 5\}$. La figure 3.17 présente les résultats obtenus en termes d'erreur d'estimation des ISRFs et des réponses radiométriques. Comme attendu, le degré estimé qui minimise l'erreur d'estimation des ISRFs est $P_e = 3$, c'est-à-dire celui correspondant au degré utilisé pour la génération des données. De plus, on observe que l'erreur d'estimation des réponses radiométriques continue de décroître légèrement avec l'augmentation du degré P_e . Un polynôme de degré supérieur à celui permettant de simuler les données peut donc être utilisé de manière efficace pour estimer les ISRFs. Au contraire, un degré faible $P_e = 1$ ne permet pas d'estimer les ISRFs avec une bonne précision, ce qui signifie qu'un simple modèle affine est insuffisant pour corriger correctement les erreurs radiométriques et estimer les ISRFs dans ce cas. En revanche, pour $P_e \geq 2$, les résultats deviennent satisfaisants en termes d'estimation des ISRFs.

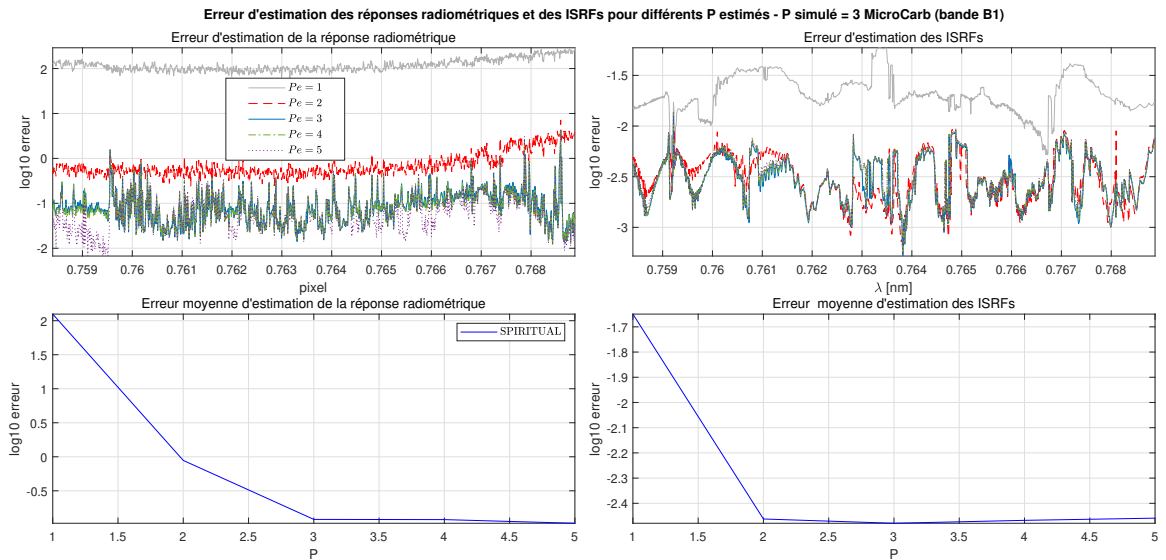


FIGURE 3.17 – Erreurs d'estimation des réponses radiométriques et des ISRFs pour différents degrés estimés P_e , avec des réponses radiométriques simulées selon un polynôme de degré $P = 3$ pour la bande B1 de MicroCarb.

Estimation pour différents degrés pour le modèle polynomiale des réponses radiométriques. À présent, nous nous plaçons dans le cas où le degré estimé P_e des polynômes a été correctement choisi (i.e. $P_e = P$), et nous cherchons à analyser les performances de l'estimation lorsque le degré réel P augmente, pour $P \in \{1, \dots, 5\}$. Les résultats obtenus sont affichés dans la figure 3.18 en termes d'erreurs d'estimation des réponses radiométriques et des ISRFs. On observe que plus le degré P augmente, plus l'erreur d'estimation des réponses radiométriques a tendance à croître, ce qui est compréhensible car le nombre de paramètres à estimer augmente avec P . Toutefois, en ce qui concerne l'estimation des ISRFs, l'erreur n'augmente que très légèrement et reste dans tous les cas inférieure au critère mission. Cela montre que même dans le cas de modèles radiométriques plus complexes (i.e. de degré élevé), la méthode SPIRITUAL parvient à maintenir de bonnes performances pour l'estimation des ISRFs. Elle se révèle ainsi robuste à l'augmentation du degré des polynômes modélisant les non-linéarités radiométriques.

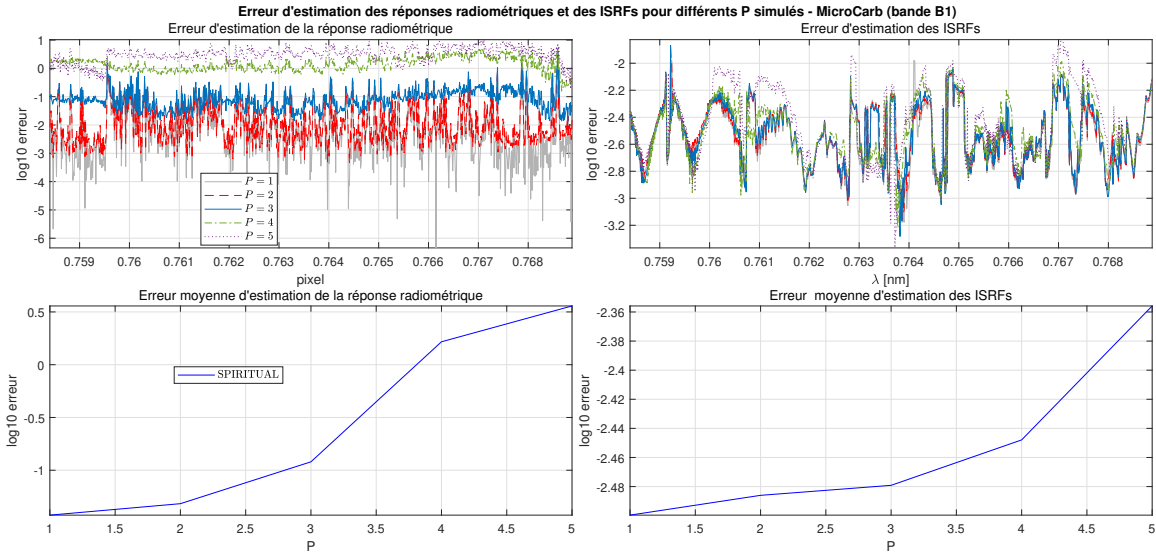


FIGURE 3.18 – Erreurs d'estimation des réponses radiométriques et des ISRFs pour différents degrés simulés $P = 1, \dots, 5$, avec des réponses radiométriques simulées selon un polynôme de degré $P = 3$ pour la bande B1 de MicroCarb.

TABLE 3.7 – Erreur d'estimation des réponses radiométriques et moyenne des erreurs d'approximation des ISRFs pour deux initialisations différentes (en prenant le premier atome du dictionnaire, en supposant qu'il n'y a pas de défauts) pour la bande B1 de l'instrument MicroCarb.

initialisation	Réponse radiométrique (log10)	Erreur d'approximation des ISRFs (%)
1 atome	-0.92	0.33
sans défauts	-0.97	0.27

Impact de l'initialisation. Il est important d'analyser l'impact de l'initialisation sur la méthode SPIRITUAL. Dans les résultats précédemment présentés, la solution a été initialisée en supposant qu'il n'y avait pas d'erreurs radiométriques. Une seconde stratégie d'initialisation consiste à estimer, dès la première itération, les ISRFs en utilisant le premier atome du dictionnaire, qui correspond à une forme moyenne des ISRFs. Les résultats obtenus avec cette seconde méthode sont reportés dans la table 3.7. Contrairement au cas des décalages spectraux, cette initialisation par la moyenne des ISRFs ne permet pas nécessairement d'améliorer la qualité de l'estimation. En effet, les deux méthodes d'initialisation fournissent des performances comparables. Cela suggère que, pour les erreurs radiométriques, le choix de l'initialisation a un impact moindre, et que la méthode SPIRITUAL converge de manière fiable, quelle que soit l'option retenue.

Choix des spectres théoriques. Dans les expériences précédentes, $Q = 13$ spectres de référence ont été utilisés. Ces spectres correspondent soit à des scènes atmosphériques bien caractérisées, soit à des dite scènes "plates" (pouvant être obtenues à l'aide de lampes embarquées). Ces scènes présentent un intérêt particulier, car leur contenu spectral faible les rend peu sensibles aux variations des ISRFs, tout en restant fortement affectées par les erreurs radiométriques. Il s'agit donc d'outils essentiels pour la calibration radiométrique. Dans cette section, nous analysons l'impact du choix et du nombre de spectres de référence sur l'estimation des ISRFs, en supposant que les réponses radiométriques ont été simulées à l'aide d'un polynôme de degré $P = 3$. La figure 3.19 présente les résultats obtenus pour l'erreur d'estimation des ISRFs en fonction du nombre de spectres de référence

disponibles. Dans la partie supérieure de la figure, 13 spectres de référence sont utilisés, dont environ la moitié proviennent de scènes plates. On observe que, lorsque le nombre de spectres utilisés est faible, les erreurs d'estimation sont significatives. Plus ce nombre augmente, plus l'erreur décroît. Ces résultats montrent qu'un nombre suffisant de spectres de référence est nécessaire pour pouvoir estimer correctement les 4 coefficients des polynômes modélisant les réponses radiométriques. En particulier, à partir de 7 spectres de référence (3 scènes plates), les erreurs d'estimation deviennent très faibles.

La partie inférieure de la figure 3.19 illustre l'évolution de l'erreur d'estimation des ISRFs pour un nombre fixe de $Q = 13$ spectres de référence, en fonction du nombre de scènes plates utilisées. Plusieurs scénarios sont envisagés : aucun spectre de scène plate n'est utilisé ; une scène atmosphérique est remplacée par un spectre de référence nul (correspondant à une absence totale de signal capturé pendant le temps d'intégration)² ; ou bien un faible nombre de scènes plates est inclus dans l'ensemble de référence (entre 1 et 3). Au sol, il est généralement possible de disposer d'un grand nombre de scènes plates pour la calibration. En revanche, en vol, les contraintes matérielles limitent généralement le nombre de lampes disponibles à bord à 1 ou 2, rendant l'analyse de cette configuration particulièrement pertinente. Les résultats sont présentés pour quatre variantes de la méthode SPIRITUAL. Ces variantes diffèrent soit par l'initialisation des ISRFs (en supposant une absence de défauts, ou en utilisant le premier atome du dictionnaire), soit par l'ajout de pondérations dans le calcul du coût d'optimisation, en fonction de la variance locale du spectre dans la fenêtre glissante. On rappelle que les erreurs radiométriques sont plus facilement estimables dans les zones plates du spectre. Les résultats montrent que l'absence totale de scène plate entraîne une dégradation de la qualité d'estimation. L'ajout d'un spectre nul n'apporte aucune amélioration dans ce contexte, et peut même dégrader les performances lorsque l'on initialise les ISRFs en supposant l'absence d'erreurs radiométriques. Il pourra être envisagé dans des travaux futurs d'exploiter cette scène pour estimer la constante du polynôme, en adaptant le modèle en conséquence. En revanche, l'introduction d'une seule scène plate permet une amélioration significative, à condition d'utiliser une initialisation adaptée. Dans ce contexte, l'utilisation du premier atome du dictionnaire comme estimation initiale, combinée à une pondération des zones du spectre en fonction de leur variance, permet d'obtenir les meilleurs résultats. Lorsque deux scènes plates sont disponibles, les performances s'améliorent encore. À partir de trois scènes plates, toutes les variantes testées convergent vers une solution de haute qualité, avec une erreur d'estimation des ISRFs très faible. Cela atteste des bonnes performances de la méthode pour de potentielles opérations en vol.

2. Ce type de scène est couramment utilisé lors des phases de calibration, car il constitue la seule configuration permettant d'estimer uniquement le courant d'obscurité et l'offset.

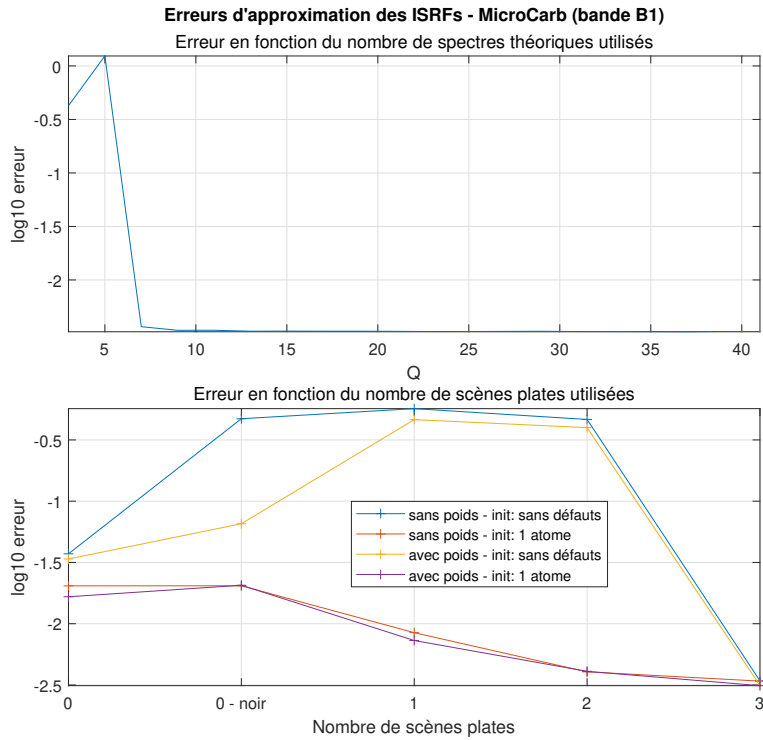


FIGURE 3.19 – Erreur d'estimation des ISRFs en fonction du nombre de spectres de référence Q : (haut) cas où la moitié des spectres sont issus de scènes plates; (bas) cas avec 13 spectres de référence et un nombre variable de scènes plates correspondant à différentes configurations de lampes disponibles (le cas "0-noir" correspond à l'utilisation d'un spectre de référence nul, obtenu sans lampe en masquant la luminosité).

3.2.4 Conclusion sur les erreurs radiométriques

Dans cette partie, nous avons analysé l'impact des erreurs radiométriques sur l'estimation des ISRFs. Nous avons modélisé les réponses radiométriques des spectromètres à l'aide d'un modèle polynomial et proposé une nouvelle méthode de résolution, nommée SPIRITUAL, permettant d'estimer conjointement les ISRFs en présence d'erreurs radiométriques. Les résultats montrent que la méthode développée permet d'estimer simultanément les ISRFs et les réponses radiométriques, et offre notamment la possibilité de corriger les spectres mesurés en entrée. Cette méthode requiert l'utilisation de plusieurs spectres de référence pour réaliser l'estimation des réponses radiométriques pixel par pixel. L'étude sur le choix des spectres de référence a montré qu'il est nécessaire d'inclure au moins un spectre issu d'une scène homogène (plate), ce qui est le cas en vol pour MicroCarb. Grâce à cela, il est possible d'estimer les ISRFs en présence d'erreurs radiométriques. Une étude des performances de la méthode selon les degrés des polynômes simulés ou générés, ainsi que dans le cas de réponses radiométriques s'écartant du modèle, a montré de bons résultats et une estimation fiable. Enfin, une analyse de la robustesse au bruit a également été menée.

3.3 Estimation conjointe des ISRFs et des erreurs de mesures

Dans cette partie, nous nous intéressons à la fois à l'estimation des ISRFs et des erreurs de mesure, qu'elles soient radiométriques ou spectrales. Nous rappelons le modèle défini en (3.1) :

$$y(\lambda_l) = f_l(r * g(I_l))(\lambda_l) = f_l\left(\int_{\mathbb{R}} r(\lambda_l - u) g(I_l(u)) du\right), \quad l = 1, \dots, N_\lambda,$$

où $y(\lambda_l) \in \mathbb{R}$ représente la valeur du spectre mesuré à la longueur d'onde λ_l , f_l modélise les erreurs radiométriques et g le décalage spectral. Dans cette partie, nous conservons l'hypothèse du modèle polynomial utilisée dans les deux sections précédentes pour modéliser les erreurs radiométriques et spectrales. En discrétisant le modèle, on obtient alors :

$$y_{l,q} = \sum_{p=0}^P d_p^l \left(\mathbf{R}_{c_q^{(q)}}(l, :) \mathbf{I}_l \right)^p, \quad q = 1, \dots, Q, \quad l = 1, \dots, N_\lambda, \quad (3.23)$$

où $\mathbf{R}_{c_q^{(q)}}(l, :) \triangleq \pi \left(\mathbf{r}_q, \mathcal{W}_l \left(\sum_{p=0}^{P'} c_p^q \left(\frac{l}{l_{\max}} \right)^p \right) \right)$ est la matrice des Q spectres de références paramétrisée par les coefficients polynomiaux des Q fonctions de décalage spectral. L'objectif est d'estimer de manière conjointe les ISRFs \mathbf{I}_l , les coefficients polynomiaux associés aux réponses radiométriques d_p^l ainsi que ceux associés aux réponses spectrales c_p^q . En combinant les problèmes d'optimisation des deux parties précédentes (3.9) (estimation conjointe des ISRFs et des décalages spectraux) et (3.17), (3.21), (3.22) (estimation conjointe des ISRFs et des réponses radiométriques), on obtient le problème d'optimisation final en plusieurs sous-problèmes :

$$\hat{\mathbf{c}}_q = \arg \min_{\mathbf{c}_q} \|\mathbf{Y}(:, q) - \mathbf{N}_q(\Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l; \mathbf{c}_q; \hat{\mathbf{d}})\|_2^2, \quad q = 1, \dots, Q \quad (3.24)$$

$$\hat{s}_{l,q} = \arg \min_{s_{l,q}} \left(y_{l,q} - \sum_{p=0}^P \hat{d}_p^l (s_{l,q})^p \right)^2, \quad q = 1, \dots, Q, \quad l = 1, \dots, N_\lambda \quad (3.25)$$

$$\hat{\mathbf{d}}_l = \arg \min_{\mathbf{d}_l} \|\mathbf{Y}(l, :)^T - \mathbf{M}_l(\Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l; \hat{\mathbf{c}}) \mathbf{d}_l\|_2^2, \quad l = 1, \dots, N_\lambda \quad (3.26)$$

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_l = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}_l} \|\text{vec}(\hat{\mathbf{S}}_l) - \Psi_l \boldsymbol{\alpha}_l\|_2^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}_l\|_0, \quad l = 1, \dots, N_\lambda \quad (3.27)$$

$$\mathbf{N}_q(\Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l; \mathbf{c}_q; \hat{\mathbf{d}}) \triangleq \left[\sum_{p=0}^P \hat{d}_p^1 \left(\mathbf{R}_{c_q^{(1)}}(1, :) \Psi_1 \hat{\boldsymbol{\alpha}}_1 \right)^p, \dots, \sum_{p=0}^P \hat{d}_p^{N_\lambda} \left(\mathbf{R}_{c_q^{(q)}}(N_\lambda, :) \Psi_{N_\lambda} \hat{\boldsymbol{\alpha}}_{N_\lambda} \right)^p \right]^T \quad (3.28)$$

$$\mathbf{M}_l(\Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l; \hat{\mathbf{c}}) \triangleq \begin{bmatrix} \left(\mathbf{R}_{c_1^{(1)}}(l, :) \Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l \right)^0 & \cdots & \left(\mathbf{R}_{c_1^{(1)}}(l, :) \Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l \right)^P \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\mathbf{R}_{c_Q^{(Q)}}(l, :) \Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l \right)^0 & \cdots & \left(\mathbf{R}_{c_Q^{(Q)}}(l, :) \Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l \right)^P \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{Q \times (P+1)},$$

où $\text{vec}(\hat{\mathbf{S}}_l)$ est introduit dans (3.21) comme la concaténation des Q spectres mesurés corrigés.

3.3.1 Estimation des ISRFs et des erreurs radiométriques et spectrales

À présent, nous utilisons une méthode d'estimation conjointe permettant d'estimer simultanément les ISRFs ainsi que les erreurs de mesure, qu'elles soient radiométriques ou spectrales. Nous proposons ici une nouvelle méthode alternée qui itère entre l'estimation des décalages spectraux, réalisée via la partie recalage spectral de la méthode SPIRITUS, et l'estimation conjointe des ISRFs et des erreurs radiométriques avec SPIRITUAL. La méthode est décrite de la manière suivante :

1. Estimation des Q décalages spectraux \mathbf{c}_q en fixant les ISRFs et à partir du spectre supposé corrigé radiométriquement en résolvant (3.24).

2. Estimation des erreurs radiométriques après recalage spectral et à partir des ISRFs estimées en résolvant un problème des moindres carrés pour chacune des longueurs d'onde appartenant à la fenêtre d'analyse \mathcal{W}_l en résolvant (3.25).
3. Correction des erreurs radiométriques en déterminant les racines des équations $\mathbf{Y}_l(l', :) - f_{l'} [\mathbf{S}_l(l', :)]$ (3.26).
4. Ré-estimation du vecteur parcimonieux $\boldsymbol{\alpha}_l$ à partir des mesures corrigées des erreurs radiométriques en utilisant l'estimation des décalages spectraux (3.25).

Dans les sections précédentes, nous avons montré qu'une bonne initialisation est essentielle pour obtenir des estimations fiables, que ce soit avec SPIRITUS ou SPIRITUAL. Les ISRFs sont donc initialisées en utilisant le premier atome du dictionnaire, un choix qui a donné les meilleurs résultats pour SPIRITUS et de bons résultats pour SPIRITUAL. Ensuite, en utilisant cette initialisation de l'ISRF, on alterne entre les deux parties : 1) estimation des décalages et 2) estimation des erreurs radiométriques avec 3) correction des erreurs radiométriques. Une fois cette initialisation réalisée, nous ajoutons l'itération dédiée à l'estimation des ISRFs 4). Il s'agit ici d'une extension de la méthode SPIRIT proposée au chapitre 2, plus complexe que les extensions SPIRITUS et SPIRITUAL définies précédemment. Cette nouvelle méthode prend en compte à la fois les erreurs radiométriques et spectrales et est nommée ASPIRIT, acronyme de "All-errors modeling (radiometric and spectral shifts) using polynomials, with a SParse representation of Instrument Spectral Responses using a dicTionary".

Il est important de noter que résoudre ce problème d'optimisation combinant toutes les erreurs considérées est plus difficile, notamment en raison d'une fonction objectif qui n'est ni convexe ni simple. Cependant, un constat fait au début du chapitre nous vient en aide : les deux types de défauts — radiométriques et spectraux — n'impactent pas uniformément l'ensemble du spectre. Plus précisément, les erreurs spectrales ont peu d'impact dans les zones plates du spectre, mais sont plus facilement identifiables et corrigées dans les raies spectrales. À l'inverse, les erreurs radiométriques sont difficiles à estimer dans les raies, à cause de la forte variabilité locale du signal, mais sont mieux détectables dans les régions plates du spectre. Pour ces raisons, on définit un nouveau modèle étendu, appelé W-ASPIRIT (Weight ASPIRIT), dans lequel on introduit des pondérations variables selon les régions spectrales en fonction du type d'erreur à estimer : 1) lorsqu'on cherche à estimer les erreurs radiométriques, on attribue plus de poids aux zones plates du spectre (où la variance sur une fenêtre glissante du spectre mesuré normalisé est faible) et 2) pour l'estimation des défauts spectraux, on met plus de poids au niveau des raies spectrales (où la variance sur la fenêtre glissante est élevée). Plus précisément, on introduit la matrice de poids $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times Q}$ contenant les écarts types pour tous les pixels l et les Q spectres de référence calculés pour chaque fenêtre glissante et les sous-problèmes d'optimisation 3.24 et 3.26 sont modifiés de la façon suivante :

$$\hat{\mathbf{c}}^{(q)} = \arg \min_{\mathbf{c}^{(q)}} \|\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}(:, q))^{-1} (\mathbf{Y}(:, q) - \mathbf{N}_q(\boldsymbol{\Psi}_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l; \mathbf{c}^{(q)}; \hat{\mathbf{d}}))\|_2^2, \quad q = 1, \dots, Q \quad (3.29)$$

$$\hat{\mathbf{d}}_l = \arg \min_{\mathbf{d}_l} \|\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}(l, :)) \mathbf{Y}(l, :)^T - \mathbf{M}_l(\boldsymbol{\Psi}_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l; \hat{\mathbf{c}}) \mathbf{d}_l\|_2^2, \quad l = 1, \dots, N_\lambda. \quad (3.30)$$

Cette méthode est décrite dans l'algorithme 9, présenté dans l'annexe A.

Afin d'analyser l'importance d'utiliser une pondération pour l'estimation des ISRFs, nous avons comparé les performances de la méthode ASPIRIT avec et sans pondération pour des mesures issues des bandes B1, B2, B3 et B4. Les décalages spectraux ont été générés avec un polynôme de degré $P = 3$ et un décalage maximal de $\delta_{\max} = 3$ pixels, tandis que les réponses radiométriques ont été modélisées par un polynôme de degré $P = 3$. L'estimation des décalages spectraux est réalisée en utilisant des algorithmes paramétriques basés sur la norme ℓ_2 (l'étude de l'utilisation du transport optimal est laissée pour des travaux futurs). Pour l'estimation des erreurs radiométriques, nous avons utilisé $Q = 13$ spectres de référence. Les performances d'estimation sont évaluées selon plusieurs critères : la qualité de l'estimation des ISRFs, l'erreur entre les spectres mesurés et les spectres reconstruits, ainsi que l'estimation des décalages spectraux et des réponses radiométriques.

Les résultats obtenus peuvent être visualisés pour toutes les bandes dans les figures 3.20 et 3.21. Il est clairement plus difficile d'estimer les ISRFs lorsque toutes les erreurs de mesure — radiométriques et spectrales — sont prises en compte simultanément. Dans ce cas, la méthode ASPIRIT montre des limites, notamment pour la bande B2, où il devient difficile d'estimer correctement les ISRFs ainsi que les erreurs radiométriques et les décalages spectraux. Cette sensibilité de la bande B2 avait déjà été observée précédemment : dans le cas d'un décalage spectral de 3 pixels, l'estimation à l'aide de la norme ℓ_2 a montré des performances dégradées. Pour les bandes B1 et B4, la méthode ASPIRIT standard montre également quelques limites en termes de précision. Cependant, l'ajout de poids dans le traitement des spectres mesurés permet d'améliorer significativement les résultats, engendrant des erreurs d'estimation des ISRFs en dessous du critère mission fixé à 1 %. La bande B3 apparaît quant à elle comme la plus favorable à l'estimation : les performances obtenues sont très bonnes, même sans pondération, et l'ajout de poids engendre de meilleures performances d'estimation. En définitive, l'approche Weight-ASPIRIT permet d'estimer les ISRFs avec une grande précision en présence d'erreurs radiométriques et spectrales. Elle s'avère particulièrement efficace tant que les spectres ne sont pas trop fortement perturbés. Cette méthode permet également une correction fiable des spectres mesurés, et donc une meilleure robustesse de l'étalonnage spectral de l'instrument.

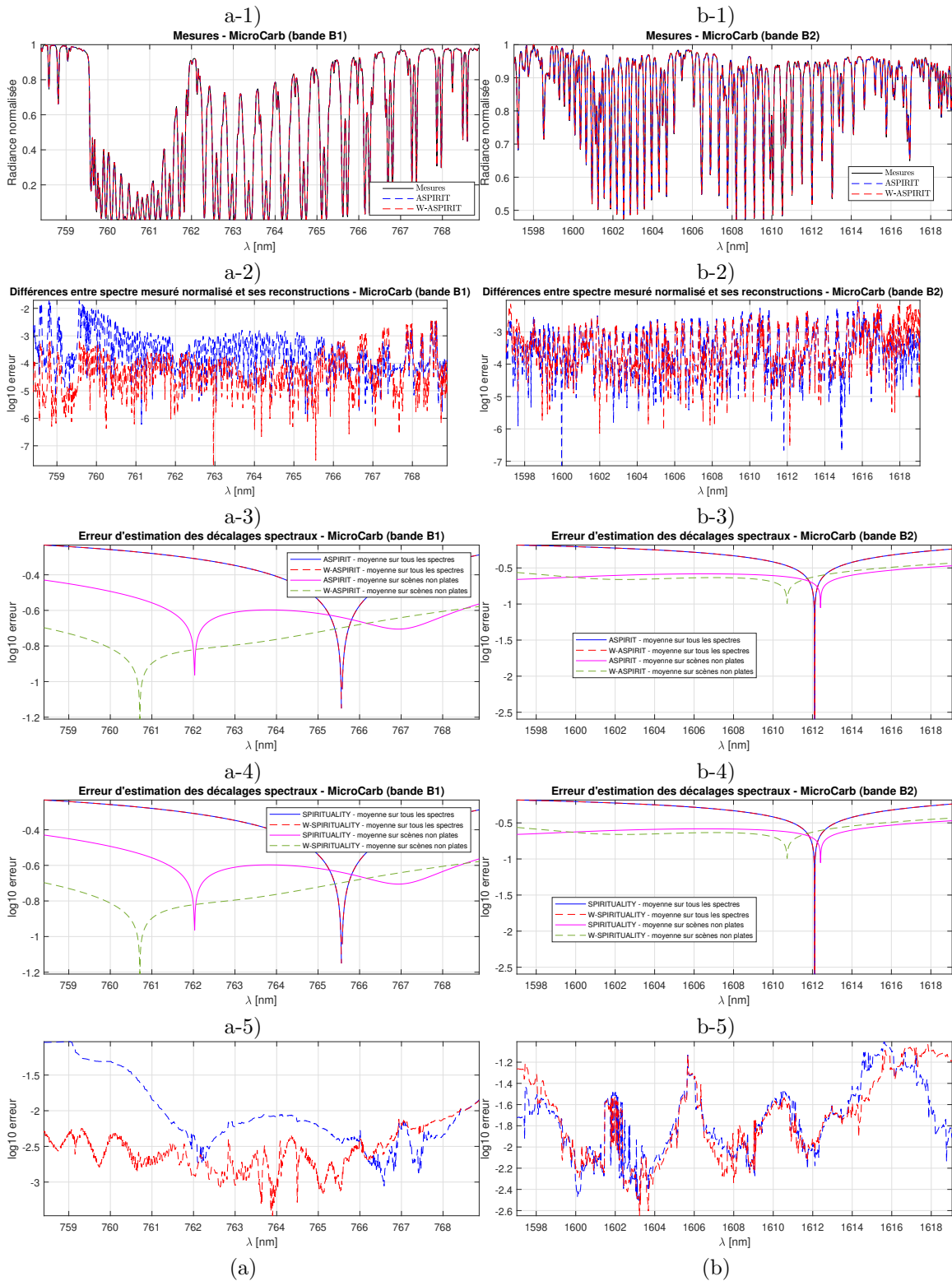


FIGURE 3.20 – Illustration du spectre mesuré sans défauts (1), de la différence entre le spectre mesuré sans défauts et le spectre reconstruit avec ASPIRIT et W-ASPIRIT (2), des erreurs d'estimation des décalages spectraux (3), des erreurs d'estimation des réponses radiométriques (4) et des erreurs d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (5)

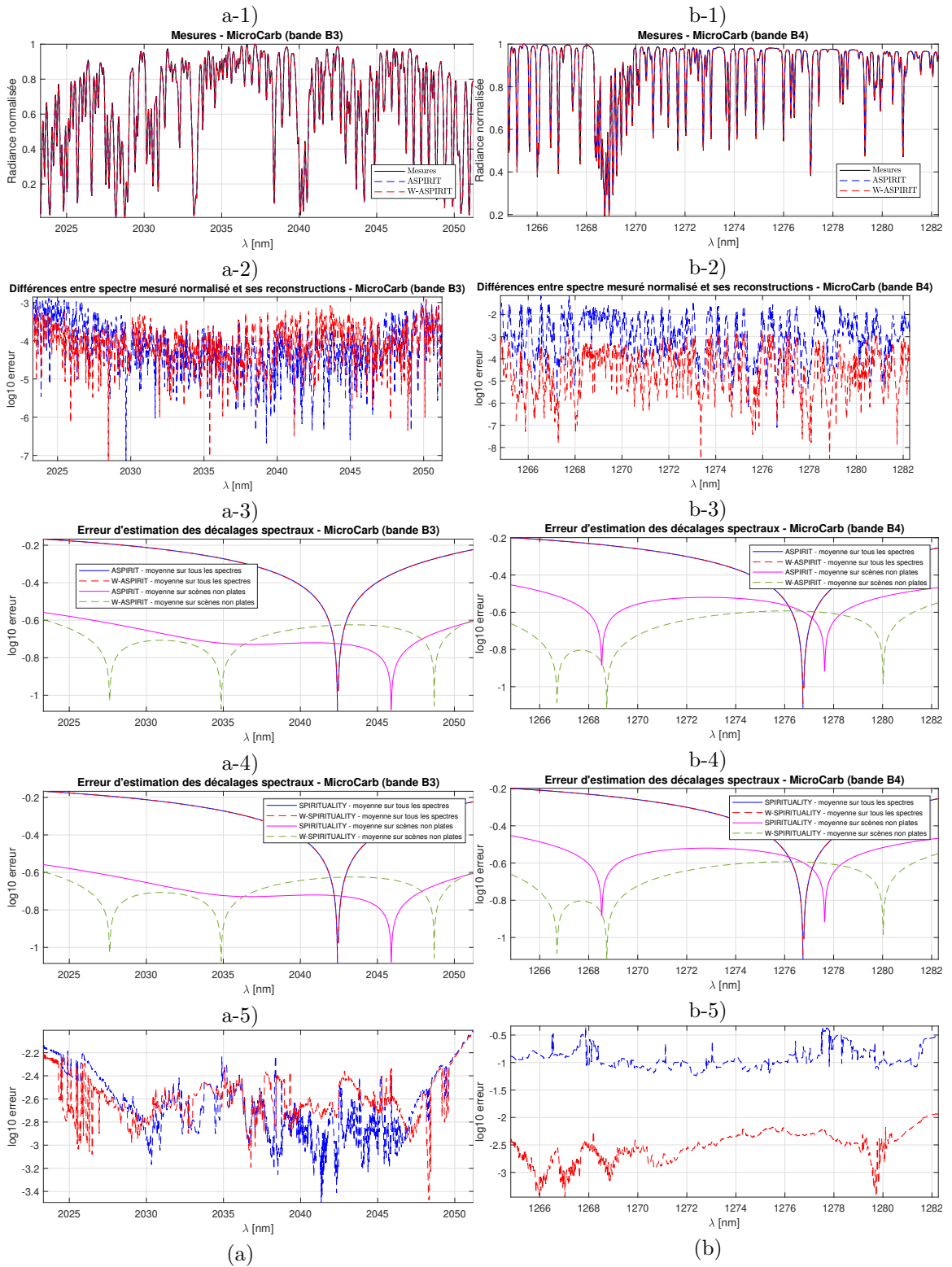


FIGURE 3.21 – Illustration du spectre mesuré sans défauts (1), de la différence entre le spectre mesuré sans défauts et le spectre reconstruit avec ASPIRIT et W-ASPIRIT (2), des erreurs d'estimation des décalages spectraux (3), des erreurs d'estimation des réponses radiométriques (4) et des erreurs d'approximation de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (5) pour les bandes B3 (a) et B4 (b) de MicroCarb.

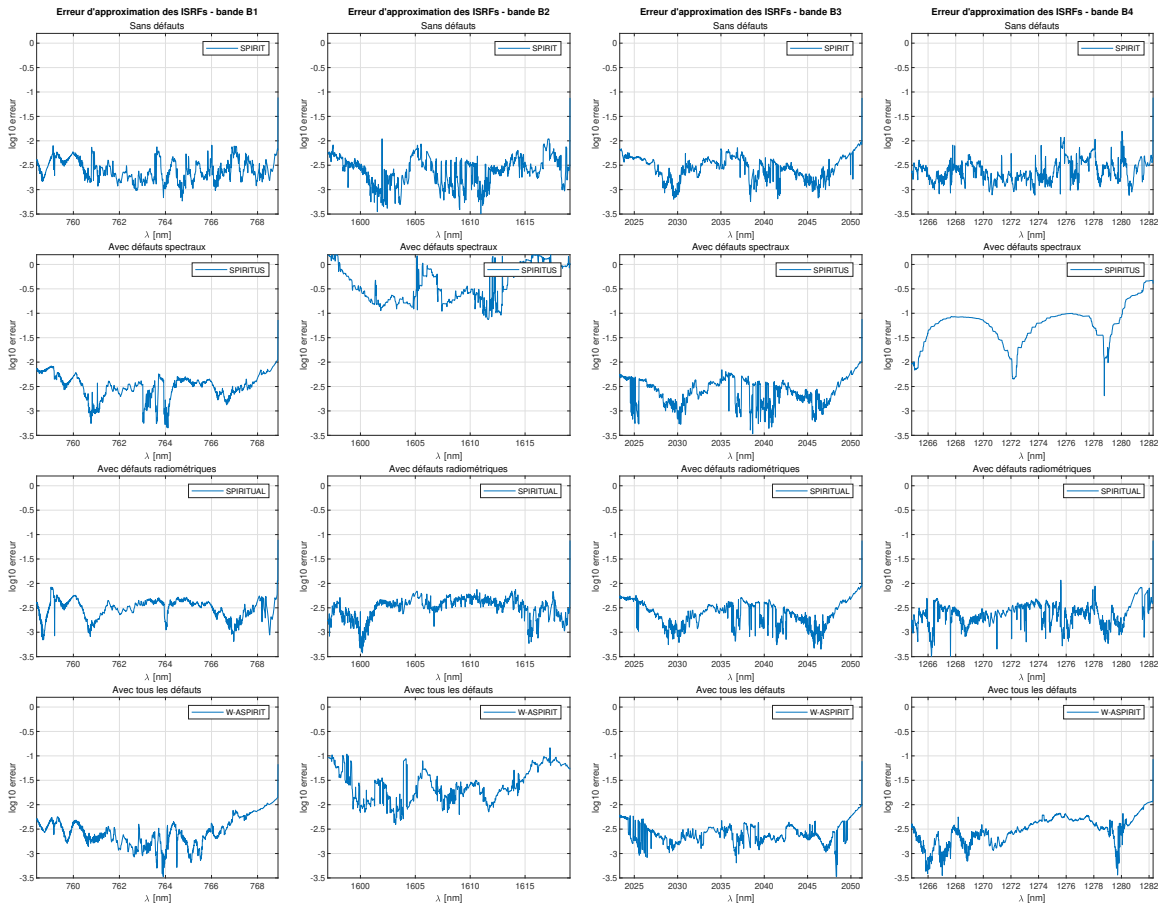


FIGURE 3.22 – Erreur d’estimation des ISRFs dans différents scénarios instrumentaux, avec les méthodes d’estimation associées : sans erreurs (SPIRIT), en présence de décalages spectraux (SPIRITUS), en présence d’erreurs radiométriques (SPIRITUAL), et en présence conjointe des deux types d’erreurs, corrigées à l’aide de la méthode pondérée W-ASPIRIT, pour les bandes B1, B2, B3 et B4 de MicroCarb.

Performances d’estimation des ISRFs pour les différents scénarios instrumentaux

Finalement, cette dernière partie propose une synthèse des performances des méthodes d’estimation des ISRFs appliquées aux quatre bandes spectrales de la mission MicroCarb, dans plusieurs scénarios représentatifs des conditions instrumentales possibles. La figure 3.22 regroupe 16 sous-figures, combinant les résultats pour les quatre bandes (B1 à B4) selon le scénario testé : sans défauts (avec résolution utilisant SPIRIT), avec uniquement des décalages spectraux (SPIRITUS), avec uniquement des défauts radiométriques (SPIRITUAL), et avec la totalité des défauts pris en compte (W-ASPIRIT). Les résultats confirment la pertinence et la robustesse des méthodes proposées, avec une très bonne qualité d’estimation dans tous les cas simples, et des performances qui restent solides même dans les scénarios complexes lors de l’introduction de défauts. L’estimation conjointe des erreurs spectrales et radiométriques avec W-ASPIRIT permet très souvent d’atteindre des niveaux de précision satisfaisants, compatibles avec les exigences de la mission. En outre, bien que certaines bandes — en particulier B2 et B4 — présentent une plus grande sensibilité aux erreurs spectrales, les méthodes restent efficaces, notamment grâce à l’introduction de pondérations adaptées. Les bandes B1 et B3 montrent une très bonne stabilité face aux différentes sources d’erreurs.

Ces résultats illustrent la capacité des approches développées à s'adapter aux différentes configurations instrumentales et à garantir une estimation fiable et précise des ISRFs sur l'ensemble des bandes spectrales.

3.4 Conclusions

Ce chapitre s'est intéressé à la modélisation et à la correction des erreurs instrumentales affectant les mesures d'un spectromètre, en s'appuyant sur les données des quatre bandes spectrales de la mission MicroCarb. Deux grandes familles de défauts ont été analysées : les erreurs spectrales, liées à des décalages dans la position des ISRFs, et les erreurs radiométriques, induites par des réponses non-linéaires du détecteur. Ces défauts altèrent la qualité des spectres mesurés, et compromettent l'estimation précise des fonctions de réponse spectrale (ISRFs), essentielles pour une détermination fiable des concentrations de gaz. Pour les prendre en compte, des modèles essentiellement paramétriques ont été proposés, en particulier des modélisations polynomiales des décalages spectraux et des réponses radiométriques, tandis que les ISRFs ont été estimées via une représentation parcimonieuse dans un dictionnaire construit à partir d'exemples expérimentaux comme dans le chapitre précédent. L'estimation conjointe des ISRFs et des erreurs spectrales et radiométriques a nécessité la mise en œuvre d'un nouvel algorithme d'estimation basé sur des modèles non-linéaires parcimonieux. La méthode principale développée repose sur une approche alternée, qui itère entre l'estimation des coefficients polynomiaux représentant les différentes erreurs (spectrales et radiométriques) et l'estimation des ISRFs via une représentation parcimonieuse (introduite au chapitre 2). Cette démarche repose sur l'utilisation de fenêtres glissantes et nécessite en plus un nombre suffisant de spectres de référence pour identifier les paramètres liés aux erreurs radiométriques.

