



HAL
open science

Traitement d'images multispectrales et spatialisation des données pour la caractérisation de la matière organique des phases solides naturelles.

Kévin Jacq

► **To cite this version:**

Kévin Jacq. Traitement d'images multispectrales et spatialisation des données pour la caractérisation de la matière organique des phases solides naturelles.. Chimie analytique. Université Grenoble Alpes, 2019. Français. NNT : 2019GREAA024 . tel-03191841

HAL Id: tel-03191841

<https://theses.hal.science/tel-03191841>

Submitted on 7 Apr 2021

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.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE LA COMMUNAUTE UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Doctorat Chimie**

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Kévin JACQ

Thèse dirigée par **Didier COQUIN**, Professeur à l'Université Savoie Mont Blanc, et codirigée par **Bernard FANGET**, Ingénieur de Recherche à l'Université Savoie Mont Blanc

préparée au sein des **Laboratoire Environnements, Dynamiques et Territoires de la Montagne (EDYTEM)** et **Laboratoire d'Informatique, Systèmes, Traitement de l'Information et de la Connaissance (LISTIC)** dans l'**École Doctorale Sciences et Ingénierie des Systèmes de l'Environnement et des Organisations (SISEO)**

Traitement d'images multispectrales et spatialisation des données pour la caractérisation de la matière organique des phases solides naturelles.

Thèse soutenue publiquement le **27 novembre 2019**,
devant le jury composé de :

Monsieur Ludovic DUPONCHEL

Professeur des Universités, Ecole Polytechnique Université de Lille,
Président du jury

Monsieur Pierre FRANCUS

Professeur des Universités, Institut National de la Recherche
Scientifique, Centre Eau Terre et Environnement, Rapporteur

Monsieur Ludovic MACAIRE

Professeur des Universités, Université de Lille, Rapporteur

Madame Maria EL RAKWE

Ingénieur de Recherche, Institut Français de Recherche pour
l'Exploitation de la Mer, Examinateur

Monsieur Maxime DEBRET

Maître de Conférences, Université de Rouen Normandie, Invité

Monsieur Didier COQUIN

Professeur des Universités, Université Savoie Mont Blanc, Directeur de
thèse

Monsieur Bernard FANGET

Ingénieur de Recherche, Université Savoie Mont Blanc, Co-directeur de
thèse



Résumé

L'évolution de l'environnement et le climat sont, actuellement, au centre de toutes les attentions. Les impacts de l'activité des sociétés actuelles et passées sur l'environnement sont notamment questionnés pour mieux anticiper les implications de nos activités sur le futur. Mieux décrire les environnements passés et leurs évolutions sont possibles grâce à l'étude de nombreux « enregistreurs » naturels (sédiments, spéléothèmes, cernes, coraux). Grâce à eux, il est possible de caractériser des évolutions bio-physico-chimiques à différentes résolutions temporelles et pour différentes périodes. La haute résolution entendue ici comme la résolution suffisante pour l'étude de l'environnement en lien avec l'évolution des sociétés constitue le principal verrou de l'étude de ces archives naturelles notamment en raison de la capacité analytique des appareils qui ne peuvent que rarement voir des structures fines inframillimétriques.

Ce travail est bâti autour de l'hypothèse que l'utilisation de caméras hyperspectrales (VNIR, SWIR, LIF) couplée à des méthodes statistiques pertinentes doivent permettre d'accéder aux informations spectrales et donc bio-physico-chimiques contenues dans ces archives naturelles à une résolution spatiale de quelques dizaines de micromètres et, donc, de proposer des méthodes pour atteindre la haute résolution temporelle (saisonnière). De plus, afin d'avoir des estimations fiables, plusieurs capteurs d'imageries et de spectroscopies linéaires (XRF, TRES) sont utilisés avec leurs propres caractéristiques (résolutions, gammes spectrales, interactions atomiques/moléculaires). Ces méthodes analytiques sont utilisées pour la caractérisation de la surface des carottes sédimentaires. Ces analyses spectrales micrométriques sont mises en correspondance avec des analyses géochimiques millimétriques usuelles.

Optimiser la complémentarité de toutes ces données, implique de développer des méthodes permettant de dépasser la difficulté inhérente au couplage de données considérées par essence dissimilaire (résolutions, décalages spatiaux, non-recouvrement spectral). Ainsi, quatre méthodes ont été développées. La première consiste à associer les méthodes hyperspectrales et usuelles pour la création de modèles prédictifs quantitatifs. La seconde permet le recalage spatial des différentes images hyperspectrales à la plus basse des résolutions. La troisième s'intéresse à la fusion de ces dernières à la plus haute des résolutions. Enfin, la dernière s'intéresse aux dépôts présents dans les sédiments (lamines, crues, tephras) pour ajouter une dimension temporelle à nos études.

Grâce à l'ensemble de ces informations et méthodes, des modèles prédictifs multivariés ont été estimés pour l'étude de la matière organique, des paramètres texturaux et de la distribution granulométrique. Les dépôts laminés et instantanés au sein des échantillons ont été caractérisés. Ceci a permis d'estimer des chroniques de crues, ainsi que des variations bio-physico-chimiques à l'échelle de la saison. L'imagerie hyperspectrale couplée à des méthodes d'analyse des données sont donc des outils performants pour l'étude des archives naturelles à des résolutions temporelles fines. L'approfondissement des approches proposées dans ces travaux permettra d'étudier de multiples archives pour caractériser des évolutions à l'échelle d'un ou de plusieurs bassin(s) versant(s).