Une analyse numérique détaillée a permis d'évaluer la robustesse de ces méthodes à différentes formes de spectre, différents niveaux de bruit, ainsi que leur sensibilité à de mauvaises spécifications du modèle (choix du degré du polynôme). En particulier, l'importance d'inclure au moins un spectre de référence correspondant à une scène plate a été mise en évidence pour bien contraindre l'estimation radiométrique. Les résultats obtenus soulignent la capacité des approches proposées à traiter un problème inverse non-linéaire complexe de manière fiable. Le chapitre suivant prolonge cette réflexion dans un cadre plus théorique, en étudiant des modèles inverses non-linéaires avec contraintes de parcimonie, dans le cadre de non-linéarités paramétriques supposées partagées par les pixels du détecteur. Ce qui ouvre la voie à une généralisation des méthodes au-delà des hypothèses polynomiales.

Chapitre 4

Généralisation du problème inverse non-linéaire

Dans les chapitres précédents, nous avons proposé des méthodes de résolution de problèmes inverses pour estimer les fonctions de réponses spectrales (ISRFs) des instruments dans le cas linéaire (SPIRIT) et dans le cas non-linéaire (SPIRITUAL). Nous avons pu attester des performances de l'utilisation de la représentation parcimonieuse dans un dictionnaire pour estimer ces fonctions. Ce chapitre vient poser quelques fondements théoriques pour la résolution globale des problèmes inverses non-linéaires en utilisant une représentation parcimonieuse et en supposant un modèle paramétrique des non-linéarités. Le but est d'estimer de manière conjointe deux vecteurs, dont l'un d'entre eux est supposé pouvoir se décomposer dans un dictionnaire. Dans la littérature, les non-linéarités sont souvent négligées ou linéarisées [93], car les problèmes inverses non-linéaires sont généralement complexes à résoudre, en raison des relations non triviales entre les données et les paramètres. Un cas particulier fréquemment étudié est celui des moindres carrés non-linéaires avec paramètres séparables, utilisé dans de nombreux domaines : chimie, systèmes mécaniques, télécommunications, imagerie biomédicale, etc. [94]. Ces problèmes consistent souvent à ajuster les données par une combinaison linéaire de fonctions non-linéaires, comme des polynômes (pouvant approximer toute fonction continue) ou des fonctions bilinéaires, utilisées notamment dans les modèles de mélange non-linéaires [95, 96] ou la modélisation d'erreurs radiométriques instrumentales [92].

Dans ce chapitre, deux méthodes de résolution de problèmes inverses non-linéaires seront étudiées. La première approche repose sur la projection de variables (Variable Projection, VP) telle que formulée dans [97]. Il s'agit d'une méthode classique pour traiter ce type de problème dans le cas où les non-linéarités sont séparables. On cherche à minimiser une fonctionnelle modifiée via l'application d'une pseudo-inverse. Toutefois, cette approche montre ses limites lorsque la matrice associée est mal conditionnée. De plus, dans de nombreuses applications, les non-linéarités ne sont pas séparables. C'est le cas, par exemple, en séparation aveugle de sources convolutives post-non-linéaires (où la non-linéarité est modélisée par une tangente hyperbolique) [98], ou encore dans les modèles épidémiologiques fractionnaires de type SIR [99]. Enfin, les fonctions sigmoïdes, largement utilisées dans les réseaux de neurones, illustrent également ce type de non-linéarités non-séparables. La seconde approche utilisée repose sur une adaptation de la formulation EXIP. Il s'agit en outre d'une simplification de la méthode SPIRITUAL présentée dans le chapitre 3 dans le cas où les non-linéarités sont identiques pour tous les pixels. La méthode consiste en une version étendue du principe d'invariance généralisé (Extended Invariance Principle) telle que décrite dans [100]. La méthode est appliquée dans le cas où les non-linéarités sont supposées bijectives sur l'espace de définition. Pour ces deux méthodes, des contraintes de parcimonie sont ajoutées, ce qui constitue une contribution à la littérature. De plus, pour la seconde méthode, la formulation EXIP est utilisée de manière alternée avec l'estimation du paramètre de la fonction non-linéaire.

Les méthodes proposées sont appliquées à divers contextes, au-delà de l'estimation des ISRFs,

notamment à des problèmes comme le démélange spectral où le modèle reste pertinent. Différents types de non-linéarités seront étudiés et des dictionnaires de différentes tailles seront utilisés. Une étude du conditionnement de ces dictionnaires sera proposée tout d'abord dans le cas linéaire, ce qui revient à supposer que la fonction paramétrique est l'identité, puis dans le cas non-linéaire afin d'analyser les difficultés pour résoudre ce type de problèmes.

4.1 Présentation et modélisation du problème

Les problèmes inverses sont largement utilisés dans de nombreux domaines, notamment l'exploration géophysique, la surveillance environnementale, ainsi que spatiale et hyperspectrale. Il est en effet possible d'utiliser ce type de modèle afin de reconstruire une image ou de retrouver le contenu spectral d'une scène observée sur Terre à partir des mesures fournies par un instrument [101]. Cependant, dans la pratique, des non-linéarités, notamment liées à la conception de l'instrument, peuvent perturber significativement les mesures et introduire des erreurs importantes lors de l'inversion. Dans ce contexte, le modèle d'observation associé peut être formulé comme suit :

$$\mathbf{y} = f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{X}\mathbf{a}) + \boldsymbol{\epsilon} \quad (4.1)$$

où $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^Q$ représente le vecteur d'observation contenant Q mesures, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{Q \times N}$ est une matrice connue, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^N$ est un vecteur que l'on cherche à estimer, $f_{\boldsymbol{\theta}}$ est une fonction paramétrique qui s'applique point à point avec la notation $f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{u}) = [f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{u}_1), \dots, f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{u}_Q)]^T, \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^Q$ et $\boldsymbol{\epsilon} \in \mathbb{R}^Q$ est un bruit additif gaussien. Notons que la fonction $f_{\boldsymbol{\theta}}$ dépend d'un vecteur de paramètres $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^P$. Nous rappelons que dans ce modèle, \mathbf{y} , \mathbf{X} , et la forme de la fonction $f_{\boldsymbol{\theta}}$ sont supposés connus et \mathbf{a} et $\boldsymbol{\theta}$ sont des vecteurs inconnus que l'on cherche à estimer. Le problème d'estimation de ces deux vecteurs peut être ré-écrit :

$$\arg \min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{a}} \|\mathbf{y} - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{X}\mathbf{a})\|_2^2. \quad (4.2)$$

Si le nombre d'observations Q est suffisamment grand par rapport au nombre total de paramètres à estimer ($N+P$), il est en principe possible de résoudre le problème (4.2) par une méthode de moindres carrés non-linéaires. Toutefois, cette approche peut s'avérer difficile en pratique, notamment en raison d'un mauvais conditionnement du problème. De plus, dans de nombreux cas d'application, le nombre de mesures Q est trop petit pour permettre l'estimation simultanée des vecteurs \mathbf{a} et $\boldsymbol{\theta}$ (en particulier lorsque $Q < N < N + P$). Le problème devient alors mal posé et des hypothèses supplémentaires sont nécessaires pour pouvoir le résoudre.

L'hypothèse centrale de ce chapitre est que le vecteur d'intérêt \mathbf{a} peut être représenté de manière parcimonieuse dans un dictionnaire donné. Cette hypothèse permet de réduire significativement le nombre de paramètres à estimer : au lieu d'estimer l'ensemble des N composantes de \mathbf{a} , il suffit d'estimer les indices et les amplitudes des K atomes sélectionnés dans le dictionnaire, soit seulement $2K$ paramètres. On fait l'hypothèse que le nombre d'observations Q est suffisamment important pour estimer de manière jointe $\boldsymbol{\theta}$ et le support des K éléments non nuls de \mathbf{a} et leurs valeurs. Le vecteur \mathbf{a} décomposé dans un dictionnaire Φ s'écrit :

$$\mathbf{a} = \Phi \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^N, \quad (4.3)$$

où $\Phi \in \mathbb{R}^{N \times N_D}$ et $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{N_D}$ est un vecteur parcimonieux. On peut alors ré-écrire (4.1) sous la forme :

$$\mathbf{y} = f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\Psi \boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (4.4)$$

avec

$$\Psi \triangleq \mathbf{X}\Phi \in \mathbb{R}^{Q \times N_D}. \quad (4.5)$$

Dès lors, l'expression $\mathbf{X}\boldsymbol{\alpha}$ de (4.1) possède une représentation parcimonieuse dans un nouveau dictionnaire $\boldsymbol{\Psi}$. Finalement, le problème d'optimisation que l'on cherche à résoudre est :

$$\arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} R_1(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}) = \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \{ \|\mathbf{y} - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0 \}. \quad (4.6)$$

4.2 Méthodes de résolution

4.2.1 Non-linéarités séparables

Dans un premier temps, on se place dans le cadre de non-linéarités séparables comme présenté dans [97]. Le modèle considéré est une combinaison linéaire de fonctions non-linéaires. Dans ce cas particulier, la fonction f définie dans (4.6) peut s'écrire $f_{\boldsymbol{\theta}}(z) = \sum_{p=0}^P g_p(z)\theta_p \forall z \in \mathbb{R}^+$ avec $\boldsymbol{\theta} = (\theta_0, \dots, \theta_P)^T$. Le problème d'optimisation associé est alors formulé comme suit :

$$\arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} R_2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}) = \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \left\{ \sum_{q=1}^Q \left| y_q - \sum_{p=0}^P g_p(\boldsymbol{\Psi}_q \boldsymbol{\alpha}) \theta_p \right|^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0 \right\}. \quad (4.7)$$

Le problème est donc quadratique par rapport à $\boldsymbol{\theta}$ et non-linéaire par rapport à $\boldsymbol{\alpha}$. Notons que les non-linéarités polynomiales, abordées dans le chapitre 3 sont un exemple typique de non-linéarités séparables.

Une méthode classique pour résoudre (4.7) est la méthode "projection de variables" [94] qui exploite la structure séparable du problème de moindres carrés non-linéaires pour éliminer les variables linéaires. On réduit alors le problème à l'optimisation d'une fonction ne dépendant que des variables non-linéaires. Cette méthode a été utilisée dans plusieurs contextes, par exemple dans le cadre de la calibration conjointe et des techniques de tomographie [102]. Le problème (4.7) est reformulé en utilisant une matrice auxiliaire $\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{R}^{Q \times P+1}$ définie par

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{bmatrix} g_0(\boldsymbol{\Psi}_1 \boldsymbol{\alpha}) & \dots & g_P(\boldsymbol{\Psi}_1 \boldsymbol{\alpha}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_0(\boldsymbol{\Psi}_Q \boldsymbol{\alpha}) & \dots & g_P(\boldsymbol{\Psi}_Q \boldsymbol{\alpha}) \end{bmatrix}, \quad (4.8)$$

de la manière suivante :

$$\arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} R_2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}) = \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \{ \|\mathbf{y} - \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{\theta}\|^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0 \}. \quad (4.9)$$

La minimisation par rapport à $\boldsymbol{\theta}$ est explicite et le minimum est obtenu au point :

$$\boldsymbol{\theta} = \left[\mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \right]^{-1} \mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{y}. \quad (4.10)$$

En remplaçant cette valeur de $\boldsymbol{\theta}$ dans (4.9), le problème d'optimisation que l'on cherche à résoudre est finalement

$$\arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} R_3(\boldsymbol{\alpha}) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \left\{ \|\mathbf{y} - \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \left[\mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \right]^{-1} \mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{y}\|^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0 \right\}, \quad (4.11)$$

où \mathbf{A}^T désigne la matrice transposée conjuguée. Une particularité de cette formulation réside dans l'utilisation de contraintes de parcimonie sur le vecteur $\boldsymbol{\alpha}$. Le problème d'optimisation associé est non-linéaire, non convexe, et NP-difficile. Sa résolution repose donc sur des approximations ou des heuristiques.

Des méthodes itératives spécifiques ont été développées dans le cas linéaire pour résoudre des problèmes d'optimisation avec contraintes de parcimonie. Les algorithmes de seuillage dur itératif (ou Iterative Hard Thresholding, IHT) en sont un exemple et ont notamment été proposés pour

résoudre des problèmes de reconstruction à partir de mesures compressées [103]. À chaque itération, un pas de descente de gradient est appliqué sur le terme d'attache aux données, puis un opérateur proximal défini ici par le seuillage dur (ou hard thresholding), i.e.

$$\text{prox}_{\text{hard}}(\mathbf{z}, \mu, t) = \begin{cases} z_i & \text{si } |z_i| - \mu t \geq 0 \quad \forall i = 1, \dots, N_{\text{D}} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

est appliqué sur le vecteur \mathbf{z} obtenu après la descente de gradient. Le paramètre μ contrôle la régularisation parcimonieuse alors que le paramètre t contrôle la descente de gradient. À la fin de l'opération proximale, seuls les coefficients les plus significatifs (avec un niveau de parcimonie K fixé) sont conservés. Il a été démontré [103] dans le cas linéaire que sous des hypothèses raisonnables sur le dictionnaire, (telles que la propriété d'isométrie restreinte), ces algorithmes fournissent des garanties d'erreur proches de l'optimal, tout en restant robustes au bruit. Leur simplicité de mise en œuvre, leur faible coût computationnel et leur capacité à s'adapter à de grands volumes de données en font des outils puissants pour l'approximation parcimonieuse.

Une autre méthode pour obtenir une solution approchée du problème (4.11) consiste à le relâcher en utilisant la norme ℓ_1 :

$$\arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} R_4(\boldsymbol{\alpha}) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \left\{ \|\mathbf{y} - \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \left[\mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \right]^{-1} \mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{y}\|^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_1 \right\}. \quad (4.12)$$

L'utilisation de la norme ℓ_1 comme terme de régularisation permet d'obtenir un problème convexe, ouvrant ainsi la voie à des garanties théoriques solides en termes de convergence et de performance. Cette relaxation favorise également des solutions parcimonieuses, tout en facilitant leur calcul. L'opérateur proximal dans ce contexte, associé à cette norme ℓ_1 , est défini par le seuillage doux (soft-thresholding), i.e.

$$\text{prox}_{\text{soft}}(\mathbf{z}, \mu, t) = \text{sign}(z_i) \max(|z_i| - \mu t, 0) \quad \forall i = 1, \dots, N_{\text{D}}.$$

Cet opérateur a été formellement décrit dans [104], dans le cadre de l'algorithme FISTA (Fast Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm). Cet algorithme a démontré son efficacité dans plusieurs applications, notamment en défloutage d'images ("image deblurring"), où il a permis d'obtenir des résultats de haute qualité tout en assurant une convergence rapide [105]. Un inconvénient bien connu de cette méthode est l'introduction d'un biais de contraction ("shrinking bias"), qui peut dégrader la qualité des solutions. Par ailleurs, comme avec l'opérateur de seuillage dur, cette approche nécessite le choix des hyperparamètres μ et t qu'il faut ajuster pour obtenir un nombre donné de composantes non nulles. Pour contourner cette difficulté, d'autres approches de relaxation ont été proposées, en particulier via l'utilisation d'enveloppes quadratiques [50]. La régularisation utilisant ces enveloppes permet d'éviter le biais de contraction tout en favorisant une représentation parcimonieuse précise [51]. Elles ont fait l'objet d'analyses théoriques approfondies, et ont été appliquées à la définition de nouvelles régularisations permettant un meilleur contrôle de pénalités mal posées ou dans des contextes d'inversion mal conditionnés, tels que la résolution de systèmes d'équations sous-déterminés en compressed sensing [51], la reconstruction de matrices de faible rang à partir de mesures bruitées [52] ou encore en imagerie spectrale compressée [54]. Toutefois, le réglage des paramètres associés reste délicat, en particulier dans les cas non-linéaires, ce qui limite leurs usages dans ce contexte. Ces méthodes ne seront donc pas approfondies ici et sont laissées pour des travaux ultérieurs.

Dans la suite, nous nous concentrerons sur une approche combinant la projection de variables et la descente de gradient proximal, que nous désignerons par SVP (Sparse Variable Projection). Sa mise en œuvre est présentée en Annexe A, dans l'Algorithme 10. Cette méthode nécessite le calcul du gradient du terme d'attache aux données par rapport au vecteur parcimonieux $\boldsymbol{\alpha}$, défini par

$$\nabla_{\boldsymbol{\alpha}} \left\| \mathbf{y} - \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \left[\mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \right]^{-1} \mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{y} \right\|^2.$$

Le calcul de ce gradient est explicité en Annexe B. L'approche par projection de variables suppose donc que les fonctions non-linéaires considérées sont différentiables et que la matrice $\mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})$ est inversible et bien conditionnée, ce qui peut ne pas être le cas et donc engendrer des instabilités numériques. De plus, le problème posé est largement non-convexe et compliqué à résoudre, notamment avec l'introduction des contraintes de parcimonie. Il n'y a donc théoriquement pas de garantie de converger dans tous les contextes. Finalement, cette approche est restreinte aux problèmes non-linéaires à variables séparables, ce qui limite son applicabilité à des cas plus généraux pouvant survenir dans certaines applications. L'objectif de la section suivante est donc de proposer une nouvelle méthode, qui évite cette inversion de matrice et peut être appliquée à une autre classe de non-linéarités, en particulier lorsque les variables ne sont plus séparables.

4.2.2 Non-linéarités non-séparables et bijectives

Les non-linéarités étudiées dans la littérature comme les fonctions polynomiales sont souvent supposées séparables, ce qui permet de simplifier l'analyse et le calcul. Toutefois, dans de nombreuses applications réelles, les non-linéarités rencontrées ne vérifient pas cette propriété de séparabilité. Dans cette partie, nous nous plaçons dans un cadre général de non-linéarités non séparables, et nous proposons une nouvelle approche de résolution de (4.6) adaptée à cette situation. La méthode repose sur l'hypothèse que la non-linéarité considérée est bijective, une propriété exploitée dans la phase d'optimisation. L'approche utilisée est itérative et alterne entre l'estimation du vecteur $\boldsymbol{\theta}$ et l'utilisation d'une extension de la formulation EXIP [100] pour l'estimation de $\boldsymbol{\alpha}$ sous contraintes de parcimonie. La première étape consiste à estimer le vecteur $\boldsymbol{\theta}$ en supposant que $\boldsymbol{\alpha}$ est connu :

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} \triangleq \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} R_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}) = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} \|\mathbf{y} - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2. \quad (4.13)$$

Résoudre ce problème revient donc à estimer les paramètres de la non-linéarité, en supposant que la structure de la fonction associée est connue. En pratique, la résolution est effectuée à l'aide d'un algorithme de moindres carrés non-linéaires (tel que celui de Levenberg-Marquardt [106] utilisé dans la fonction `lsqnonlin` de MATLAB). La seconde étape consiste à estimer le vecteur $\boldsymbol{\alpha}$ en supposant que $\boldsymbol{\theta}$ est connu. Le problème d'optimisation associé est :

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} \triangleq \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} R_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha}) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \{ \|\mathbf{y} - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0 \}. \quad (4.14)$$

Ce problème est difficile à résoudre, non seulement en raison de la présence de la non-linéarité, mais également à cause des contraintes de parcimonie imposées sur la solution. La méthode proposée pour estimer $\boldsymbol{\alpha}$ est basée sur une version étendue de la formulation EXIP (EXtended Invariance Principle) introduite et étudiée par Stoica et al. [100] qui ajoute des contraintes de parcimonie sur la solution. La formulation EXIP offre un cadre permettant de reformuler la fonction de coût, de manière à simplifier la résolution du problème d'optimisation sous-jacent.

Proposition (EXIP). *Supposons qu'il existe une application $g : \mathbb{R}^{N_D} \rightarrow \mathbb{R}^Q$ telle que, pour tout $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{N_D}$,*

$$\boldsymbol{\beta} = g(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{R}^Q, \quad (4.15)$$

et que l'estimateur de $\boldsymbol{\beta}$ construit avec un échantillon de taille N noté $\hat{\boldsymbol{\beta}}_N$ vérifie l'invariance asymptotique suivante :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \hat{\boldsymbol{\beta}}_N = \lim_{N \rightarrow +\infty} g(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_N), \quad (4.16)$$

c'est-à-dire que lorsque la taille N de l'échantillon tend vers l'infini, estimer $\boldsymbol{\beta}$ ou estimer $\boldsymbol{\alpha}$ puis appliquer la fonction g revient au même. Une approximation de l'estimateur de $\boldsymbol{\alpha}$ est donnée par :

$$\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_N = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} [\hat{\boldsymbol{\beta}}_N - g(\boldsymbol{\alpha})]^T R''_{\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_N) [\hat{\boldsymbol{\beta}}_N - g(\boldsymbol{\alpha})], \quad (4.17)$$

où $R_{\beta}(\beta) = \|\mathbf{y} - f_{\theta} \circ \beta\|_2^2$ et $R''_{\beta}(\hat{\beta}) = \nabla^2 R_{\beta}(\hat{\beta})$ est la matrice hessienne (matrice des dérivées secondes) de ce critère par rapport à β , et évaluée en $\hat{\beta}$. En particulier, si $R''_{\beta}(\hat{\beta})$ ne dépend pas de β , alors l'estimateur indirect $\hat{\alpha}_N$ est identique à $\hat{\alpha}_N$ et il n'y a alors plus aucune approximation.

Dans notre problème, on cherche à estimer le vecteur α . En pratique, on estime tout d'abord le vecteur transformé $\beta = g(\alpha)$, où l'application g est définie par $g(\alpha) = \Psi\alpha$ car cette estimation est plus facile et mieux conditionnée. A partir de l'estimation $\hat{\beta}$, on utilise la proposition EXIP afin de revenir à α , tout en tenant compte de l'information sur la qualité de cette estimation (via une métrique quadratique pondérée par la hessienne). On montre par ailleurs que la matrice hessienne s'écrit dans notre cas (voir Annexe C) :

$$R''_{\beta}(\hat{\beta}) = \begin{bmatrix} 2 \left(\frac{\partial f_{\theta}}{\partial \beta_1} \right)^2 & & & \\ & \ddots & & \\ & & & 2 \left(\frac{\partial f_{\theta}}{\partial \beta_Q} \right)^2 \end{bmatrix}_{\beta=\hat{\beta}}. \quad (4.18)$$

La formulation EXIP fournit une manière rigoureuse de faire cette inversion, et elle est asymptotiquement équivalente à une estimation directe de α quand le nombre d'observations N est grand. Nous devons ajouter à cette formulation des contraintes de parcimonie (voir (4.14)), ce qui conduit au problème suivant :

$$\hat{\alpha} = \arg \min_{\alpha} \left\{ \left[\hat{\beta} - g(\alpha) \right]^T R''_{\beta}(\hat{\beta}) \left[\hat{\beta} - g(\alpha) \right] + \mu \|\alpha\|_0 \right\}. \quad (4.19)$$

Notons la présence du vecteur $\hat{\beta}$ dans cette équation qui représente le signal en amont de la non-linéarité, c'est-à-dire avant l'application de la transformation non-linéaire. Ce vecteur est estimé à partir des observations \mathbf{y} en résolvant un problème de recherche de zéro sur la fonction : $\beta \rightarrow \mathbf{y} - f_{\theta} \circ \beta$. Cette étape repose sur l'hypothèse de bijectivité de la non-linéarité, condition nécessaire pour garantir l'existence et l'unicité de l'inverse. Il est notamment important de s'assurer lors de l'estimation du paramètre θ que la fonction obtenue est bien bijective (i.e. strictement croissante ou décroissante) sur l'ensemble de définition. Après avoir estimé le vecteur β , estimer α revient à résoudre le problème inverse linéaire (4.19), ce qui peut être effectué avec les méthodes présentées dans le chapitre 2 (i.e. OMP et LASSO). Notons qu'il serait théoriquement possible d'utiliser d'autres approches, notamment des algorithmes de type descente de gradient avec opérateur proximal (comme les seuillages doux ou durs introduits précédemment), en les appliquant ici dans un cadre sans non-linéarité afin de retrouver le vecteur α . Toutefois, leur application dans ce contexte se heurte à une difficulté majeure : le coût computationnel élevé associé à leur caractère itératif, qui viendrait s'ajouter à une méthode d'estimation déjà itérative par ailleurs. Une telle stratégie conduirait à une complexité algorithmique trop importante, raison pour laquelle cette piste n'est pas explorée ici et est laissée à de futurs travaux.

Dans la suite, la méthode proposée, qui consiste à itérer entre estimation des paramètres θ de la non-linéarité, du vecteur intermédiaire corrigé de la non-linéarité β et du vecteur parcimonieux α , sera désignée par EXIPRIM, acronyme de EXtended Invariance Principle based method for paRameterized nonlInear inverse problem through sparse Modeling. Celle-ci est résumée dans l'Algorithme 11 en Annexe A.. Dans cet algorithme, la notation "SR" représente soit l'algorithme OMP dans le cas de la résolution avec la norme ℓ_0 , soit l'algorithme LASSO, dans le cas de la résolution avec la norme ℓ_1 . La méthode EXIPRIM constitue une stratégie prometteuse pour traiter des problèmes inverses non-linéaires complexes sous contraintes de parcimonie et elle est basée sur des fondements théoriques (EXIP). Toutefois, il est important de noter que si les non-linéarités ne sont pas bijectives, il n'y a pas d'unicité de la solution et aucune méthode ne peut donner une solution unique car elle n'existe pas. L'hypothèse est faite que les non-linéarités considérées sont bijectives. De plus, comme dans le cas des non-linéarités séparables, le problème est non convexe et demeure

difficile à résoudre numériquement. Dans ce contexte, il n'existe aucune garantie de convergence vers un minimum global, ce qui limite théoriquement la robustesse de la méthode mais aussi de toute autre méthode. Même si cette approche permet de résoudre des problèmes plus complexes que lorsque les non-linéarités sont séparables et de s'affranchir de l'inversion de la matrice $\mathbf{A}^T(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})$, des erreurs d'estimation peuvent en pratique survenir à chaque étape du processus, notamment : 1) lors de l'estimation du paramètre $\boldsymbol{\theta}$, où la non-linéarité estimée doit être bijective sur l'ensemble de définition considéré, 2) lors de l'étape de reconstruction de $\boldsymbol{\beta}$, qui repose sur la résolution d'un problème de recherche de zéros susceptible d'introduire des imprécisions et enfin 3) lors de l'estimation du vecteur parcimonieux $\boldsymbol{\alpha}$ où la solution obtenue peut s'éloigner de l'optimum globale.

4.3 Préconditionnement des dictionnaires

Le phénomène de mauvais conditionnement peut être présent dans de multiples contextes tels que les problèmes de démélange spectral [101] ou d'acquisition comprimée [107], où la présence de dictionnaires mal conditionnés est fréquente. Si l'estimation correcte du vecteur parcimonieux n'est pas possible dans le cadre linéaire — considéré comme le cas le plus simple — elle devient d'autant plus délicate dans le contexte non-linéaire. C'est pourquoi l'étude du preconditionnement est d'abord menée dans cette partie dans le cadre linéaire avant d'être étendue au cas non-linéaire.

4.3.1 Cas linéaire

Dans cette partie, le modèle considéré ne prend pas en compte de non-linéarités, i.e. la fonction $f_{\boldsymbol{\theta}}$ est définie comme étant la fonction identité. On cherche à résoudre le problème suivant en prenant en compte des problèmes de conditionnement de $\boldsymbol{\Psi}$:

$$\arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \|\mathbf{y} - \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha}\|_2^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0, \quad (4.20)$$

avec $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^Q$, $\boldsymbol{\Psi} \in \mathbb{R}^{Q \times N_D}$ et $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{N_D}$ le vecteur parcimonieux avec K atomes non nuls.

Un mauvais conditionnement des dictionnaires utilisés peut altérer l'estimation du support, et du vecteur $\boldsymbol{\alpha}$. Schnass et al. ont introduit dans [108] le concept de dictionary sensing. Il s'agit d'une modification des algorithmes gloutons tels que les algorithmes MP ou OMP, permettant d'améliorer la représentation parcimonieuse d'un signal dans un dictionnaire redondant (i.e. $Q < N_D$). La propriété à la base de la plupart des théorèmes concernant les algorithmes gloutons est la croissance lente de la cohérence cumulative, aussi appelée fonction de Babel $\mu_1(K, \boldsymbol{\Psi})$, du dictionnaire $\boldsymbol{\Psi}$, définie par :

$$\mu_1(K, \boldsymbol{\Psi}) = \max_{i \in I} \max_{|J|=K, i \notin J} \sum_{j \in J} |\langle \boldsymbol{\Psi}_i, \boldsymbol{\Psi}_j \rangle|. \quad (4.21)$$

Cette fonction donne une indication de la proximité du dictionnaire à une base orthonormée.

Les algorithmes gloutons peuvent être formellement décomposés en deux étapes : une étape de sensing, où l'algorithme tente d'identifier les bons atomes du support, et une étape de reconstruction. L'idée du dictionary sensing est de modifier la partie sensing en utilisant un nouveau dictionnaire $\boldsymbol{\Gamma}$ à la place de $\boldsymbol{\Psi}$, permettant d'identifier plus facilement les bonnes composantes. Cette nouvelle matrice contient le même nombre d'atomes que la matrice originale, ce qui permet une correspondance terme à terme entre les deux dictionnaires, tout en offrant un problème bien mieux conditionné.

Théorème [108]. *Soit \mathbf{y} un signal exactement K -parcimonieux dans $\boldsymbol{\Psi}$, i.e. $\mathbf{y} = \sum_{i \in I} \alpha_i \boldsymbol{\psi}_i$ avec le cardinal de I égal à K . Il est possible de récupérer une composante $\boldsymbol{\psi}_i$ du vrai support avec la matrice de sensing $\boldsymbol{\Gamma}$ si :*

$$\frac{|\alpha_i|}{\|\boldsymbol{\alpha}\|_{\infty}} > \frac{1}{\beta} (\tilde{\mu}_1(K) + \tilde{\mu}_1(K-1)) := \nu(K, \boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{\Gamma}), \quad (4.22)$$

avec

$$\tilde{\mu}_1(K, \Psi, \Gamma) := \max_{i \in I} \max_{|J|=K, i \notin J} \sum_{j \in J} |\langle \gamma_i, \Psi_j \rangle|, \quad (4.23)$$

$$\beta(\Psi, \Gamma) := \min_i |\langle \gamma_i, \Psi_i \rangle|. \quad (4.24)$$

On cherche alors le dictionnaire Γ solution du problème suivant :

$$\tilde{\Gamma} = \arg \min_{\Gamma} \nu(K, \Psi, \Gamma). \quad (4.25)$$

Ainsi, le problème de recherche d'une matrice de sensing pour un dictionnaire Ψ revient à trouver un dictionnaire ayant une cohérence cumulative faible. Ce problème peut être reformulé comme la recherche de la matrice de Gram $\mathbf{G} = \Gamma^* \Psi$ la plus proche de la matrice de Gram idéale. Cette matrice de Gram idéale peut être définie comme la matrice possédant des 1 sur la diagonale et des coefficients hors diagonale de valeur absolue $\mu = \sqrt{\frac{N_D - Q}{Q(N_D - 1)}}$. Elle est obtenue en s'appuyant sur le théorème suivant :

Théorème cohérence de dictionnaire [108]. Soit Ψ un dictionnaire de N_D atomes de dimension Q . Si $K^2 < N_D - 1$ alors :

$$\mu_1(K) \geq K \sqrt{\frac{N_D - Q}{Q(N_D - 1)}}, \quad (4.26)$$

l'égalité ayant lieu si et seulement si le dictionnaire est une "tight frame" à vecteurs unitaires équiangulaires, e.g. si le dictionnaire est une généralisation d'une base orthonormale.

On définit les deux ensembles :

$$\mathcal{G} := \{\mathbf{G} = \Gamma^T \Psi, \Gamma \in \mathbb{R}^{Q \times N_D}\},$$

$$\mathcal{H} := \{\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N_D \times N_D} \text{ où } \mathbf{H}_{i,i} = 1 \text{ et } |\mathbf{H}_{i,j}| \leq \mu \ \forall i \neq j\},$$

et on peut alors écrire le problème (4.25) comme :

$$\min_{\Gamma} \|\mathbf{G} - \mathbf{H}\|_F \text{ st } \mathbf{G} \in \mathcal{G}, \mathbf{H} \in \mathcal{H}. \quad (4.27)$$

Pour résoudre ce problème, on fixe un nombre d'itérations, on initialise $\mathbf{G} = \Psi^T \Psi$ et à chaque itération, on effectue :

1. Trouver $\mathbf{H} \in \mathcal{H}$ minimisant $\|\mathbf{G} - \mathbf{H}\|_F$,

2. Trouver $\mathbf{G} \in \mathcal{G}$ minimisant $\|\mathbf{G} - \mathbf{H}\|_F$.

On récupère ensuite le dictionnaire de sensing à la dernière itération en effectuant l'opération : $\Gamma^T = \tilde{\mathbf{G}} \Psi^T$. Plus d'informations concernant l'implémentation de cette méthode peuvent être trouvées dans [108]. On peut finalement appliquer cette matrice aux algorithmes gloutons tels que l'algorithme OMP, en modifiant la partie sensing (la recherche du support). Après avoir effectué les initialisations $\mathbf{a} = \mathbf{0}$, $\mathbf{r} = \mathbf{y}$ et choisi une liste des indices du support $I = \emptyset$, à chaque itération, on effectue les opérations suivantes :

1. Estimation du support en utilisant la matrice Γ :

$$i = \arg \max_{j \in J} |\langle \gamma_j, \mathbf{r} \rangle|$$

2. Reconstruction :

$$I = I \cup i, \quad (4.28)$$

$$\mathbf{a} = \Psi_I \Psi_I^T \mathbf{y}, \quad (4.29)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{a}. \quad (4.30)$$

La méthode ainsi obtenue permettant d'estimer le vecteur parcimonieux sera notée *OMP_sens*.

D'autres méthodes, basées sur des techniques de préconditionnement, ont été proposées pour obtenir de meilleurs résultats [107], en particulier dans le contexte de l'acquisition comprimée. Ces méthodes définissent une matrice de préconditionnement $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$, supposée inversible, telle que le dictionnaire résultant $\mathbf{M}\Psi$ soit incohérent. En multipliant les deux membres du problème d'optimisation (4.20) par \mathbf{M} , on obtient :

$$\arg \min_{\alpha} \|\mathbf{M}\mathbf{y} - \mathbf{M}\Psi\alpha\|_2^2 + \mu\|\alpha\|_0. \quad (4.31)$$

Nous proposons une méthode pour construire la matrice de préconditionnement, applicable à tout type de matrice (i.e. Q n'est pas nécessairement inférieur à N_D), basée sur la décomposition en valeurs singulières réduite (RSVD) de Ψ :

$$\Psi = \mathbf{U}_r \mathbf{S}_r \mathbf{V}_r^T. \quad (4.32)$$

La RSVD a par exemple été utilisée en audio dans [109] notamment afin de supprimer les distorsions des signaux. Elle permet une représentation plus compacte et, comparée à la SVD complète, est plus efficace en termes de calcul [110]. Dans notre contexte, cette méthode est également mieux adaptée aux problèmes d'inversion car mieux conditionnée. Ainsi, en définissant la matrice \mathbf{M} comme suit :

$$\mathbf{M} = \mathbf{U}_r [(\mathbf{U}_r \mathbf{S}_r)^T \mathbf{U}_r \mathbf{S}_r]^{-1} (\mathbf{U}_r \mathbf{S}_r)^T, \quad (4.33)$$

on remarque que cette matrice peut être appliquée dans les cas sous-complet (i.e. $N_D > Q$) comme sur-complet (i.e. $Q > N_D$). De plus, l'inversion est mieux conditionnée. Enfin, en posant $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{M}^T \mathbf{M}\Psi$, on a :

$$\mathbf{\Gamma}^T \Psi = \Psi^T \mathbf{M}^T \mathbf{M}\Psi, \quad (4.34)$$

$$= \mathbf{V}_r (\mathbf{U}_r \mathbf{S}_r)^T (\mathbf{U}_r \mathbf{S}_r) [(\mathbf{U}_r \mathbf{S}_r)^T \mathbf{U}_r \mathbf{S}_r]^{-1} \mathbf{U}_r^T \mathbf{U}_r [(\mathbf{U}_r \mathbf{S}_r)^T \mathbf{U}_r \mathbf{S}_r]^{-1} (\mathbf{U}_r \mathbf{S}_r)^T \mathbf{U}_r \mathbf{S}_r \mathbf{V}_r^T \quad (4.35)$$

$$= \mathbf{V}_r \mathbf{U}_r^T \mathbf{U}_r \mathbf{V}_r^T. \quad (4.36)$$

On retrouve ainsi une matrice de Gram pour $\mathbf{M}\Psi$. Cette méthode sera notée *OMP_precon*. Notons que, dans le cas de l'utilisation d'un dictionnaire de sensing, comme lors d'un préconditionnement par la matrice \mathbf{M} , les observations sont multipliées par un nouveau dictionnaire. Ainsi, si ces observations sont bruitées, le bruit peut lui aussi être amplifié, ce qui constitue une limitation importante de ces approches.

4.3.2 Cas non-linéaire

Lorsqu'il s'agit de transposer les approches précédemment développées au cas non-linéaire, en particulier à la méthode décrite dans (4.31), une adaptation du problème s'avère nécessaire. L'utilisation d'un dictionnaire de type sensing, tel que présenté en section 4.3.1, peut être intégrée au sein de l'algorithme EXIPRIM. Cette intégration consiste à substituer l'algorithme OMP standard avec pondération par sa version modifiée prenant en compte le dictionnaire de sensing, au sein de l'algorithme 11, dans lequel la matrice $\mathbf{\Gamma}$ est supposée préalablement calculée avec la même étape de pondération.

La seconde approche consiste à préconditionner le problème. Contrairement à la méthode basée sur le dictionnaire de sensing, qui agit uniquement sur le processus de reconstruction sans affecter les observations, le préconditionnement implique une transformation directe des observations. Plus précisément, dans le cadre non-linéaire, les observations sont multipliées par la matrice de préconditionnement \mathbf{M} , ce qui modifie le problème d'optimisation. Le préconditionnement revient ainsi à considérer un vecteur d'observation modifié, noté $\tilde{\mathbf{y}}$:

$$\arg \min_{(\alpha, \theta)} \|\tilde{\mathbf{y}} - f_{\theta} \circ (\mathbf{M}\Psi\alpha)\|_2^2 + \mu\|\alpha\|_0. \quad (4.37)$$

Il s'agit alors de déterminer un vecteur $\tilde{\mathbf{y}}$ tel que la résolution du problème (4.37) soit équivalente au problème (4.6) rappelé ci-dessous :

$$\arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \{ \|\mathbf{y} - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0 \}.$$

Ce problème consiste à chercher un vecteur $\boldsymbol{\alpha}$ parcimonieux et un vecteur $\boldsymbol{\theta}$ tels que

$$\mathbf{y} \approx f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha}) \text{ soit } \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha} = f_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \circ \mathbf{y}. \quad (4.38)$$

En revanche, le problème (4.37) consiste à chercher un vecteur $\boldsymbol{\alpha}$ parcimonieux et un vecteur $\boldsymbol{\theta}$ tels que :

$$\tilde{\mathbf{y}} \approx f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{M}\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha}). \quad (4.39)$$

En remplaçant l'expression de $\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha}$ issue de (4.38) dans (4.39), on obtient

$$\tilde{\mathbf{y}} \approx f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{M}f_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \circ \mathbf{y}),$$

ce qui conduit à la recherche de $\boldsymbol{\alpha}$ et de $\boldsymbol{\theta}$ solutions du problème avec préconditionnement suivant :

$$\arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \|f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{M}f_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \circ \mathbf{y}) - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{M}\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu \|\boldsymbol{\alpha}\|_0. \quad (4.40)$$

Une limitation importante de cette formulation réside dans l'inversion de la fonction bijective $f_{\boldsymbol{\theta}}$. Cette inversion peut être effectuée de manière analytique et exacte, ce qui représente le meilleur scénario car cela limite les erreurs d'inversion ajoutées. Elle peut aussi se faire de façon itérative, via des méthodes numériques (Newton-Raphson, gradient, etc.) lorsque l'inverse analytique est compliquée à calculer. Toutefois, cette approche est plus coûteuse, peut perturber la convergence de l'algorithme et entraîner des erreurs.