Mots clés : Sédimentologie, Spectroscopie, Imagerie, Chimométrie, Fusion de Données, Matière Organique, Granulométrie.

Abstract

The evolution of the environment and climate are, currently, the focus of all attention. The impacts of the activities of present and past societies on the environment are in particular questioned in order to better anticipate the implications of our current activities on the future. Better describing past environments and their evolutions are possible thanks to the study of many natural “recorders” (sediments, speleothems, tree rings, corals). Thanks to them, it is possible to characterize biological-physical-chemical evolutions at different temporal resolutions and for different periods. The high resolution understood here as the sufficient resolution for the study of the environment in connection with the evolution of societies constitutes the main lock of the study of these natural archives in particular because of the analytical capacity devices that can only rarely see fine inframillimetre structures.

This work is built on the assumption that the use of hyperspectral sensors (VNIR, SWIR, LIF) coupled with relevant statistical methods should allow access to the spectral and therefore biological-physical-chemical contained in these natural archives at a spatial resolution of a few tens of micrometers and, therefore, to propose methods to reach the high temporal resolution (season). Besides, to obtain reliable estimates, several imaging sensors and linear spectroscopy (XRF, TRES) are used with their own characteristics (resolutions, spectral ranges, atomic/molecular interactions). These analytical methods are used for surface characterization of sediment cores. These micrometric spectral analyses are mapped to usual millimeter geochemical analyses.

Optimizing the complementarity of all these data involves developing methods to overcome the difficulty inherent in coupling data considered essentially dissimilar (resolutions, spatial shifts, spectral non-recovery). Thus, four methods were developed. The first consists in combining hyperspectral and usual methods for the creation of quantitative predictive models. The second allows the spatial registration of different hyperspectral images at the lowest resolution. The third focuses on their merging with the highest of the resolutions. Finally, the last one focuses on deposits in sediments (laminae, floods, tephras) to add a temporal dimension to our studies.

Through all this information and methods, multivariate predictive models were estimated for the study of organic matter, textural parameters and particle size distribution. The laminated and instantaneous deposits within the samples were characterized. These made it possible to estimate floods chronicles, as well as biological-physical-chemical variations at the season scale. Hyperspectral imaging coupled with data analysis methods are therefore powerful tools for the study of natural archives at fine temporal resolutions. The further development of the approaches proposed in this work will make it possible to study multiple archives to characterize evolutions at the scale of one or more watershed(s).

Keywords : Sedimentology, Spectroscopy, Imaging, Chemometrics, Data Fusion, Organic Matter, Grain Size

Remerciements

Une thèse peut avoir plusieurs définitions, pour certains il s'agit d'un diplôme supplémentaire, pour d'autres d'un grade plus élevé, ou encore d'un premier CDD de 3 ans, des premiers pas dans la recherche, ou d'une aventure humaine. Dans mon cas, je la décris comme un marathon scientifique (c'est mon côté Speedy) et surtout une histoire de famille.

Avec des parrains et marraine qui ont permis d'avoir différents regards sur mes travaux pour les faire avancer dans la bonne direction. C'est pourquoi je tenais à remercier le jury qui a assisté à ma thèse pour diriger mes futurs travaux : Ludovic Duponchel, Ludovic Macaire, Pierre Francus, Maria El Rakwe et Maxime Debret. Ainsi que mon comité de thèse qui a permis de choisir les méthodologies à privilégier durant la thèse : Jocelyn Chanussot, Ludovic Duponchel et Maxime Debret.

Bien évidemment des parents dans mon cas, trois pères, deux lumineux et un de l'ombre qui m'ont encadré, épaulé, enseigné de nombreux éléments dans différents domaines (tenir le coup après un prieuré, monter en haut d'une colline pour prendre du recul, voir la vie en fluo ou en flou). A commencer par mon directeur lumineux, Didier, qui m'a dirigé à distance sur un domaine loin de ces habitudes, mais cela a très bien fonctionné grâce à la complémentarité de toutes nos approches et à la perfection de nos origines bretonnes. Puis mon co-directeur tout aussi lumineux et l'encadrant de l'ombre, Bernard et Yves, qui m'ont fait faire 300 km du marathon à les chercher dans le laboratoire pendant les trois ans, mais cela m'a permis de sortir de mon ordinateur !

Ensuite, il y a les grands-parents, les oncles et tantes qui m'ont enseigné la culture des archives sédimentaires et des masques d'argile !

Avec deux familles :

1* La famille EDYTEM. En commençant par Faycal-Vincent et Manu qui ont orienté mon marathon dans le laboratoire pour trouver mes pères ! Fabien et Pierre qui ont alimenté mes travaux avec de nouveaux obstacles à dépasser avec des heures de calcul que je faisais avec plaisir. Anne-Lise ou Dark Devil dont la joie de vivre égaille nos journées avec des rayons X. Erwan que je dois citer ici, mais qui adore laisser sa place dans les co-autorat ;) pour ensuite se venger avec des smashes au badminton, bientôt il va crouler sous les articles à relire ! Charline qui m'a montré qu'avec de la persévérance on retombe sur des résultats attendus et surtout comment aller jusqu'au bout pour raconter une belle histoire. Cécile qui m'a permis d'ajouter de nouvelles cordes à mon arc, avec des protocoles et la gestion des données. Jérôme qui est une des rares personnes qui comprends ce que je fais mais sans mettre les mains dans les codes ;). Je remercie aussi les équipes du laboratoire qui m'ont permis de réfléchir sur leurs problématiques pour voir que mes approches sont transposables à de nombreux domaines : les équipes lacs et archives, ainsi que des grottes ornées. Je remercie aussi Christine M. qui a orienté la dernière diapo de ma soutenance et qui m'a fait confiance pour l'épauler avec le

site internet du laboratoire et HAL. Je tiens à remercier Christine C. et Carole sans qui une thèse se résumerait à trois ans derrière un bureau, elles sont toujours là pour nous aider et répondre à nos questions. Je remercie aussi tous les membres du laboratoire EDYTEM qui ont permis de développer mon sujet et aussi d'en sortir.