Cas particulier où $f_{\boldsymbol{\theta}}$ est un polynôme d'ordre 1

Lorsque la fonction $f_{\boldsymbol{\theta}}$ est un polynôme d'ordre 1, on peut écrire :

$$\mathbf{y} = f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha}) \Leftrightarrow \mathbf{y}_q = \theta_0 + \theta_1 \boldsymbol{\Psi}_q^T \boldsymbol{\alpha}, \quad \forall q \in 1, \dots, Q, \quad (4.41)$$

et

$$\tilde{\mathbf{y}} = f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{M}f_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \circ \mathbf{y}) \Leftrightarrow \tilde{\mathbf{y}}_q = \theta_0 + \theta_1 \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \boldsymbol{\Psi}_j \boldsymbol{\alpha}, \quad \forall q \in 1, \dots, Q. \quad (4.42)$$

Si on pose $\mathbf{x}_q = \boldsymbol{\Psi}_q^T \boldsymbol{\alpha}$, comme $\mathbf{y}_q = \theta_0 + \theta_1 \mathbf{x}_q \Leftrightarrow \mathbf{x}_q = \frac{\mathbf{y}_q - \theta_0}{\theta_1}$, si on injecte cette expression dans (4.42), on obtient :

$$\tilde{\mathbf{y}}_q = \theta_0 + \theta_1 \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \boldsymbol{\Psi}_j \boldsymbol{\alpha}, \quad (4.43)$$

$$= \theta_0 + \theta_1 \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \frac{\mathbf{y}_j - \theta_0}{\theta_1}, \quad (4.44)$$

$$= \theta_0 \left(1 - \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \right) + \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \mathbf{y}_j. \quad (4.45)$$

On peut alors résoudre le problème d'optimisation (4.40) comme suit. Si on pose $R(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}) = \|\tilde{\mathbf{y}} - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{M}\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu\|\boldsymbol{\alpha}\|_0$, on a :

$$\arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} R(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}) = \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \|\tilde{\mathbf{y}} - f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\mathbf{M}\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu\|\boldsymbol{\alpha}\|_0, \quad (4.46)$$

$$= \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \sum_{q=1}^Q \left| \tilde{\mathbf{y}}_q - \theta_0 - \theta_1 \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \boldsymbol{\Psi}_j \boldsymbol{\alpha} \right|^2 + \mu\|\boldsymbol{\alpha}\|_0, \quad (4.47)$$

$$= \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \sum_{q=1}^Q \left| \theta_0 \left(1 - \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \right) + \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \mathbf{y}_j - \theta_0 - \theta_1 \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \boldsymbol{\Psi}_j \boldsymbol{\alpha} \right|^2 + \mu\|\boldsymbol{\alpha}\|_0, \quad (4.48)$$

$$= \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \sum_{q=1}^Q \left| \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \mathbf{y}_j - \theta_0 \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} - \theta_1 \sum_{j=1}^Q \mathbf{M}_{q,j} \boldsymbol{\Psi}_j \boldsymbol{\alpha} \right|^2 + \mu\|\boldsymbol{\alpha}\|_0, \quad (4.49)$$

$$= \arg \min_{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta})} \|\mathbf{M}\mathbf{y} - \mathbf{M}f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu\|\boldsymbol{\alpha}\|_0. \quad (4.50)$$

On peut conclure que pour un polynôme d'ordre 1, résoudre le problème (4.1) revient à résoudre

$$\arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \|\mathbf{M}\mathbf{y} - \mathbf{M}f_{\boldsymbol{\theta}} \circ (\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha})\|_2^2 + \mu\|\boldsymbol{\alpha}\|_0. \quad (4.51)$$

Cette approximation sera employée lors de l'initialisation de l'algorithme EXIPRIM prenant en compte le préconditionnement et l'inversion de la fonction bijective dans la section 4.5.1. Le préconditionnement peut être appliqué avec la norme ℓ_0 , comme illustré précédemment via l'algorithme OMP, mais également avec la norme ℓ_1 , associée dans ce travail à l'algorithme LASSO. Les méthodes reposant sur le préconditionnement dans le cas non-linéaire seront désignées respectivement par *OMP_precon_inv* et *LASSO_precon_inv*.

Une dernière approche consiste à combiner le préconditionnement avec le dictionnaire de sensing. Dans ce cas, la phase de sensing de l'algorithme *OMP_sens* est modifiée en remplaçant la matrice $\boldsymbol{\Gamma}$ par le produit $\mathbf{M}\boldsymbol{\Psi}$. Le vecteur \mathbf{a} est initialisé à zéro, le résidu \mathbf{r} est fixé à \mathbf{y} , et la liste des indices du support est initialement vide, $I = \emptyset$. À chaque itération, les opérations suivantes sont réalisées :

1. Estimation du support en utilisant la matrice $\boldsymbol{\Gamma}$:

$$i = \arg \max_{j \in J} |\langle \gamma_j, \mathbf{M}\mathbf{r} \rangle|.$$

2. Reconstruction :

$$I = I \cup i, \quad (4.52)$$

$$\mathbf{a} = \boldsymbol{\Psi}_I \boldsymbol{\Psi}_I^T \mathbf{y}, \quad (4.53)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{a}. \quad (4.54)$$

Cette méthode peut également être appliquée avec les algorithmes OMP ou LASSO et sera désignée respectivement par *OMP_precon_LS* et *LASSO_precon_LS*.

4.4 Résultats numériques pour des données synthétiques

Dans cette partie, les données sont synthétiques et simulées suivant le modèle (4.4). Les méthodes proposées sont évaluées sur différents types de scénarios afin d'analyser leur comportement en fonction des caractéristiques du problème inverse. Les résultats obtenus concernent quatre variantes :

EXIPRIM et SVP, chacune combinée avec une régularisation ℓ_0 ou ℓ_1 . Les scénarios considérés explorent plusieurs types de non-linéarités (séparables (polynomiales) et non séparables) dans le but de comparer les performances des méthodes selon la structure de la non-linéarité. En parallèle, plusieurs niveaux de bruit blanc additif gaussien (définis par le rapport signal sur bruit (SNR)) sont introduits afin d'étudier la robustesse des différentes méthodes. Par ailleurs, différents dictionnaires sont considérés, notamment des ondelettes de Haar, des bases issues de la SVD d'un ensemble de gaussiennes, et des ondelettes de Gabor, afin d'étudier à la fois l'impact du choix du dictionnaire et celui de son conditionnement sur la qualité de la reconstruction. Pour chaque configuration, la matrice \mathbf{X} est générée aléatoirement suivant une loi normale centrée réduite, puis ses coefficients sont rendus positifs. Le vecteur $\boldsymbol{\theta}$ est également généré de manière aléatoire selon une loi gaussienne, sous contrainte de générer des non-linéarités adaptées au contexte (bijectives ou non). Enfin, le vecteur \mathbf{a} obtenu dépend des différents scénarios. Cette diversité de configurations permet une évaluation comparative approfondie des méthodes, en mettant en lumière les conditions dans lesquelles EXIPRIM ou SVP offrent les meilleures performances.

Dans les simulations, le nombre d'observations est fixé à $Q = 30$, le vecteur \mathbf{a} est de taille $N = 201$ et la taille du dictionnaire est $N_D = 15^1$. La valeur initiale du vecteur $\boldsymbol{\alpha}$ est le vecteur nul. Les algorithmes EXIPRIM - ℓ_1 (LASSO) nécessitent de choisir le paramètre de régularisation μ et le pas t . Cette initialisation dépend du scénario considéré. Plusieurs valeurs sont testées et les résultats correspondant aux meilleures performances sont conservés pour l'analyse. La performance des méthodes d'estimation est évaluée en utilisant l'erreur quadratique moyenne pour les 3 critères suivants :

- le résidu au niveau du terme d'attache aux données

$$r = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q (\mathbf{y}_i - f_{\boldsymbol{\theta}}([\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}]_i))^2, \quad (4.55)$$

- l'erreur d'estimation du vecteur cible $\mathbf{a} = \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\alpha}$

$$r_{\mathbf{a}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{a}_i - \hat{\mathbf{a}}_i)^2, \quad (4.56)$$

- l'erreur d'estimation des non-linéarités

$$r_{\text{NL}} = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q (f_{\boldsymbol{\theta}}(x_i) - \hat{f}_{\boldsymbol{\theta}}(x_i))^2, \quad \mathbf{x} = [\min(\mathbf{X}\mathbf{a}), \dots, \max(\mathbf{X}\mathbf{a})]^T. \quad (4.57)$$

4.4.1 Application à différentes non-linéarités

Dans ce scénario, il est supposé que le vecteur $\boldsymbol{\alpha}$ est parcimonieux de cardinalité $K = 4$. Le dictionnaire $\boldsymbol{\Phi}$ est construit à partir d'une décomposition en valeurs singulières (SVD) d'une matrice formée par plusieurs fonctions gaussiennes générées avec des moyennes et variances aléatoires. Dans un premier temps, il est supposé que les observations ne sont pas bruitées. Les non-linéarités étudiées dans cette section sont les suivantes :

- $f_{\boldsymbol{\theta}}^1(x) = \theta_2 x^2 + \theta_1 x + \theta_0$, $\boldsymbol{\theta} = [1, -2, -0.02]$ - non-linéarité non bijective mais séparable
- $f_{\boldsymbol{\theta}}^2(x) = \theta_2 x^2 + \theta_1 x + \theta_0$, $\boldsymbol{\theta} = [0.5, -0.7, 0.5]$ - non-linéarité bijective et séparable
- $f_{\boldsymbol{\theta}}^3(x) = \theta_3 x^3 + \theta_2 x^2 + \theta_1 x + \theta_0$, $\boldsymbol{\theta} = [1.10.50.70.5]$ - non-linéarité bijective et séparable
- $f_{\boldsymbol{\theta}}^4(x) = \theta_5 x^5 + \theta_4 x^4 \theta_3 x^3 + \theta_2 x^2 + \theta_1 x + \theta_0$, $\boldsymbol{\theta} = [2.5, 4, 0.5, 1.2, 3.5, 2]$ - non-linéarité bijective et séparable
- $f_{\boldsymbol{\theta}}^5(x) = \tanh(\theta_1 x) + \theta_0 x$, $\boldsymbol{\theta} = [0.1, 1]$ - non-linéarité bijective et non-séparable [98]
- $f_{\boldsymbol{\theta}}^6(x) = \theta_1 x^{\theta_0}$, $\boldsymbol{\theta} = [1.6, 200]$ - non-linéarité bijective et non-séparable.²

1. Le but étant de simuler un scénario sous-complet proche de celui utilisé pour les ISRFs

2. Ces non-linéarités peuvent provenir par exemple du modèle SIR (Susceptible Infected Removed) utilisé en épidémiologie [99]. Aussi, ce modèle est utilisé dans la loi de Marshall Parmler pour l'estimation du taux de précipitation [111].

Remarquons que pour les non-linéarités utilisées, il existe une indétermination d'échelle due à la multiplication entre les paramètres θ par \mathbf{a} . Il est donc supposé que le vecteur \mathbf{a} est normalisé et que $\sum_{i=1}^N \mathbf{a}_i = 1$. Après application des algorithmes EXIPRIM et SVP, la solution obtenue est normalisée.

La figure 4.1 illustre les résultats obtenus en termes de convergence (i.e. erreur en fonction du nombre d'itérations). Il apparaît que lorsque la fonction est polynomiale de degré $P = 2$ et non bijective, les méthodes considérées ne parviennent pas à fournir des estimations satisfaisantes, ce qui est attendu. Les meilleurs résultats sont obtenus avec la méthode SVP_ ℓ_0 . Cependant, il est notable que l'estimation obtenue par SVP_ ℓ_0 reste éloignée de la solution optimale, ce qui est moins attendu. Pour les autres cas étudiés, toutes les méthodes atteignent des erreurs proches de la précision machine, témoignant ainsi de leurs bonnes performances. Une autre observation importante concerne la méthode SVP_ ℓ_1 , qui présente les performances les plus faibles en termes d'erreur d'estimation. Cette méthode s'avère également plus complexe à mettre en œuvre en raison de la nécessité d'un ajustement précis des paramètres afin de garantir le bon niveau de parcimonie. En conséquence, cette méthode n'est pas retenue pour les expérimentations ultérieures.

Enfin, en termes de coût calculatoire, les méthodes EXIPRIM se révèlent plus rapides (voir Table 4.1), avec un nombre d'itérations nécessaires à la convergence nettement réduit, constituant un avantage supplémentaire. De plus, les méthodes EXIPRIM ne requièrent aucun réglage supplémentaire pour identifier correctement le nombre K d'atomes du support alors que les méthodes SVP sont plus compliquées.

TABLE 4.1 – Temps de simulation pour l'estimation d'un vecteur avec un polynôme de degré $P = 3$ et une cardinalité $K = 4$ selon les quatre méthodes (EXIPRIM_ ℓ_0 , EXIPRIM_ ℓ_1 , SVP_ ℓ_0 et SVP_ ℓ_1).

	Temps de simulation moyen sur 100 réalisations
EXIPRIM_ ℓ_0	1.29
EXIPRIM_ ℓ_1	2.48s
SVP_ ℓ_0	45.63
SVP_ ℓ_1	47.87

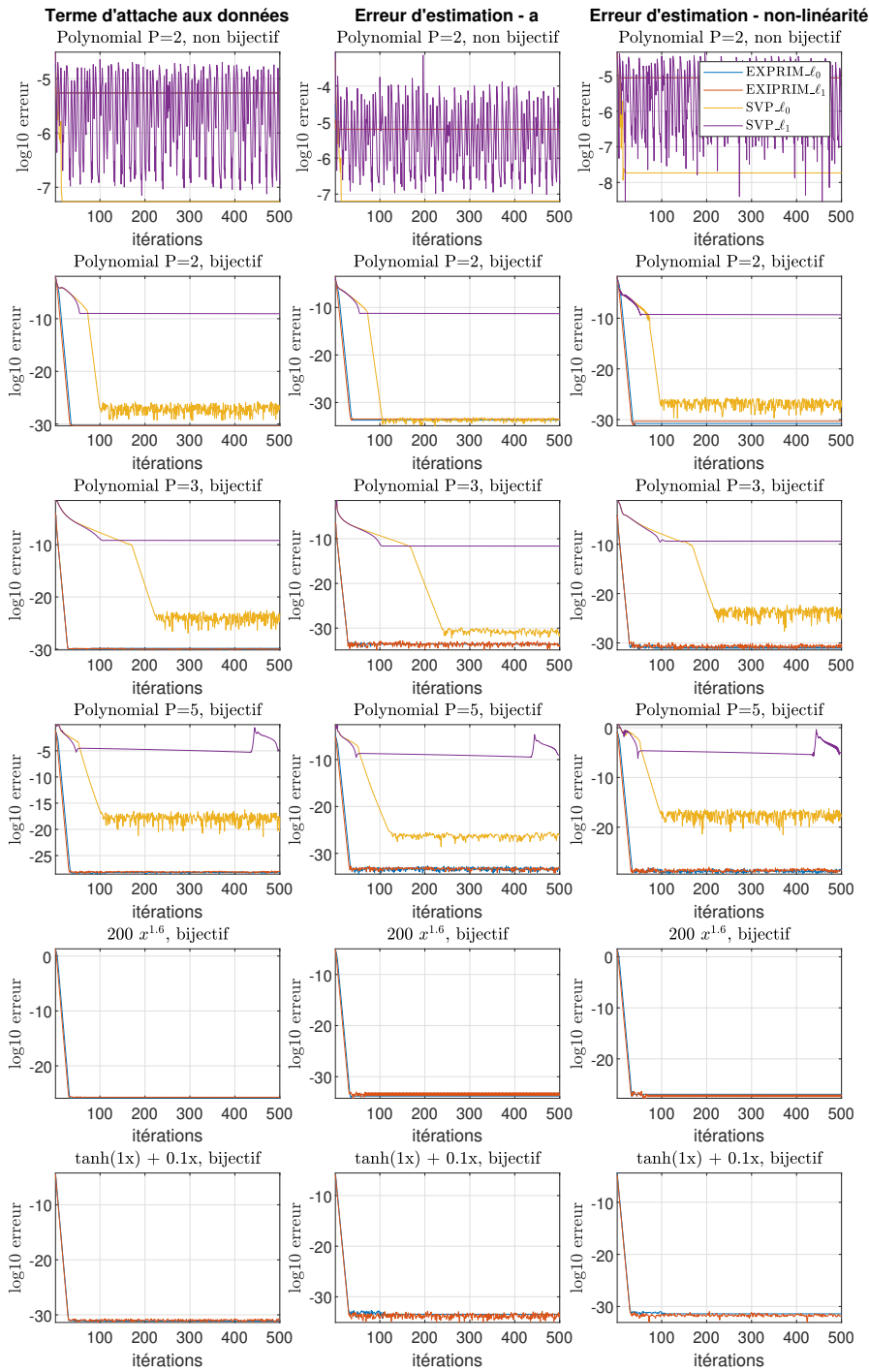


FIGURE 4.1 – Erreur d'estimation (terme d'attache aux données, vecteur \mathbf{a} et non-linéarité) en fonction de la non-linéarité considérée sans bruit additif.

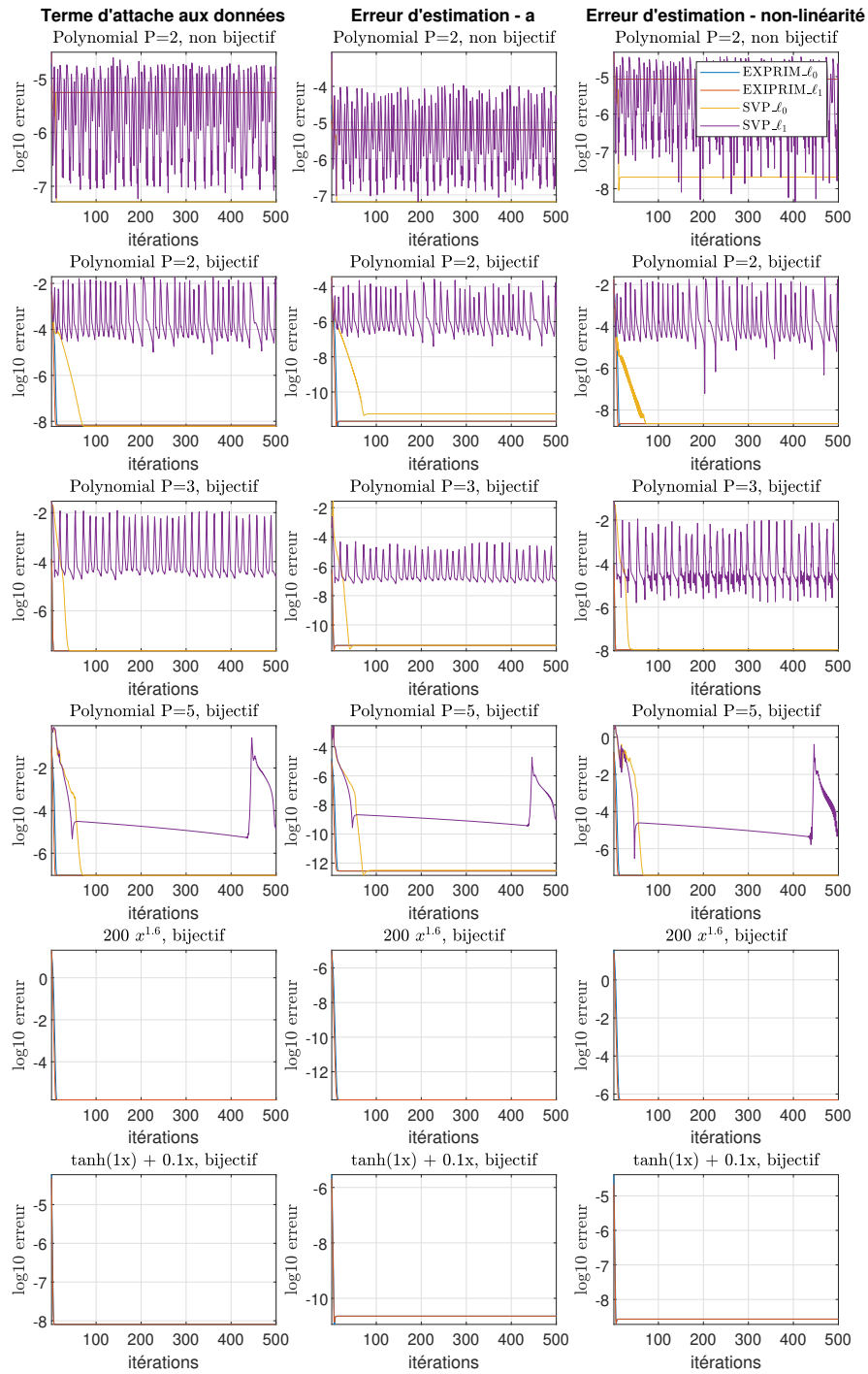


FIGURE 4.2 – Erreur d'estimation (terme d'attache aux données, vecteur \mathbf{a} et non-linéarité) en fonction de la non-linéarité considérée avec un bruit gaussien additif de SNR = 80.

4.4.2 Robustesse au bruit

Dans cette partie, on cherche à étudier la robustesse des méthodes développées à la présence de bruit. Le bruit ϵ ajouté aux observations est un bruit gaussien additif généré avec un rapport signal

sur bruit (SNR) spécifié, selon la relation suivante :

$$\epsilon = \sqrt{10^{-\text{SNR}/10} \frac{\|\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{n}_0\|_2}} \mathbf{n}_0, \quad (4.58)$$

où $\mathbf{n}_0 \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1})$ est de même dimension que \mathbf{y} . Le premier jeu de simulations est celui de la section 4.4.1 en ajoutant un bruit additif gaussien correspondant à un rapport signal sur bruit de $\text{SNR} = 80\text{dB}$. L'objectif est ici d'analyser l'impact du bruit sur l'estimation des paramètres des différentes non-linéarités. La figure 4.2 illustre les résultats obtenus, qui restent globalement similaires au cas sans bruit. La méthode SVP_{ℓ_1} fournit des résultats plus proches de la solution optimale que dans le cas sans bruit, mais elle rencontre toujours des difficultés à converger vers cette solution. En effet, elle se révèle moins performante que les trois autres méthodes, que ce soit en termes de minimisation de la fonction objective, d'estimation de la non-linéarité ou de reconstruction du vecteur d'intérêt \mathbf{a} . Cette limitation peut s'expliquer par l'utilisation de l'opérateur de seuillage doux (soft-thresholding), ainsi que par une forte sensibilité aux paramètres μ et t , dont le réglage s'avère particulièrement délicat dans ce contexte. En conséquence, cette méthode ne sera pas retenue dans la suite de l'étude.

Le second jeu de données considère la non-linéarité polynomiale de degré $P = 3$ définie précédemment. Une campagne de simulations est menée sur 100 réalisations indépendantes, chacune correspondant à un vecteur $\mathbf{\alpha}$ différent, un support généré aléatoirement, ainsi qu'un échantillon bruité distinct. L'objectif de cette étude est double : analyser l'impact de la présence de bruit sur l'erreur de reconstruction, et évaluer l'influence de la cardinalité du support sur les performances des trois méthodes considérées précédemment. Le bruit ϵ ajouté aux observations est le même bruit gaussien additif que celui étudié précédemment. La figure 4.3 présente les résultats obtenus pour 100 réalisations, en fonction de la cardinalité K du vecteur solution, avec un niveau de bruit fixé à $\text{SNR} = 80\text{dB}$. Il apparaît que la méthode EXPRIM fournit une estimation précise tant que la cardinalité reste inférieure ou égale à $K = 4$. Toutefois, lorsque la cardinalité augmente, la précision de l'estimation décroît, rendant la reconstruction plus difficile. En ce qui concerne la méthode SVP , les performances sont plus variables : selon les réalisations, des erreurs plus importantes sont observées, et la probabilité d'obtenir une estimation exacte du support diminue significativement à mesure que K augmente. La figure 4.3 montre que les méthodes de type SVP commettent plus fréquemment des erreurs, même pour des cardinalités modérées ($K = 2$ à $K = 4$), tandis que les approches basées sur EXPRIM conservent de très bonnes performances, en moyenne, même pour des cardinalités plus élevées, bien qu'elles ne soient pas optimales dans tous les cas. La figure 4.4 montre une analyse plus globale, dans laquelle à la fois la cardinalité K et le niveau de bruit (SNR) varient. Les résultats affichés correspondent à la moyenne des erreurs calculées sur les 100 réalisations précédentes, pour chaque couple (K, SNR) . Les trois figures du haut représentent l'évolution de l'erreur de reconstruction pour une cardinalité fixée à $K = 4$ lorsque le SNR augmente. Comme attendu, une amélioration progressive des performances est observée à mesure que le bruit diminue. Des erreurs très élevées sont notamment constatées pour un SNR de 10dB. Il est intéressant de noter que la méthode SVP semble plus robuste dans les régimes fortement bruités. Toutefois, à partir d'un SNR de 30dB, les méthodes EXPRIM reprennent l'avantage, en particulier celle basée sur la minimisation de la norme ℓ_0 , qui fournit les meilleurs résultats en termes de précision.

L'analyse de la sensibilité au bruit est également menée dans le cadre de l'étude comparative des différents dictionnaires (voir section 4.4.4 et tableau 4.2).

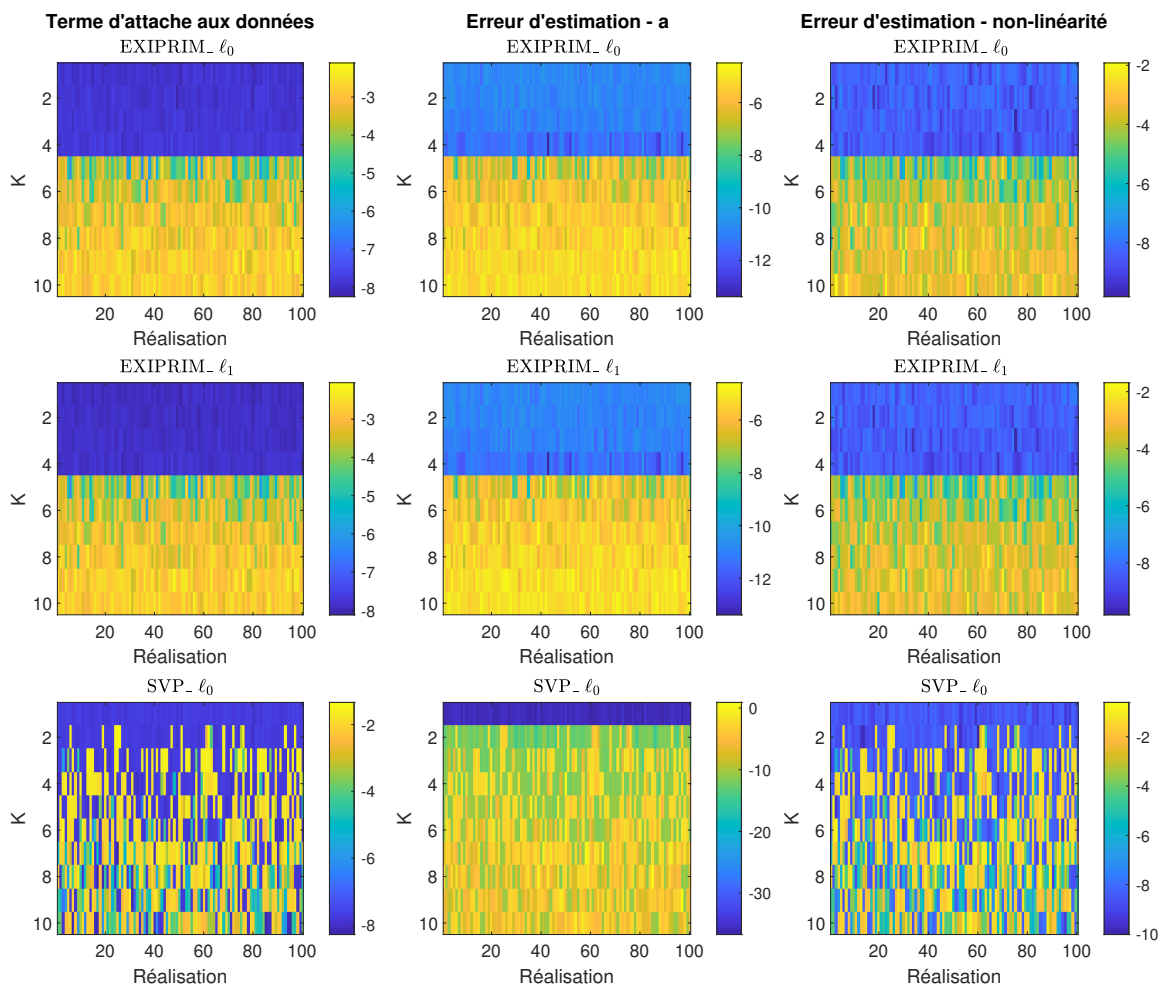


FIGURE 4.3 – Erreur d'estimation (terme d'attache aux données, vecteur \mathbf{a} et non-linéarité) en fonction de la réalisation et de la cardinalité pour un SNR fixé à 80 dB et la non-linéarité polynomiale de degré $P = 3$.

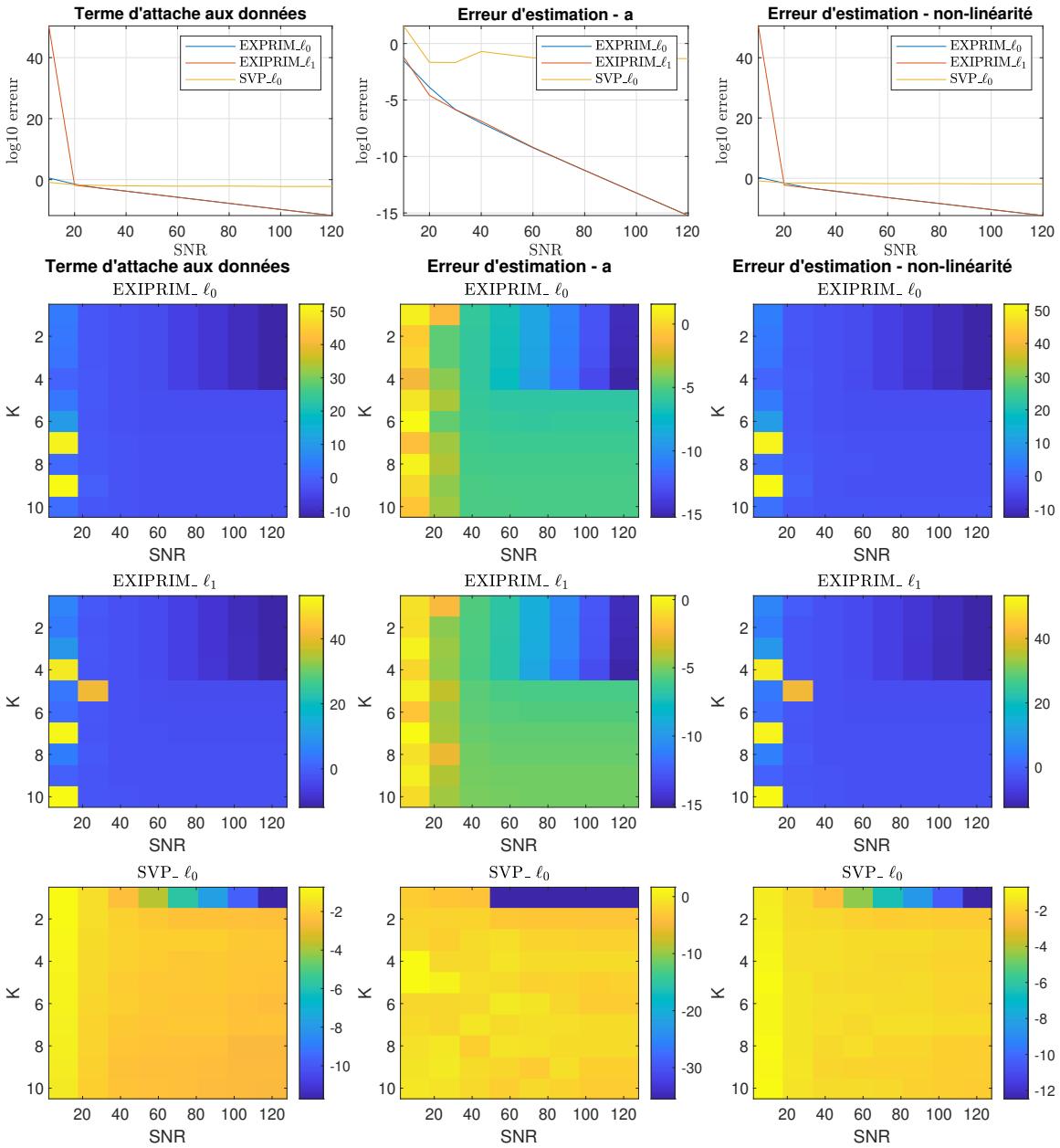


FIGURE 4.4 – Moyenne des erreurs d'estimation (terme d'attache aux données, vecteur \mathbf{a} et non-linéarité) en fonction du bruit (SNR en haut) et en fonction du couple bruit et cardinalités (K/SNR en bas) pour la non-linéarité polynomiale de degré $P = 3$ et avec $K=4$.

4.4.3 Sensibilité aux hyperparamètres

On considère à présent un niveau de bruit de $SNR = 80dB$, une cardinalité pour le support de $K = 4$, le dictionnaire introduit précédemment basé sur la SVD et la non-linéarité est polynomiale de degré $P = 3$. L'objectif est d'analyser la sensibilité de la méthode EXIPRIM, pour les deux types de régularisation ℓ_0 et ℓ_1 en fonction du nombre d'observations Q et de la taille du dictionnaire N_D . Les résultats sont illustrés dans la figure 4.5. Ils montrent que, pour les deux régularisations,

les performances s'améliorent avec l'augmentation du nombre d'observations Q . Ce comportement est attendu, car avoir davantage d'observations permet de mieux contraindre le problème inverse, en renforçant la stabilité de l'estimation. Par ailleurs, à nombre d'observations fixé (par exemple $Q = 60$), on observe qu'une réduction de la taille N_D du dictionnaire conduit également à une amélioration des performances. Ce phénomène s'explique par la nature du problème : lorsque $N_D \leq Q$, le dictionnaire est sous-complet, ce qui signifie que le système linéaire associé est (au moins localement) bien contraint, et donc plus facile à inverser. Au contraire, dans le cas sur-complet $N_D > Q$, le système est sous-déterminé, ce qui peut rendre l'estimation plus compliquée, plus sensible au bruit et à l'approximation du support, surtout lorsque le dictionnaire n'est pas bien conditionné. Ce comportement met en lumière un compromis important dans la conception du dictionnaire : bien qu'un dictionnaire sur-complet puisse théoriquement mieux représenter les signaux (meilleure expressivité), cela se fait au prix d'une augmentation de la difficulté de reconstruction, notamment en contexte bruité ou lorsque le nombre d'observations est limité. Finalement, on constate que la régularisation ℓ_0 conduit globalement aux meilleures performances, confirmant son efficacité dans un cadre non-linéaire et parcimonieux.

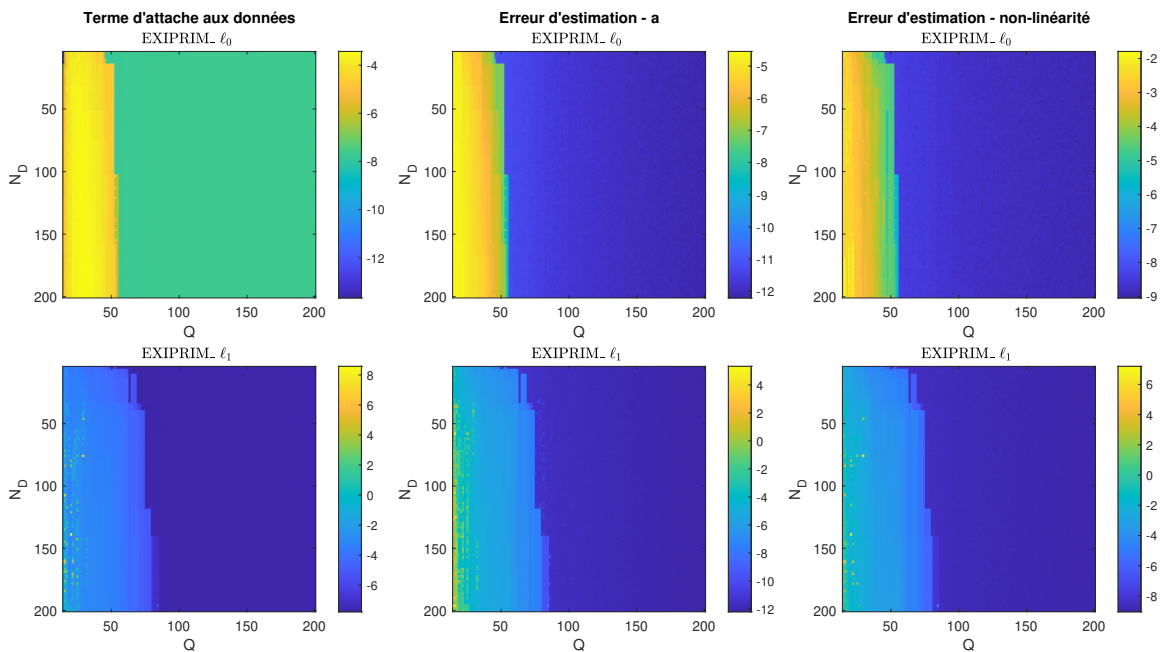


FIGURE 4.5 – Moyenne des erreurs d'estimation (terme d'attache aux données, vecteur \mathbf{a} et non-linéarité) pour un niveau de bruit de $\text{SNR} = 80\text{dB}$ en fonction du couple nombre d'observations et taille de dictionnaire (Q/N_D).

4.4.4 Utilisation de différents dictionnaires

Plusieurs dictionnaires ont été construits afin d'évaluer l'impact de leur choix sur la qualité de l'estimation. Les résultats obtenus précédemment avec le dictionnaire SVD ont été comparés à ceux issus de deux autres dictionnaires, à savoir les dictionnaires de Haar et de Gabor. Le tableau 4.2 présente les performances d'estimation pour les trois méthodes EXIPRIM_{ℓ_0} , EXIPRIM_{ℓ_1} et SVP_{ℓ_0} , évaluées sur 100 réalisations moyennées, et pour plusieurs niveaux de SNR. Les résultats montrent que, quelle que soit la méthode utilisée, les performances de la méthode SVP restent globalement inférieures, indépendamment du dictionnaire choisi. Par ailleurs, comme observé précédemment, l'erreur d'estimation tend à augmenter avec la diminution du SNR, mais reste comparable

entre les dictionnaires SVD et Haar. En revanche, le dictionnaire Gabor engendre des erreurs plus importantes pour toutes les méthodes, ce qui peut s'expliquer par un conditionnement défavorable. En effet, le conditionnement des dictionnaires joue un rôle clé dans la qualité de la reconstruction. Le produit $\mathbf{X}\Phi$, où Φ est le dictionnaire, peut affecter le conditionnement global du système. Selon la génération aléatoire du support et les atomes sélectionnés, il peut devenir plus difficile de retrouver le support correct, notamment lorsque le dictionnaire Gabor est utilisé. Ce phénomène peut alors expliquer les erreurs accrues observées dans ce cas.

TABLE 4.2 – Erreur d'estimation (terme d'attache aux données, r , vecteur \mathbf{a} , $r_{\mathbf{a}}$, et non-linéarité, r_{NL}) en fonction du bruit et en utilisant trois dictionnaires différents (SVD, Haar, Gabor) pour chaque méthode (EXIPRIM(E)- ℓ_0 , EXIPRIM(E)- ℓ_1 et SVP (V)- ℓ_0) et une cardinalité fixée à $K=4$ et une non-linéarité polynomiale de degré $P = 3$.

log10	SVD			Haar			Gabor			
	(E)- ℓ_0	(E)- ℓ_1	(V)- ℓ_0	(E)- ℓ_0	(E)- ℓ_1	(V)- ℓ_0	(E)- ℓ_0	(E)- ℓ_1	(V)- ℓ_0	
sans bruit	r	-29.851	-29.8324	-2.3905	-29.917	-6.924	-4.4206	-3.8907	-4.0945	-2.705
	$r_{\mathbf{a}}$	-33.344	-33.2669	-2.3282	-33.2102	-9.5078	-6.5478	-6.2874	-6.4542	-0.62686
	r_{NL}	-30.2578	-30.2082	-2.0462	-29.4468	-7.3366	-4.693	-4.0829	-4.3187	-2.4574
SNR=80dB	r	-7.7649	-7.7641	-2.0668	-7.765	-6.2936	-4.3647	-3.9201	-4.0943	-2.558
	$r_{\mathbf{a}}$	-11.2256	-11.2281	-2.0231	-11.2011	-8.6928	-6.5493	-6.31	-6.4538	-1.0227
	r_{NL}	-8.42	-8.4138	-1.7255	-8.5021	-7.201	-4.8932	-4.0877	-4.3179	-2.3516
SNR=40dB	r	-3.7668	-3.7298	-2.0121	-3.78	-3.7578	-3.6145	-3.5328	-3.6118	-2.4797
	$r_{\mathbf{a}}$	-7.0148	-6.8298	-1.6572	-6.8308	-6.8174	-6.2284	-6.2266	-6.2551	0.78241
	r_{NL}	-4.387	-4.3756	-1.6809	-4.4939	-4.4512	-4.3033	-3.9368	-4.0564	-2.3021

TABLE 4.3 – Taux de récupération du support en fonction du dictionnaire choisi dans le cas linéaire et non-linéaire avec un polynôme de degré $P = 3$ en absence de bruit.

	Cas linéaire	Cas non-linéaire
SVD	100%	100%
Haar	100%	100%
Gabor	65%	64%

4.4.5 Conclusion sur les données synthétiques

Dans cette partie, nous avons appliqué les quatre méthodes étudiées à des données synthétiques afin d'évaluer leur applicabilité et leur robustesse dans divers contextes : forme de la non-linéarité, présence de bruit, taille du support, sensibilité aux paramètres (notamment la taille du dictionnaire et le nombre d'observations), ainsi que structure du dictionnaire. Il en ressort que les méthodes EXIPRIM offrent globalement les meilleures performances dans l'ensemble des configurations testées. Toutefois, la méthode SVP avec régularisation ℓ_0 se distingue en donnant de meilleurs résultats en présence de bruit plus important. Enfin, il apparaît clairement que le bon conditionnement du dictionnaire est un facteur déterminant. En effet, lorsqu'il existe déjà des difficultés à estimer correctement le support dans le cas linéaire, ces problèmes se répercutent sur l'estimation du vecteur parcimonieux α dans le cas non-linéaire. Cela souligne l'importance d'utiliser des dictionnaires bien structurés pour garantir des performances satisfaisantes dans des scénarios réels. La partie suivante consiste à appliquer ces méthodes à des contextes d'application réels, tels que les problèmes de démixage spectral ou d'estimation des fonctions de réponse spectrale. Le problème du conditionnement des dictionnaires joue ici un rôle crucial, en particulier dans le cadre du démixage spectral. En effet, les atomes des dictionnaires correspondent aux spectres des différents minéraux présents à la

surface de la Terre, lesquels peuvent présenter des similarités marquées. Cette forte ressemblance entre spectres entraîne une cohérence élevée du dictionnaire, ce qui complique significativement la séparation des composantes spectrales.

4.5 Données réelles

Dans cette section, les méthodes proposées sont appliquées à deux cas d’usage concrets : le démélange d’images hyperspectrales et l’estimation des fonctions de réponse spectrale (ISRFs) pour l’instrument MicroCarb. Pour chacun de ces cas, une analyse du conditionnement est d’abord réalisée dans le cas linéaire, afin d’évaluer l’influence de la structure du dictionnaire et des paramètres du modèle sur les performances des différentes approches. Sur la base des observations issues de cette étude linéaire, les méthodes les plus prometteuses sont ensuite sélectionnées et appliquées au cas non-linéaire, permettant ainsi de valider leur robustesse et leur capacité à s’adapter à des modèles plus complexes.

4.5.1 Démélange spectral

Le démélange spectral vise à estimer les abondances fractionnaires des signatures spectrales pures, appelées *endmembers*, présentes dans chaque pixel d’une image hyperspectrale. Dans le cas non-linéaire, le modèle utilisé ici est défini à l’équation 4.4 i.e.

$$\mathbf{y} = f_{\theta} \circ (\Psi \boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\epsilon},$$

avec

$$\Psi \triangleq \mathbf{X} \Phi \in \mathbb{R}^{Q \times N_D}.$$

Dans ce contexte, Ψ est une matrice contenant les signatures spectrales des matériaux (la matrice \mathbf{X} est définie étant l’identité) et $\boldsymbol{\alpha}$ est un vecteur parcimonieux que l’on cherche à estimer contenant les abondances de ces matériaux avec $\alpha_i \geq 0$. Certains modèles considèrent $\sum_{i=1} \alpha_i = 1$ (contrainte de somme à un), d’autres considèrent les contraintes de positivité uniquement. L’identification de ces abondances est particulièrement difficile en raison de la résolution spatiale insuffisante des capteurs. De nombreuses méthodes de démélange spectral ont été proposées dans la littérature. Différentes approches sont étudiées dans la revue [112], qui couvre principalement les modèles linéaires de mélange et introduit également des extensions vers des cas de démélange non-linéaires, en définissant différents types d’inversions, qu’elles soient statistiques ou empiriques. Dans [101], le problème de démélange suppose que les signatures spectrales observées peuvent être exprimées comme une combinaison linéaire parcimonieuse d’un certain nombre de signatures spectrales pures connues a priori, i.e. regroupées dans un dictionnaire spectral. Les abondances sont supposées positives et leur somme égale à 1. Notons que les algorithmes développés ne prennent en compte aucune contrainte explicite sur la solution. Par conséquent, à l’issue de l’estimation, les abondances obtenues sont normalisées de manière à ce que leur somme soit égale à 1.

Différentes formes de non-linéarités ont été étudiées dans la littérature pour effectuer un démélange non-linéaire d’images hyperspectrales. Elles peuvent notamment être de type bilinéaire, correspondant à des interactions croisées entre les abondances spectrales. Ainsi, dans [113], un modèle bilinéaire généralisé a été introduit afin de modéliser ces non-linéarités et la résolution s’appuie sur une approche bayésienne hiérarchique — mais sans introduire de parcimonie. Dans [114], la parcimonie est introduite dans le cadre du modèle bilinéaire, en appliquant un algorithme de type ADMM robuste au bruit dans un contexte linéaire. Une revue des modèles et algorithmes pour le démélange non-linéaire a été proposée dans [115]. Celle-ci présente non seulement des modèles bilinéaires, mais également des approches plus générales basées sur des modèles physiques. Ces derniers peuvent reposer sur une formulation duale composée de deux termes : un linéaire et un non-linéaire, mais aussi proposer de linéariser le problème autour de la non-linéarité, puis de le résoudre via

l'algorithme Fully Constrained Least Squares (FCLS) [116]. Cet article présente aussi un autre modèle d'approximation pour représenter une large classe de non-linéarités en utilisant une fonction de mélange définie par un polynôme du second ordre, et paramétrée par un unique coefficient. Ce modèle, qualifié de modèle de mélange post non-linéaire, a notamment été introduit dans [96], où la non-linéarité est appliquée séparément à chaque composante de \mathbf{y} , sous la forme :

$$f_b(x) = x + bx^2 \quad (4.59)$$

où x est un réel positif et b est un paramètre à estimer. Les résultats présentés dans [96] montrent que les algorithmes des moindres carrés produisent des résultats similaires à ceux obtenus par des approches bayésiennes, tout en réduisant considérablement le coût calculatoire dans le cadre d'un démixage spectral non-linéaire d'images hyperspectrales. Notons que pour ces modèles, la solution est initialisée en utilisant l'algorithme FCLS. Cette méthode sera utilisée dans les expériences suivantes et sera désignée sous le nom de "Modèle PNL" pour modèle post non-linéaire. Par ailleurs, pour les expériences réalisées dans le cas non-linéaire, la non-linéarité définie dans l'équation (4.59) sera utilisée.

Pour les deux cas de démixage (linéaire ou non-linéaire), trois types de dictionnaires Ψ sont utilisés. Ils sont issus de bases de données réelles Moffett, Cuprite et USGS. Ces dictionnaires se distinguent par leur taille, leur structure et leur conditionnement, des facteurs qui influencent fortement les performances des méthodes d'estimation. Le dictionnaire Moffett, récupéré de [96], contient trois signatures spectrales de longueur $Q = 189$, correspondant à des matériaux présents dans la scène hyperspectrale associée. Tous les atomes de ce dictionnaire étant utilisés pour reconstruire les observations, ce cas ne constitue pas un véritable problème parcimonieux. Par conséquent, le dictionnaire Moffett ne sera pas considéré dans l'analyse du conditionnement dans le cas linéaire. Le dictionnaire Cuprite, aussi récupéré dans [96], est construit à partir des données hyperspectrales de la scène de Cuprite (Nevada, USA), issues de la base AVIRIS. Cette scène est une référence classique dans les études de démixage en raison de sa richesse minéralogique et de la qualité de ses mesures. Le dictionnaire est composé de $N_D = 15$ signatures spectrales de taille $Q = 189$. Il est dit sous-complet, car le nombre d'atomes est inférieur à la dimension spectrale ($N_D < Q$). Toutefois, il présente un mauvais conditionnement, ce qui complique la détection du support correct, en particulier dans les cas non-linéaires. Enfin, le dictionnaire USGS est extrait de la base spectrale de la United States Geological Survey, couramment utilisée comme référence dans les études de démixage [117]. Il comprend $N_D = 498$ signatures spectrales, chacune de taille $Q = 189$. Ce dictionnaire est sur-complet, c'est-à-dire qu'il contient plus d'atomes que la dimension de l'espace d'observation ($N_D > Q$). Cette redondance permet une représentation parcimonieuse du signal, mais elle entraîne une non-unicité des solutions. En présence de bruit ou de fortes corrélations entre colonnes, cela rend la sélection correcte du support plus difficile. De plus, ce dictionnaire est également mal conditionné, en raison de fortes similarités entre certaines signatures spectrales, ce qui aggrave encore le problème. Ainsi, ces trois cas illustrent différents scénarios rencontrés en démixage spectral : du cas simple non parcimonieux (Moffett) (qui suppose que le support est connu), au cas sous-complet et mal conditionné (Cuprite), jusqu'au cas sur-complet, redondant et mal conditionné (USGS). Chacun pose des défis spécifiques pour l'identification fiable du support, que ce soit dans un cadre linéaire ou non-linéaire.

Démixage linéaire

Dans le cas linéaire, on suppose que la fonction f_{θ} est la fonction identité. Dans les simulations utilisées dans cette section, 1000 réalisations indépendantes ont été générées, chacune correspondant à un support parcimonieux aléatoire et on cherche à résoudre le problème linéaire dans le cas des dictionnaires Cuprite et USGS. Les résultats obtenus avec les deux dictionnaires sont présentés dans la figure 4.6. Ils mettent en évidence l'influence du conditionnement du dictionnaire sur la capacité de l'algorithme OMP à identifier correctement le support du vecteur parcimonieux. On remarque que par rapport aux résultats obtenus avec le dictionnaire créé à partir de distributions gaussiennes de [108], les deux dictionnaires semblent être très mal conditionnés et ne permettent

jamais de retrouver le bon support même pour une faible cardinalité. De manière générale, les résultats obtenus montrent qu'il peut être difficile de récupérer un support parcimonieux, dans un cadre sur-complet ou sous-complet, lorsque le dictionnaire est mal conditionné. Par conséquent, l'utilisation de l'algorithme OMP dans un tel contexte nécessite des précautions particulières. Notons par ailleurs qu'un échec de la récupération dans le cas linéaire — considéré comme le cas le plus favorable — implique inévitablement des difficultés accrues dans le cas non-linéaire, où les effets du mauvais conditionnement sont amplifiés. Il est donc nécessaire de préconditionner les dictionnaires.

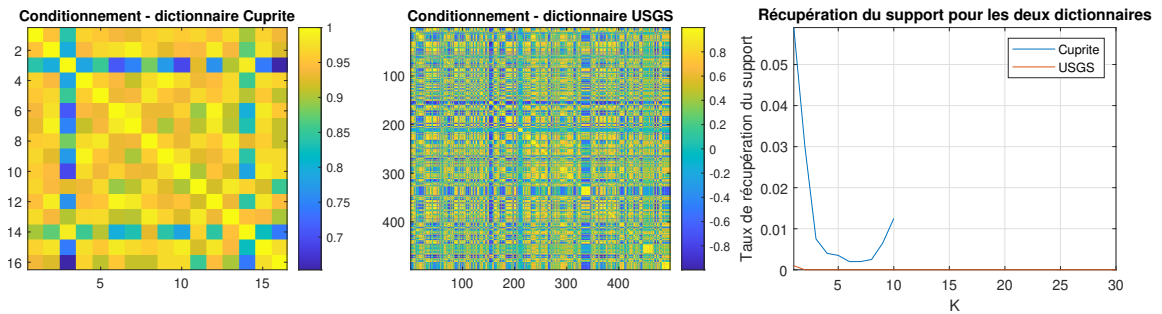


FIGURE 4.6 – Affichage du conditionnement des deux dictionnaires (Cuprite et USGS) et taux de récupération du support en fonction de la cardinalité K .

Les méthodes de correction, en particulier le préconditionnement et l'utilisation de dictionnaires de type sensing, sont appliquées aux deux dictionnaires considérés, dans le cas linéaire. Les méthodes `OMP_sens`³ et `OMP_precon` sont comparées à la méthode OMP standard, ainsi qu'à la version d'OMP avec critère d'arrêt basé sur le résidu, notée `OMP_eps`. Cet algorithme `OMP_eps` s'arrête lorsque l'erreur sur le résidu devient inférieure à un certain seuil. Ensuite, les K atomes associés aux coefficients de plus grande amplitude sont conservés, tandis que les autres sont mis à zéro. L'impact du bruit a été analysé pour trois niveaux de rapport signal sur bruit (SNR = 80 dB, 60 dB, et 40 dB). Les métriques utilisées sont celles introduites dans la section 4.4 : erreur sur le terme d'attache aux données, erreur sur l'estimation de \mathbf{a} , et erreur sur l'estimation des non-linéarités, ainsi que le taux de récupération du support, mesuré comme la proportion de fois où le support exact est retrouvé parmi l'ensemble des essais. Les résultats obtenus à l'aide de ces différentes approches sont synthétisés dans la figure 4.7. Les principales conclusions issues de cette étude sont présentées ci-dessous :

- Pour le dictionnaire Cuprite, on observe des écarts notables entre les différentes méthodes. L'utilisation d'un dictionnaire de type sensing permet une amélioration visible des performances, mais cet avantage diminue rapidement lorsque la cardinalité K augmente. La méthode OMP avec critère d'arrêt basé sur l'erreur de reconstruction notée `OMP_eps` apporte également une amélioration, mais les meilleurs résultats sont obtenus avec la méthode de préconditionnement.
- Dans le cas du dictionnaire USGS, qui est particulièrement mal conditionné, l'utilisation d'un dictionnaire sensing permet d'obtenir de meilleures performances que la méthode `OMP_eps`. Toutefois, cette amélioration reste très sensible à l'augmentation de la cardinalité K , entraînant une dégradation rapide des résultats. À l'inverse, la méthode de préconditionnement s'avère la plus robuste sur l'ensemble des tests, montrant une meilleure résistance au mauvais conditionnement du dictionnaire.
- L'introduction du bruit dégrade rapidement les performances des méthodes, en particulier pour des faibles valeurs de la cardinalité K . On observe qu'à partir de $K = 1$ ou $K = 2$, certaines méthodes échouent systématiquement à identifier le bon support, même dans des conditions de bruit modéré. Cette observation souligne la sensibilité au bruit des algorithmes

3. Notons que la méthode `OMP_sens` a été adaptée afin de pouvoir être utilisée dans le cas sous-complet.

de sélection de support, en particulier dans les contextes où le conditionnement du dictionnaire est déjà défavorable. En présence de bruit, les méthodes précédemment proposées avec l'algorithme OMP présentent encore des marges d'amélioration.

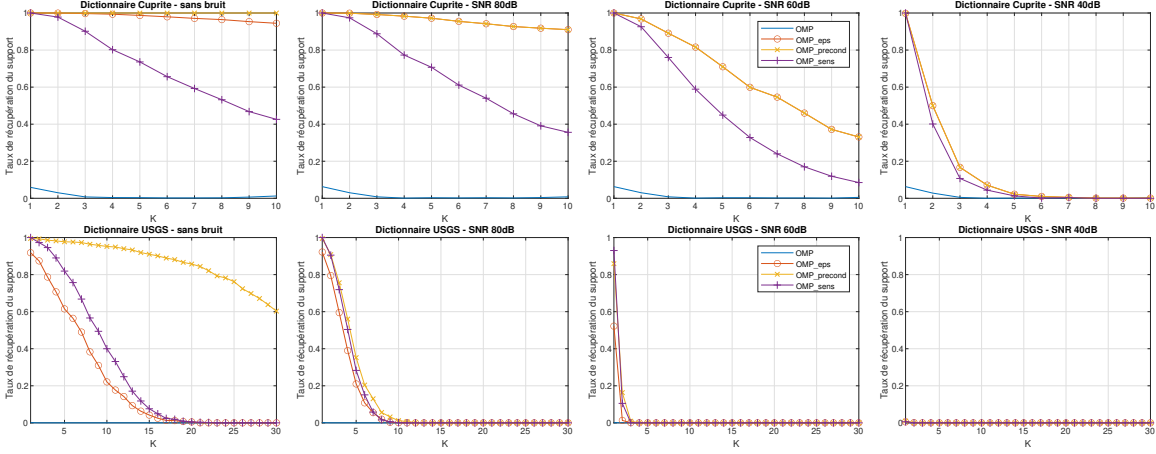


FIGURE 4.7 – Taux de récupération du support en fonction de la cardinalité K pour les dictionnaires Cuprite (haut) et USGS (bas) en fonction du bruit (absence de bruit, SNR=80dB, SNR=60dB, SNR=40dB).

L'algorithme OMP est un algorithme glouton qui, bien qu'efficace et simple à mettre en œuvre, ne garantit pas l'obtention de la solution optimale. D'autres approches auraient pu être envisagées, notamment les relaxations convexes de type LASSO, déjà présentées dans les chapitres précédents. Toutefois, même avec ces relaxations, les performances peuvent rester limitées lorsque les dictionnaires sont mal conditionnés, les résultats restant alors fortement liés aux propriétés d'incohérence du dictionnaire utilisé. Par ailleurs, des méthodes de résolution approchée basées sur des métaheuristiques ont également été étudiées pour traiter des problèmes NP-complets. Un exemple notable est celui du recuit simulé [118], une métaheuristique d'optimisation globale inspirée d'un phénomène physique : le recuit des matériaux. Il s'agit d'une métaheuristique d'optimisation globale, inspirée d'un phénomène physique : le recuit des matériaux. En métallurgie, ce procédé consiste à chauffer un solide à très haute température, puis à le refroidir progressivement. L'objectif est d'atteindre un état stable où les atomes sont parfaitement organisés. Dans l'algorithme du recuit simulé, chaque état du système représente une configuration possible, et la fonction à minimiser est assimilée à l'énergie du solide. Le recuit simulé s'inspire des algorithmes de Monte Carlo, plus précisément de l'algorithme de Metropolis, qui permet d'explorer efficacement les minima locaux d'une fonction de coût. Contrairement à une recherche locale classique, qui permet de déterminer des optima locaux, le recuit simulé accepte parfois une dégradation temporaire de la solution pour mieux explorer l'espace de recherche. Plus concrètement, le principe de l'algorithme du recuit simulé est résumé ci-dessous :

- Un état initial α_i est généré avec une énergie E_i , puis un état voisin α_j avec une énergie E_j
- Si $E_j < E_i$, la nouvelle solution est acceptée
- Si $E_j > E_i$, elle est acceptée avec une probabilité obtenue par le critère de Metropolis :

$$P = \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{k_B T}\right), \quad (4.60)$$

où T est la température et k_B la constante de Boltzmann.

Ce mécanisme permet au système d'éviter les pièges des minima locaux et d'approcher le minimum global de la fonction objectif. Pour appliquer cette méthode au problème de démixage hyperspectral, on peut se fixer une cardinalité K , choisir une solution initiale α_0 de manière aléatoire et générer un

voisinage en remplaçant un atome sélectionné par un nouveau. La valeur des coefficients est ensuite obtenue avec la méthode des moindres carrés. Les résultats obtenus sont présentés dans les figures 4.8 et 4.9 pour les deux jeux de données (Cuprite et USGS) ainsi que pour 3 niveaux de bruit. Les résultats montrent une amélioration sensible, tant au niveau de la récupération du support que de l'erreur liée au terme d'attache aux données, par rapport aux méthodes précédemment utilisées. Toutefois, l'inconvénient majeur de cette méthode est le temps de simulation qui augmente drastiquement en fonction du nombre d'atomes utilisés. Cet aspect peut en effet être très limitant dans certaines applications. Il ne sera pas considéré dans la suite pour cette raison.

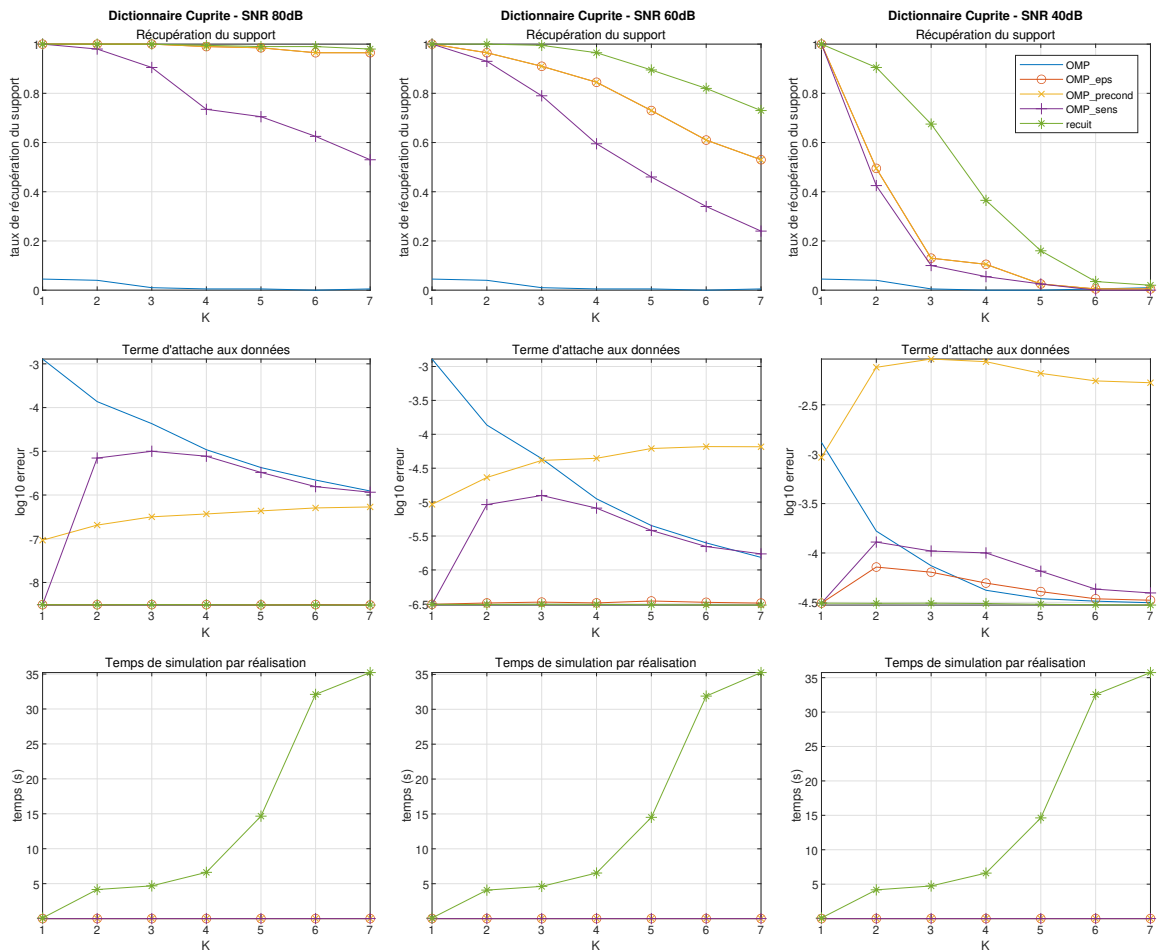


FIGURE 4.8 – Taux de récupération du support en fonction de la cardinalité K (haut), erreur sur le terme d'attache aux données (milieu) et temps de simulation par réalisation (bas) pour le dictionnaire Cuprite en fonction du bruit (SNR=80dB, SNR=60dB, SNR=40dB) avec ajout du recuit simulé.

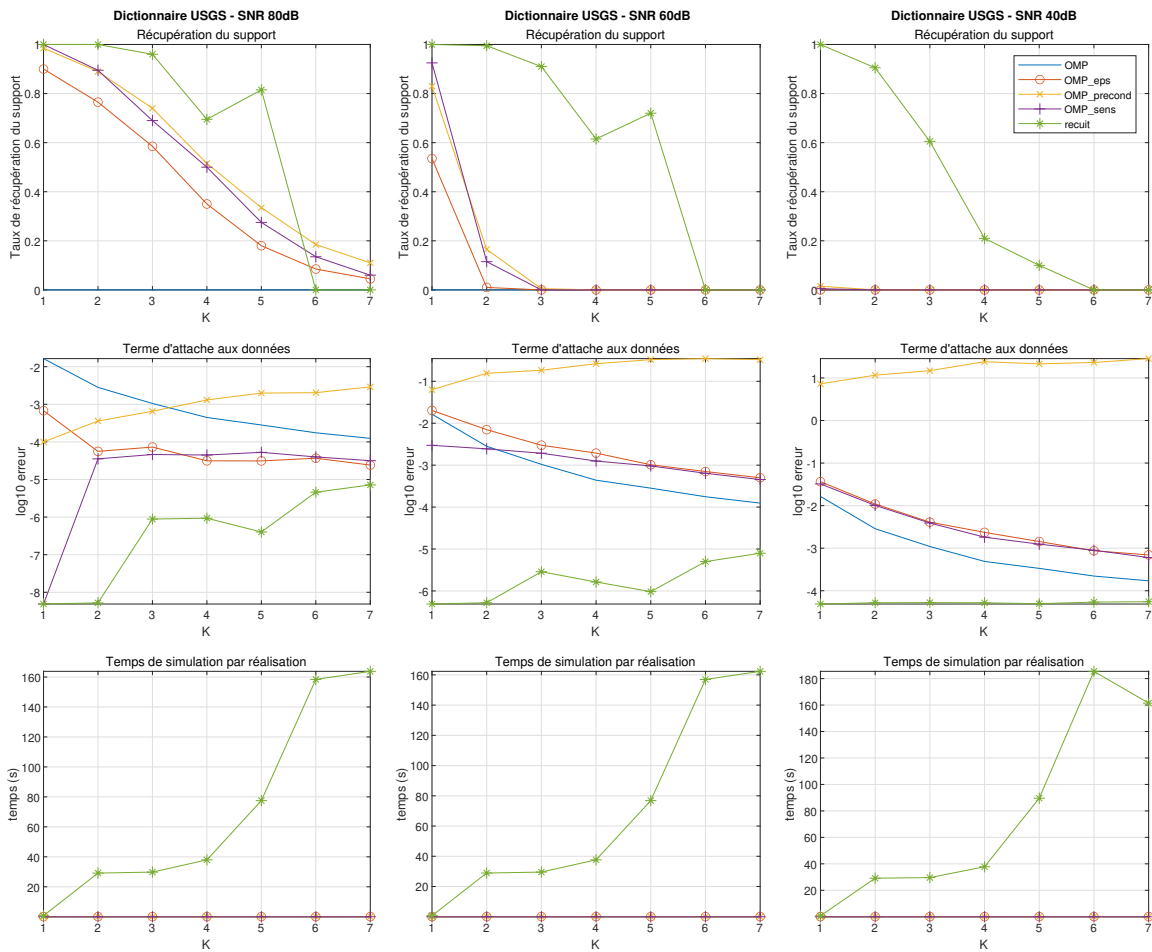


FIGURE 4.9 – Taux de récupération du support en fonction de la cardinalité K (haut), erreur sur le terme d'attache aux données (milieu) et temps de simulation par réalisation (bas) pour le dictionnaire USGS en fonction du bruit (SNR=80dB, SNR=60dB, SNR=40dB) avec ajout du recuit simulé.

Démélange non-linéaire

Dans le cas d'un démelange non-linéaire, les trois dictionnaires définis dans la section 4.5.1 sont utilisés. La non-linéarité considérée, introduite dans [96], est rappelée dans l'équation (4.59). Pour chacun des dictionnaires, une image de taille 25×25 pixels a été générée, en faisant varier le paramètre à estimer b entre 0 et 10. Pour chaque valeur de b , 25 réalisations différentes ont été produites, avec des abondances variant aléatoirement d'une réalisation à l'autre.

Données Moffett. Nous analysons tout d'abord les résultats obtenus à partir des données issues de l'image hyperspectrale Moffett. Pour ce jeu de données, rappelons que le support est supposé connu et que l'on cherche à estimer $K = 3$ abondances. Par conséquent, aucun préconditionnement ne sera utilisé, et l'estimation des trois coefficients au niveau de l'algorithme EXIPRIM sera réalisée via une méthode des moindres carrés et non pas en utilisant la représentation parcimonieuse. Les résultats sont présentés pour les deux méthodes (littérature [96] et EXIPRIM) dans les figures 4.10, 4.11 et 4.12, en fonction du niveau de bruit, respectivement sans bruit, à $\text{SNR} = 80\text{dB}$ et à $\text{SNR} = 60\text{dB}$. Ces résultats portent sur trois critères : le terme d'attache aux données, l'erreur d'estimation des abondances \mathbf{a} , ainsi que l'erreur d'estimation des non-linéarités. Sur ces figures, la première ligne présente l'erreur moyenne, calculée sur l'ensemble des réalisations, en fonction du paramètre b . Les deux lignes suivantes illustrent, pour chaque réalisation individuelle, l'évolution de l'erreur en fonction de b pour la méthode de la littérature [96] et pour la méthode EXIPRIM étudiée dans cette thèse. Les résultats montrent qu'en l'absence de bruit, la méthode EXIPRIM offre de meilleures performances sur l'ensemble des trois critères. Pour les deux méthodes, les résultats se dégradent lorsque la valeur du paramètre b augmente, impactant particulièrement l'erreur d'estimation de la non-linéarité. Par ailleurs, certaines réalisations présentent des erreurs plus marquées que d'autres, ce qui peut s'expliquer soit par la variabilité des abondances, soit par une convergence plus lente de l'algorithme, ou encore par une convergence vers un optimum local. Lorsque le niveau de bruit atteint $\text{SNR} = 60\text{dB}$, les performances des deux méthodes deviennent alors comparables.

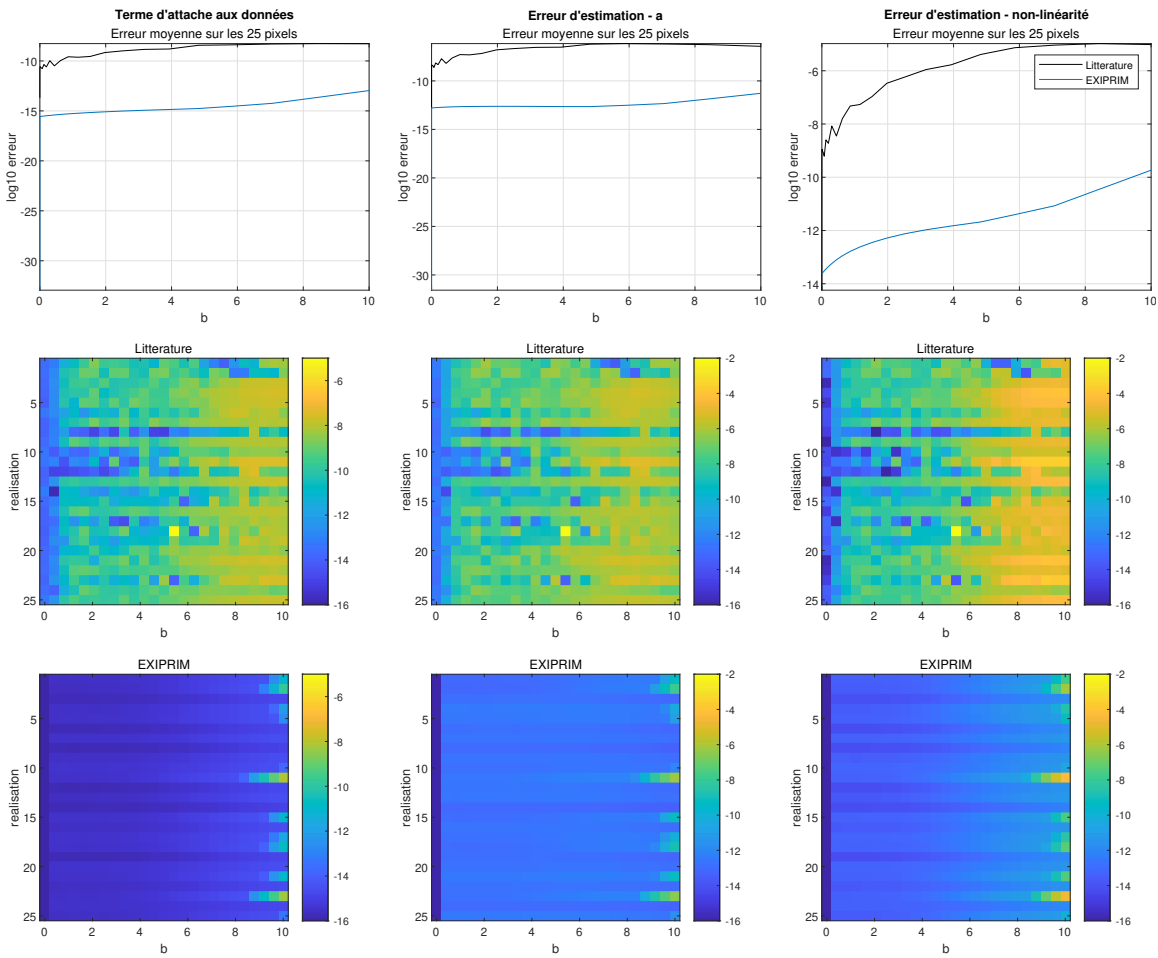


FIGURE 4.10 – Erreur d'estimation dans le cas non-linéaire pour les données Moffett au niveau du terme d'attaches aux données, de l'erreur d'estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) dans le cas sans bruit.

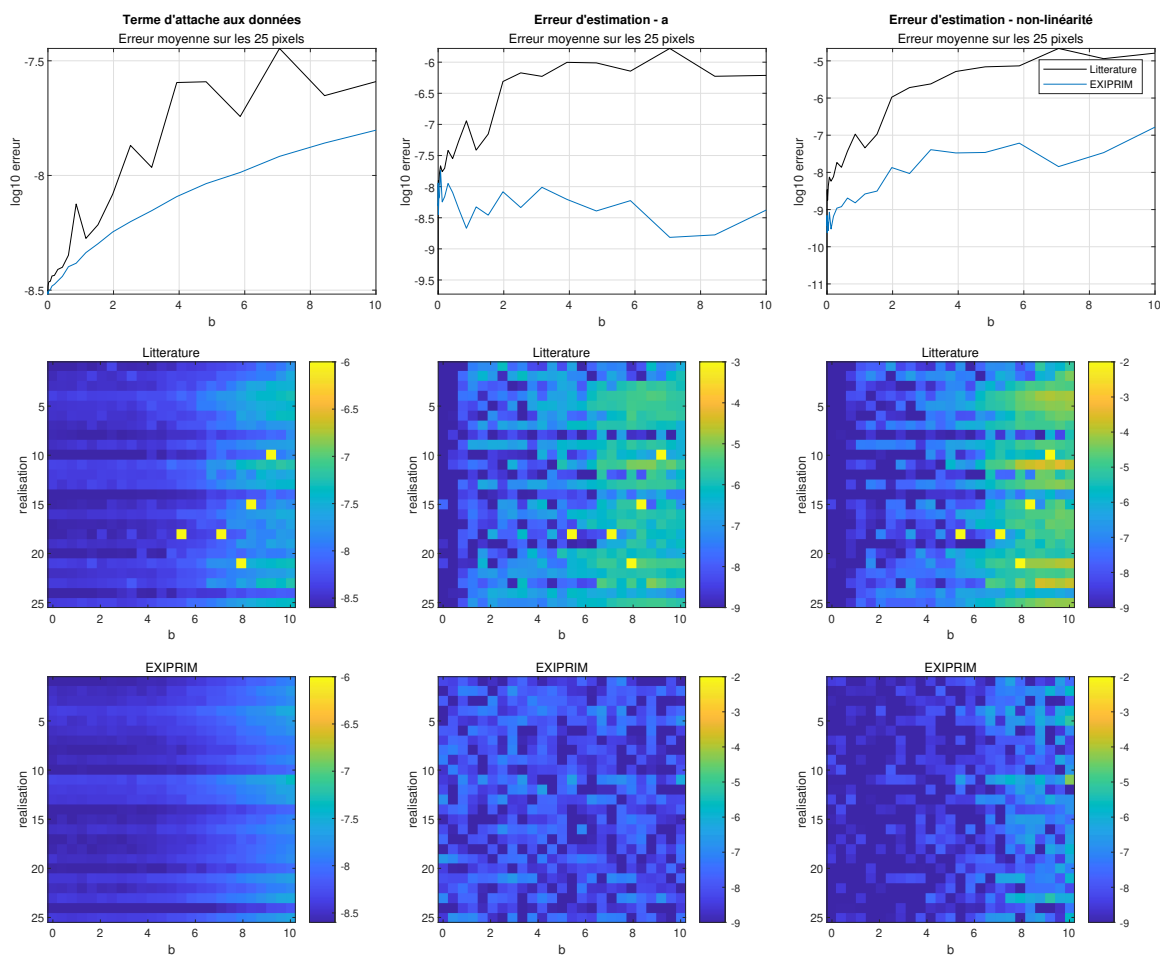


FIGURE 4.11 – Erreur d’estimation dans le cas non-linéaire pour les données Moffett au niveau du terme d’attaches aux données, de l’erreur d’estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) en présence de bruit ($\text{SNR} = 80\text{dB}$).

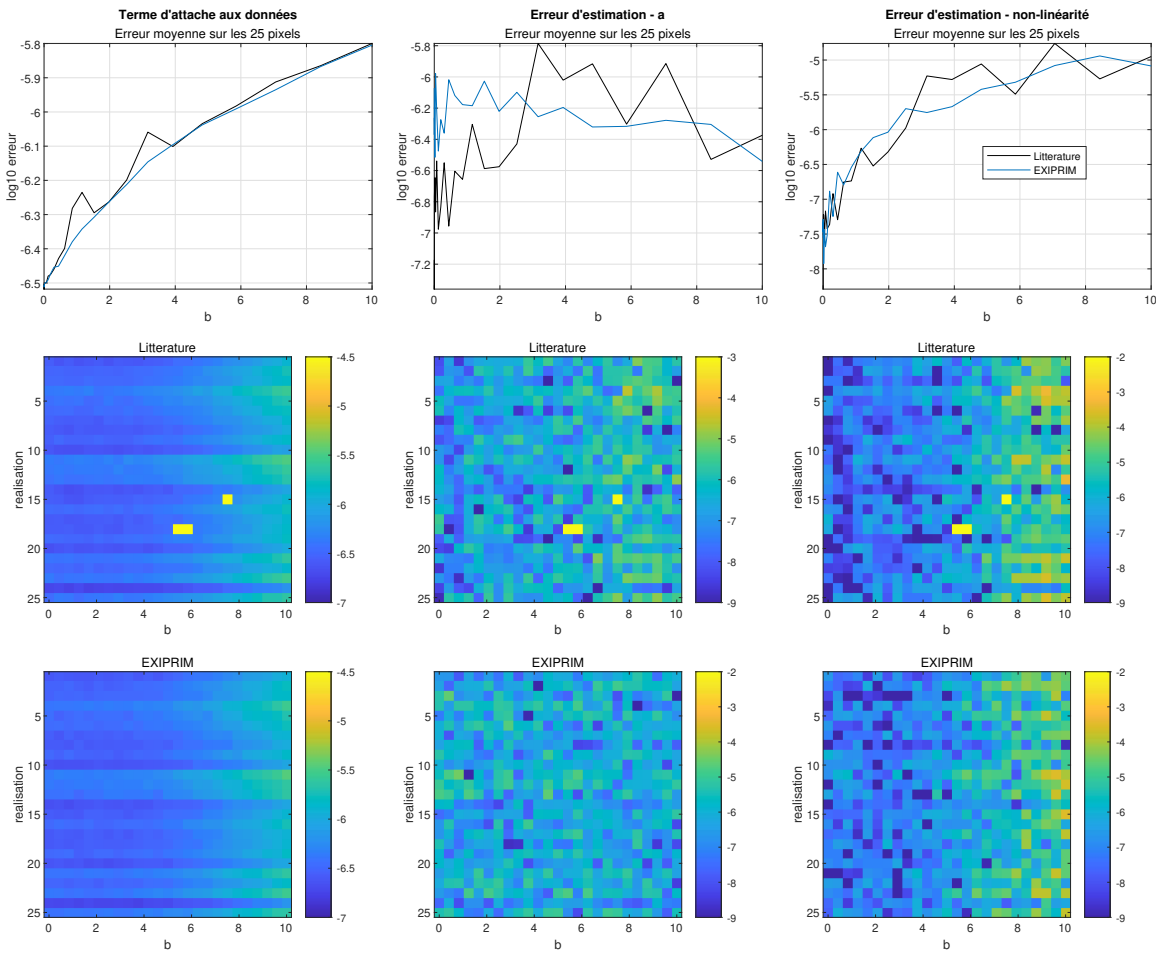


FIGURE 4.12 – Erreur d’estimation dans le cas non-linéaire pour les données Moffett au niveau du terme d’attaches aux données, de l’erreur d’estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) en présence de bruit ($\text{SNR} = 60\text{dB}$).

Données Cuprite. Nous analysons à présent les résultats obtenus à partir des données issues de l’image hyperspectrale Cuprite. Pour ce jeu de données, le support n’est pas supposé connu mais reste identique pour toutes les réalisations : seule la valeur des abondances varie. Le dictionnaire comporte $N_D = 15$ éléments, et on suppose que le nombre d’abondances par pixel est connu, soit $K = 5$. L’objectif est d’évaluer les performances des méthodes proposées lorsque les abondances varient mais avec un support fixe. Les résultats sont exposés dans les figures 4.13, 4.14 et 4.15 pour différents niveaux de bruit (respectivement sans bruit, $\text{SNR} = 80\text{dB}$, et $\text{SNR} = 60\text{dB}$). Ces résultats portent sur trois critères : le terme d’attache aux données, l’erreur d’estimation des abondances \mathbf{a} , ainsi que l’erreur d’estimation des non-linéarités. Sur ces figures, la première ligne présente l’erreur moyenne, calculée sur l’ensemble des réalisations, en fonction du paramètre b . Les deux lignes suivantes montrent, pour chaque réalisation individuelle, l’évolution de l’erreur en fonction de b pour la méthode de la littérature [96] ainsi que pour la méthode basée sur EXIPRIM donnant les meilleurs résultats en termes d’estimation (ici *OMP_precon_inv* pour les trois figures). Enfin, la figure 4.16 illustre le taux de récupération du support en fonction de la valeur de b , ainsi que le temps de calcul associé à chacune des méthodes.

Les résultats montrent qu’en l’absence de bruit, trois méthodes basées sur EXIPRIM offrent de meilleures performances sur l’ensemble des trois critères alors que les autres n’améliorent pas

la solution. La méthode la plus performante est *OMP_precon_inv*, qui améliore les solutions d'un facteur allant jusqu'à 10^5 par rapport à la méthode de la littérature. Les autres méthodes donnant également de bons résultats sont *LASSO_precon_inv*, puis *OMP_precon_LS*, cette dernière étant efficace jusqu'à une valeur de $b = 6$. Comme précédemment, certaines réalisations présentent des erreurs plus importantes lorsque b augmente. Pour l'ensemble des méthodes, l'augmentation de b entraîne une dégradation des performances, en particulier sur l'estimation de la non-linéarité. De plus, lorsque le niveau de bruit augmente, l'erreur d'estimation s'accroît également. Il est intéressant de noter que, dans le cas des données Cuprite, l'algorithme de [96] ne surpasse les méthodes basées sur EXIPRIM que sur le critère du terme d'attache aux données. En revanche, il présente des erreurs bien plus importantes pour l'estimation des abondances \mathbf{a} et des non-linéarités, en particulier face à *OMP_precon_inv*, qui reste la méthode la plus efficace, suivie de *LASSO_precon_inv*.