2* Et la famille LISTIC que j'ai moins côtoyée mais qui m'a appris énormément de nouvelles méthodes essentielles à mes travaux. Alexandre avec les réseaux de neurones profonds (ou intelligence artificielle) et sa grande joie de vivre. Reda avec les régressions par splines et son intérêt pour les données spectroscopiques. Patrick et Emmanuel qui avaient une bonne vision de nos problématiques et qui nous ont proposé certaines méthodes très intéressantes.

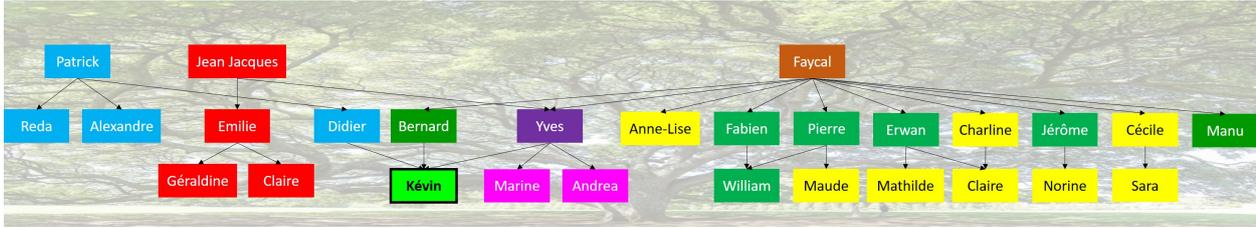
Mon marathon n'aurait pas été loin sans mes demi-sœurs ou frères et sœurs de cœur qui étaient toujours là pour discuter, avoir des points de vue différents sur mes travaux et pour me booster par moments.

A commencer par mes drôles de dames ou sœurs de cœur. Avec la team SpecSole (Marine la manipulatrice et Andrea la grande sage) qui préfère regarder leurs mignons bonshommes en pain d'épice pendant 2 mois avant de leur couper en premier les bras ou la tête ; et je vais regretter de ne plus pouvoir jouer avec des lasers dans le noir pendant des heures et des heures. Les discussions super- et anti- héros, et SF avec Claire vont me manquer, mais j'y penserai grâce au monde des BDs qui s'ouvre à moi grâce à son initiation. Je n'oublie pas notre chère héroïne à tous, Géraldine ou Jade pour les non-intimes, qui a le pouvoir de disparaître des photos et avec qui on a passé des soirées à se biffer dans la (presque) bonne humeur. Merci à Camille pour ses bons conseils dans le bus et autour d'une bière. Et pour finir avec un peu de testostérone tout de même avec les drôles de bonhommes. Merci à Benjamin de me sauver de certaines discussions du midi sur les sujets propres à ces dames et pour les discussions scientifiques très intéressantes que l'on a pu avoir autour d'une ou plusieurs bières. Sans Pedro ces discussions n'auraient pas eu lieu, tout comme certaines soirées, grâce à son approvisionnement en bières (brasserie du Merle), donc un grand merci à lui pour veiller à notre bonne hydratation. Après la boisson vient la nourriture, alors merci à William d'avoir tenté de m'initier aux gratins mais les restaurants normands ont eu raison d'eux, de m'avoir trouvé un si beau surnom (Speedy) et j'espère qu'on finira nos publications communes au lieu de jouer au chat et au Speedy (Chambéry-Paris).

Ensuite, la vie d'un doctorant n'est pas solitaire, il est toujours entouré par les cousins et cousines qui passent par les mêmes étapes, c'est comme ça qu'on avance en groupe et qu'on apprend ensemble les difficultés de la thèse. A commencer par Laurent et Johan qui m'ont appris la vie d'un jeune doctorant. Merci aux doctorants qui comme moi aimaient taper des volants le midi pour évacuer du stress : Sophie-Anne (ou le regard noir), Ellen, Timothy, Qi et Xiaqing. Je remercie Manon, Ruth, et Claire pour m'avoir transmis une partie de leurs connaissances en sédimentologie, ainsi qu'avoir utilisé mes compétences pour résoudre leurs problématiques. Merci à mes amis de promo qui m'ont appris les joies de la rédaction de ce manuscrit et la préparation de la soutenance : PA, Anne, Jacques, Kim, et à ceux qui sont sur la fin : Grégoire, Thérèse, Céline, Chiara. Et enfin bon courage à ceux qui sont sur le chemin de la thèse : Ana, Léna, Norine, Maude, Hege, Mathieu, Emmanuel, Guilhem, Mathilde, Tanguy. Je tiens aussi à remercier des collègues de l'INES pour s'être occupés d'Anaïs pendant mon absence rédactionnelle : Laurène, Florent, Chloé, Benoit, Francisco, José, Mohamed, Malek ... Et merci à tout ce que j'ai pu oublier.

Je remercie tout particulièrement mes amis de longue date pour m'avoir changé les idées en sortant de mon ordinateur. Anne-Claire et Manu, merci pour les soirées Eurovision, Fifa, Cartes, Pompon et grandes oreilles, et les journées playa-grottes. Damien, merci pour tes visites pendant tes périodes de formation à Lyon où tu étais toujours balade ou blessé et tes

Remerciements



lapins pour x raisons lors de mes passages à Rouen (muscu, aqua-poney, cerf-volant, maladies, blessures). Clémence, tes humiliations à dos de bouquetins étaient très intéressantes et vont me manquer, maintenant ça va être à dos d'hippocampes. Merci à Simon et Hélène de m'avoir coaché lors de mon premier colloque international et de nous avoir permis de revenir quelques jours dans la ville rose.

Bien évidemment je ne peux oublier d'où je suis sorti, alors un très grand merci à ma famille de m'avoir supporté pendant toutes ces années et de m'avoir fait comme le docteur que je suis devenu, alors merci au Ptit et à Mimi mes parents que j'aime tant, Violaine la meilleure des tatas, Floriane, Sylvia. Merci aussi à mes trois belles familles, Aurélie, Clémentine et Zoé; Régine, Gérard et Antoine; Daniel, Valérie, Youenn, Romane, Jade, Annie et Jeeean; et la grande belle-famille Colin.

Enfin merci à Abstergo, à l'animus et aux assassins pour toutes ces bottes de foin à travers le monde (Palestine, Italie, USA, Caraïbes, Paris, Londres, Égypte, Grèce) pendant plus de 800 heures de jeux sur 3 ans, dont 200 heures sur les trois derniers mois de la thèse pour finir le manuscrit.

La meilleure pour la fin, qu'aurait été ma thèse sans Anaïs (future Jacq)? Elle aurait été très difficile et peut-être ne serais-je pas allée jusqu'au bout. Alors un énorme merci à elle pour m'avoir épaulé, supporté pendant ces trois années et de s'être amusée à compter les "que" et "qui" dans ce manuscrit qui ont conduit au décès d'une touche sur mon clavier.

Sommaire

Résumé	ii
Abstract	iii
Remerciements	iv
Introduction et contexte général	1
1 État de l'art et méthodologies proposées	7
1.1 La spectroscopie et l'imagerie, des outils performants pour l'analyse des échantillons naturels	7
1.2 Objectifs des travaux et méthodologies proposées	40
2 L'analyse spectrale mono-capteur des carottes sédimentaires	51
2.1 Les biais et incertitudes de l'analyse hyperspectrale	73
2.2 Les différences d'échelle spatiale	74
2.3 La transférabilité entre échantillons	75
3 Le recalage des images pour l'analyse spectrale multi-capteurs des carottes sédimentaires	81
3.1 La méthode de recalage des données pour une fusion "basse résolution"	82
3.2 La fusion "basse résolution" pour l'analyse des archives sédimentaires	107
4 La combinaison ou fusion des capteurs à la plus haute résolution	139
4.1 Les méthodes de fusion utilisées en télédétection	140
4.2 Des perspectives pour une fusion à haute résolution de capteurs de laboratoire	159
5 La dimension spatiale, une dimension informative pour l'analyse spatio-spectrale des archives naturelles	163
5.1 La détection d'événements instantanés par l'utilisation de méthodes d'apprentissage automatique	165
5.2 La détection des dépôts laminés pour l'ajout d'une dimension temporelle	202
Conclusions générales et perspectives	215
1 L'imagerie hyperspectrale, un outil novateur pour l'analyse des archives environnementales	216
2 Des perspectives de développements des technologies et méthodes pour l'analyse à haute résolution	223
Table des abréviation	229

Table des matières	231
Table des figures	235
Liste des tableaux	239
Annexe	243
A Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique	244
B Les images RGB, une donnée simple à ne pas sous-estimer	262
C Une méthode semi-automatique pour le comptage des lamines à partir d'images RGB d'archives solides naturelles	276

Introduction et contexte général

Les changements environnementaux et climatiques passés et futurs sont devenus des sujets majeurs de société. On s'interroge tout particulièrement sur les conséquences des activités humaines sur ces évolutions, ainsi que leurs impacts sur nos modes de vie et sur les écosystèmes à l'échelle de la planète. Selon le dernier rapport de 2014 du Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat (GIEC), il est clairement démontré que les gaz à effet de serre émis par l'homme influent sur le climat avec le réchauffement de l'atmosphère et de l'océan, les réductions des surfaces gelées, l'augmentation du niveau des mers et leurs acidifications, l'augmentation de la fréquence des événements extrêmes (canicule, inondation, sécheresse, cyclone, incendie) [1]. Tout ceci a un impact sur l'écosystème à l'échelle de la planète, comme le montre le rapport de 2005 d'Évaluation des écosystèmes pour le millénaire commandé par l'Organisation des Nations unies avec des effets négatifs sur la qualité des eaux, la qualité des sols et leurs érosions, la qualité de l'air, l'augmentation des espèces invasives et l'extinction de certaines espèces. Le dernier rapport spécial du GIEC d'août 2019 est en accord avec ses observations [2, 3]. C'est pourquoi des initiatives internationales se mettent en place, comme les Conférences annuelles des Nations Unies sur les changements climatiques (COP).



FIGURE 1 : Six sphères représentant la Terre

La recherche dans ce domaine repose sur de nombreux programmes de financement, comme Horizon 2020 (H2020) qui place le développement durable et les innovations sur le climat à la première place des investissements avec au minimum 35% de son budget 2018-2020 [4]. L'agence nationale de la recherche française (ANR) a d'ailleurs créé un rapport en 2013 intitulé "Environnement et Changements Globaux : des aléas à la vulnérabilité des sociétés" pour recenser les enjeux et les défis à surmonter dans huit catégories qu'elle a définies [5] et qui sont pour certains en adéquation avec le plan scientifique du programme international de découverte des océans (IODP) [6]. Ceux-ci s'accordent sur la nécessité de renforcer l'étude

des cinq sphères de la Terre (atmosphère, biosphère, cryosphère, hydrosphère, lithosphère) de manière globale et locale, ainsi que leurs interactions entre elles et avec une sixième sphère : l'anthroposphère (figure 1).