La figure 4.16 montre par ailleurs que l'algorithme de [96] n'est jamais capable de retrouver le bon support. En effet, aucune contrainte de parcimonie n'est imposée dans ce modèle. Même après seuillage (mise à zéro des plus petites valeurs), les bons coefficients — et donc les matériaux associés aux pixels — ne sont jamais correctement identifiés. En revanche, pour l'algorithme *OMP_precon_inv*, on observe que dans le cas sans bruit, le support est parfaitement retrouvé jusqu'à une valeur de $b = 6$, au-delà de laquelle les performances diminuent. De manière générale, pour les cas sans bruit et avec un $\text{SNR} = 80\text{dB}$, le bon support est identifié dans 80 % des cas. Lorsque le bruit atteint $\text{SNR} = 60\text{dB}$, ce taux varie entre 60% et 80%. Ce gain de précision se fait toutefois au prix d'un temps de calcul plus important : alors que l'algorithme de [96] nécessite un temps de l'ordre de la seconde, *OMP_precon_inv* requiert une dizaine de secondes. Notons que la méthode *SVP_ℓ₀* ne permet pas d'obtenir de bons résultats, même en l'absence de bruit : les erreurs restent élevées selon l'ensemble des critères, le bon support n'est pas retrouvé, et le temps de simulation s'avère particulièrement important pour cette méthode. Par conséquent, elle ne sera pas utilisée pour l'image hyperspectrale USGS, dont la taille est nettement plus importante que celle de Cuprite.

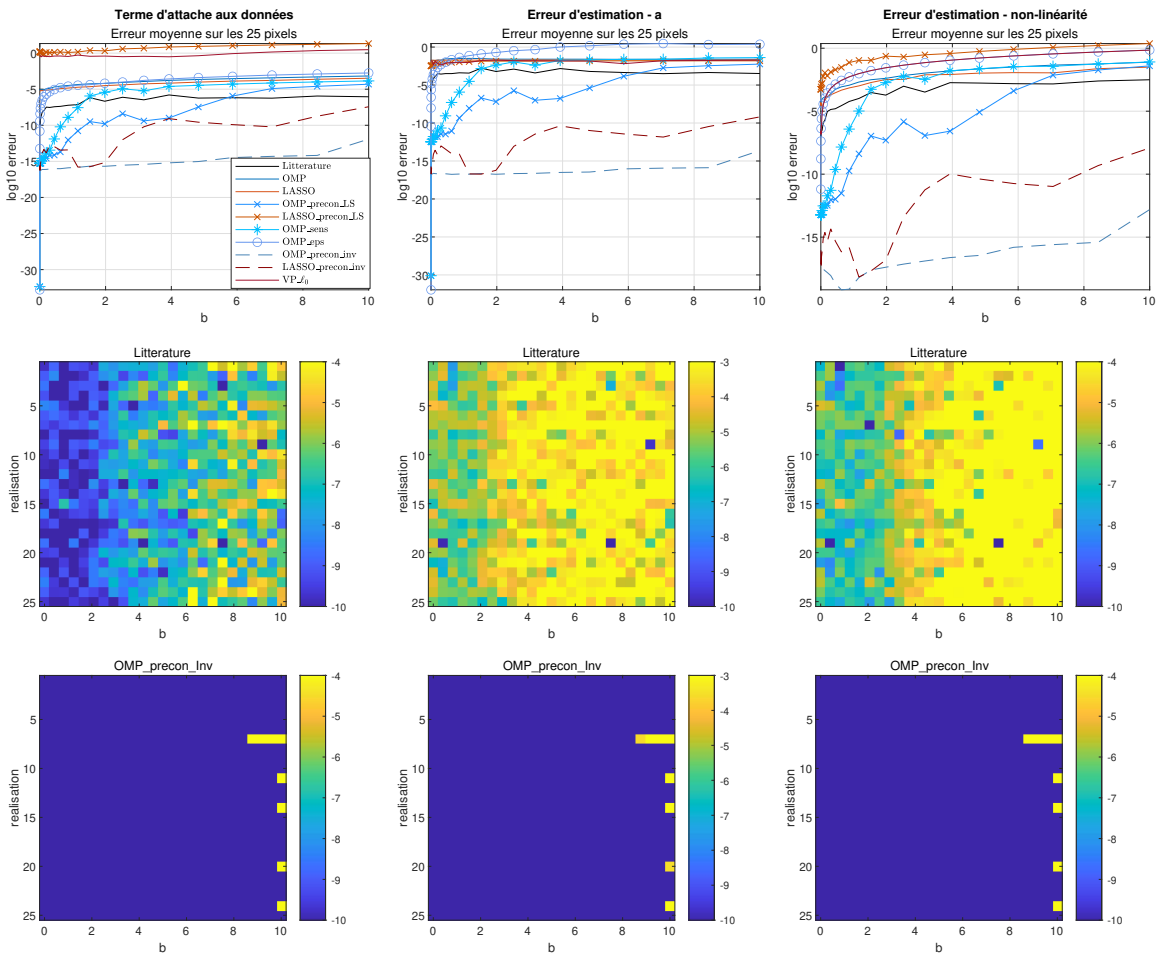


FIGURE 4.13 – Erreur d'estimation dans le cas non-linéaire pour les données Cuprite au niveau du terme d'attaches aux données, de l'erreur d'estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) dans le cas sans bruit.

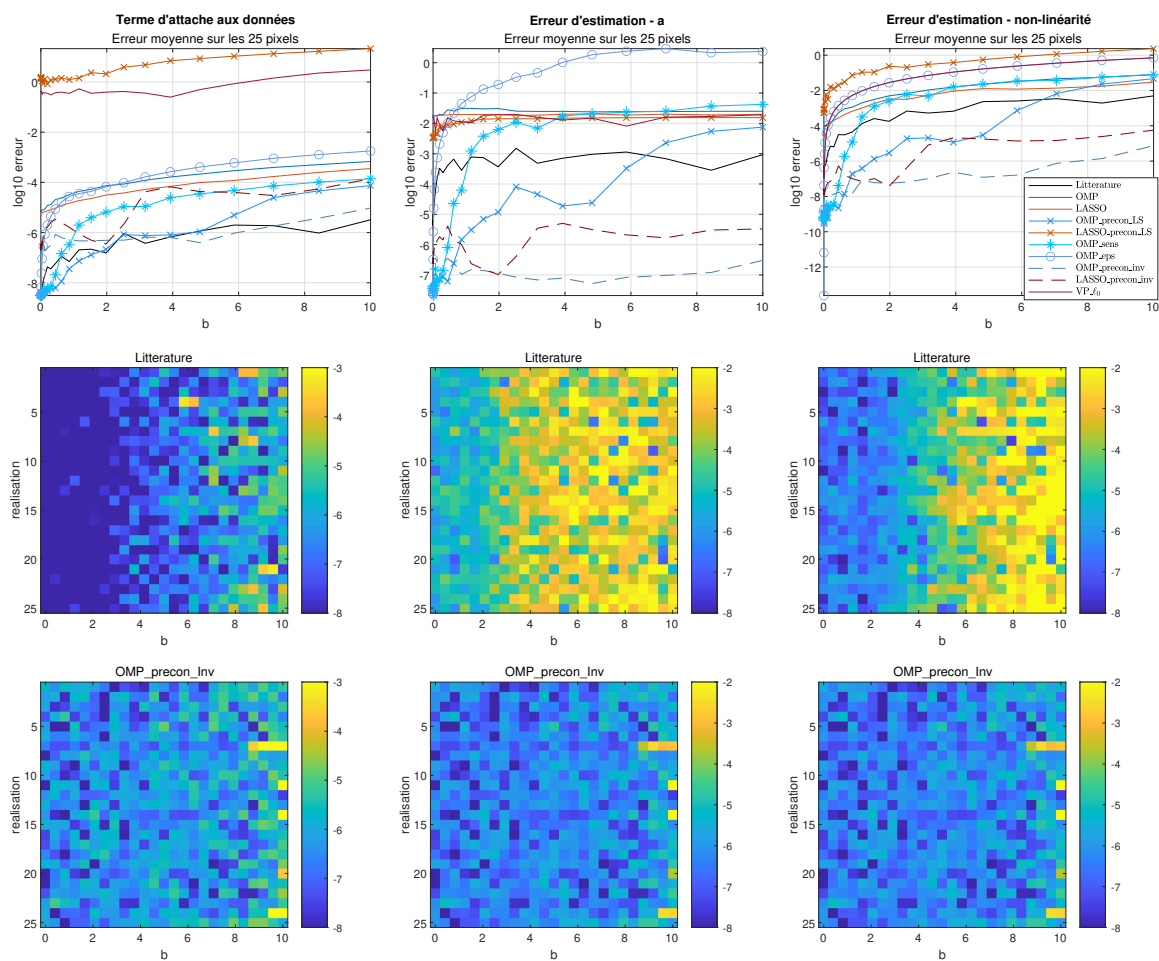


FIGURE 4.14 – Erreur d'estimation dans le cas non-linéaire pour les données Cuprite au niveau du terme d'attaches aux données, de l'erreur d'estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) en présence de bruit ($\text{SNR} = 80\text{dB}$).

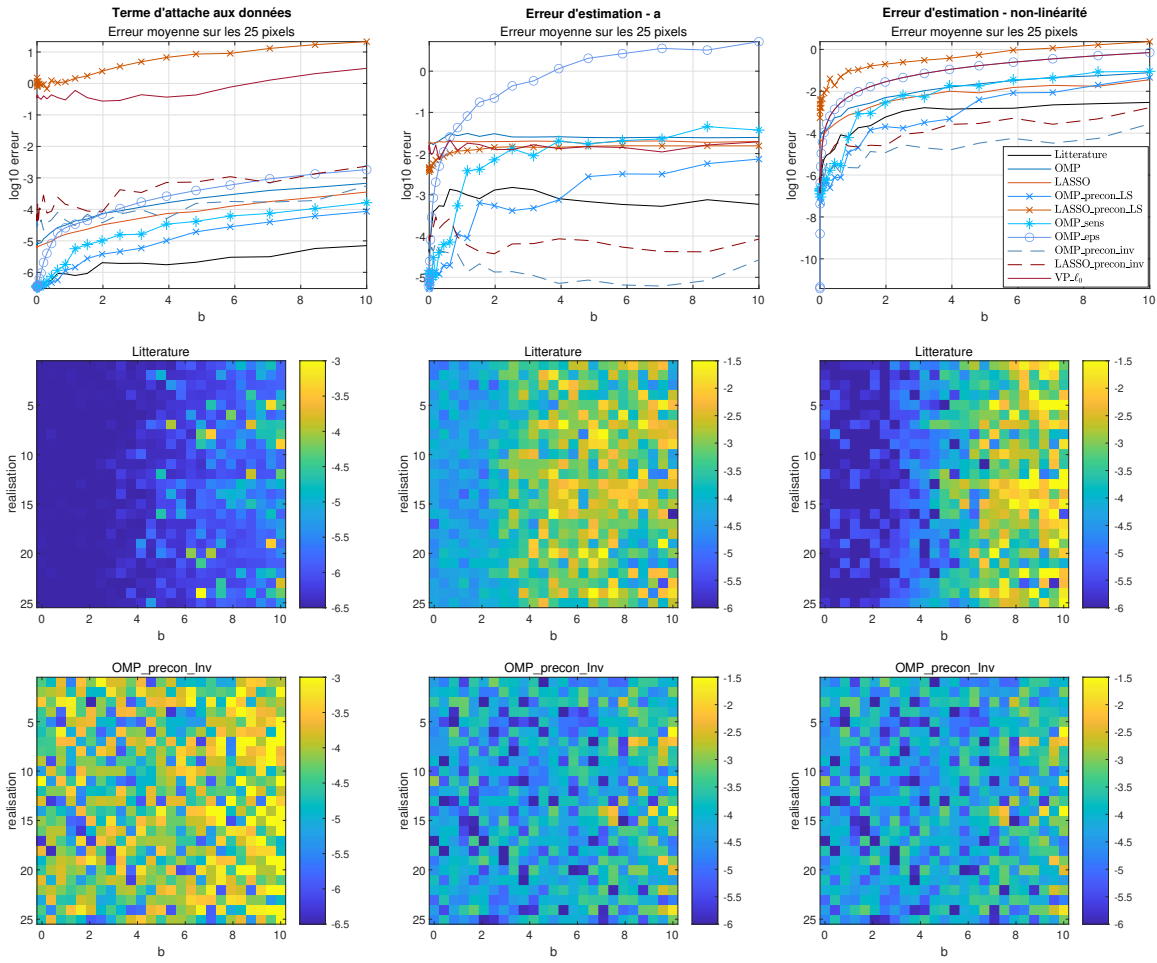


FIGURE 4.15 – Erreur d'estimation dans le cas non-linéaire pour les données Cuprite au niveau du terme d'attaches aux données, de l'erreur d'estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) en présence de bruit ($\text{SNR} = 60\text{dB}$).

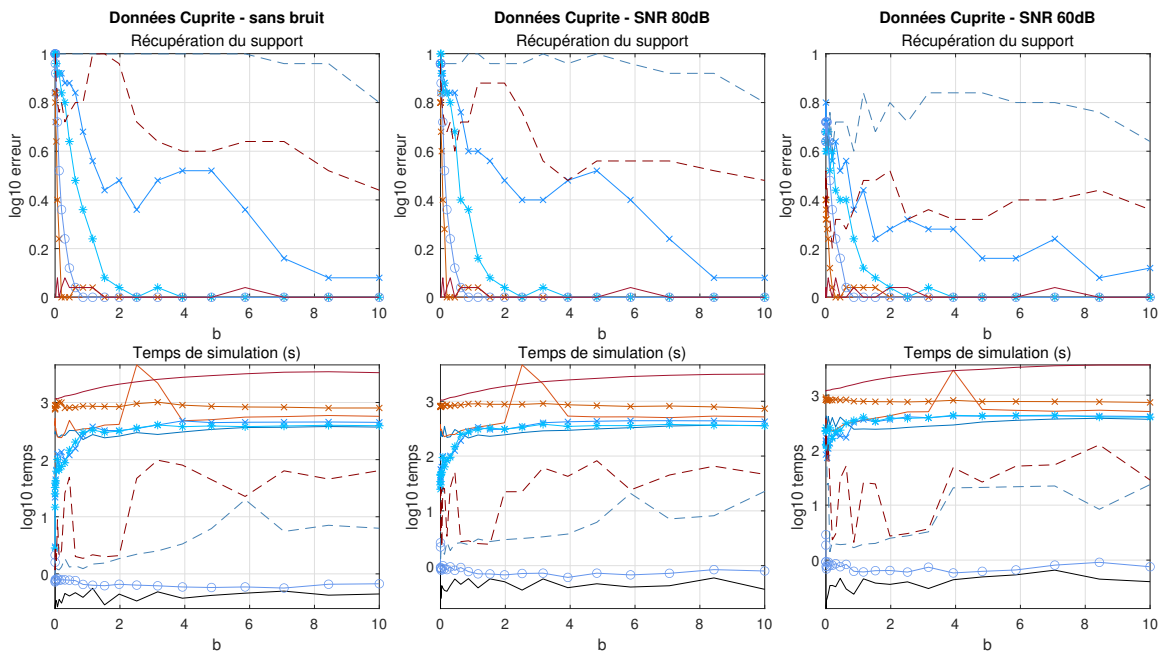


FIGURE 4.16 – Taux de récupération du support en fonction de la valeur de la nonlinéarité b (haut), temps de simulation par réalisation (bas) pour les données Cuprite en fonction du bruit (sans bruit, SNR = 80dB, SNR = 60dB).

Données USGS. Finalement, l'analyse porte sur les résultats obtenus à partir des données issues de l'image hyperspectrale USGS. Pour ce jeu de données, le support n'est pas supposé connu et est généré aléatoirement selon une loi uniforme pour chaque réalisation, tandis que les valeurs des abondances sont variables. Le dictionnaire contient $N_D = 498$ éléments, et on suppose que le nombre d'abondances par pixel est connu, soit $K = 4$. L'objectif est d'évaluer les performances des méthodes proposées dans un cadre où à la fois le support et les coefficients varient. Les résultats sont présentés dans les figures 4.17, 4.18 et 4.19, correspondant respectivement aux cas sans bruit, avec SNR = 80dB, et avec SNR = 60dB. Ces résultats sont analysés selon trois critères : le terme d'attache aux données, l'erreur d'estimation des abondances \mathbf{a} , ainsi que l'erreur d'estimation des non-linéarités. Sur ces figures, la première ligne présente l'erreur moyenne, calculée sur l'ensemble des réalisations, en fonction du paramètre b . Les deux lignes suivantes illustrent, pour chaque réalisation individuelle, l'évolution de l'erreur en fonction de b pour la méthode de la littérature [96], ainsi que pour la méthode basée sur EXIPRIM donnant les meilleurs résultats en termes d'estimation (à savoir *OMP_precon_inv* dans le cas sans bruit, et *OMP_precon_LS* en présence de bruit). Enfin, la figure 4.20 illustre le taux de récupération du support en fonction de la valeur de b , ainsi que le temps de calcul associé à chacune des méthodes.

Les résultats montrent qu'en l'absence de bruit, quatre méthodes basées sur EXIPRIM offrent de meilleures performances sur l'ensemble des trois critères, tandis que les autres n'apportent pas d'amélioration significative. La méthode la plus performante est *OMP_precon_inv*, qui améliore les solutions d'un facteur moyen de 10^5 par rapport à la méthode de la littérature. Les autres approches efficaces sont *LASSO_precon_inv*, suivie de *OMP_precon_LS* et *OMP_sens*. Comme observé précédemment, certaines réalisations présentent des erreurs plus importantes, en particulier les réalisations 12 et 13, lorsque la valeur de b augmente. Globalement, l'augmentation de b entraîne une dégradation des performances pour l'ensemble des méthodes, en particulier sur l'estimation de la non-linéarité. Cependant, l'ajout de bruit modifie cette tendance. En effet, l'augmentation de b ne conduit pas systématiquement à une hausse de l'erreur, notamment lorsque SNR = 60dB. Dans ce cas, on observe même une diminution de l'erreur d'estimation des abondances (vecteur α) lorsque

b augmente (voir figure 4.18). Ce phénomène est également visible dans le taux de récupération du support, qui tend à augmenter avec b à ce niveau de bruit.

Lorsque le bruit est fixé à $\text{SNR} = 80\text{dB}$, l'algorithme de [96], contrairement au cas des données Cuprite, ne surpasse plus toutes les méthodes basées sur EXIPRIM pour le critère du terme d'attache aux données. En effet, les algorithmes *OMP_precon_LS* et *OMP_sens* obtiennent les meilleurs résultats sur ce critère. Pour les deux autres critères, les algorithmes *OMP_precon_inv* et *LASSO_precon_inv* ont aussi de bonnes performances. Les performances des méthodes [96] et *OMP_eps* sont, sur ces deux derniers critères, relativement proches. Pour $\text{SNR} = 60\text{dB}$, les résultats rejoignent ceux observés pour les données Cuprite : la méthode [96] reste performante pour le terme d'attache aux données, mais elle est surpassée par les méthodes de type EXIPRIM pour l'estimation des abondances et des non-linéarités.

En ce qui concerne la récupération du support dans le cas sans bruit, la méthode *LASSO_precon_inv* se distingue en parvenant à l'identifier correctement le support dans 100% des cas, suivie de près par *OMP_precon_inv* et *OMP_precon_LS*, dont les taux de récupération dépassent 90%. À l'inverse, la méthode [96] échoue systématiquement à retrouver le support correct, ce qui corrobore les constats établis précédemment. Lorsque le niveau de bruit augmente, les trois méthodes les plus performantes — *LASSO_precon_inv*, *OMP_precon_inv* et *OMP_precon_LS* — conservent des résultats satisfaisants, avec des taux de récupération du support avoisinant 0.8, *OMP_precon_LS* devenant alors la méthode la plus efficace. Néanmoins, dans des conditions de bruit plus sévères, aucune des méthodes testées ne parvient à retrouver le support exact de manière systématique.

Enfin, en ce qui concerne les temps de calcul, l'algorithme de [96] reste le plus rapide, avec des temps de l'ordre de la centaine de secondes. Les méthodes *OMP_precon_inv* et *LASSO_precon_inv* présentent des temps comparables pour certaines valeurs de b , mais peuvent atteindre des durées deux à quatre fois plus élevées selon les cas. Les méthodes *OMP_precon_LS* et *OMP_sens*, qui donnent de bons résultats, nécessitent quant à elles des temps de simulation d'environ 400 secondes, ce qui reste raisonnable au vu des performances obtenues.

Conclusion sur le démélange spectral

Cette section a appliqué les différents algorithmes parcimonieux développés dans ce chapitre au problème de démélange d'images hyperspectrales. Les dictionnaires utilisés dans ce contexte sont fortement mal conditionnés, ce qui justifie l'usage des méthodes de correction proposées, aussi bien dans le cas linéaire que non-linéaire. Dans le cas linéaire, l'utilisation d'algorithmes prenant en compte le conditionnement du dictionnaire permet une amélioration significative des performances par rapport à l'algorithme OMP standard. Toutefois, ces algorithmes présentent certaines limites, notamment en présence de bruit ou de désaccords (mismatches) entre le modèle et les données. Ces difficultés sont particulièrement marquées lorsque le dictionnaire est fortement redondant, comme c'est le cas pour le dictionnaire USGS. Une piste complémentaire explorée repose sur l'utilisation d'heuristiques telles que le recuit simulé, qui, en présence de bruit, peut donner de bons résultats même sans préconditionnement. Néanmoins, cette approche se heurte à un coût de calcul élevé, qui la rend difficilement intégrable dans des algorithmes itératifs comme EXIPRIM. Il pourrait toutefois être intéressant d'étudier l'adaptation de ces heuristiques au cadre non-linéaire.

Dans le cas non-linéaire, les méthodes proposées ont été comparées à l'approche de référence [96]. L'ensemble des résultats met en évidence la pertinence des approches fondées sur EXIPRIM pour le démélange hyperspectral non-linéaire, en particulier dans des situations complexes impliquant des dictionnaires mal conditionnés et un support inconnu. En l'absence de bruit, ces méthodes surpassent nettement celle de la littérature, que ce soit en termes d'estimation des abondances \mathbf{a} , des non-linéarités ou de récupération du support. En présence de bruit, certaines variantes — notamment *OMP_precon_inv*, *LASSO_precon_inv* et *OMP_precon_LS* — conservent de bonnes performances et restent efficaces même avec des dictionnaires de grande taille comme celui de l'image USGS. En comparaison, l'approche de [96] est efficace sur le critère du terme d'attache aux données et sur le temps de simulation mais présente des limitations importantes concernant l'estimation des abondances, des non-linéarités et la récupération du support. L'ensemble des résultats obtenus

confirme l'intérêt d'introduire des techniques telles que le préconditionnement ou les dictionnaires de type sensing, ainsi que des critères de sélection adaptés, pour renforcer la robustesse et la qualité des solutions obtenues.

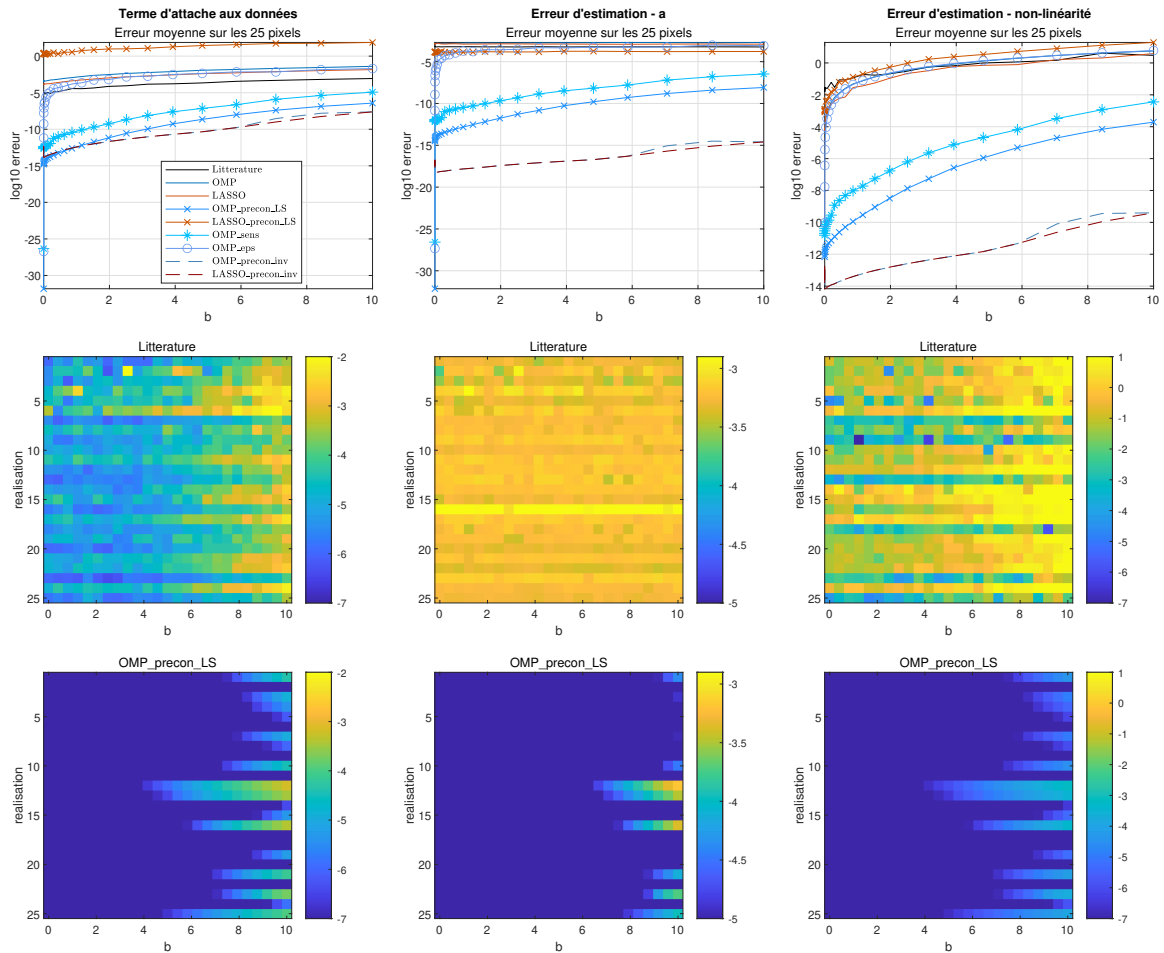


FIGURE 4.17 – Erreur d'estimation dans le cas non-linéaire pour les données USGS au niveau du terme d'attaches aux données, de l'erreur d'estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) dans le cas sans bruit.

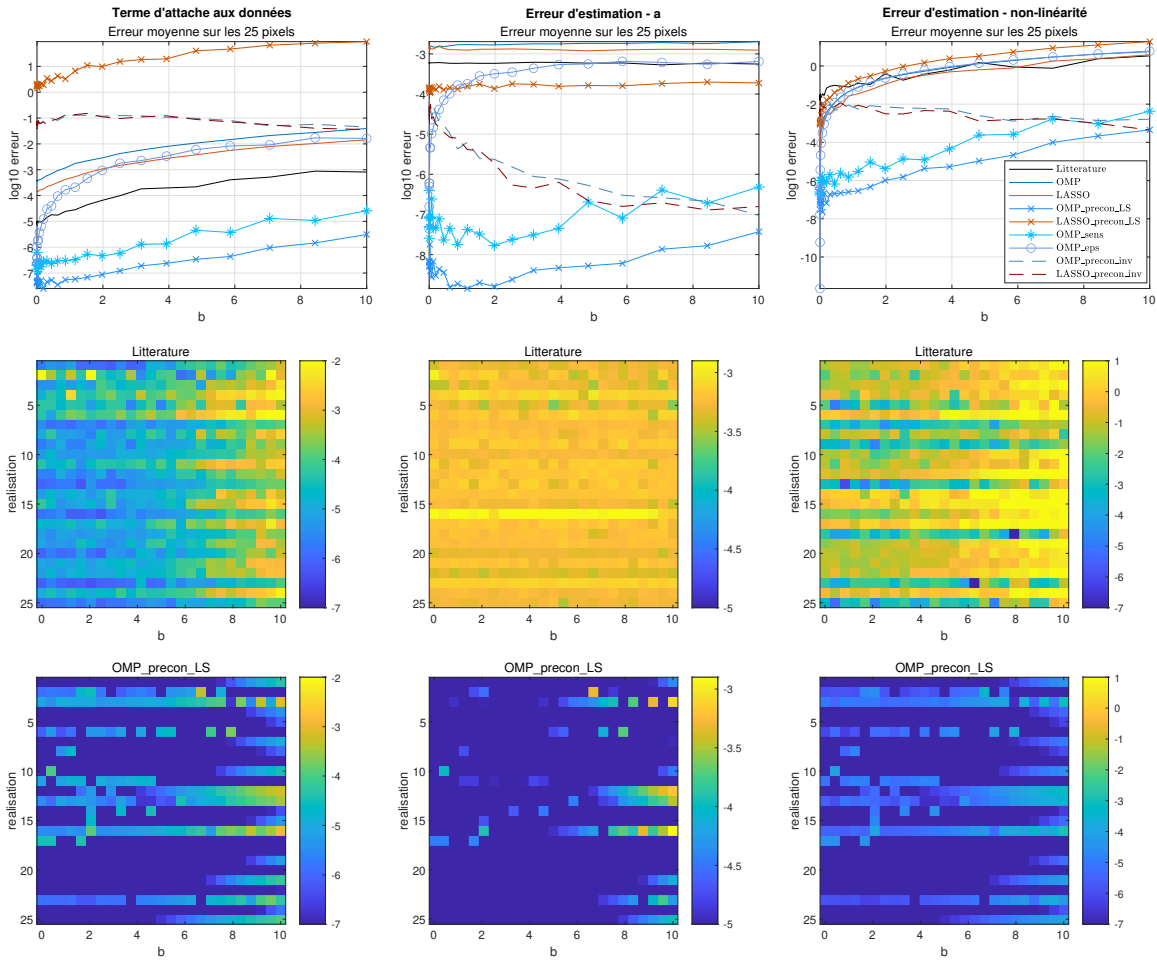


FIGURE 4.18 – Erreur d’estimation dans le cas non-linéaire pour les données USGS au niveau du terme d’attache aux données, de l’erreur d’estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) en présence de bruit ($SNR = 80dB$).

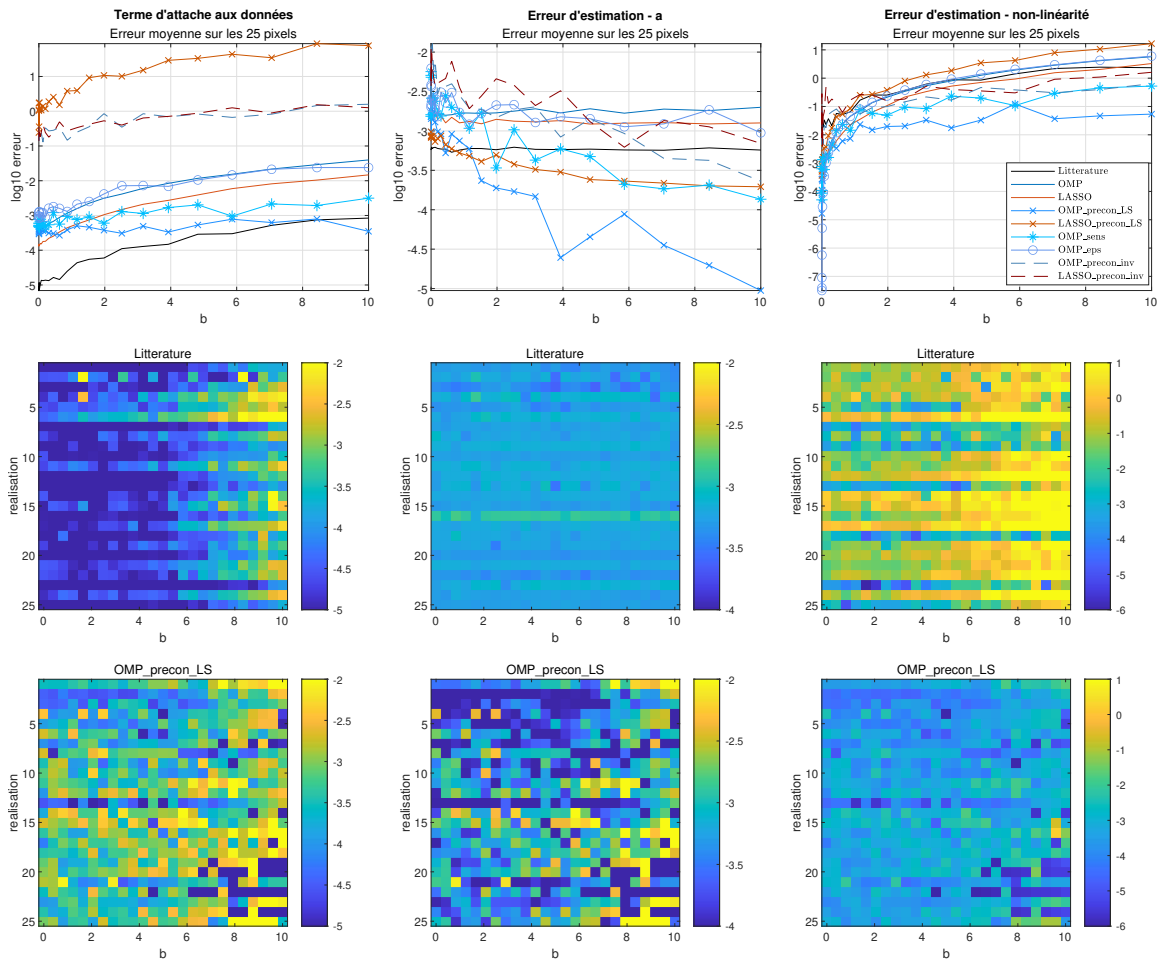


FIGURE 4.19 – Erreur d'estimation dans le cas non-linéaire pour les données USGS au niveau du terme d'attache aux données, de l'erreur d'estimation de \mathbf{a} et de la non-linéarité en moyenne pour chaque valeur de b (haut), et par réalisation (deux lignes sur bas) en utilisant [96] (milieu) et EXIPRIM (bas) en présence de bruit ($\text{SNR} = 60\text{dB}$).

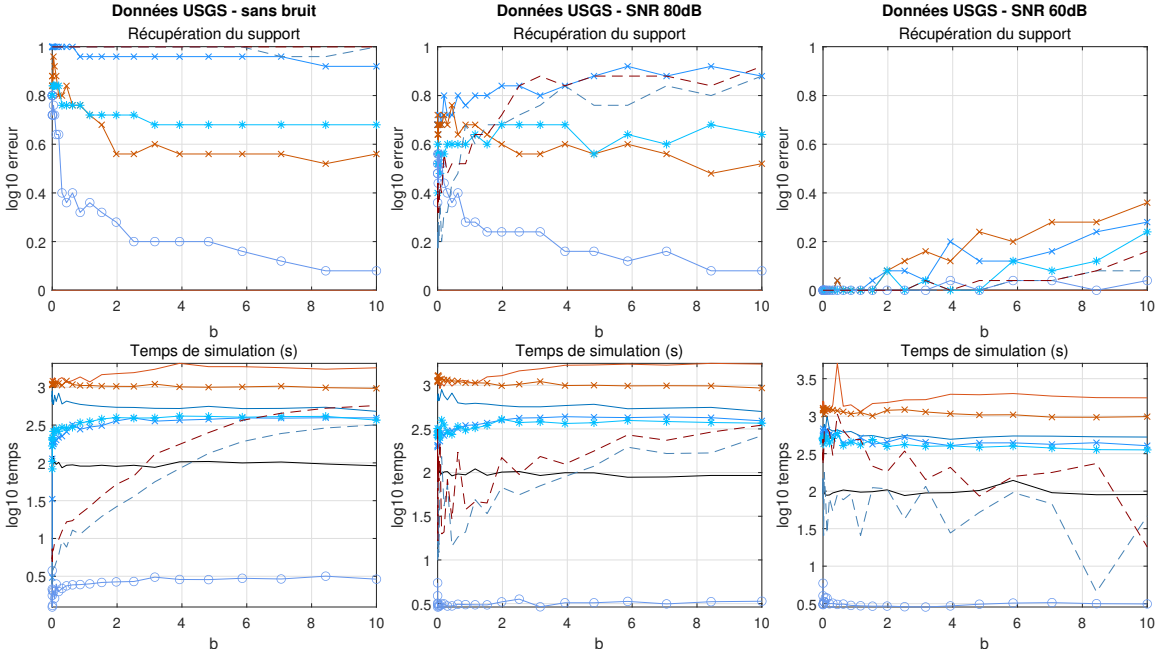


FIGURE 4.20 – Taux de récupération du support en fonction de la valeur de la nonlinéarité b (haut), temps de simulation par réalisation (bas) pour les données USGS en fonction du bruit (sans bruit, $\text{SNR} = 80\text{dB}$, $\text{SNR} = 60\text{dB}$).

4.5.2 Estimation de la réponse spectrale d'un spectromètre

Dans le cadre de l'estimation des fonctions de réponse spectrale (ISRF) des spectromètres, le modèle utilisé est très proche de celui présenté dans la section 4.1. Ce modèle est rappelé ici :

$$\mathbf{y} = f_{\theta} \circ (\mathbf{X}\Phi\alpha) + \epsilon,$$

Dans ce contexte, l'objectif est d'estimer l'ISRF en supposant qu'elle admet une représentation parcimonieuse dans un dictionnaire Φ avec un vecteur de coefficients α . Comme décrit dans le chapitre 2, ce dictionnaire peut être construit à partir d'une décomposition en valeurs singulières (SVD) des ISRFs. La matrice \mathbf{X} correspond quant à elle au spectre de référence, translaté sur les longueurs d'onde d'intérêt. Une particularité, par rapport au modèle présenté au chapitre 3, réside dans l'hypothèse selon laquelle la fonction de réponse radiométrique est identique pour l'ensemble des pixels considérés. Par conséquent, l'utilisation d'une collection de spectres de référence n'est plus requise ; un unique spectre de référence est utilisé. Enfin, les ISRFs sont supposées positives et normalisées.

Cas linéaire

Il s'agit du cas considéré au chapitre 2 dans lequel la fonction f_{θ} est égale à la fonction identité :

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}_i^T \Phi \alpha \quad i = 1, \dots, Q.$$

On cherche à estimer les ISRFs en estimant les vecteurs parcimonieux α à partir des mesures $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_Q$ du spectromètre. Différents cas d'étude sont analysés ici pour évaluer les performances des méthodes dans le cadre de l'estimation des fonctions de réponse spectrale (ISRFs). Dans un premier scénario, on suppose que le modèle d'estimation est parfaitement respecté : les observations \mathbf{y} sont égales au produit entre l'ISRF réelle et la matrice des spectres de référence pour chaque fenêtre

glissante. Le deuxième scénario introduit du bruit additif gaussien à ce premier scénario avec un niveau de bruit vérifiant $\text{SNR} = 55\text{dB}$. Le troisième scénario modifie le modèle de génération : les observations sont obtenues en effectuant la convolution entre les ISRFs et le spectre de référence. En effet, la section 2.3.1 avait montré les complications induites par cette génération. Dans ce contexte, les ISRFs sont identiques pour toutes les longueurs d'onde, et aucun bruit n'est ajouté. Enfin, le quatrième scénario ajoute une difficulté supplémentaire : les ISRFs varient d'une longueur d'onde à l'autre et un bruit vérifiant $\text{SNR} = 55\text{dB}$ est ajouté.

La figure 4.21 présente de gauche à droite le conditionnement du dictionnaire $\Psi = R\Phi$, celui du dictionnaire Γ , puis celui de $M\Phi$. Les deux figures situées à droite comparent ensuite les méthodes en termes de terme d'attache aux données et d'erreur d'estimation des ISRFs (erreur utilisée au chapitre 2, dans le premier cas (sans bruit, modèle parfaitement respecté)). On constate que le dictionnaire $M\Phi$ présente le meilleur conditionnement, ce qui se reflète également par les meilleures performances d'estimation des ISRFs. En revanche, le recuit simulé atteint les meilleures valeurs du terme d'attache aux données, malgré une estimation moins précise des ISRFs. Les autres méthodes testées ne parviennent pas à d'aussi bons résultats dans ce scénario. Lorsqu'un bruit est introduit (deuxième scénario), seules deux approches restent robustes : l'OMP sans préconditionnement ni matrice de sensing, ainsi que le recuit simulé, qui continue à produire de bons résultats. Dans les scénarios plus complexes (scénarios 3 et 4), les mêmes tendances se confirment, mais avec des écarts de performances qui se creusent. L'algorithme OMP offre les meilleurs résultats d'estimation des ISRFs avec un temps de calcul raisonnable, tandis que le recuit simulé optimise davantage le terme d'attache aux données, mais au prix d'un coût calculatoire plus élevé. Ces résultats montrent que les méthodes avec préconditionnement sont très sensibles aux hypothèses du modèle. En présence de mismatches entre le modèle et les données réelles, elles peuvent entraîner des erreurs d'estimation importantes. En conséquence, nous avons décidé de ne pas utiliser de préconditionnement pour l'estimation des ISRFs.

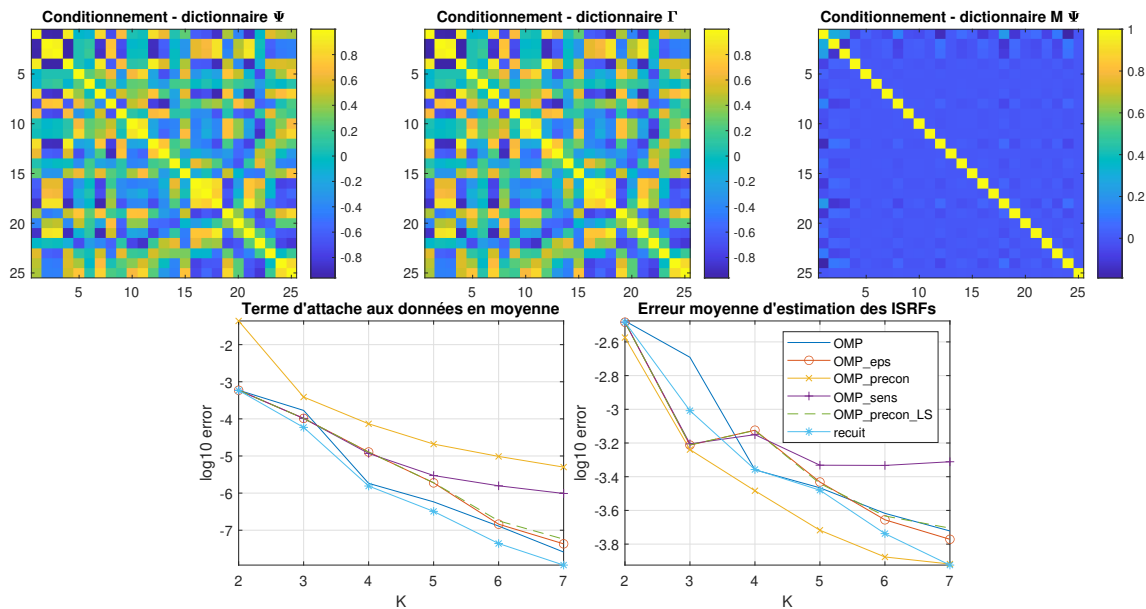


FIGURE 4.21 – Affichage du conditionnement des trois dictionnaires Ψ obtenus pour une fenêtre glissante (haut) et erreur moyenne d'estimation des ISRFs en fonction de la cardinalité K (bas) dans le cas sans bruit, avec des ISRFs identiques.