Afin d'étudier ces sphères, ainsi que le climat et l'environnement passés, il existe des "enregistreurs" aux quatre coins du globe que l'on appelle archives naturelles. Parmi celles-ci, on trouve les sédiments (lacustre, marin, roche), les spéléothèmes (stalagmites, stalactites, concrétions), les carottes de glace, les sols, les arbres (cernes), les coraux. Une base de données internationales permettant la reconstruction de la température depuis 2000 ans à partir de toutes ces archives a été mise en place par le consortium PAGES2k (Past Global Changes over the past 2000 years). Celle-ci a notamment permis de mettre en avant une anomalie de température avec son augmentation sur les 150 dernières années [7]. Elle permet aussi de comparer la résolution temporelle et la disponibilité de ces archives, comme le montre la figure 2. On observe notamment une résolution temporelle médiane variant entre un mois et cent ans. Les plus résolues étant les coraux et les moins résolues étant les sédiments marins ; quant aux sédiments lacustres leur résolution médiane est de l'ordre de la décennie ; les arbres, les carottes de glace et les spéléothèmes sont aux alentours de l'année. Quatre archives principales, dans cette base de données, permettent d'étudier les 2000 dernières années, les sédiments lacustre et marin, les carottes de glace et les arbres. On voit donc que la résolution temporelle peut être un frein pour certaines archives, à moins d'utiliser des techniques nouvelles pour l'augmenter.

On peut aussi mentionner d'autres difficultés, car il existe de nombreuses méthodes physico-chimiques qui sont devenues usuelles du fait de leur efficacité, mais malgré cela, certaines présentent aussi des inconvénients lors de leurs utilisations à des archives volumineuses (plusieurs mètres de longueurs, centimètres de largeur et de profondeur). En effet, ces analyses sont peu résolues (millimétriques) et discontinues, ce qui est un frein pour des études fines à l'échelle de l'année ou de la saison. Elles peuvent utiliser des solvants toxiques, dangereux pour l'environnement et l'expérimentateur. Elles sont aussi très souvent chronophages, conduisent à la destruction de l'échantillon et sont spécifiques à une ou plusieurs propriété(s).

Pour répondre à ces difficultés, le bureau de coordination du forage scientifique continental (CSDCO) propose d'utiliser des méthodes d'analyse avancées, innovantes, non destructives, à haute résolution, récentes, demandant donc des développements méthodologiques et informatiques spécifiques. Cela rejoint également les propositions de différentes communautés comme celles étudiant les archives naturelles [9, 10, 11]. Parmi ces méthodes, on trouve :

- L'imagerie hyperspectrale qui permet d'étudier rapidement tout point à la surface des échantillons dans les domaines spectraux ultra-violet, visible, infrarouge, Raman. Ceci dans le but d'obtenir des cartes d'abondances de certaines propriétés, comme la minéralogie, les composés organiques.
- La tomodynamométrie qui estime la densité de l'échantillon en 3D pour discriminer des lithologies et des matériaux.
- La micro-spectroscopie qui permet une étude très fine de la géochimie et ainsi d'estimer des variations minéralogiques, de matière organique, d'interaction entre l'environnement et l'échantillon.
- Le développement d'outils de terrain fiables pour résister aux conditions extérieures (température, pression, humidité, vibration).

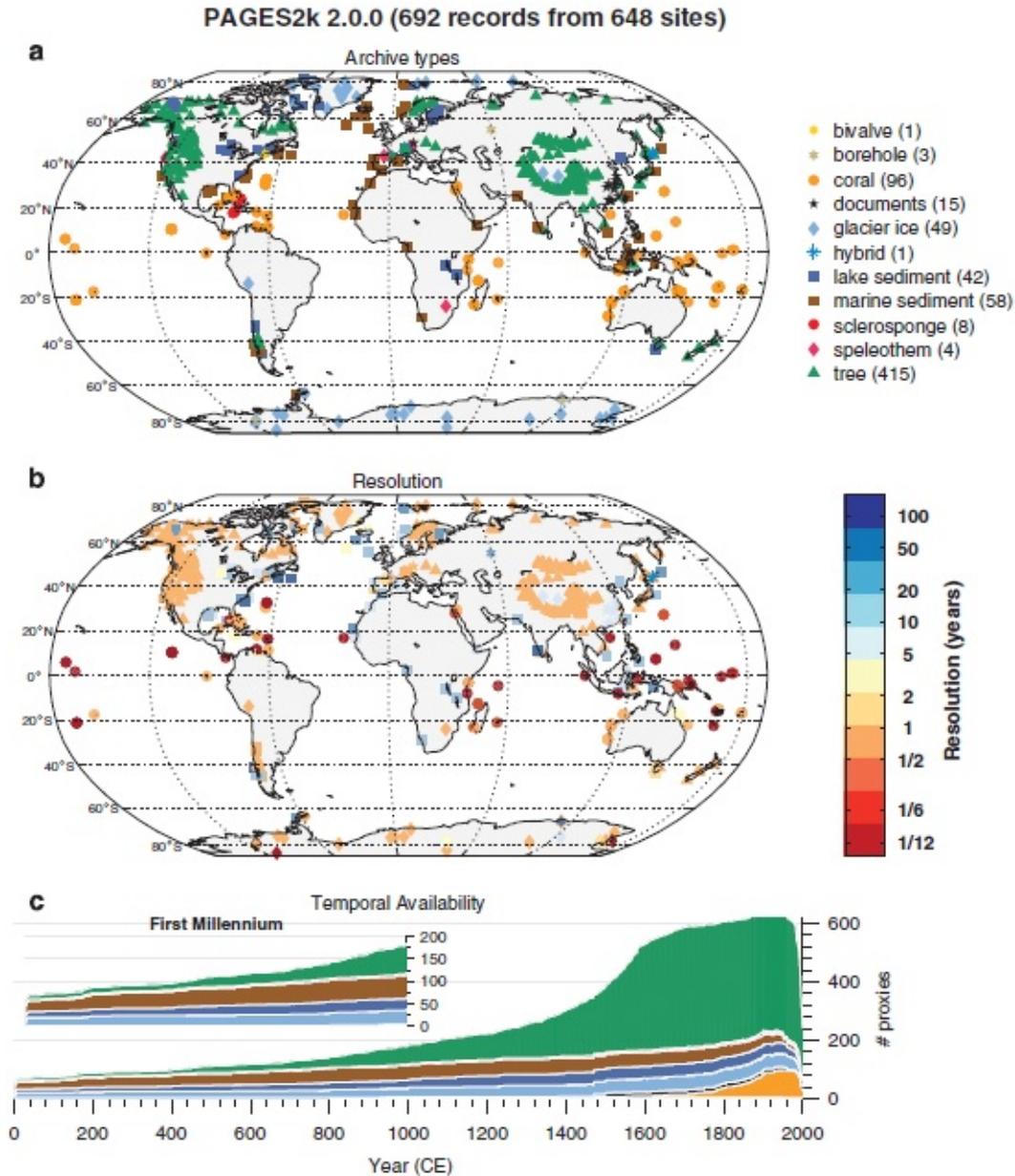


FIGURE 2 : Base de données de PAGES2k en 2017 [8]. Répartitions des différents échantillons en fonction (a) du type d'archives naturelles, (b) de la résolution temporelle, (c) de la capacité d'enregistrement

Ces méthodes avancées se basent principalement sur deux groupes de méthodes bien connues. D'une part, les méthodes spectroscopiques qui étudient l'interaction entre un rayonnement électromagnétique (ultra-violet, visible, infrarouge) et la matière. Elles peuvent quantifier et classifier certains paramètres physico-chimiques des archives naturelles rapidement, avec précision et pour certaines sans destruction de l'échantillon. Parmi ces paramètres, on trouve la matière organique (totale, chlorophylle, matière humique), les paramètres de textures (argile, silt, sable), l'azote et le phosphore total, des polluants organiques et de métaux lourds, des empreintes de minéraux [12, 13, 14, 15, 16]. D'autre part, les méthodes d'imagerie qui permettent d'étudier un paramètre en tout point de l'échantillon. Elles peuvent caractériser des structures au sein de l'échantillon (lamines, dépôts instantanés, particules,

débris) [17, 18, 19, 20, 21]. Elles permettent aussi d'étudier les variations au sein d'une même structure et donc sur une même unité de temps.

Si ces "méthodes de base" donnent des résultats aussi intéressants, les méthodes avancées proposées par le CSDCO et d'autres communautés devraient permettre d'approfondir encore plus les connaissances sur les archives naturelles.

C'est pourquoi la problématique qui va nous intéresser pour ces travaux est : **comment le développement des méthodes d'analyses et de traitements peut permettre d'améliorer la résolution temporelle et la qualité des informations extraites des archives naturelles dans le but d'atteindre une compréhension des phénomènes d'occurrences annuelles voire sub-annuelles.**

Pour répondre à cette problématique, nous nous sommes tournés vers des technologies d'imageries hyperspectrales permettant de faire de la cartographie ou de l'imagerie spectroscopique pour analyser l'échantillon complet. La donnée obtenue est une image qui enregistre une donnée spectroscopique dans chaque pixel. Nous nous limiterons à l'étude des archives sédimentaires lacustres (dépôts de particules au fond des lacs) qui enregistrent des informations à l'échelle d'un bassin versant (figure 3). Celles-ci permettent d'estimer des variations au sein du lac (activités biologiques), sur ces rives directes (érosion, activités humaines), par l'apport des cours d'eau (érosion) et de l'atmosphère (aérosols, gaz).