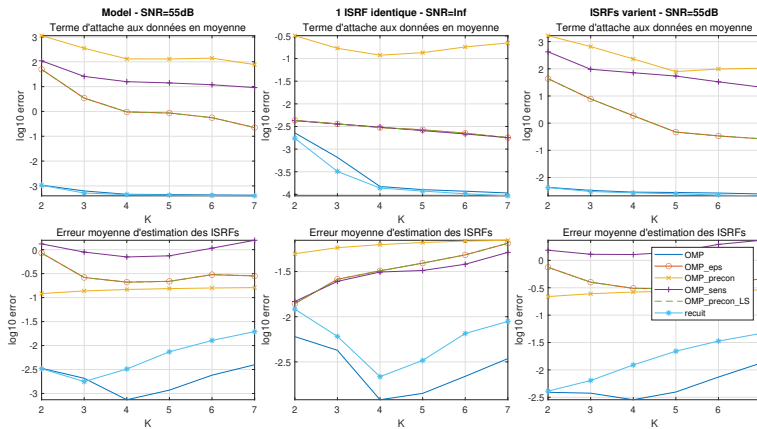


FIGURE 4.22 – Erreur moyenne d’estimation des ISRFs en fonction de la cardinalité K pour trois différents cas (modèle avec bruit, génération avec une ISRF identique, génération avec ISRFs variables et présence de bruit à 55dB)

Cas non-linéaire

On se place à présent dans le cadre non-linéaire, où l’on considère une non-linéarité f_{θ} représentée dans la Figure 4.23. Cette non-linéarité est caractéristique de certaines réponses radiométriques observées sur des capteurs réels. Elle présente typiquement trois régimes : une zone non-linéaire pour les faibles intensités, une zone intermédiaire quasi-linéaire où la réponse du capteur est proportionnelle au signal incident, et enfin une zone de saturation. Ce comportement en trois phases reflète fidèlement le fonctionnement de plusieurs dispositifs d’acquisition optiques ou hyperspectraux et justifie l’étude de ce type de modèle non-linéaire dans un cadre d’estimation réaliste. On notera que cette non-linéarité est bijective mais n’est pas séparable. Dès lors, seule la méthode EXIPRIM est utilisée. Deux cas d’étude sont analysés :

- Dans le premier cas, on suppose que l’ISRF reste identique sur l’ensemble de la fenêtre glissante. Ce scénario correspond à une situation idéale où les variations spectrales sont nulles au sein de la fenêtre,
- Dans le second cas, on introduit une variabilité faible de l’ISRF d’une longueur d’onde à l’autre. Cette hypothèse est plus réaliste et vise à évaluer la robustesse des méthodes face à des modulations progressives des réponses instrumentales dans un cadre non-linéaire.

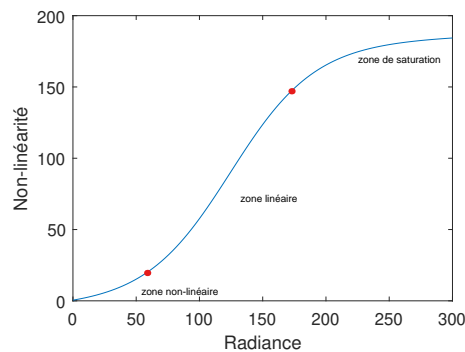


FIGURE 4.23 – Fonction non-linéaire utilisée.

Application aux ISRFs identiques par fenêtre glissante. On suppose ici que le spectre mesuré est divisé en 14 canaux, chacun couvrant 70 longueurs d’onde. Une ISRF est associée à chaque canal, soit un total de 14 ISRFs à estimer. La Figure 4.24 présente les performances obtenues pour

chaque canal selon quatre critères : le terme d'attache aux données, l'erreur d'estimation du vecteur \mathbf{a} , l'erreur sur la non-linéarité estimée, et l'erreur d'estimation des ISRFs telle que définie dans le chapitre 2. Les résultats sont obtenus pour différentes valeurs de la cardinalité K . Les trois dernières sous-figures de cette figure affichent la moyenne des quatre erreurs en fonction de K . On observe que les meilleures performances globales sont obtenues avec la régularisation ℓ_0 , notamment pour des valeurs de K comprises entre 2 et 4, ce qui correspond à un compromis entre parcimonie et fidélité aux observations. De plus, on observe que certains canaux, tels que les canaux 1, 12 et 13, présentent des erreurs d'estimation plus importantes. Cette difficulté peut s'expliquer par la forme du spectre au niveau de ces canaux. En effet, lorsque la diversité spectrale est faible, l'information disponible pour estimer la non-linéarité est limitée, ce qui rend l'estimation des ISRFs plus incertaine.

La figure 4.25 explore ensuite l'impact du bruit sur l'estimation, pour une cardinalité fixée à $K = 4$ et plusieurs valeurs de SNR. Comme attendu, on constate une dégradation progressive des performances lorsque le niveau de bruit augmente, quelque soit le critère mesuré et quelque soit la régularisation utilisée. Toutefois, les mêmes canaux vus précédemment (1, 12 et 13) apparaissent plus sensibles au bruit, ce qui se traduit par des erreurs d'estimation plus importantes, en particulier avec la régularisation ℓ_1 . En comparaison, la régularisation ℓ_0 maintient de meilleures performances sur l'ensemble des canaux, confirmant à nouveau ses bonnes performances dans le contexte d'estimation des ISRFs, même en présence de bruit.

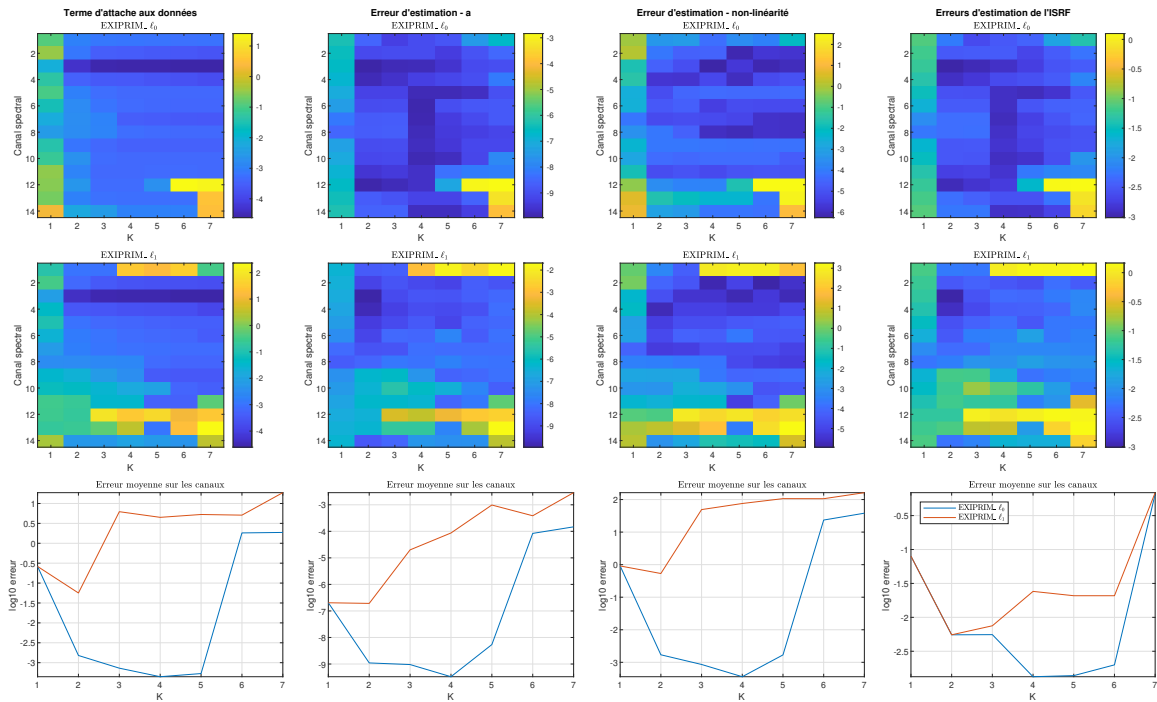


FIGURE 4.24 – Erreurs d'estimation dans le cas non-linéaire pour les méthodes $EXIPRIM - \ell_0$ (haut), $EXIPRIM - \ell_1$ (milieu) et comparaison des méthodes en fonction de la cardinalité K (bas) pour un bruit de $SNR = 55dB$.

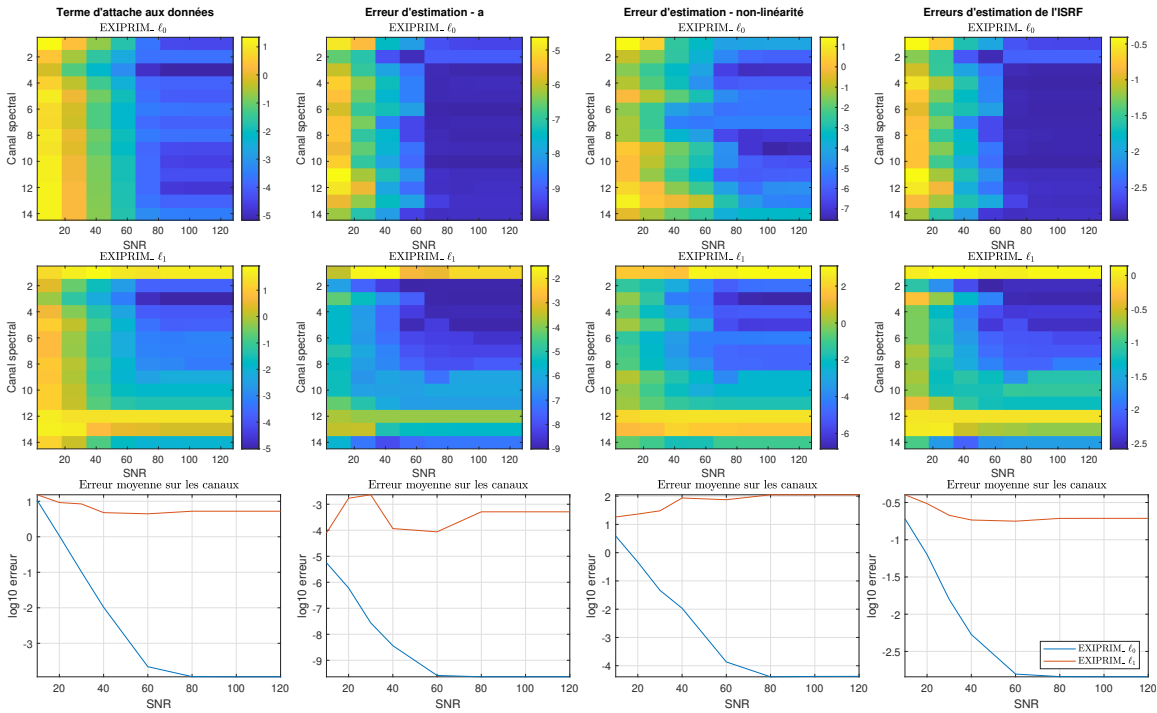


FIGURE 4.25 – Erreurs d’estimation dans le cas non-linéaire pour les méthodes $EXIPRIM_{\ell_0}$ (haut), $EXIPRIM_{\ell_1}$ (milieu) et comparaison des méthodes en fonction du niveau de bruit SNR (bas) pour une cardinalité de $K = 4$.

Application aux ISRFs qui varient dans la bande. Nous étudions ici l’impact des variations des ISRFs en fonction de la longueur d’onde sur les performances d’estimation. Contrairement au cas où les ISRFs sont supposées constantes par canal, nous considérons ici des ISRFs qui varient le long du spectre, ce qui génère un total de 1024 ISRFs différentes à estimer à partir d’un spectre dégradé. Cette configuration permet d’évaluer la robustesse des méthodes d’estimation face à des variations de la forme des ISRFs plus réalistes. Pour traiter ce problème, nous appliquons la méthode à fenêtre glissante introduite au chapitre 2, ce qui conduit à 1024 sous-problèmes indépendants à résoudre.

Les résultats sont présentés dans la figure 4.26, qui compare les performances obtenues avec les régularisations ℓ_0 et ℓ_1 , d’abord en fonction de la cardinalité K pour un bruit fixé (SNR = 55 dB), puis en fonction du niveau de bruit pour une cardinalité fixée ($K = 4$). Dans chacune de ces figures, les deux premières lignes illustrent les résultats individuels pour l’ensemble des 1024 ISRFs, tandis que la troisième ligne montre une moyenne sur ces 1024 estimations. Comme dans le cas des ISRFs non variables, la régularisation ℓ_0 fournit systématiquement les meilleures performances que ce soit au niveau du terme d’attache aux données, de l’erreur d’estimation du vecteur \mathbf{a} , de l’erreur d’estimation de la non-linéarité ou celle des ISRFs. De plus, pour chacun de ces critères, l’erreur augmente lorsque le bruit augmente, avec des erreurs importantes à partir de SNR = 40dB pour les performances attendues pour l’estimation des ISRFs. Cependant, on observe ici que la meilleure estimation des ISRFs est atteinte en moyenne pour une cardinalité plus faible ($K = 2$) que dans le cas des ISRFs constantes. Cela reflète une difficulté accrue pour l’estimation lorsque les ISRFs varient et que des non-linéarités plus complexes sont présentes. Un autre constat notable est la dégradation marquée des performances d’estimation pour les premières ISRFs (environ du pixel 1 à 20), même à faible bruit. Cette tendance est confirmée dans la figure 4.28, qui présente des résultats pour un SNR = 55 dB et $K = 4$, en termes de différence entre spectre réel et reconstruit, d’erreur d’estimation des ISRFs, et de visualisation d’une ISRF estimée. La première image de cette figure montre une

comparaison entre le spectre réel sans défauts et le spectre affecté par les erreurs. On constate que le début du spectre est principalement plat, alors que des raies spectrales apparaissent dans la suite du signal. Cette partie plate du spectre peut expliquer la mauvaise estimation initiale : elle contient moins d'informations discriminantes (faible variabilité), les intensités y sont plus élevées, se rapprochant de la zone de saturation introduite par la non-linéarité, ce qui complique l'estimation, et comme discuté au chapitre 2, les ISRFs sont plus difficiles à estimer dans les zones plates du spectre. Les courbes d'erreur (différence spectre réel / reconstruit et erreur sur les ISRFs) montrent clairement un pic d'erreur au tout début du spectre. Ensuite, l'erreur d'estimation des ISRFs chute pour atteindre des valeurs proches de 1% en moyenne avec la régularisation ℓ_0 , ce qui atteste des bonnes performances de la méthode lorsque la partie du spectre considéré dans la fenêtre glissante est suffisamment variable.

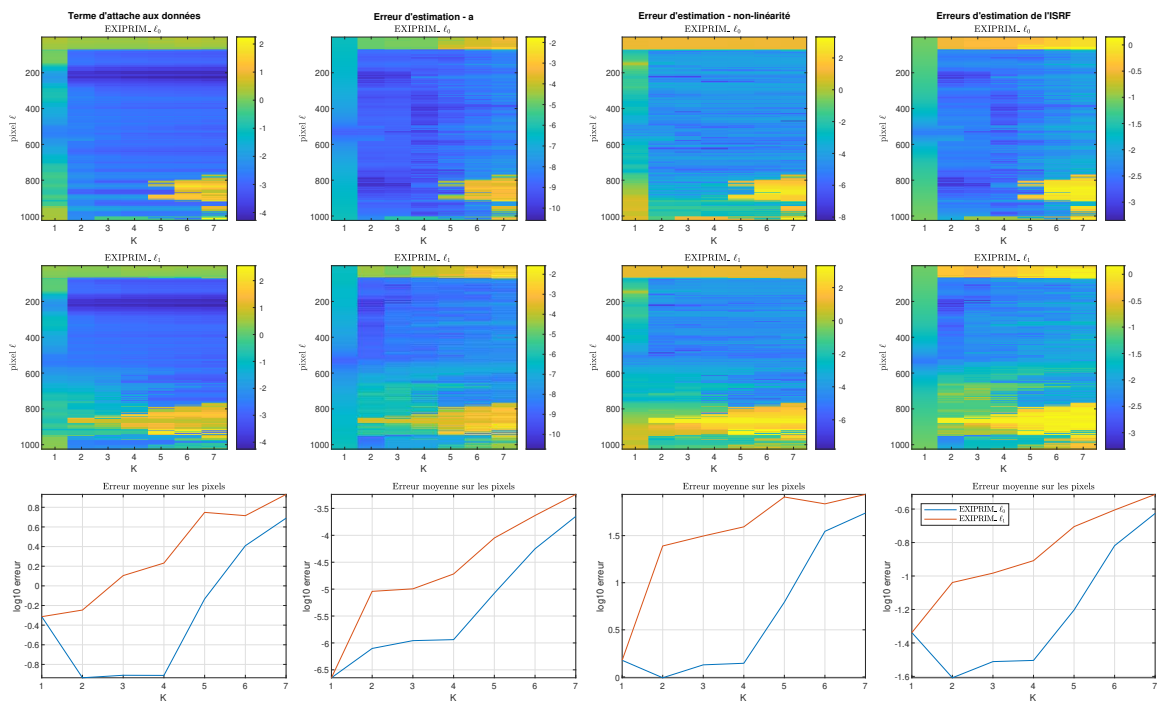


FIGURE 4.26 – Erreurs d'estimation dans le cas non-linéaire lorsque les ISRFs varient dans la bande pour les méthodes $EXIPRIM - \ell_0$ (haut), $EXIPRIM - \ell_1$ (milieu) et comparaison des méthodes en fonction de la cardinalité K (bas) pour un bruit de $SNR = 55dB$.

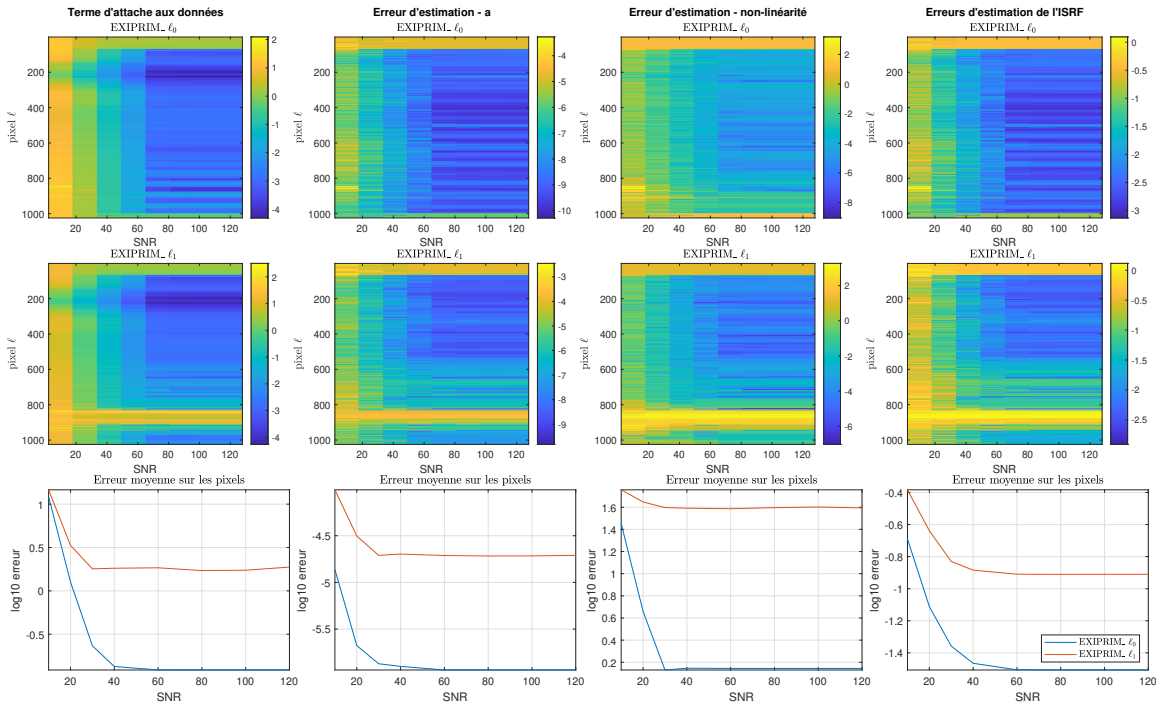


FIGURE 4.27 – Erreurs d’estimation dans le cas non-linéaire lorsque les ISRFs varient dans la bande pour les méthodes $EXIPRIM_{\ell_0}$ (haut), $EXIPRIM_{\ell_1}$ (milieu) et comparaison des méthodes en fonction du niveau de bruit SNR (bas) pour une cardinalité de $K = 4$.

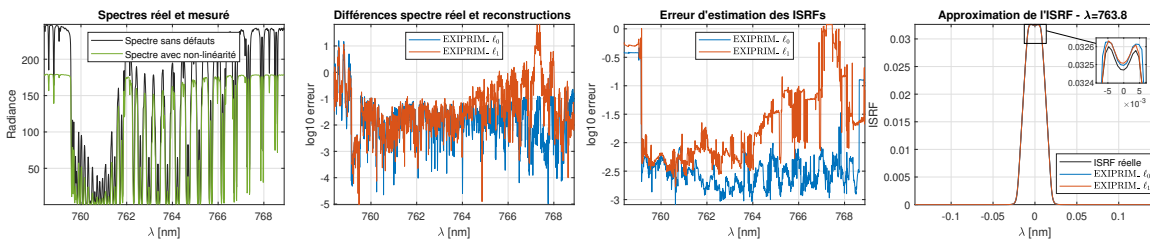


FIGURE 4.28 – Comparaison du spectre sans défauts et du spectre avec non-linéarités, différences absolues entre le spectre réel et ses reconstructions, erreurs d’estimation des ISRFs selon la longueur d’onde λ et exemple d’approximation d’une ISRF pour les méthodes $EXIPRIM_{\ell_0}$ et $EXIPRIM_{\ell_1}$, pour un niveau de bruit de $SNR = 55dB$ et une cardinalité de $K = 4$.

Conclusion sur l’estimation des ISRFs

Cette section a permis de mettre en œuvre des méthodes de résolution de problèmes inverses parcimonieux pour l’estimation des fonctions de réponse spectrale (ISRFs) de spectromètres. Dans le cas linéaire, l’utilisation d’un préconditionnement du dictionnaire Ψ utilisé pour la représentation des ISRFs ne s’est pas révélée bénéfique. Cela peut s’expliquer par plusieurs facteurs, notamment l’échantillonnage plus fin utilisé pour générer les spectres mesurés (via convolution avec un spectre théorique), la présence de bruit, et les variations des ISRFs à l’intérieur de la bande spectrale. Les meilleurs résultats sont obtenus sans préconditionnement, raison pour laquelle celui-ci n’a pas été utilisé dans la résolution du problème inverse non-linéaire. Dans le cas non-linéaire, deux scénarios

ont été explorés : le premier avec des ISRFs constantes sur chaque canal, et le second avec des ISRFs variant à chaque longueur d'onde, estimées à l'aide de fenêtres glissantes. Sans surprise, les performances sont meilleures lorsque les ISRFs sont constantes, avec une cardinalité optimale autour de $K = 4$. Lorsqu'elles varient, la meilleure estimation est atteinte en moyenne pour une cardinalité plus faible, autour de $K = 2$, reflétant la complexité accrue du problème. Dans les deux configurations, la régularisation ℓ_0 surpasse nettement la régularisation ℓ_1 , confirmant sa pertinence pour ce type de problème, bien que l'augmentation du bruit dégrade les performances. Les erreurs les plus notables apparaissent dans les zones du spectre où la variabilité spectrale est faible, ce qui complique l'estimation des non-linéarités et, par conséquent, celle des ISRFs.

Les résultats obtenus dans cette partie montrent donc que les méthodes parcimonieuses développées sont efficaces et adaptables, même dans des contextes non-linéaires et avec des ISRFs variant fortement. Elles constituent ainsi une base solide pour des approches plus avancées et applicables en conditions réelles.

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons généralisé la méthode SPIRITUAL, introduite dans le chapitre 3, à la résolution de problèmes inverses non-linéaires sous contrainte de parcimonie sur le vecteur d'intérêt, en supposant que la non-linéarité est paramétrée par un vecteur inconnu à estimer. Pour résoudre ce problème, deux méthodes ont été introduites. La première, appelée SVP, suppose que les non-linéarités sont séparables et repose sur un algorithme de descente de gradient, combiné à des étapes proximales, pour résoudre le problème d'optimisation avec la norme ℓ_0 ou ℓ_1 . La seconde, appelée EXIPRIM, s'applique au cas où les non-linéarités ne sont pas nécessairement séparables mais sont supposées bijectives. Cette méthode autorise également l'utilisation des normes ℓ_0 ou ℓ_1 . Par la suite, l'utilisation de EXIPRIM a été généralisée aux cas où les dictionnaires sont mal conditionnés. Différentes méthodes ont été introduites pour traiter ce cas, avec ou sans dictionnaire de type sensing, en intégrant un préconditionnement reposant ou non sur l'utilisation de la fonction inverse de la non-linéarité.

Les méthodes SVP et EXIPRIM ont été analysées et appliquées dans un premier temps à des simulations synthétiques simples, en faisant varier le type de non-linéarité, le niveau de bruit, les différents paramètres (taille du dictionnaire, nombre d'observations), ainsi que le type de dictionnaire (SVD, Haar, Gabor). Les résultats obtenus ont mis en évidence les bonnes performances globales de la méthode EXIPRIM pour l'estimation conjointe du vecteur parcimonieux et des paramètres de la non-linéarité. Toutefois, sans préconditionnement, cette méthode peut présenter certaines limites. Ces approches ont ensuite été appliquées à des données réelles, dans le cadre du démixage d'images hyperspectrales ou de l'estimation des fonctions de réponse spectrale (ISRF) de spectromètres, lorsque la non-linéarité est supposée identique pour tous les pixels. Le préconditionnement a été étudié dans les deux applications, à commencer par le cas linéaire.

Pour le cas linéaire, il en ressort que, si le préconditionnement est nécessaire pour le démixage d'images hyperspectrales, son utilité pour l'estimation des ISRFs reste limitée. En effet, comme présenté dans le chapitre 2, l'échantillonnage dans ce contexte induit un écart entre les données obtenues après convolution et le modèle utilisé, ce qui accentue les erreurs d'estimation des ISRFs, en particulier lorsqu'elles varient dans la bande. À l'inverse, les dictionnaires utilisés pour le démixage d'images hyperspectrales étant très mal conditionnés, la prise en compte de cette information est indispensable pour obtenir de bonnes performances d'estimation. Une limite des méthodes de préconditionnement réside dans leur sensibilité au bruit : elles peuvent avoir pour effet d'amplifier ce dernier. Une piste complémentaire explorée repose sur l'utilisation d'heuristiques, telles que le recuit simulé, qui peut produire de bons résultats en présence de bruit même sans préconditionnement. Néanmoins, cette approche présente un coût de calcul très élevé, qui la rend difficilement intégrable à des algorithmes itératifs comme EXIPRIM.

Dans le cas non-linéaire, lorsque les dictionnaires sont bien conditionnés et que les observations présentent une variabilité suffisante, les meilleurs résultats d'estimation sont obtenus avec l'algo-

rithme EXIPRIM_ℓ₀. Lorsque cette variabilité diminue, des erreurs apparaissent, mais l'algorithme reste globalement performant. En revanche, lorsque le dictionnaire est mal conditionné, les méthodes EXIPRIM doivent être adaptées. Que ce soit dans un cadre sous-complet ou sur-complet, les meilleurs résultats sont obtenus à l'aide de variantes basées sur EXIPRIM, notamment avec *OMP_precon_inv*, *LASSO_precon_inv* et *OMP_precon_LS*. Dans tous les cas, les performances diminuent avec l'introduction de bruit. Les perspectives de recherche incluent le développement de nouveaux algorithmes intégrant des stratégies de préconditionnement, spécifiquement adaptées à des niveaux de bruit plus élevés, ainsi que leur généralisation à des modèles non-linéaires plus complexes. Il serait notamment intéressant d'étudier l'adaptation d'heuristiques telles que le recuit simulé dans le cadre non-linéaire.

Conclusion et perspectives

Le but de cette thèse est de proposer de nouvelles approches d'estimation de paramètres d'instrument à partir d'observations indirectes. Spécifiquement, la thèse se focalise sur la calibration des spectromètres utilisés pour le sondage atmosphérique, notamment dans le cadre de missions dédiées à la mesure des gaz à effet de serre telles que MicroCarb ou CO2M. L'objectif principal est de mieux caractériser et d'estimer, à partir des données mesurées, les fonctions de réponses spectrales des instruments (ISRFs), les décalages spectraux ainsi que les réponses radiométriques non-linéaires associées à chaque pixel du détecteur. Il s'agit ainsi de corriger les erreurs susceptibles d'affecter les spectres mesurés, afin d'en améliorer la qualité et de garantir la fiabilité des produits scientifiques dérivés, en particulier les concentrations en gaz atmosphériques. Les méthodes proposées visent à rendre la calibration plus robuste, plus précise et plus compatible avec les contraintes opérationnelles rencontrées dans un contexte réel.

Différentes formulations basées sur des problèmes inverses potentiellement non-linéaires ont été explorées, avec pour objectif final d'estimer de manière conjointe les ISRFs, les décalages spectraux et les réponses radiométriques. Les ISRFs sont tout d'abord estimées en s'appuyant sur une représentation parcimonieuse dans un dictionnaire construit à partir d'une décomposition en valeurs singulières (SVD) d'un ensemble d'ISRFs mesurées au sol. Cette approche offre une flexibilité supérieure aux méthodes traditionnelles, en s'adaptant à une plus grande diversité de formes possibles des ISRFs. Pour cette étape, l'algorithme Orthogonal Matching Pursuit (OMP) est retenu, car il constitue un bon compromis entre précision d'estimation et efficacité computationnelle. Ensuite, les décalages spectraux sont estimés en supposant un modèle paramétrique, ce qui permet leur bonne reconstruction. Deux distances ont été utilisées pour cette estimation selon le cas d'utilisation : la distance de Wasserstein, issue de la théorie du transport optimal, se révèle plus robuste en présence de forts décalages spectraux ou de spectres fortement perturbés, tandis que dans les cas plus favorables — qui devraient être majoritaires dans le contexte de la mission — la norme ℓ_2 constitue une métrique efficace. Enfin, les réponses radiométriques sont modélisées elles aussi par un modèle paramétrique (polynôme) ; une fois estimées, il est possible de corriger le spectre mesuré avant une nouvelle estimation des ISRFs. Ces trois estimations sont réalisées séparément et de manière alternée. Ce découplage est justifié par deux raisons principales. La première est d'ordre méthodologique : il est essentiel de vérifier que chaque méthode fonctionne de manière robuste sur des cas simples, avant d'envisager leur combinaison dans un cadre global plus complexe. Par exemple, on teste d'abord l'estimation seule des ISRFs (problème inverse linéaire), puis leur estimation conjointe avec les réponses radiométriques, et enfin avec les décalages spectraux. Si une méthode échoue dans ces cas élémentaires, il est peu probable qu'elle réussisse dans le cas complet. La seconde raison est liée aux conditions d'application : les ISRFs, les décalages spectraux et les réponses radiométriques sont normalement suffisamment caractérisés au sol, et en vol on cherche uniquement à les réestimer à partir de cette connaissance initiale. Par exemple, dans la pratique, une estimation simple des ISRFs peut suffire, sauf si le résidu observé après modélisation indique une erreur importante. Dans ce cas, on peut envisager l'approche alternée permettant une estimation conjointe. Toutefois, une estimation globale incluant la totalité des défauts instrumentaux n'est pas toujours nécessaire. Il est plus judicieux d'analyser les spectres mesurés et le modèle visuellement pour orienter le choix : si l'on observe un décalage des raies d'absorption, cela indique probablement un défaut dans l'association

pixel-longueur d'onde ; en revanche, si en observant les zones plates du spectre, les erreurs apparaissent, un problème radiométrique est plus probable. Cette approche progressive permet d'adapter les méthodes au contexte tout en maîtrisant la complexité computationnelle. Dès lors, lorsque les erreurs instrumentales deviennent importantes pour être négligées, il devient alors indispensable de définir un modèle non-linéaire associé.

Le travail réalisé autour de l'estimation des ISRFs s'inscrit plus largement dans le cadre général de la résolution de problèmes inverses non-linéaires sous contrainte de parcimonie, où la fonction non-linéaire est supposée paramétrique. Si, dans les cas considérés, les réponses radiométriques et les décalages spectraux ont été modélisés à l'aide de polynômes, les méthodes proposées restent applicables à tout type de fonction paramétrique. Ce cadre plus général a permis d'apporter à la fois des contributions théoriques en plus de celles algorithmiques. Deux formulations principales ont été explorées : l'approche alternée dans laquelle les paramètres de la fonction non-linéaire et le vecteur parcimonieux sont estimés successivement ; et une approche globale, applicable lorsque les non-linéarités sont séparables, consistant à exprimer les paramètres de la fonction non-linéaire à partir d'un vecteur parcimonieux à estimer. Dans ces différents cadres, plusieurs types de régularisations (basées sur la norme ℓ_0 ou la norme ℓ_1) peuvent être envisagés. Plusieurs algorithmes de résolution (FBS (Forward-Backward Splitting), FISTA, LASSO et OMP couplés à l'estimation des paramètres de la non-linéarité) ont été évalués, permettant de comparer leurs performances et leur robustesse. De manière générale, l'approche la plus efficace s'est révélée être l'estimation alternée couplée à l'algorithme OMP dans les cas d'usage étudiés, qui offre un bon compromis entre précision, rapidité de calcul et robustesse numérique. Finalement, les différentes méthodes développées pour la résolution de problèmes inverses peuvent être directement transposées à d'autres domaines d'application, tels que la séparation de sources ou le démélange hyperspectral. Dans ces contextes également, on cherche à estimer un vecteur parcimonieux associé à une fonction non-linéaire paramétrée. Les premières expérimentations menées ont permis d'obtenir des résultats prometteurs pour le démélange d'images hyperspectrales.

L'ensemble des résultats obtenus dans le cadre de cette thèse ont été validés sur divers jeux de données et dans des contextes variés. Toutefois, malgré la robustesse des méthodes proposées, plusieurs limites demeurent pour l'estimation des ISRFs. La principale concerne la connaissance supposée du spectre de référence, dont l'erreur peut affecter significativement la qualité de l'estimation des ISRFs. Par ailleurs, l'hypothèse selon laquelle les ISRFs ne varient pas beaucoup dans une fenêtre glissante pourrait ne pas être toujours vérifiée dans des conditions opérationnelles réelles. De plus, dans un contexte opérationnel, certains scénarios pourraient impliquer un niveau de bruit supérieur à celui étudié dans le cadre de cette thèse. D'autres sources d'erreurs instrumentales, telles que la lumière parasite "straylight" ou les défauts géométriques (comme le "smile" ou le "keystone"), n'ont pas été prises en compte dans cette étude et pourraient faire l'objet de développements futurs. Enfin, une analyse approfondie de l'incertitude liée à l'estimation des ISRFs reste à mener, afin de mieux quantifier la fiabilité des résultats et leur impact sur les produits scientifiques dérivés. Ces limitations ouvrent ainsi des perspectives d'amélioration des approches développées dont certaines sont présentées dans la suite de cette conclusion.

Modèle de débruitage appliqué au spectre mesuré

Les spectres mesurés sont supposés peu bruités grâce à une étape de "binning" spatial qui améliore le rapport signal sur bruit (SNR). Toutefois, dans des conditions opérationnelles réelles, des situations plus défavorables avec un bruit plus important peuvent se présenter. Il devient alors crucial de prendre en compte ce bruit — ou même de proposer des méthodes pour le réduire afin d'atteindre un niveau acceptable pour les méthodes développées dans cette thèse.

Des techniques classiques de débruitage peuvent être envisagées comme celles basées sur la transformée en ondelettes, les transformées temps-fréquence (TF), etc. Toutefois, les spectres étant potentiellement très variables, ces méthodes peuvent être insuffisantes. Des approches modernes d'apprentissage automatique comme les autoencodeurs variationnels (VAE) peuvent être envisagées

pour le débruitage des spectres. Plus récemment, les modèles de diffusion ont montré d'excellents résultats dans ce domaine, en particulier pour le traitement de signaux biomédicaux. Ces modèles reposent sur un processus de diffusion [119] qui ajoute progressivement du bruit gaussien à un signal, suivi d'un processus inverse appris par un réseau de neurones. Ils permettent de générer ou restaurer des signaux réalistes, même à partir d'observations fortement bruitées. Dans [120], un modèle nommé DeScoD-ECG a été proposé pour le débruitage de signaux ECG, avec une amélioration de plus de 20 % par rapport aux méthodes classiques. D'autres travaux, comme [121], ont utilisé des modèles de diffusion conditionnels pour supprimer différents types de bruit (mouvements d'électrodes, artefacts musculaires) sur des signaux avec un faible rapport signal sur bruit (entre 0 et 15 dB). Pour l'application à nos signaux issus d'un spectromètre, ce type de modèle de diffusion pourrait offrir une approche puissante : il apprendrait à générer une version débruitée des spectres en partant du signal bruité, tout en conservant la structure spectrale. La méthode OMP pourrait ensuite être utilisée pour estimer de manière précise les ISRFs et intégrée dans une nouvelle approche d'estimation alternée.

Estimation des ISRFs à l'aide de modèles d'état

Une autre limite identifiée dans ce travail concerne l'utilisation de fenêtres glissantes dans lesquelles les ISRFs sont supposées constantes. En effet, dans le cas où les ISRFs présentent des variations rapides ou brutales le long de la bande spectrale, cette hypothèse de régularité locale peut ne plus être valide, ce qui compromet la qualité de l'estimation. Une piste d'amélioration consiste à s'affranchir de ces fenêtres glissantes en modifiant le modèle d'observation. Une manière de procéder est de considérer une formulation globale sur toute la bande spectrale. En notant $\Psi \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times N_D}$ un dictionnaire commun à toutes les longueurs d'onde, et $\mathbf{A} = [\alpha_0, \dots, \alpha_{N_\lambda}]^T \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times N_D}$ la matrice contenant les vecteurs parcimonieux associés aux différentes longueurs d'onde, on pourrait s'intéresser au problème suivant :

$$\arg \min_{\mathbf{A}} \{ \|\text{diag}(\Psi \mathbf{A}) - \mathbf{s}\|_2^2 + \gamma^2 \|\mathbf{A} \mathbf{\Gamma}\|_2^2 + \mu \|\mathbf{A}\|_0 \}, \quad (4.61)$$

où $\mathbf{\Gamma}$ est une matrice de Tikhonov et γ est un paramètre de régularisation permettant d'assurer que les ISRFs ne varient pas de manière trop importante d'une longueur d'onde à une autre. Ce formalisme permettrait de formuler une estimation conjointe de l'ensemble des ISRFs sans recourir à un découpage local, tout en conservant la structure parcimonieuse du problème. Notons que le rôle du paramètre γ est dans ce cas analogue à celui de la taille de la fenêtre glissante et devra donc être ajusté avec soin.

Une autre approche possible consiste à modéliser l'évolution des coefficients parcimonieux à l'aide d'un système dynamique en introduisant un ensemble de vecteurs d'états. L'idée est de faire un parallèle entre la dimension spectrale (longueur d'onde) et la dimension temporelle d'un système dynamique. Si on définit le vecteur d'état $\mathbf{x}_t = \begin{bmatrix} \alpha_t \\ \alpha_{t-1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2N_D}$, où α_t désigne le vecteur parcimonieux associé à la longueur d'onde λ_t , un bruit de "transition" $\mathbf{v}_t \sim \mathcal{N}\left(0, \frac{1}{\gamma^2} \mathbf{I}_{N_D}\right)$ et un bruit d'observation $w_t \sim \mathcal{N}(0, 1)$. On pourrait considérer le modèle d'observation sans fenêtre glissante suivant :

$$\mathbf{x}_t = \begin{bmatrix} \alpha_t \\ \alpha_{t-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\mathbf{1}_{N_D} & -\mathbf{1}_{N_D} \\ \mathbf{1}_{N_D} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{t-1} \\ \alpha_{t-2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{v}_t \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (4.62)$$

$$s_t = [\Psi(t, :) \mathbf{0}] \begin{bmatrix} \alpha_t \\ \alpha_{t-1} \end{bmatrix} + w_t, \quad (4.63)$$

où $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{N_D}$ est le vecteur nul. Afin de résoudre ce problème, une méthode couramment utilisée est le filtre de Kalman [122, 123], qui permet d'estimer récursivement un vecteur d'état à partir d'un modèle linéaire de transition et d'observation en présence de bruit gaussien. Ce filtre est

particulièrement adapté à des équations d'état et d'observation linéaires. Cependant, lorsque le système présente des non-linéarités — comme c'est le cas en présence d'erreurs radiométriques ou spectrales — d'autres méthodes peuvent être envisagées. En effet, le filtre de Kalman étendu [124], le filtre de Kalman sans parfum [125] ou les filtres particuliers [126, 127] semblent adaptés à la résolution de tels problèmes inverses non-linéaires. Ces approches pourraient être appliquées au problème d'estimation des ISRFs dans le cas où les erreurs instrumentales (radiométriques ou spectrales) sont également modélisées et estimées.