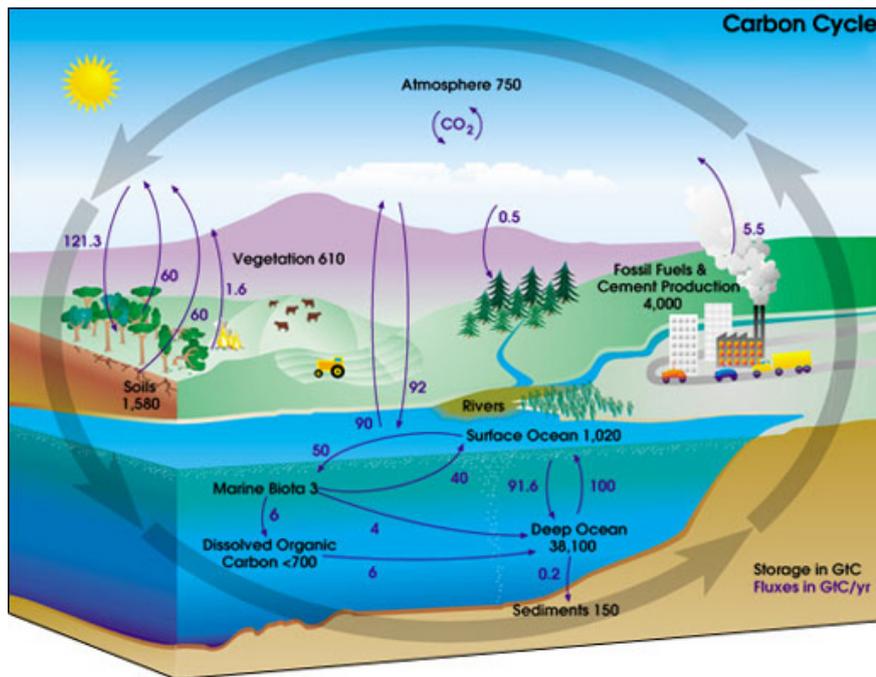


FIGURE 3 : Cycle du carbone qui montre les sources d'apport sédimentaire potentiel pour l'océan, qui sont similaires pour un lac [22]

Nous allons dans un **premier chapitre** dresser un **état de l'art** des méthodes d'analyse des données appliquées aux données spectroscopiques et d'imageries. Ceci nous permettra de déterminer **les verrous et limites actuels, les objectifs de nos travaux, ainsi que la méthodologie à mettre en place.** Dans les **chapitres 2 à 5**, nous développerons **des méthodologies** que nous avons appliquées pour répondre à la problématique et aux objectifs de nos travaux avec l'utilisation de l'imagerie hyperspectrale et des archives sédimentaires lacustres.

Bibliographie

- [1] GIEC. *Changements climatiques 2014 : Rapport de synthèse. Contribution des Groupes de travail I, II et III au cinquième Rapport d'évaluation du Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat*. Rapp. tech. Genève, Suisse : GIEC, 2014, p. 161.
- [2] *Ecosystems and Human Well-being : Synthesis*. Rapp. tech. Washington, DC : Millennium Ecosystem Assessment, 2005.
- [3] GIEC. *Climate change and land grabbing*. Rapp. tech. Intergovernmental Panel on Climate Change, 2019.
- [4] *La C.E. publie les derniers programmes de travail 2018-2020 d'Horizon 2020*. 2019.
- [5] ANR. *Environnement et Changements Globaux : des aléas à la vulnérabilité des sociétés*. Rapp. tech. ANR, 2013.
- [6] *Illuminating Earth 's Past, Present, and Future*. Rapp. tech. The international ocean discovery program, 2013.
- [7] R. NEUKOM et al. « No evidence for globally coherent warm and cold periods over the preindustrial Common Era ». In : *Nature* 571.7766 (2019), p. 550-554.
- [8] PAGES2K CONSORTIUM. « A global multiproxy database for temperature reconstructions of the Common Era ». In : *Scientific Data* 4.1 (2017).
- [9] B. ZOLITSCHKA et al. « Varves in lake sediments, a review ». In : *Quaternary Science Reviews* 117 (2015), p. 1-41.
- [10] I. W. CROUDACE et R. G. ROTHWELL. *Micro-XRF studies of sediment cores : applications of a non-destructive tool for the environmental sciences*. 2015.
- [11] *Annual recorders of the past*. Rapp. tech. 2014.
- [12] S. XU et al. « Comparison of multivariate methods for estimating selected soil properties from intact soil cores of paddy fields by Vis-NIR spectroscopy ». In : *Geoderma* 310 (2018), p. 29-43.
- [13] R. A. VISCARRA ROSSEL et al. « A global spectral library to characterize the world's soil ». In : *Earth-Science Reviews* 155 (2016), p. 198-230.
- [14] S. ARMENTA et M. de la GUARDIA. « Vibrational spectroscopy in soil and sediment analysis ». In : *Trends in Environmental Analytical Chemistry* 2 (2014), p. 43-52.
- [15] B. STENBERG et al. « Visible and near infrared spectroscopy in soil science ». In : *Advances in Agronomy* 107 (2010), p. 163-215.
- [16] R. VISCARRA ROSSEL et al. « Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties ». In : *Geoderma* 131.1-2 (2006), p. 59-75.
- [17] I. F. AYMERICH et al. « Detection of Tephra Layers in Antarctic Sediment Cores with Hyperspectral Imaging ». In : *PLOS ONE* 11.1 (2016). Sous la dir. de J. A. COLES, p. 1-24.
- [18] S. Q. GAN et C. A. SCHOLZ. « Extracting paleoclimate signals from sediment laminae : An automated 2-D image processing method ». In : *Computers & Geosciences* 52 (2013), p. 345-355.

- [19] D. BUSCOMBE. « Transferable wavelet method for grain-size distribution from images of sediment surfaces and thin sections, and other natural granular patterns ». In : *International Association of Sedimentologists* (2013).
- [20] M. E. WEBER et al. « BMPix and PEAK tools : New methods for automated laminae recognition and counting-Application to glacial varves from Antarctic marine sediment ». In : *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 11.3 (2010).
- [21] S. OUTAL. « Quantification par analyse d'images de la granulométrie des roches fragmentées : amélioration de l'extraction morphologique des surfaces, amélioration de la reconstruction stéréologique ». Thèse de doct. 2006.
- [22] K. LORENTZ. *Humans and the Global Carbon Cycle : A Faustian Bargain ?* 2007.

Chapitre 1

État de l'art et méthodologies proposées

Afin de répondre à la problématique de nos travaux, ce chapitre présente une **première partie correspondant à un état de l'art** qui montre le large panel de méthodes que l'on peut utiliser pour l'analyse des images hyperspectrales, celles-ci étant caractérisées par deux dimensions spatiales liées à la surface de l'échantillon, et une dimension spectrale associée à sa bio-physico-chimie.