En complément, l'utilisation de processus gaussiens pourrait également être envisagée [128]. D'une part, ils peuvent servir à modéliser les ISRFs par des fonctions aléatoires lisses dépendant de la longueur d'onde. D'autre part, ils peuvent être utilisés dans une approche de régression (Gaussian Process Regression [129]) afin de modéliser ou d'estimer les non-linéarités induites par les erreurs instrumentales, qu'elles soient spectrales ou radiométriques. De plus, ces méthodes offrent l'avantage d'estimer l'incertitude associée à l'estimation des fonctions, ce qui constitue un atout important pour l'analyse et la validation des résultats. Une autre approche consisterait à utiliser des méthodes d'apprentissage ("machine learning") pour estimer les ISRFs comme expliqué dans la prochaine section.

Machine learning pour l'estimation des ISRFs

On peut envisager une approche alternative et réaliser l'apprentissage des ISRFs à partir du couple (spectre mesuré \mathbf{s} , matrice associée au spectre de référence \mathbf{R}) en apprenant le vecteur paramètre $\boldsymbol{\theta}$ d'un réseau de neurones $\mathcal{F}_{\boldsymbol{\theta}}$ défini de la façon suivante :

$$\mathbf{I} = \mathcal{F}_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{s}, \mathbf{R}). \quad (4.64)$$

En reprenant l'analogie entre l'axe spectral et l'axe temporel, il est possible d'utiliser une méthode d'estimation séquentielle pour capturer les dépendances des ISRFs dans la bande avec l'apprentissage automatique. Nous pensons notamment aux réseaux de neurones récurrents (RNN) [130] qui permettent de modéliser des dépendances entre les différentes valeurs d'une série temporelle. Plus précisément, les réseaux de type Long Short-Term Memory (LSTM) [131] apparaissent comme de bons candidats, car ils sont capables de conserver en mémoire des informations sur les états précédents. De plus, afin de réduire la dimension du problème et d'introduire de l'information sur sa physique, on peut introduire une matrice de préconditionnement \mathbf{M} permettant d'obtenir un modèle légèrement différent des ISRFs $\mathbf{I} = \mathbf{M}\mathcal{F}_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{s}, \mathbf{R})$ dans lequel la matrice \mathbf{M} peut être définie de plusieurs façons. Premièrement, il est possible de reprendre directement le dictionnaire des ISRFs utilisé dans les approches précédentes, c'est-à-dire en posant $\mathbf{M} = \boldsymbol{\Phi}$. Sinon, la matrice \mathbf{M} peut être apprise conjointement avec les autres paramètres du réseau de neurones lors du processus d'optimisation. Enfin, une troisième option consiste à définir \mathbf{M} comme une transformation paramétrée et entraînable appliquée à un ensemble de données d'entraînement d'ISRFs noté \mathbb{X} , en écrivant par exemple $\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbb{X}$, où \mathbf{A} est une matrice de transformation optimisée durant l'apprentissage. Pour réaliser cet apprentissage, le spectre peut être découpé en morceaux qui se chevauchent. Certains morceaux seront utilisés pour l'apprentissage de la relation entre le spectre mesuré et le spectre de référence, tandis que d'autres serviront à l'évaluation (test) du modèle appris.

Une autre approche consiste à considérer un modèle génératif, par exemple de type auto-encodeur [132, 133], des ISRFs paramétré par un réseau de neurones récurrent tel que, e.g., les LSTM. Ainsi, en supposant que l'on dispose d'un jeu d'échantillons $\{\mathbf{I}^{(n)}\}$, $n = 1, \dots, N$ issus de la matrice des ISRFs \mathbf{I} , on peut entraîner un réseau génératif afin qu'il simule toutes les ISRFs, à partir d'un vecteur latent \mathbf{z} de petite dimension et tiré suivant une loi de probabilité simple comme par exemple une loi normale standard, i.i.d. gaussienne) :

$$\mathbf{I} \stackrel{d}{=} \mathcal{F}_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{z}), \quad p(\mathbf{z}) = \text{iid gaussienne}, \quad (4.65)$$

où $\mathbf{a} \stackrel{d}{=} \mathbf{b}$ signifie que les deux vecteurs \mathbf{a} et \mathbf{b} ont la même loi. L'apprentissage de \mathbf{z} peut s'effectuer de manière similaire à celle décrite précédemment, en divisant la bande spectrale en plusieurs morceaux qui se chevauchent. Certains pourraient être considérés pour l'apprentissage, d'autres pour le test. Les méthodes basées sur l'apprentissage automatique présentent donc de multiples avantages : elles permettraient une modélisation conjointe et non-linéaire des ISRFs, sans recourir aux fenêtres glissantes, avec une évaluation rapide. Toutefois, leur entraînement est coûteux et peut exiger de nombreuses données. Leur généralisation à d'autres instruments ou régimes resterait également incertaine.

Estimation conjointe des ISRFs et du spectre de référence

Une limitation importante de cette thèse réside dans l'hypothèse de connaissance exacte du spectre de référence. Il serait intéressant d'envisager une modélisation conjointe permettant d'estimer simultanément les ISRFs et les spectres de référence à partir des spectres mesurés. Cette problématique s'apparente aux modèles de déconvolution aveugle étudiés dans la littérature. Une méthode serait de considérer le modèle génératif décrit précédemment avec une loi de probabilité conditionnelle par exemple gaussienne :

$$p_{\theta}(\mathbf{s}|\mathbf{R}, \mathbf{I}) = \mathcal{N}(\text{diag}(\mathbf{R}\mathbf{I}), \sigma^2). \quad (4.66)$$

En assignant des distributions a priori aux variables latentes non observées, $p_{\theta}(\mathbf{A})$ et $p_{\theta}(\mathbf{R})$, on peut tenter une estimation par maximum de vraisemblance marginale. Une autre possibilité pour estimer le spectre de référence serait de considérer un modèle de mélange linéaire, $\mathbf{M}\mathbf{r}'$, où \mathbf{M} est un dictionnaire de spectres de références et \mathbf{r}' les coefficients du mélange. Finalement, une dernière perspective possible pourrait être de maximiser aussi la vraisemblance jointe $p_{\theta}(\mathbf{R}, \mathbf{I})$.

Vers une estimation des concentrations en gaz

Une perspective à plus long terme consiste à intégrer les méthodes développées dans cette thèse pour la calibration de niveau 1 dans le processus d'inversion qui vise actuellement à estimer les concentrations de gaz atmosphériques (comme le CO_2 dans le cadre de la mission MicroCarb - étape de niveau 2), une fois que les spectres de radiance ont été calibrés. Dans les chaînes de traitement classiques, les ISRFs et autres paramètres instrumentaux sont supposés connus ou pré-corrigés, et l'inversion repose sur l'ajustement d'un spectre simulé au spectre mesuré via un modèle de transfert radiatif [134], souvent à l'aide d'une approche bayésienne [135]. Toutefois, cette hypothèse de correction peut introduire des biais si les erreurs de calibration sont mal caractérisées. Une première voie d'amélioration consisterait à exploiter les méthodes de résolution de problèmes inverses non-linéaires proposées dans cette thèse — notamment pour l'estimation des ISRFs et des défauts instrumentaux — et de les étendre au problème d'inversion atmosphérique. Le but serait de renforcer la robustesse de la récupération des concentrations en gaz, en corrigeant de façon alternée les erreurs résiduelles au moment de l'inversion. Une seconde piste, plus ambitieuse, consisterait à ne plus séparer les traitements de niveau 1 et de niveau 2, mais à intégrer l'ensemble des incertitudes instrumentales directement dans le modèle d'inversion : au lieu de supposer un spectre déjà corrigé, on partirait du spectre brut, affecté par l'ensemble des erreurs (instrumentales et atmosphériques), et l'on chercherait à estimer simultanément les concentrations en gaz ainsi que tous les paramètres instrumentaux pertinents. Cette approche conjointe, potentiellement couplée à un cadre bayésien [135] et à un modèle de transfert radiatif [134], permettrait d'exploiter de manière optimale l'information contenue dans les mesures, tout en prenant en compte les incertitudes affectant le signal.

Glossaire

- 4A/OP** Automatized Atmospheric Absorption Atlas / Operational Processor (Atlas d'absorption atmosphérique automatisé / Processeur opérationnel)
- 4ARTIC** 4AOP Radiative Transfer Inversion code
- ACQ** Acquisition
- ACT** Across Track (axe transversal à la direction du satellite)
- ADMM** Alternating Direction Method of Multipliers (Méthode des multiplicateurs à directions alternées)
- ALT** Along Track (axe le long du déplacement du satellite)
- ASPIRIT** All-errors modeling (radiometric and spectral shifts) using polynomials, with SPIRIT
- AVIRIS** Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer (Spectromètre d'imagerie visible/infrarouge embarqué)
- C3S** Copernicus Climate Change Service (Service climat de Copernicus)
- CALVAL** Calibration et Validation
- CNES** Centre National d'Études Spatiales
- CNRS** Centre National de la Recherche Scientifique
- CO₂** Dioxyde de carbone
- COP21** 21st Conference of the Parties (Accords de Paris)
- DIPOpt** workshop Deep learning, image analysis, inverse problems, and optimization
- ECG** Electrocardiogramme
- EarthDATA** NASA Earth Observing System Data and Information System (Système de données d'observation de la Terre de la NASA)
- EnvQuad** Enveloppe quadratique
- EnvQuad_KSVD** Enveloppe quadratique avec dictionnaire K-SVD
- EnvQuad_SVD** Enveloppe quadratique avec dictionnaire SVD
- ESA** European Space Agency (Agence spatiale européenne)
- EUMETSAT** European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites (Organisation européenne pour l'exploitation des satellites météorologiques)
- EUSIPCO** European Signal Processing Conference (Conférence européenne de traitement du signal)
- EXIP** EXTended Invariance Principle
- EXIPRIM** EXTended Invariance Principle based method for parameterized nonlinear inverse problem through sparse modeling
- FBS** Forward-Backward Splitting (Méthode de séparation avant-arrière)
- FCLS** Fully Constrained Least Squares (Moindres carrés entièrement contraints)

- FISTA** Fast Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm (Algorithme itératif rapide de seuillage et rétrécissement)
- FOV** Field of View (Champ de vue)
- FTS** Fourier Transform Spectrometer (Spectromètre à transformée de Fourier)
- FWHM** Full Width at Half Maximum (Largeur à mi-hauteur)
- GES** Gaz à Effet de Serre
- GIEC** Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat
- GRETSI** Colloque francophone de traitement du signal et des images
- ICASSP** International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (Conférence internationale sur l'acoustique, la parole et le traitement du signal)
- ICSO** International Conference on Space Optics (Conférence internationale sur l'optique spatiale)
- IEEE** Institute of Electrical and Electronics Engineers
- IGARSS** International Geoscience and Remote Sensing Symposium (Symposium international de géosciences et télédétection)
- IHT** Iterative Hard Thresholding (Seuillage dur itératif)
- ILS** Instrument Line Shape
- IP** Inverse Problem (Problème inverse)
- ISRF** Instrument Spectral Response Function (Fonction de réponse spectrale de l'instrument)
- ISTA** Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm (Algorithme itératif de seuillage et rétrécissement)
- K-SVD**
- KNMI** Royal Netherlands Meteorological Institute (Institut royal météorologique des Pays-Bas)
- LASSO** Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (Opérateur de sélection et de rétrécissement absolu minimal)
- LASSO_precon_LS** LASSO préconditionné avec moindres carrés
- W-ASPIRIT** Weighted ASPIRIT (ASPIRIT pondéré)
- LASSO_precon_inv** LASSO préconditionné en utilisant l'inverse de la fonction paramétrique non-linéaire considérée
- LSTM** Long Short-Term Memory
- MI_G** Modèle Instrument avec l'approximation Gaussienne
- MI_SG** Modèle Instrument avec l'approximation Super-Gaussienne
- NASA** National Aeronautics and Space Administration (Administration nationale de l'aéronautique et de l'espace)
- NATO** North Atlantic Treaty Organization (Organisation du traité de l'Atlantique Nord)
- NIR** Near-Infrared (Proche infrarouge)
- NIPS** Neural Information Processing Systems
- NOAA** National Oceanic and Atmospheric Administration (Administration nationale océanique et atmosphérique)
- NOVELTIS** Entreprise française d'ingénierie en données environnementales et spatiales
- OMP** Orthogonal Matching Pursuit
- OMP_eps** Orthogonal Matching Pursuit avec critère d'arrêt epsilon
- OMP_precon** OMP préconditionné

- OMP_precon_Inv** OMP préconditionné en utilisant l'inverse de la fonction paramétrique non-linéaire considérée
- OMP_precon_LS** OMP préconditionné avec moindres carrés
- OMP_precond** OMP préconditionné
- OMP_sens** OMP avec dictionnaire de sensing
- RNN** Recurrent Neural Network (Réseau de neurones récurrent)
- SG** Savitzky-Golay
- SLSIP** Statistical Learning for Signal and Image Processing Workshop
- SNR** Signal-to-Noise Ratio (Rapport signal sur bruit)
- SPIE** International Society for Optics and Photonics
- SPIRIT** SParse representation of Instrument spectral Response Functions using a dIcTionary
- SPIRITUAL** SPIRIT assuming polynomial radiometric errors
- SPIRITUS** SPIRIT and accounting for spectral shifts
- SRON** Netherlands Institute for Space Research (Institut néerlandais de recherche spatiale)
- SVD** Singular Value Decomposition (Décomposition en valeurs singulières)
- SVP** Sparse Variable Projection
- SWIR** Short-Wave Infrared (Infrarouge à ondes courtes)
- TIGR** Thermodynamic Initial Guess Retrieval (Reconstruction thermodynamique initiale)
- TV** Total Variation (Variation totale)
- UKSA** United Kingdom Space Agency (Agence spatiale du Royaume-Uni)
- USGS** United States Geological Survey (Service géologique des États-Unis)
- UV** Ultraviolet
- UVIS** Ultraviolet VISible (Ultraviolet visible)
- VAE** Variational Autoencoder (Autoencodeur variationnel)
- VIS** Spectre visible
- VP** Variable Projection

Annexe A

Description des algorithmes utilisés

L'annexe A présente les différents algorithmes utilisés pour construire la matrice du spectre théorique à partir de la forme vectorielle du spectre, notamment l'algorithme OMP et le K-SVD. L'algorithme LASSO a été implémenté à l'aide de la fonction LASSO de Matlab. Le choix du paramètre μ y est également détaillé.

Matrice représentant le spectre de référence

L'algorithme prend en entrée le spectre théorique sous forme vectorielle, les longueurs d'onde associées λ_r , les longueurs d'onde correspondant au spectre mesuré λ_l , ainsi que la période d'échantillonnage de la fonction de réponse spectrale instrumentale (ISRF), notées Δ_I et introduites dans la section 2. À partir de ces éléments, l'algorithme permet de générer une matrice représentant le spectre théorique.

Algorithme 1 Génération de la matrice de spectres théoriques

Entrées : spectre théorique r , longueurs d'onde de ce spectre λ_r , longueurs d'onde du spectre mesuré λ_l , période d'échantillonnage des ISRFs Δ .

Sortie : matrice des spectres théoriques évalués sur toutes les longueurs d'onde R .

```
1: for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  do
2:    $\lambda_l \leftarrow \lambda(l)$ 
3:    $\lambda_{\text{resp}} \leftarrow \lambda_l + \Delta$ 
4:    $R(l, :) \leftarrow \text{interp}(\lambda_r, r, \lambda_{\text{resp}})$ 
5: end for
6: return  $R$ 
```

Pour chaque fenêtre glissante, on récupère la matrice R_l en prenant une sous-partie de la matrice R .

Construction du dictionnaire

Cette partie décrit la construction du dictionnaire Φ qui sera utilisé en entrée des algorithmes basés sur la représentation parcimonieuse (K-SVD, LASSO, OMP).

Algorithme 2 Construction du dictionnaire.

Input : Matrice des ISRFs sélectionnées I , taille du dictionnaire N_{obs}

Output : Dictionnaire des ISRFs Φ .

```
1:  $[U, \Gamma, V^*] = \text{SVD}(I)$ 
2:  $\Phi = V(:, 1 : N_{\text{obs}})$ 
3: return  $\Phi$ 
```

Algorithme OMP

Cette partie décrit l'algorithme OMP utilisé dans cet article pour obtenir la représentation parcimonieuse de l'ISRF I_l d'intérêt, en utilisant K coefficients non nuls dans le dictionnaire Φ , à partir du spectre mesuré s_l et de la matrice du spectre théorique R_l dans la fenêtre glissante.

Algorithme 3 Algorithme Orthogonal Matching Pursuit (OMP).

Input : Spectre mesuré s_l , Matrice associée au spectre théorique R_l , Dictionnaire des ISRFs Φ , Paramètre de parcimonie K .

Output : Vecteur parcimonieux α_l .

- 1: $\Psi_l = R_l \Phi$
- 2: $U_1 = s_l$
- 3: **for** $k = 1, \dots, K$ **do**
- 4: Trouver $\Psi_{\gamma_k} \in \Psi_l$ maximisant le produit scalaire

$$\left| \left\langle U_k, \frac{\Psi_{\gamma_k}}{\|\Psi_{\gamma_k}\|} \right\rangle \right|$$

- 5: Trouver $[\alpha_{\gamma_1}, \dots, \alpha_{\gamma_k}] \in \alpha_l$ qui résout

$$\arg \min_{\alpha} \left\| U_k - \sum_{k'=1}^k \alpha_{\gamma_{k'}} \Psi_{\gamma_{k'}} \right\|_2^2$$

- 6: $U_{k+1} = s_l - \sum_{k'=1}^k \alpha_{\gamma_{k'}} \Psi_{\gamma_{k'}}$
 - 7: **end for**
 - 8: **return** α_l
-

LASSO algorithm

La fonction *lasso* de MATLAB est utilisée pour obtenir la représentation parcimonieuse de l'ISRF I_l d'intérêt, en utilisant K coefficients non nuls dans le dictionnaire Φ , à partir du spectre mesuré s_l et de la matrice du spectre théorique R_l dans la fenêtre glissante. Une recherche dichotomique est utilisée pour déterminer le paramètre de parcimonie μ associé à la valeur K des coefficients non nuls. L'algorithme correspondant est décrit dans l'algorithme 4.

Algorithme 4 LASSO algorithm.

Input : Spectre mesuré s_l , Matrice associée au spectre théorique R_l , Dictionnaire des ISRFs Φ , Paramètre de parcimonie K , Valeur minimum du paramètre de parcimonie de LASSO μ_{\min} , Valeur maximale du paramètre de parcimonie de LASSO μ_{\max}

Output : Vecteur parcimonieux α_l .

- 1: $\Psi_l = R_l \Phi$
 - 2: $\alpha_{\text{resp}} = \text{lasso}(\Psi_l, s_l, \text{'lambda'}, \mu_{\max}, \text{'Alpha'}, 1)$
 - 3: **while** $\text{sparsity}(\alpha_{\text{resp}}) \neq K$ **do**
 - 4: $\mu = \frac{\mu_{\min} + \mu_{\max}}{2}$
 - 5: $\alpha_{\text{resp}} = \text{lasso}(\Psi_l, s_l, \text{'lambda'}, \mu, \text{'Alpha'}, 1)$
 - 6: **if** $\text{sparsity}(\alpha_{\text{resp}}) < K$ **then**
 - 7: $\mu_{\max} = \mu$
 - 8: **else**
 - 9: $\mu_{\min} = \mu$
 - 10: **end if**
 - 11: **end while**
 - 12: Trouver les composantes non-nulles dans α_{resp} pour former le vecteur $[\gamma_1, \dots, \gamma_K]$
 - 13: Ré-estimer les coefficients parcimonieux non-nuls : Trouver $[\alpha_{\gamma_1}, \dots, \alpha_{\gamma_K}] \in \alpha_l$ qui résout $\arg \min_{\alpha} \|s_l - \sum_{k'=1}^k \alpha_{\gamma_{k'}} \Psi_{\gamma_{k'}}\|_2^2$
 - 14: **return** α_l
-

Algorithme K-SVD

L'algorithme K-SVD de [35] est décrit dans l'algorithme 5. À chaque itération, le dictionnaire est mis à jour en modifiant ses colonnes séparément et de manière séquentielle, en appliquant K décompositions en valeurs singulières (SVD) sur la matrice d'erreur appropriée \mathbf{E}_j .

Algorithme 5 Construction du dictionnaire en utilisant l'algorithme K-SVD.

Input : Matrice des ISRFs sélectionnées \mathbf{I} , Nombre d'ISRFs sélectionnées L , Taille du dictionnaire N_{obs} , Dictionnaire Φ obtenu utilisant la SVD introduite dans l'algorithme 2, Paramètre de parcimonie K

Output : Nouveau dictionnaire des ISRFs Φ .

```

1: while la convergence n'est pas atteinte do
2:   Étape de codage parcimonieux :  $\mathbf{x}_l = \text{OMP}(\mathbf{I}_l, \Phi, K) \forall l = 1, \dots, L$ 
3:   Mise à jour du dictionnaire :
4:   for  $j = 1, \dots, L + 1$  do
5:     Définition d'un groupe utilisant la  $j$ -ième colonne du dictionnaire  $j$ ,  $w_j = \{l | 1 \leq l \leq N, \mathbf{x}_T^j(l) \neq 0\}$ 
6:     Calculer la matrice globale d'erreur de représentation,  $\mathbf{E}_j = \mathbf{I} - \sum_{i \neq j} \phi_i \mathbf{x}_T^i$ 
7:     Construire  $\mathbf{E}_j^R$  à partir de  $\mathbf{E}_j$  en utilisant les colonnes associées à  $w_j$ 
8:     Décomposition SVD :  $[\mathbf{U}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{V}^*] = \text{SVD}(\mathbf{E}_j^R)$ 
9:     Mise à jour de la colonne du dictionnaire  $\phi_j$  en prenant la première colonne de  $\mathbf{U}$  et le vecteur
        $\mathbf{x}_R^j$  en prenant la première colonne de  $\mathbf{V}\mathbf{\Gamma}(1, 1)$ .
10:   end for
11: end while
12: return  $\Phi$ 

```

Algorithme utilisant les enveloppes quadratiques

L'approche fondée sur l'enveloppe quadratique a été implémentée à l'aide de l'algorithme FISTA [104], tel que décrit dans [55]. Dans ce cadre, un paramètre de régularisation $0 < \gamma < \|\Psi_l\|^2$ doit être fixé [50]. Une description plus détaillée de l'algorithme basé sur l'enveloppe quadratique pour l'estimation de l'ISRF est présentée dans l'algorithme 6, pour chaque fenêtre glissante.

Algorithme 6 Algorithme basé sur l'enveloppe quadratique pour l'estimation des ISRFs.

Input : Spectre mesuré \mathbf{s}_l , Dictionnaire Ψ_l , Cardinalité K , Paramètres de régularisation γ et ρ , Nombre d'itérations T

Output : Estimation de l'ISRF $\hat{\mathbf{I}}_l^{(T)}$

```

1: Initialiser  $\hat{\mathbf{I}}_l^{(0)}$ ;
2:  $\hat{\mathbf{I}}_{l,\text{resp}}^{(1)} = \mathbf{0}$ ;
3: for  $1 \leq t \leq T$  : do
4:    $\tilde{\mathbf{I}}_l^{(t)} = \hat{\mathbf{I}}_l^{(t-1)} + \frac{t-1}{t+2} \left( \hat{\mathbf{I}}_l^{(t-1)} - \hat{\mathbf{I}}_{l,\text{resp}}^{(1)} \right)$ ;
5:    $\hat{\mathbf{I}}_{l,\text{resp}}^{(t)} = \hat{\mathbf{I}}_l^{(t-1)}$ ;
6:    $\hat{\mathbf{I}}_l^{(t)} = \text{ProxQgammaiota} \left( \tilde{\mathbf{I}}_l^{(t)} - \frac{1}{\rho} \Psi_l^T (\Psi_l \tilde{\mathbf{I}}_l^{(t)} - \mathbf{s}_l), K, \gamma, \rho \right)$ ;
7: end for

```

▷ Utilisation du processus d'accélération FISTA :

▷ Calcul de l'opérateur proximal :

Algorithme SPIRITUS

Cette algorithme présente la méthode SPIRITUS définie au chapitre 3 pour réaliser l'estimation jointe des ISRFs et des décalages spectraux.

Algorithme 7 Estimation alternée des ISRFs et des décalages spectraux.

Input : Spectre mesuré \mathbf{y} , Spectre de référence \mathbf{r} , longueur d'ondes λ , Dictionnaire Φ , Cardinalité K , Degré du polynôme P

Sorties : ISRF estimé $\hat{\mathbf{I}}$, Mesures corrigées $\hat{\mathbf{s}}$, Décalages spectraux $\hat{\lambda}'$.

```

1: Initialiser  $\hat{\mathbf{c}} = [0, \dots, 0]^T$ ;
2: Initialiser  $\hat{\mathbf{R}}$  avec;
3: for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
4:   Mettre à jour :  $\hat{\mathbf{R}}_l = \pi(\mathbf{r}, \mathcal{W}(\lambda_l))$ ;
5: end for
6: Initialiser  $\hat{\mathbf{A}}$  avec;
7: for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
8:    $\hat{\Psi}_l = \hat{\mathbf{R}}_l \Phi$ ;
9:    $\hat{\alpha}_l = \text{OMP}(\mathbf{y}_l, \hat{\Psi}_l, 1)$ ;
10: end for
11: while pas de convergence do
12:   Mettre à jour :  $\hat{\mathbf{c}} = \arg \min_{\mathbf{c}} \sum_{l=1}^{N_\lambda} \|\mathbf{y}_l - \mathbf{R}_l(\mathbf{c})\Phi\hat{\alpha}_l\|_2^2$ ;
13:   for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
14:     Mettre à jour :  $\hat{\lambda}'_l = \lambda_l + \sum_{p=0}^P \hat{c}_p \left(\frac{l}{l_{\max}}\right)^p$ ;
15:   end for
16:   for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
17:     Mettre à jour :  $\hat{\mathbf{R}}_l = \pi(\mathbf{r}, \mathcal{W}(\hat{\lambda}'_l))$ ;
18:   end for
19:   for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
20:      $\hat{\Psi}_l = \hat{\mathbf{R}}_l \Phi$ ;
21:      $\hat{\alpha}_l = \text{OMP}(\mathbf{y}_l, \hat{\Psi}_l, K)$ ;
22:   end for
23: end while
24:  $\hat{\mathbf{I}} = [\Phi\hat{\alpha}_1, \dots, \Phi\hat{\alpha}_{N_\lambda}]$ 
25:  $\hat{\mathbf{s}} = [\hat{\mathbf{R}}_1\hat{\mathbf{I}}_1, \dots, \hat{\mathbf{R}}_{N_\lambda}\hat{\mathbf{I}}_{N_\lambda}]$ 
26:  $\hat{\lambda}' = [\hat{\lambda}'_1, \dots, \hat{\lambda}'_{N_\lambda}]$ 

```

▷ Estimation des décalages spectraux :

▷ Interpolation du spectre de référence :

▷ Estimation des vecteurs parcimonieux :

▷ Estimation de l'ISRF :

▷ Reconstruction du spectre :

▷ Estimation des décalages spectraux :

Algorithme SPIRITUAL

Cet algorithme met en œuvre la méthode SPIRITUAL présentée au chapitre 3. Il est appliqué à chaque fenêtre glissante afin d'estimer l'ISRF en son centre, ainsi que l'erreur radiométrique associée à chaque pixel de la bande.

Algorithme 8 Estimation alternée des ISRFs et des réponses radiométriques.

Input : Spectres mesurés \mathbf{y}_l , Matrice des spectres de $\mathbf{R}_l^{(q)}$, Dictionnaires concaténés Ψ_l , Cardinalité K , Degré du polynôme P

Output : Estimation de l'ISRF $\hat{\mathbf{I}}_l$, Mesures corrigées $\hat{\mathbf{S}}_l$

```

1: Initialiser  $\hat{\mathbf{d}}_l, l = 1, \dots, N_\lambda$ 
2: Initialiser  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_l, l = 1, \dots, N_\lambda$ ;
3:  $\text{vec}(\hat{\mathbf{S}}_l) = \Psi_l \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l$ ;
4: while pas de convergence do
    ▷ Estimation des réponses radiométriques en utilisant des moindres carrés :
5:   for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
6:     Mettre à jour :  $\hat{\mathbf{d}}_l = \arg \min_{\mathbf{d}_l} \|\mathbf{y}_l - \mathbf{M}_l((\Phi \hat{\boldsymbol{\alpha}}) \mathbf{d}_l)\|_2^2$ ;
7:   end for
    ▷ Correction des réponses radiométriques en inversant les non-linéarités à partir  $\hat{\mathbf{d}}_l$ ;
8:   for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
9:     for  $q = 1, \dots, Q$  : do
10:      Mettre à jour :  $\hat{s}_{l,q} = \arg \min_{s_{l,q}} \left( y_{l,q} - \sum_{p=0}^P \hat{d}_p^l (s_{l,q})^p \right)^2$ .
11:    end for
12:  end for
    ▷ Re-estimation du vecteur parcimonieux :
13:  for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
14:    Mettre à jour :  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_l = \text{OMP}(\text{vec}(\hat{\mathbf{S}}_l), \Psi_l, K)$ ;
15:  end for
16: end while
    ▷ Estimation de l'ISRF :
17:  $\hat{\mathbf{I}}_l = \Phi \hat{\boldsymbol{\alpha}}_l$ 
    ▷ Détermination des mesures corrigées :
18:  $\hat{\mathbf{S}}_l(:, q) = \mathbf{R}_l^{(q)} \hat{\mathbf{I}}_l \forall q = 1, \dots, Q$ 

```

Algorithme W-ASPIRIT

Cet algorithme met en œuvre la méthode W-ASPIRIT présentée au chapitre 3. On utilise chaque fenêtre pour estimer les ISRFs, les décalages spectraux sont estimés par spectre et les réponses radiométriques sont estimées pour chaque pixel de la bande.

Algorithme 9 Estimation alternée d'une ISRF et des réponses radiométriques.

Input : Spectres mesurés \mathbf{y}_l , Matrice des spectres de $\mathbf{R}_l^{(q)}$, Dictionnaires concaténés Ψ_l , Cardinalité K , degré des polynômes P et P' , matrice de poids Σ

Output : Estimation de l'ISRF $\hat{\mathbf{I}}_l$, Mesures corrigées $\hat{\mathbf{S}}_l$

```

1: Initialiser  $\hat{\mathbf{d}}_l, l = 1, \dots, N_\lambda$ 
2: Initialiser  $\hat{\alpha}_l, l = 1, \dots, N_\lambda$ ;
3:  $\text{vec}(\hat{\mathbf{S}}_l) = \Psi_l \hat{\alpha}_l$ ;
4: while pas de convergence do                                ▷ Estimation des décalages spectraux  $\mathbf{c}$  en utilisant des moindres carrés :
5:   for  $q = 1, \dots, Q$  : do
6:     Mettre à jour :  $\hat{\mathbf{c}}_q = \arg \min_{\mathbf{c}_q} \|\text{diag}(\Sigma(:, q))^{-1} (\mathbf{Y}(:, q) - \mathbf{N}_q(\Psi_l \hat{\alpha}_l; \mathbf{c}^{(q)}; \hat{\mathbf{d}}))\|_2^2$ ;
7:   end for                                                    ▷ Estimation des réponses radiométriques en utilisant des moindres carrés :

8:   for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
9:     Mettre à jour :  $\hat{\mathbf{d}}_l = \arg \min_{\mathbf{d}_l} \|\text{diag}(\Sigma(l, :)) \mathbf{Y}(l, :)^T - \mathbf{M}_l(\Psi_l \hat{\alpha}_l; \hat{\mathbf{c}}) \mathbf{d}_l\|_2^2$ ;
10:  end for

                                ▷ Correction des réponses radiométrique en inversant les non-linéarités à partir  $\hat{\mathbf{d}}_l$ ;
11:  for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
12:    for  $q = 1, \dots, Q$  : do
13:      Mettre à jour :  $\hat{s}_{l,q} = \arg \min_{s_{l,q}} \left( y_{l,q} - \sum_{p=0}^P \hat{d}_p^l (s_{l,q})^p \right)^2$ ;
14:    end for
15:  end for

                                ▷ Re-estimation du vecteur parcimonieux :
16:  for  $l = 1, \dots, N_\lambda$  : do
17:    Mettre à jour :  $\hat{\alpha}_l = \text{OMP}(\text{vec}(\hat{\mathbf{S}}_l), \Psi_l, K)$ ;
18:  end for

19: end while

                                ▷ Estimation de l'ISRF :
20:  $\hat{\mathbf{I}}_l = \Phi \hat{\alpha}_l$ 

                                ▷ Détermination des mesures corrigées :
21:  $\hat{\mathbf{S}}_l(:, q) = \mathbf{R}_l^{(q)} \hat{\mathbf{I}}_l \forall q = 1, \dots, Q$ 

```

Algorithme SVP

L'algorithme met en oeuvre méthode SVP présentée au chapitre 4 qui permet de résoudre des problèmes inverses avec contraintes de parcimonie dans le cas où la non-linéarité est séparable.

Algorithme 10 Algorithme SVP.

Entrées : Mesures \mathbf{y} , Dictionnaire Ψ , Paramètre de pénalité μ , pas t , Vecteur initial $\hat{\alpha}$.

Sortie : Vecteur α , Vecteur θ

```

1: Initialiser  $i = 0$ ;
2: while la convergence n'est pas atteinte do
3:                                      $\triangleright$  Etape de descente de gradient :
4:   Mettre à jour :  $z = \alpha^i - t \nabla_{\alpha} \left\| \mathbf{y} - \mathbf{A}(\alpha) \left[ \mathbf{A}^T(\alpha) \mathbf{A}(\alpha) \right]^{-1} \mathbf{A}^T(\alpha) \mathbf{y} \right\|^2$ ;
5:                                      $\triangleright$  Opérateur proximal (doux / dur / enveloppes quadratiques) :
6:   Mettre à jour :  $\alpha^{i+1} = \text{prox}(z, \mu, t)$ 
7:    $i = i + 1$ ;
8: end while

```

Algorithme EXIPRIM

L'algorithme met en oeuvre la méthode EXIPRIM présentée au chapitre 4 utilisée pour l'estimation de problème inverse non-linéaire sous contrainte de parcimonie lorsque les non-linéarités ne sont pas forcément séparable.

Algorithme 11 Algorithme EXIPRIM.

Entrée : Mesures \mathbf{y} , Dictionnaire Ψ , Cardinalité K du vecteur parcimonieux α , Nombre of iterations N_{iter}

Sortie : Vecteur parcimonieux α , Vecteur θ

```

1: Initialiser  $f_{\theta} = \text{identité}$ ;
2:  $\alpha^0 = \text{SR}(\mathbf{y}, \Psi, K)$ ;
3: while la convergence n'est pas atteinte do
4:                                      $\triangleright$  Estimation des non-linéarités :
5:   Mettre à jour :  $\theta^{i+1} = \arg \min_{\theta} \|\mathbf{y} - f_{\theta} \circ (\Psi \alpha^i)\|_2^2$ ;
6:                                      $\triangleright$  Utilisation de la formulation EXIP et estimation de  $\beta$  :
7:   for  $q = 1, \dots, Q$  : do
8:      $\beta_q^{i+1} = \arg \min_{\beta_q} |\mathbf{y}_q - f_{\theta^{i+1}}(\beta_q)|^2$ ;
9:   end for
10:                                      $\triangleright$  Nouvelle estimation du vecteur parcimonieux :
11:   Mettre à jour :  $\alpha^{i+1} = \text{SR}(\beta^{i+1}, \Psi, K)$ ;
12:    $i = i + 1$ ;
13: end while

```

Annexe B

Détermination du gradient dans le cadre des moindres carrés séparables

Cette annexe détaille le calcul du gradient utilisé dans l'appel à la fonction SVP, dans le contexte de la résolution d'un problème inverse non-linéaire régularisé par une contrainte de parcimonie, en supposant des non-linéarités séparables, comme décrit au chapitre 4.

On rappelle ici le problème d'optimisation formulé avec la régularisation ℓ_1

$$\arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} R_4(\boldsymbol{\alpha}) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \|\mathbf{y} - \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) [(\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})]^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \mathbf{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\alpha}\|_1 \quad (\text{B.1})$$

Formulons pour chaque élément de la matrice $[\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})]_{q,p} = g_p(\boldsymbol{\Psi}_q \boldsymbol{\alpha}) \quad \forall (q,p) \in \{1, \dots, Q\} \times \{1, \dots, P\}$ l'expression de la dérivée associée au j -ième composant du vecteur parcimonieux $[\boldsymbol{\alpha}]_j$ par

$$\frac{\partial [\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})]_{q,p}}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} = \frac{\partial g_p(\boldsymbol{\Psi}_q \boldsymbol{\alpha})}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} [\boldsymbol{\Psi}_q]_j. \quad (\text{B.2})$$

Notons que si la non-linéarité est polynomiale, la dérivée s'écrit :

$$\frac{\partial [\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})]_{q,p}}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} = p (\boldsymbol{\Psi}_q \boldsymbol{\alpha})^{p-1} [\boldsymbol{\Psi}_q]_j \quad (\text{B.3})$$

La dérivée peut s'écrire sous forme vectorielle en utilisant la variable auxiliaire $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{Q \times (P+1)}$ définie par

$$\mathbf{B}(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_0(\boldsymbol{\Psi}_1 \boldsymbol{\alpha})}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} & \cdots & \frac{\partial g_P(\boldsymbol{\Psi}_1 \boldsymbol{\alpha})}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_0(\boldsymbol{\Psi}_Q \boldsymbol{\alpha})}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} & \cdots & \frac{\partial g_P(\boldsymbol{\Psi}_1 \boldsymbol{\alpha})}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

comme

$$\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial [\boldsymbol{\alpha}]_j} = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{\Psi}_1]_j & & \\ & \ddots & \\ & & [\boldsymbol{\Psi}_Q]_j \end{bmatrix} \mathbf{B}(\boldsymbol{\alpha}) \quad (\text{B.5})$$

avec $\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}_j} \in \mathbb{R}^{Q \times (P+1)}$.

Notons que si les non-linéarités sont polynomiales, la matrice \mathbf{B} s'écrit :

$$\mathbf{B}(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2(\Psi_1\boldsymbol{\alpha}) & \dots & P(\Psi_1\boldsymbol{\alpha})^{P-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 2(\Psi_Q\boldsymbol{\alpha}) & \dots & P(\Psi_Q\boldsymbol{\alpha})^{P-1} \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

Afin d'avoir une expression pour $\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha})$, on calcule $\sum_j \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_j} \Delta \alpha_j$. On obtient alors :

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) = \begin{bmatrix} \Psi_1 \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha} & & \\ & \ddots & \\ & & \Psi_Q \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha} \end{bmatrix} \mathbf{B}(\boldsymbol{\alpha}) \quad (\text{B.7})$$

$$= \mathbf{D}_\Psi(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{B}(\boldsymbol{\alpha}) \quad (\text{B.8})$$

avec $\mathbf{D}_\Psi(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) = \begin{bmatrix} \Psi_1 \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha} & & \\ & \ddots & \\ & & \Psi_Q \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$.

Introduisons les variables auxiliaires $\mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) [(\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})]^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$ et $\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}) = (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{R}^{(P+1) \times (P+1)}$. Nous obtenons alors :

$$(\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\Delta}\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}))^{-1} = \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} - \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} \boldsymbol{\Delta}\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} + O(\|\boldsymbol{\Delta}\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})\|^2) \quad (\text{B.9})$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) &= \left(\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) + \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right) \times \left[\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}) + \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right)^* \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) + (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right) \right]^{-1} \\ &\times \left(\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) + \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right)^* + O(\|\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}\|^2) \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} &= \left(\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) + \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right) [\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} - \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} \boldsymbol{\Delta}\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1}] \times \left(\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) + \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right)^* \\ &+ O(\|\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}\|^2) \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned} &= \mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha}) + \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* + \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right)^* \\ &- \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right)^* \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) + (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right] \times \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* + O(\|\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}\|^2) \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Posons $S(z) = \frac{1}{2}(z + z^*)$. Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) &= \mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha}) + 2 S \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \right) \\ &- 2 \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} S \left((\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \right) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* + O(\|\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}\|^2) \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

La dérivée $\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \boldsymbol{\alpha}}$ s'écrit alors comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) &= 2 S (\mathbf{D}_\Psi(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{B}(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^*) \\ &- 2 \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} S ((\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \mathbf{D}_\Psi(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\alpha}) \mathbf{B}(\boldsymbol{\alpha})) \mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha})^{-1} (\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}))^* \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Le terme de fidélité aux données, noté J , de la fonction R_4 à optimiser peut s'écrire :

$$J(\boldsymbol{\alpha}) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \| (\mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha}) - \mathbf{Id}_Q) \mathbf{y} \|^2 \quad (\text{B.15})$$

où $\mathbf{Id}_Q \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$ est la matrice identité.

Dès lors :

$$J(\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\Delta\alpha}) = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} \left\| \left(\mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha}) + \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta\alpha}) - \mathbf{Id}_Q \right) \mathbf{y} \right\|^2 + O(\|\boldsymbol{\Delta\alpha}\|^2). \quad (\text{B.16})$$

On en déduit finalement le calcul du gradient :

$$\frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta\alpha}) = 2 \left\langle \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\Delta\alpha}) \mathbf{y}, (\mathbf{C}(\boldsymbol{\alpha}) - \mathbf{Id}_Q) \mathbf{y} \right\rangle \quad (\text{B.17})$$

Annexe C

Calcul de la dérivée seconde pour EXIPRIM

Cette annexe détaille le calcul de la dérivée seconde utilisée lors de l'appel à la fonction EXIPRIM, dans le contexte de la résolution d'un problème inverse non-linéaire sous contraintes de parcimonie, en supposant des non-linéarités bijectives, comme décrit au chapitre 4.

On rappelle ici le problème d'optimisation formulé. L'approximation utilisée pour l'estimateur de α est :

$$\tilde{\alpha}_N = \arg \min_{\alpha} [\hat{\beta}_N - g(\alpha)]^T R''_{\beta}(\hat{\beta}_N) [\hat{\beta}_N - g(\alpha)], \quad (\text{C.1})$$

où $R_{\beta}(\beta) = \|\mathbf{y} - f_{\theta} \circ \beta\|_2^2$ et $R''_{\beta}(\hat{\beta}) = \nabla^2 R_{\beta}(\hat{\beta})$ est la matrice hessienne de ce critère par rapport à β , et évaluée en $\hat{\beta}$. Calculons la dérivée seconde R''_{β} puis évaluons-la au point $\hat{\beta}$. Soit $q = \{1, \dots, Q\}$. Rappelons que la fonction f_{θ} est une fonction terme à terme et elle s'applique à chacune des composantes β_q . La dérivée partielle de R_{β} par rapport à β_q s'écrit alors :

$$\frac{\partial R_{\beta}}{\partial \beta_q} = 2 (\mathbf{y}_q - f_{\theta}(\beta_q)) \frac{\partial (\mathbf{y}_q - f_{\theta}(\beta_q))}{\partial \beta_q} \quad (\text{C.2})$$

$$= -2 (\mathbf{y}_q - f_{\theta}(\beta_q)) \frac{\partial f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_q} \quad (\text{C.3})$$

La dérivée de R_{β} par rapport au vecteur β s'écrit alors :

$$R'_{\beta}(\beta) = \left(\frac{\partial R_{\beta}}{\partial \beta_1}, \dots, \frac{\partial R_{\beta}}{\partial \beta_Q} \right)^T \quad (\text{C.4})$$

$$= -2\mathbf{J}^T (\mathbf{y} - f_{\theta} \circ \beta) \quad (\text{C.5})$$

où \mathbf{J} est la jacobienne de f_{θ} appliquée à β . La fonction f_{θ} s'appliquant point à point, on obtient directement :

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_{\theta}}{\partial \beta_1} & & & \\ & \ddots & & \\ & & & \frac{\partial f_{\theta}}{\partial \beta_Q} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.6})$$

Soit $q' = \{1, \dots, Q\}$. L'expression de la dérivée seconde pour chacune des composantes est alors :

$$\frac{\partial^2 R_{\beta}}{\partial \beta_{q'} \partial \beta_q} = -2 \left(\frac{(\mathbf{y}_q - f_{\theta}(\beta_q))}{\partial \beta_{q'}} \frac{\partial f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_q} + (\mathbf{y}_q - f_{\theta}(\beta_q)) \frac{\partial^2 f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_{q'} \partial \beta_q} \right) \quad (\text{C.7})$$

$$= 2 \frac{f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_{q'}} \frac{\partial f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_q} - 2 (\mathbf{y}_q - f_{\theta}(\beta_q)) \frac{\partial^2 f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_{q'} \partial \beta_q} \quad (\text{C.8})$$

La fonction f_{θ} s'appliquant point à point, si $q' \neq q$ la dérivée seconde partielle vaut zéro et si $q' = q$ on obtient :

$$\frac{\partial^2 R_{\beta}}{\partial \beta_q^2} = 2 \left(\frac{\partial f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_q} \right)^2 - 2 (\mathbf{y}_q - f_{\theta}(\beta_q)) \frac{\partial^2 f_{\theta}(\beta_q)}{\partial \beta_q^2} \quad (\text{C.9})$$

Le point $\hat{\beta}$ correspond à la solution vérifiant $\mathbf{y} - f_{\theta} \circ \beta = \mathbf{0}$. La dérivée seconde évaluée en ce point est donc :

$$R''_{\beta}(\hat{\beta}) = \begin{bmatrix} 2 \left(\frac{\partial f_{\theta}}{\partial \beta_1} \right)^2 & & \\ & \ddots & \\ & & 2 \left(\frac{\partial f_{\theta}}{\partial \beta_Q} \right)^2 \end{bmatrix}_{\beta=\hat{\beta}} \quad (\text{C.10})$$

Bibliographie

- [1] P. Landiech and F.-M. Bréon, “La mesure des émissions de CO₂ depuis l’espace et la compréhension de leurs évolutions,” *Annales des Mines-Enjeux numériques*, vol. 25, no. 1, pp. 78–89, 2024.
- [2] Y. Meijer, “Greenhouse Gas Emissions from Space : The Copernicus CO₂M Mission,” *SCIEN-TIA*, 2025.
- [3] P. Hébert, D. Blumstein, C. Buil, T. Carlier, G. Chalon, P. Astruc, A. Clauss, D. Simeoni, and B. Tournier, “IASI instrument : Technical description and measured performances,” vol. 554, pp. 49–56, 05 2004.
- [4] G. Bianchini, F. Castagnoli, G. Di Natale, and L. Palchetti, “A Fourier transform spectroradiometer for ground-based remote sensing of the atmospheric downwelling long-wave radiance,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 12, no. 1, pp. 619–635, 2019.
- [5] B. Sierk, V. Fernandez, J.-L. Bézy, Y. Meijer, Y. Durand, G. B. Courrèges-Lacoste, C. Pachot, A. Löscher, H. Nett, K. Minoglou, L. Boucher, R. Windpassinger, A. Pasquet, D. Serre, and F. te Hennepe, “The Copernicus CO₂M mission for monitoring anthropogenic carbon dioxide emissions from space,” in *Int. Conf. Space Optics — ICSO 2020*, Bruno Cugny, Zoran Sodnik, and Nikos Karafolas, Eds. International Society for Optics and Photonics, 2021, vol. 11852, p. 118523M, SPIE.
- [6] M. A. Barucci, J.-M. Reess, P. Bernardi, A. Doressoundiram, S. Fornasier, M. Le Du, T. Iwata, H. Nakagawa, T. Nakamura, Y. André, et al., “Mirs : an imaging spectrometer for the mmx mission,” *Earth Planets Space*, vol. 73, no. 1, pp. 211, 2021.
- [7] Y. Meijer, “Status of Copernicus CO₂M mission development - Anthropogenic greenhouse gas monitoring from space,” *Int. Workshop Greenhouse Gas Meas. Space (IWGGMS-20)*, vol. 10, 05 2024.
- [8] European Space Agency (ESA) CO₂M project team, “Copernicus High Priority Candidate Missions CO₂M Space Segment Requirements Document (SSRD),” 07 2020.
- [9] E. Cansot, L. Pistre, M. Castelnau, P. Landiech, L. Georges, Y. Gaeremynck, and P. Bernard, “MicroCarb instrument, overview and first results,” *Proc. SPIE 12777, Inf. Conf. Space Optics*, vol. 12777, no. 1277734, pp. 1–13, 2022.
- [10] J.-L. Bertaux, A. Hauchecorne, F. Lefèvre, F.-M. Bréon, L. Blanot, D. Jouglet, P. Lafrique, and P. Akaev, “The use of the 1.27 μm O₂ absorption band for greenhouse gas monitoring from space and application to MicroCarb,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 13, no. 6, pp. 3329–3374, 2020.
- [11] M. Castelnau, E. Cansot, C. Buil, V. Pascal, V. Crombez, S. Lopez, L. Georges, and M. Dubreuil, “Modelization and validation of the diffraction effects in the microcarb instrument for accurately computing the instrumental spectral response function,” in *Int. Conf. Space Optics—ICSO 2018*. SPIE, 2019, vol. 11180, pp. 1054–1068.
- [12] S. Noël, M. Buchwitz, M. Hilker, M. Reuter, M. Weimer, H. Bovensmann, J. P. Burrows, H. Bösch, and R. Lang, “Greenhouse gas retrievals for the CO₂M mission using the FOCAL

- method : first performance estimates,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 17, no. 8, pp. 2317–2334, 2024.
- [13] C. D. Rodgers, *Inverse methods for atmospheric sounding : theory and practice*, vol. 2, World scientific, 2000.
- [14] S. W. Seemann, E.E. Borbas, J. Li, W.P. Menzel, and L.E. Gumley, “MODIS Atmospheric profile retrieval algorithm theoretical basis document - Collection 6,” 04 2011.
- [15] S. Noël, K. Bramstedt, H. Bovensmann, K. Gerilowski, J. P. Burrows, C. Standfuss, E. Dufour, and B. Veihelmann, “Quantification and mitigation of the impact of scene inhomogeneity on Sentinel-4 UVN UV-VIS retrievals,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 5, no. 6, pp. 1319–1331, 2012.
- [16] T. Hummel, C. Meister, C. Keim, J. Krauser, and M. Wenig, “Slit homogenizer introduced performance gain analysis based on the Sentinel-5/UVNS spectrometer,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 14, no. 8, pp. 5459–5472, 2021.
- [17] S. Beirle, J. Lampel, C. Lerot, H. Sihler, and T. Wagner, “Parameterizing the instrumental spectral response function and its changes by a super-Gaussian and its derivatives,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 2, pp. 581–598, 2017.
- [18] J. El Haouari, J.-Y. Tournet, H. Wendt, C. Pittet, and J.-M. Gaucel, “Approximation et estimation de réponses spectrales d’instruments,” in *Proc. Conf. GRETSI*, Grenoble, France, 2023, pp. p. 85–88.
- [19] Jihanne El Haouari, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tournet, and Herwig Wendt, “Estimation of instrument spectral response functions using sparse representations in a dictionary,” in *IEEE Int. Geosci. Remote Sens. Symp. (IGARSS 2024)*, Athens, Greece, July 2024.
- [20] J. El Haouari, J.-M. Gaucel, C. Pittet, J.-Y. Tournet, and H. Wendt, “In-flight estimation of instrument spectral response functions using sparse representations,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 18, no. 12, pp. 2573–2590, 2025.
- [21] Jihanne El Haouari, Marcus Carlsson, Jean-Yves Tournet, Herwig Wendt, Jean-Michel Gaucel, and Christelle Pittet, “Estimating Instrument Spectral Response Functions Using Sparse Representations and Quadratic Envelopes,” in *International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2025)*, Hyderabad, India, Apr. 2025.
- [22] Jihanne El Haouari, Jean-Yves Tournet, Herwig Wendt, Jean-Michel Gaucel, and Christelle Pittet, “Estimation of instrument spectral response functions in presence of radiometric errors,” in *IEEE European Signal Process. Conf. (EUSIPCO 2024)*, Lyon, France, Aug. 2024.
- [23] Jihanne El Haouari, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tournet, and Herwig Wendt, “On-ground and in-flight estimation of instrument spectral responses in the presence of measurement errors,” in *Int. Conf. Space Optics (ICSO2024)*, Antibes Juan-les-Pins, France, Oct. 2024.
- [24] Jihanne El Haouari, Filip Elvander, Jean-Michel Gaucel, Christelle Pittet, Jean-Yves Tournet, and Herwig Wendt, “Joint ISRF and Spectral Shift Estimation for Spectrometer Calibration using Optimal Transport,” in *IEEE European Signal Process. Conf. (EUSIPCO 2025)*, Palermo, Italy, Sept. 2025.
- [25] NOVELTIS, CNES, and LMD, “4A/OP - operational release for 4A - Automated Atmospheric Absorption Atlas,” .
- [26] R. Armante, N. A. Scott, V. Capelle, A. Chédin, E. Bernard, C. Standfuss, B. Tournier, and C. Pierangelo, “IASI conference Presentation : 4AOP : A fast and accurate operational forward radiative transfer model,” 2013.
- [27] R. L. Kurucz, I. Furenid, J. Brault, and L. Testerman, “Solar flux atlas from 296 to 1300 nm,” *National Solar Observatory Atlas, Sunspot*, 1984.

- [28] C. Pittet, V. Crombez, D. Jouglet, L. Georges, E. Cansot, and A. Albert-Aguilar, "In-flight estimation of the microcarb instrument spectral response functions.," in *Geophysical Research Abstracts*, 2019, vol. 21.
- [29] K. Sun, X. Liu, G. Huang, G. González Abad, Z. Cai, K. Chance, and K. Yang, "Deriving the slit functions from OMI solar observations and its implications for ozone-profile retrieval," *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 10, pp. 3677–3695, 2017.
- [30] R. M. van Hees, P. J. J. Tol, S. Cadot, M. Krijger, S. T. Persijn, T. A. van Kempen, R. Snel, I. Aben, and Hoogeveen, "Determination of the TROPOMI-SWIR instrument spectral response function," *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 11, no. 7, pp. 3917–3933, 2018.
- [31] Randall L Eubank, *Nonparametric regression and spline smoothing*, CRC press, 1999.
- [32] Z. Zhang, Y. Xu, J. Yang, X. Li, and D. Zhang, "A Survey of Sparse Representation : Algorithms and Applications," *IEEE Access*, vol. 3, pp. 490–530, 2015.
- [33] M. A. T. Figueiredo, R. D. Nowak, and S. J. Wright, "Gradient projection for sparse reconstruction : Application to compressed sensing and other inverse problems," *IEEE J. Sel. Topics Signal Process.*, vol. 1, no. 4, pp. 586–597, 2007.
- [34] I. Tošić and P. Frossard, "Dictionary learning," *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 28, no. 2, pp. 27–38, 2011.
- [35] M. Aharon, M. Elad, and A. Bruckstein, "K-SVD : An algorithm for designing overcomplete dictionaries for sparse representation," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 54, no. 11, pp. 4311–4322, 2006.
- [36] S. G. Mallat and Z. Zhang, "Matching pursuits with time-frequency dictionaries," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 41, no. 12, pp. 3397–3415, 1993.
- [37] Y. C. Pati, R. Rezaifar, and P. S. Krishnaprasad, "Orthogonal matching pursuit : recursive function approximation with applications to wavelet decomposition," in *Proc. Asilomar Conf. Signals, Systems and Computers*, Pacific Grove, CA, USA, Nov. 1-3 1993, pp. 40–44.
- [38] M. Tan, I. W. Tsang, and L. Wang, "Matching pursuit LASSO Part I : Sparse recovery over big dictionary," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 63, no. 3, pp. 727–741, 2015.
- [39] S.-J. Kim, K. Koh, M. Lustig, S. Boyd, and D. Gorinevsky, "An interior-point method for large-scale ℓ_1 -regularized least squares," *IEEE J. Sel. Topics Signal Process.*, vol. 1, no. 4, pp. 606–617, 2007.
- [40] D. L. Donoho, M. Elad, and V. N. Temlyakov, "Stable recovery of sparse overcomplete representations in the presence of noise," *IEEE Trans. Inf. Theory*, vol. 52, no. 1, pp. 6–18, 2005.
- [41] A. Savitzky and M. JE Golay, "Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures.," *Analytical chemistry*, vol. 36, no. 8, pp. 1627–1639, 1964.
- [42] L. I Rudin, S. Osher, and E. Fatemi, "Nonlinear total variation based noise removal algorithms," *Physica D : nonlinear phenomena*, vol. 60, no. 1-4, pp. 259–268, 1992.
- [43] A. Chambolle, "An algorithm for total variation minimization and applications : Special issue on mathematics and image analysis," *Journal of Mathematical Imaging and Vision*, vol. 20, 01 2004.
- [44] D. L Donoho and I. M Johnstone, "Ideal spatial adaptation by wavelet shrinkage," *biometrika*, vol. 81, no. 3, pp. 425–455, 1994.
- [45] I. M. Johnstone and B. W. Silverman, "Needles and straw in haystacks : Empirical bayes estimates of possibly sparse sequences.," *Annals of Statistics*, vol. 32, no. 4, pp. 1594–1649, 2004.
- [46] N. Wiener, *Extrapolation, interpolation, and smoothing of stationary time series*, The MIT press, 1964.

- [47] J. Ho, A. Jain, and P. Abbeel, “Denoising diffusion probabilistic models,” in *Proceedings of the 34th Int. Conf. Neural Information Process. Systems*, Red Hook, NY, USA, 2020, NIPS ’20, Curran Associates Inc.
- [48] Edmond Adib, Amanda S Fernandez, Fatemeh Afghah, and John J Prevost, “Synthetic ecg signal generation using probabilistic diffusion models,” *IEEE Access*, vol. 11, pp. 75818–75828, 2023.
- [49] M. Hamidouche and G. Lichtenberg, “In-flight retrieval of SCIAMACHY instrument spectral response function,” *Remote Sensing*, vol. 10, no. 3, pp. 401, 2018.
- [50] M. Carlsson, “On convex envelopes and regularization of non-convex functionals without moving global minima,” *J. Optim. Theory Appl.*, vol. 183, no. 1, pp. 66–84, 2019.
- [51] M. Carlsson, D. Gerosa, and C. Olsson, “An unbiased approach to compressed sensing,” *Inverse Probl.*, vol. 36, no. 11, pp. 115014, Oct. 2020.
- [52] M. Carlsson, D. Gerosa, and C. Olsson, “An unbiased approach to low rank recovery,” *SIAM J. Optim.*, vol. 32, no. 4, pp. 2969–2996, 2022.
- [53] D. Gerosa, M. Carlsson, and C. Olsson, “Bias versus non-convexity in compressed sensing,” *J. Math. Imaging Vis.*, vol. 64, no. 4, pp. 379–394, 2022.
- [54] J. Bacca, M. Carlsson, B. Monroy, and H. Arguello, “Plug-and-play algorithm coupled with low-rank quadratic envelope regularization for compressive spectral imaging,” in *ICASSP 2024-2024 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*. IEEE, 2024, pp. 2505–2509.
- [55] M. Carlsson and D. Gerosa, “On phase retrieval via matrix completion and the estimation of low rank PSD matrices,” *Inverse Probl.*, vol. 36, no. 1, pp. 015006, Dec. 2019.
- [56] J. C. Lagarias, J. A. Reeds, M. H. Wright, and P. E. Wright, “Convergence properties of the Nelder-Mead simplex method in low dimensions,” *SIAM J. Optim.*, vol. 9, pp. 112–147, 1998.
- [57] R. Tibshirani, “Regression shrinkage and selection via the lasso,” *Journal of the Royal Statistical Society (Series B)*, vol. 58, pp. 267–288, 1996.
- [58] C.-H. Zhang and J. Huang, “The sparsity and bias of the Lasso selection in high-dimensional linear regression,” *Ann. Stat.*, vol. 36, no. 4, pp. 1567 – 1594, 2008.
- [59] R. A. M. Lee, C. W. O’Dell, D. Wunch, C. M. Roehl, G. B. Osterman, J.-F. Blavier, R. Rosenberg, L. Chapsky, C. Frankenberg, S. L. Hunyadi-Lay, B. M. Fisher, D. M. Rider, D. Crisp, and R. Pollock, “Preflight Spectral Calibration of the Orbiting Carbon Observatory 2,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 55, no. 5, pp. 2499–2508, 2017.
- [60] D. Crisp, R. Rosenberg, L. Chapsky, G. R. Keller Rodrigues, R. Lee, A. Merrelli, G. Osterman, F. Oyafuso, R. Pollock, G. Spiers, S. Yu, J. Zong, and A. Eldering, “Orbiting Carbon Observatory – 2 & 3 (OCO-2 & OCO-3)- Level 1B! Algorithm Theoretical Basis Document,” 2021.
- [61] “AvaSpec-ULS2048x64-EVO - Data User’s product description,” .
- [62] R. Munro, R. Lang, D. Klaes, G. Poli, C. Retscher, R. Lindstrot, R. Huckle, A. Lacan, M. Grzegorski, A. Holdak, A. Kokhanovsky, J. Livschitz, and M. Eisinger, “The GOME-2 instrument on the Metop series of satellites : instrument design, calibration, and level 1 data processing – an overview,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 9, no. 3, pp. 1279–1301, 2016.
- [63] R. Siddans and B. G. Latter, “Analysis of GOME-2 (FM201-3) : Slit function Measurements Final Report Eumetsat Contract No. EUM/CO/04/1298/RM,” 2018.
- [64] M. R. Dobber, R. J. Dirksen, P. F. Levelt, G. H. J. van den Oord, R. H. M. Voors, Q. Kleipool, G. Jaross, M. Kowalewski, E. Hilsenrath, G. W. Leppelmeier, Johan de Vries, W. Dierssen, and N. C. Rozemeijer, “Ozone monitoring instrument calibration,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 44, no. 5, pp. 1209–1238, 2006.

- [65] V. M. E. Schenkeveld, G. Jaross, S. Marchenko, D. Haffner, Q. L. Kleipool, N. C. Rozemeijer, J. P. Veefkind, and P. F. Levelt, “In-flight performance of the Ozone Monitoring Instrument,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 5, pp. 1957–1986, 2017.
- [66] Q. Kleipool, A. Ludewig, L. Babić, R. Bartstra, R. Braak, W. Dierssen, P.-J. Dewitte, P. Kenter, R. Landzaat, J. Leloux, E. Loots, P. Meijering, E. van der Plas, N. Rozemeijer, D. Schepers, D. Schiavini, J. Smeets, G. Vacanti, F. Vonk, and P. Veefkind, “Pre-launch calibration results of the TROPOMI payload on-board the Sentinel-5 Precursor satellite,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 11, no. 12, pp. 6439–6479, 2018.
- [67] J. Smeets, Q. Kleipool, R. van Hees, and Sneepe M., “Readme for TROPOMI instrument spectral response functions,” 2002.
- [68] L. Babic, R. Braak, W. Dierssen, J. Kissi-Ameyaw, Q. Kleipool, J. Leloux, E. Loots, A. Ludewig, N. Rozemeijer, J. Smeets, and G. Vacanti, “Algorithm theoretical basis document for the TROPOMI L01b data processor,” 2022.
- [69] M. Kang, M.-H. Ahn, X. Liu, U. Jeong, and J. Kim, “Spectral Calibration Algorithm for the Geostationary Environment Monitoring Spectrometer (GEMS),” *Remote Sens.*, vol. 12, no. 17, 2020.
- [70] H. Ye, X. Wang, J. Wu, and Y. Jiang, “A priori estimation for spectral shift of atmospheric carbon dioxide satellite measurement,” *Optik*, vol. 158, pp. 283–290, 2018.
- [71] K. Sun, X. Liu, C. R. Nowlan, Z. Cai, K. Chance, C. Frankenberg, R. A. M. Lee, R. Pollock, R. Rosenberg, and D. Crisp, “Characterization of the OCO-2 instrument line shape functions using on-orbit solar measurements,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 3, pp. 939–953, 2017.
- [72] M. H. Stone, “The generalized Weierstrass approximation theorem,” *Mathematics Magazine*, vol. 21, pp. 167, 1948.
- [73] J. Lampel, Y. Wang, A. Hilboll, S. Beirle, H. Sihler, J. Pukite, U. Platt, and T. Wagner, “The tilt effect in DOAS observations,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 12, pp. 4819–4831, 2017.
- [74] S. Beirle, H. Sihler, and T. Wagner, “Linearisation of the effects of spectral shift and stretch in DOAS analysis,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 6, no. 3, pp. 661–675, 2013.
- [75] L. Métivier, R. Brossier, F. Kpadonou, J. Messud, and A. Pladys, “A review of the use of optimal transport distances for high resolution seismic imaging based on the full waveform,” *Mathematics In Action*, vol. 11, no. 1, pp. 3–42, 2022.
- [76] G. Peyré and M. Cuturi, et al, “Computational optimal transport : With applications to data science,” *Found. Trends Mach. Learn.*, vol. 11, no. 5-6, pp. 355–607, 2019.
- [77] C. Villani et al., *Optimal transport : old and new*, vol. 338, Springer, 2009.
- [78] F. Santambrogio, “Optimal transport for applied mathematicians,” *Birkhäuser, NY*, vol. 55, no. 58-63, pp. 94, 2015.
- [79] M. A. Schmitz, M. Heitz, N. Bonneel, F. Ngolè, D. Coeurjolly, M. Cuturi, G. Peyré, and J.-L. Starck, “Wasserstein dictionary learning : Optimal transport-based unsupervised nonlinear dictionary learning,” *SIAM J. Imaging Sci.*, vol. 11, no. 1, pp. 643–678, 2018.
- [80] T. Lin, C. Fan, N. Ho, M. Cuturi, and M. Jordan, “Projection robust wasserstein distance and riemannian optimization,” *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, vol. 33, pp. 9383–9397, 2020.
- [81] R. Flamary, C. Févotte, N. Courty, and V. Emiya, “Optimal spectral transportation with application to music transcription,” *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, vol. 29, 2016.
- [82] C. A. Prieto, “Velocities from cross-correlation : a guide for self-improvement,” *Astron. J.*, vol. 134, no. 5, pp. 1843, 2007.
- [83] H. Chen, Y. Liu, F. Lu, Y. Cao, and Z.-M. Zhang, “Eliminating non-linear raman shift displacement between spectrometers via moving window fast fourier transform cross-correlation,” *Front. Chem.*, vol. 6, pp. 515, 2018.

- [84] K. Hoyt, Forsberg F., and J. Ophir, “Comparison of shift estimation strategies in spectral elastography,” *Ultrasonics*, vol. 44, no. 1, pp. 99–108, 2006.
- [85] T. N. Vu and K. Laukens, “Getting your peaks in line : A review of alignment methods for nmr spectral data,” *Metabolites*, vol. 3, pp. 259–276, 04 2013.
- [86] G. Tomasi, F. Van Den Berg, and C. Andersson, “Correlation optimized warping and dynamic time warping as preprocessing methods for chromatographic data,” *J. Chemom. : A Journal of the Chemometrics Society*, vol. 18, no. 5, pp. 231–241, 2004.
- [87] Pavel Senin, “Dynamic time warping algorithm review,” *Information and Computer Science Department University of Hawaii at Manoa Honolulu, USA*, vol. 855, no. 1-23, pp. 40, 2008.
- [88] M. Cuturi and M. Blondel, “Soft-dtw : a differentiable loss function for time-series,” in *Int. conf. machine learning*. PMLR, 2017, pp. 894–903.
- [89] J. Ma, J. Zhao, and A. L Yuille, “Non-rigid point set registration by preserving global and local structures,” *IEEE Trans. image Process.*, vol. 25, no. 1, pp. 53–64, 2015.
- [90] Vladimir Vapnik, Steven Golowich, and Alex Smola, “Support vector method for function approximation, regression estimation and signal processing,” *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, vol. 9, 1996.
- [91] R. Rosenberg, S. Maxwell, B. C. Johnson, L. Chapsky, R. A. M. Lee, and R. Pollock, “Preflight Radiometric Calibration of Orbiting Carbon Observatory 2,” *IEEE Trans. on Geosci. Remote Sens.*, vol. 55, no. 4, pp. 1994–2006, 2017.
- [92] D. Crisp et al., “The on-orbit performance of the orbiting carbon observatory-2 (OCO-2) instrument and its radiometrically calibrated products,” *Atmos. Meas. Tech.*, vol. 10, no. 1, pp. 59–81, 2017.
- [93] M. Hotz and C. Vogel, “Linearization of time-varying nonlinear systems using a modified linear iterative method,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 62, no. 10, pp. 2566–2579, 2014.
- [94] G. H. Golub and V. Pereyra, “Separable nonlinear least squares : the variable projection method and its applications,” *Inverse Probl.*, vol. 19, no. 2, pp. R1, feb 2003.
- [95] M. Castella, “Inversion of polynomial systems and separation of nonlinear mixtures of finite-alphabet sources,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 56, no. 8, pp. 3905–3917, 2008.
- [96] Y. Altmann, A. Halimi, N. Dobigeon, and J.-Y. Tourneret, “Supervised nonlinear spectral unmixing using a postnonlinear mixing model for hyperspectral imagery,” *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 21, no. 6, pp. 3017–3025, 2012.
- [97] G. H. Golub and V. Pereyra, “The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares problems whose variables separate,” *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 10, no. 2, pp. 413–432, 1973.
- [98] M. Babaie-Zadeh, C. Jutten, and K. Nayebi, “Blind separating convolutive post non-linear mixtures,” *Proc. 3rd ICA Workshop*, p. 138–143, 2001.
- [99] A. Taghvaei, T.T. Georgiou, and L. et al Norton, “Fractional sir epidemiological models,” *Sci Rep*, vol. 10, no. 20882, April 2020.
- [100] P. Stoica and T. Söderström, “On reparametrization of loss functions used in estimation and the invariance principle,” *Signal Process.*, vol. 17, no. 4, pp. 383–387, 1989.
- [101] M.-D. Iordache, J. M. Bioucas-Dias, and A. Plaza, “Sparse Unmixing of Hyperspectral Data,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 49, no. 6, pp. 2014–2039, 2011.
- [102] V. Pathuri-Bhuvana, S. Schuster, and A. Och, “Joint calibration and tomography based on separable least squares approach with constraints on linear and non-linear parameters,” in *2020 28th European Signal Process. Conf. (EUSIPCO)*, 2021, pp. 1931–1935.
- [103] T. Blumensath and M. E. Davies, “Iterative hard thresholding for compressed sensing,” *Appl. Comput. Harmon. A.*, vol. 27, no. 3, pp. 265–274, 2009.
- [104] A. Beck and M. Teboulle, “A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm for linear inverse problems,” *SIAM J. Imaging Sci.*, vol. 2, no. 1, pp. 183–202, 2009.

- [105] A. Beck and M. Teboulle, “A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm with application to wavelet-based image deblurring,” in *Proc. IEEE Int. Conf. Acoust., Speech Signal Process. (ICASSP)*, Taipei, Taiwan, Apr. 19-24 2009, pp. 693–696.
- [106] D. Marquardt, “An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters,” *SIAM Journal Applied Mathematics*, vol. 11, pp. 431–441, 1963.
- [107] E. Tsiligianni, L. P. Kondi, and A. K. Katsaggelos, “Preconditioning for underdetermined linear systems with sparse solutions,” *IEEE Signal Process. Lett.*, vol. 22, no. 9, pp. 1239–1243, 2015.
- [108] K. Schnass and P. Vandergheynst, “Dictionary preconditioning for greedy algorithms,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 56, no. 5, pp. 1994–2002, 2008.
- [109] Jian Wang, Ron Healy, and Joe Timoney, “A robust audio watermarking scheme based on reduced singular value decomposition and distortion removal,” *Signal Processing*, vol. 91, no. 8, pp. 1693–1708, 2011.
- [110] L. N. Trefethen and D. Bau, *Numerical linear algebra*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), PA,USA, 1997.
- [111] J. S. Marshall, R. C. Langille, and W. Mc K. Palmer, “Measurement of Rainfall by Radar.,” *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 4, no. 6, pp. 186–192, Dec. 1947.
- [112] N. Keshava, “A survey of spectral unmixing algorithms,” *Lincoln Laboratory Journal*, vol. 14, pp. 55–78, 01 2003.
- [113] A. Halimi, Y. Altmann, N. Dobigeon, and J.-Y. Tourneret, “Nonlinear unmixing of hyperspectral images using a generalized bilinear model,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 49, no. 11, pp. 4153–4162, 2011.
- [114] F. Zhu, A. Halimi, P. Honeine, B. Chen, and N. Zheng, “Correntropy maximization via admm : Application to robust hyperspectral unmixing,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 55, no. 9, pp. 4944–4955, 2017.
- [115] N. Dobigeon, J.-Y. Tourneret, C. Richard, J. C. M. Bermudez, S. McLaughlin, and A. O. Hero, “Nonlinear unmixing of hyperspectral images : Models and algorithms,” *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 31, no. 1, pp. 82–94, 2014.
- [116] D.I Heinz and C.-I Chang, “Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 39, pp. 529 – 545, 04 2001.
- [117] R. N. Clark, G. A. Swayze, R. Wise, K. E. Livo, T. M. Hoefen, R. F. Kokaly, and S. J. Sutley, “Usgs digital spectral library,” 2007, <http://speclab.cr.usgs.gov/spectral.lib06/ds231/datatable.html>.
- [118] Daniel Delahaye, Supatcha Chaimatanan, and Marcel Mongeau, “Simulated annealing : From basics to applications,” in *Handbook of metaheuristics*, pp. 1–35. Springer, 2018.
- [119] J. Ho, A. Jain, and P. Abbeel, “Denoising diffusion probabilistic models,” in *Adv. Neural Inf. Process.*, H. Larochelle, M. Ranzato, R. Hadsell, M.F. Balcan, and H. Lin, Eds. 2020, vol. 33, pp. 6840–6851, Curran Associates, Inc.
- [120] H. Li, G. Ditzler, J. Roveda, and A. Li, “Descod-ecg : Deep score-based diffusion model for ecg baseline wander and noise removal,” *IEEE J. Biomed. Health Inform.*, vol. 28, no. 9, pp. 5081–5091, 2024.
- [121] P. de Boer, “Report : Conditional diffusion models for ecg signal denoising,” 2024.
- [122] R. E. Kalman and Others, “A new approach to linear filtering and prediction problems,” *J. Basic Eng.*, vol. 82, no. 1, pp. 35–45, 1960.
- [123] H. W. Sorenson, “Kalman filtering : theory and application,” *New York (N.Y.) : IEEE Press, reprint edition*, 1985.

- [124] S. J. Julier and J. K. Uhlmann, “New extension of the kalman filter to nonlinear systems,” in *Signal processing, sensor fusion, and target recognition VI*. Spie, 1997, vol. 3068, pp. 182–193.
- [125] S.J. Julier and J.K. Uhlmann, “Unscented filtering and nonlinear estimation,” *Proc. IEEE*, vol. 92, no. 3, pp. 401–422, 2004.
- [126] A. Doucet, N. De Freitas, N. J. Gordon, et al., *Sequential Monte Carlo methods in practice*, vol. 1, Springer, 2001.
- [127] J. Carpenter, P. Cliffordy, and P. Fearnhead, “An improved particle filter for non-linear problems,” *IEE Proc. Radar, Sonar Navig.*, vol. 146, 09 2000.
- [128] D. JC MacKay et al., “Introduction to gaussian processes,” *NATO Adv. Sci. Inst. Ser. F Comput. Systems Sci.*, vol. 168, pp. 133–166, 1998.
- [129] C. Williams and C. Rasmussen, “Gaussian processes for regression,” *Adv. Neural Inf. Process.*, vol. 8, 1995.
- [130] A. Sherstinsky, “Fundamentals of recurrent neural network (RNN) and long short-term memory (LSTM) network,” *Phys. D : Nonlinear Phenom.*, vol. 404, pp. 132306, 2020.
- [131] K. Greff, R. K. Srivastava, J. Koutník, B. R. Steunebrink, and J. Schmidhuber, “Lstm : A search space odyssey,” *IEEE Trans. Neural Netw. Learn. Syst.*, vol. 28, no. 10, pp. 2222–2232, 2017.
- [132] C. Doersch, “Tutorial on variational autoencoders,” 06 2016.
- [133] L. Girin, S. Leglaive, X. Bie, J. Diard, T. Hueber, and X. Alameda-Pineda, “Dynamical variational autoencoders : A comprehensive review,” *Found. Trends Mach. Learn.*, vol. 15, no. 1–2, pp. 1–175, 2021.
- [134] John Hedley, Chris Roelfsema, and Stuart R. Phinn, “Efficient radiative transfer model inversion for remote sensing applications,” *Remote Sens. of Environment*, vol. 113, no. 11, pp. 2527–2532, 2009.
- [135] A. L. Ganesan, M. Rigby, A. Zammit-Mangion, A. J. Manning, R. G. Prinn, P. J. Fraser, C. M. Harth, K.-R. Kim, P. B. Krummel, S. Li, J. Mühle, S. J. O’Doherty, S. Park, P. K. Salameh, L. P. Steele, and R. F. Weiss, “Characterization of uncertainties in atmospheric trace gas inversions using hierarchical bayesian methods,” *Atmos. Chem. Phys.*, vol. 14, no. 8, pp. 3855–3864, 2014.

Titre : calibration de spectromètre par résolution de problèmes inverses parcimonieux pour le sondage atmosphérique

Mots clés : Télédétection spatiale, Problèmes inverses, Calibration des instruments, Représentation parcimonieuse, Défauts radiométriques et spectraux

Résumé : "Dans la nature réside la préservation du monde", écrivait Thoreau dans *Walking* (Finch & Elder, p. 192), soulignant le rôle fondamental de la nature dans l'équilibre terrestre. Aujourd'hui, le changement climatique bouleverse cet équilibre, menaçant les écosystèmes. Une surveillance précise des gaz à effet de serre dans l'atmosphère, principaux responsables du changement climatique, est devenue indispensable. Dans cette optique, la télédétection spatiale constitue un outil puissant pour mesurer et analyser à l'échelle mondiale la composition de l'atmosphère grâce à l'interaction entre le rayonnement électromagnétique et les molécules atmosphériques. La présence de ces dernières modifie le contenu spectral du rayonnement, ce qui permet d'inférer leurs concentrations à partir de mesures de spectre rayonné. Les spectromètres utilisés sont des instruments à haute résolution, centrés sur les bandes spectrales des gaz d'intérêt. Toutefois, ces instruments présentent des imperfections optiques et électroniques, générant des erreurs qui biaisent l'interprétation des spectres mesurés. Il est donc crucial de modéliser précisément le comportement de l'instrument, en particulier sa fonction de réponse spectrale instrumentale (ISRF). La caractérisation instrumentale débute au sol, via des campagnes sous vide thermique, puis se poursuit en orbite durant la phase de calibration/validation (CALVAL). Des calibrations régulières permettent ensuite de suivre les dérives instrumentales liées à l'environnement spatial (vieillesse, variations thermomécaniques). La thèse s'est focalisée sur l'estimation des ISRFs, tout en prenant en compte d'autres imperfections tels que les erreurs radiométriques et les décalages spectraux, afin d'améliorer la qualité des produits utilisateurs.

Dans la littérature, les ISRFs sont souvent modélisées par des fonctions paramétriques (gaussiennes, super-gaussiennes). Toutefois, ces modèles peinent à représenter la diversité des formes observées et n'offrent pas une correction suffisante face aux exigences croissantes des missions spatiales. Par ailleurs, les erreurs instrumentales sont rarement intégrées dans le modèle global ou traitées conjointement. Pour dépasser ces limites, la thèse explore des approches de représentation parcimonieuse permettant d'estimer les ISRFs de manière plus flexible et précise que les approches paramétriques classiques. En complément, une méthode a été développée pour estimer simultanément les ISRFs et les erreurs de mesure, en combinant représentation parcimonieuse et modélisation paramétrique des erreurs. Cette approche conjointe atteint une précision comparable à celle obtenue dans des conditions idéales, c'est-à-dire sans erreurs instrumentales.

Le cadre méthodologique proposé ouvre la voie à une généralisation à d'autres problèmes inverses non-linéaires sous contraintes de parcimonie, par exemple en imagerie hyperspectrale. Les perspectives incluent l'exploration de modèles dynamiques, tels que les modèles à espace d'états (State Space Models), pour estimer conjointement les ISRFs selon la longueur d'onde. Des outils comme les filtres de Kalman, les réseaux de neurones récurrents, les transformateurs ou les processus gaussiens sont également envisagés. L'apprentissage automatique pourrait aussi être mobilisé pour estimer les ISRFs, atténuer le bruit ou calibrer les spectres. À plus long terme, il serait pertinent d'intégrer d'autres erreurs, telles que la lumière parasite (assimilable à une fonction de réponse spatiale ou spatio-spectrale), ou d'aller jusqu'à l'estimation des paramètres atmosphériques (comme le CO₂) au niveau 2, en tenant compte de l'impact des erreurs instrumentales sur l'inversion.

En somme, cette thèse contribue à la mise au point d'algorithmes robustes pour la calibration en vol des instruments de télédétection, avec un impact potentiel fort sur la précision des mesures atmosphériques, et à terme, sur les applications climatiques et environnementales.

Title: spectrometer calibration using sparse inverse problems for atmospheric sounding

Key words: Space remote sensing, Inverse problems, Flight calibration, Sparse representation, Radiometric and spectral defects

Abstract: "In wildness is the preservation of the world," wrote Thoreau in *Walking* (Finch & Elder, p. 192), emphasizing the fundamental role of nature in the Earth's balance. Today, climate change is disrupting this balance, threatening ecosystems.

Accurate monitoring of greenhouse gases in the atmosphere, the main drivers of climate change, has become essential. In this context, space-based remote sensing is a powerful tool for measuring and analyzing the composition of the atmosphere on a global scale through the interaction between electromagnetic radiation and atmospheric molecules. The presence of these molecules modifies the spectral content of the radiation, making it possible to infer their concentrations from measurements of the radiated spectrum. The spectrometers used are high-resolution instruments, focused on the spectral bands of the gases of interest. However, these instruments have optical and electronic imperfections, generating errors that bias the interpretation of the measured spectra. It is therefore crucial to accurately model the behavior of the instrument, in particular its instrumental spectral response function (ISRF). Instrument characterization begins on the ground, via thermal vacuum campaigns, and then continues in orbit during the calibration/validation (CALVAL) phase. Regular calibrations then make it possible to monitor instrumental drifts related to the space environment (aging, thermomechanical variations). The thesis focuses on estimating ISRFs while taking into account other imperfections, such as radiometric errors and spectral shifts, in order to improve the quality of user products.

In the literature, ISRFs are often modeled by parametric functions (Gaussian, super-Gaussian). However, these models struggle to represent the diversity of observed shapes and do not offer sufficient correction for the growing demands of space missions. Furthermore, instrumental errors are rarely integrated into the overall model or treated jointly. To overcome these limitations, the thesis explores sparse representation approaches that allow ISRFs to be estimated more flexibly and accurately than classical approaches. In addition, a method has been developed to simultaneously estimate ISRFs and measurement errors by combining sparse representation and parametric modeling of errors. This joint approach achieves a level of accuracy comparable to that obtained under ideal conditions, i.e., without instrumental errors.

The proposed methodological framework paves the way for generalization to other nonlinear inverse problems under sparse constraints, for example, in hyperspectral imaging. Prospects include the exploration of dynamic models, such as state space models, to jointly estimate ISRFs according to wavelength. Tools such as Kalman filters, recurrent neural networks, transformers, or Gaussian processes are also being considered. Machine learning could also be used to estimate ISRFs, reduce noise, or calibrate spectra. In the longer term, it would be relevant to integrate other errors, such as stray light (assimilable to a spatial or spatio-spectral response function), or even estimate atmospheric parameters (such as CO₂) at level 2, taking into account the impact of instrumental errors on inversion.

Ultimately, the work carried out in this thesis aims to contribute to the development of robust in-flight calibration algorithms for remote sensing instruments, with potentially significant impact on the accuracy of atmospheric measurements and, more broadly, on climate and environmental applications.