La **seconde partie de ce chapitre présentera les axes méthodologiques développés** proposées à partir de l'état de l'art. Nous discuterons aussi des verrous et limites associés à nos données pour définir des objectifs en lien avec la problématique.

1.1 La spectroscopie et l'imagerie, des outils performants pour l'analyse des échantillons naturels

L'ensemble des méthodes que l'on retrouve dans la littérature peuvent être rassemblées en trois groupes qui vont constituer les trois premières sections, la quatrième section se concentrera sur des méthodes pouvant améliorer les résultats des précédentes.

- La **première section** présente la **théorie du spectre électromagnétique** avec les différentes gammes spectrales et ce qu'elles peuvent caractériser, **les méthodes d'analyse uni- et multi-variées, et la caractérisation d'empreintes bio-physico-chimiques** qui permettent d'extraire les informations d'intérêt des signaux spectroscopiques. Une synthèse des résultats de la littérature pour l'analyse d'échantillons environnementaux (sédiment, sol) a été effectuée et sera présentée à travers des propriétés d'intérêt pour ces échantillons.
- La **seconde section** présente les méthodes de **segmentation d'image** qui permettent d'extraire des structures à la surface des échantillons. Des illustrations seront effectuées avec la détection des lamines et l'estimation des particules sédimentaires pour le cas des archives naturelles.
- La **troisième section** présente les méthodes de **classification ou d'apprentissage automatique** qui peuvent aussi bien exploiter la dimension spectrale que spatiale, ceci dans le but d'extraire les caractéristiques des échantillons comme au chapitre précédent, avec les dépôts sédimentaires.

- Une **quatrième section** introduit les méthodes de **fusion** utilisées pour combiner des données multicapteurs que ce soit des images (nD , $n > 1$) ou des signaux ($1D$). L'objectif de la fusion est de créer des capteurs composites sur des gammes spectrales étendues, pouvant ainsi apporter davantage d'informations bio-physico-chimiques. Ces méthodes permettront d'améliorer les performances de modélisation des précédentes approches.

1.1.1 L'analyse spectrale pour mettre en lumière la composition des échantillons

Les capteurs spectroscopiques peuvent utiliser différentes gammes du spectre électromagnétique (ultraviolet, visible, infrarouge, rayons X). Ceux-ci enregistrent des informations physiques, chimiques et biologiques sur les échantillons analysés, on parle de propriétés structurales. Mais l'interprétation de ces données est souvent indirecte. La chimiométrie s'intéresse à l'utilisation de méthodes statistiques qui permettent d'extraire le maximum d'information pertinentes.

Le spectre électromagnétique

Le spectre électromagnétique est divisé en plusieurs gammes spectrales en fonction des modes d'interaction entre les rayonnements et la matière (molécules, atomes, électrons). Banwell [1] propose de le diviser en sept zones principales qui sont synthétisées dans la figure 1.1 :

- Les ondes radio-électriques peuvent interagir avec le spin des particules en les inversant, comme par exemple avec les noyaux atomiques ou les électrons célibataires. L'étude de ces deux phénomènes est appelée respectivement résonance magnétique nucléaire (RMN), résonance de spin électronique (RSE) ou la résonance paramagnétique électronique (RPE).
- Les micro-ondes sont capables d'influer sur la vitesse de rotation des molécules, c'est pourquoi son étude se nomme spectroscopie rotationnelle.
- Les infrarouges (IR) s'intéressent aux vibration des liaisons moléculaires, d'où le nom de spectroscopie vibrationnelle. Deux groupes principaux existent dans cette zone, la spectroscopie infrarouge et la spectroscopie Raman. La première est aussi subdivisée en trois zones d'après la norme ISO 20473 [2], ou communément subdivisée en cinq zones (tableau 1.1).

Séparation	Nom	Abréviation	Gamme (μm)
ISO20473	Proche infrarouge	PIR (NIR)	0.78-3.0
Usuelle	Proche infrarouge	PIR (NIR)	0.75-1
Usuelle	Infrarouge courtes ondes	SWIR	1-3.0
ISO20473	Moyen infrarouge	MIR	3-50
Usuelle	Infrarouge moyennes ondes	MWIR	3-5
Usuelle	Infrarouge longues ondes	LWIR	8-12
Usuelle	Lointain infrarouge	LIR (FIR)	15-1000
ISO20473	Lointain infrarouge	LIR (FIR)	50-1000

TABLE 1.1 : Découpages de la gamme infrarouge suivant la norme ISO 20473 et ceux utilisés usuellement

- Les ultraviolets et le visible (UV-visible) excitent les électrons de valence (externe) des atomes ou molécules pour les transitions des états électroniques, on parle de spectroscopie électronique. Deux méthodes principales existent dans cette gamme, la spectroscopie UV-Visible et la spectroscopie de fluorescence UV-Visible (EEM, avec excitation laser LIF, ou en temps résolu TRES).
- Les rayons X permettent aussi de faire de la spectroscopie électronique, mais au niveau des électrons de cœur ou proche du noyau atomique. Cette gamme peut aussi être divisée en trois méthodes principales, les spectroscopies d'absorption ou de diffraction des rayons X (DRX) et la spectroscopie de fluorescence des rayons X.
- Les rayons γ influent sur les transitions d'énergie au sein des noyaux des atomes. Elle est aussi représentée par deux méthodes principales, la spectrométrie gamma et la spectrométrie de Mössbauer.

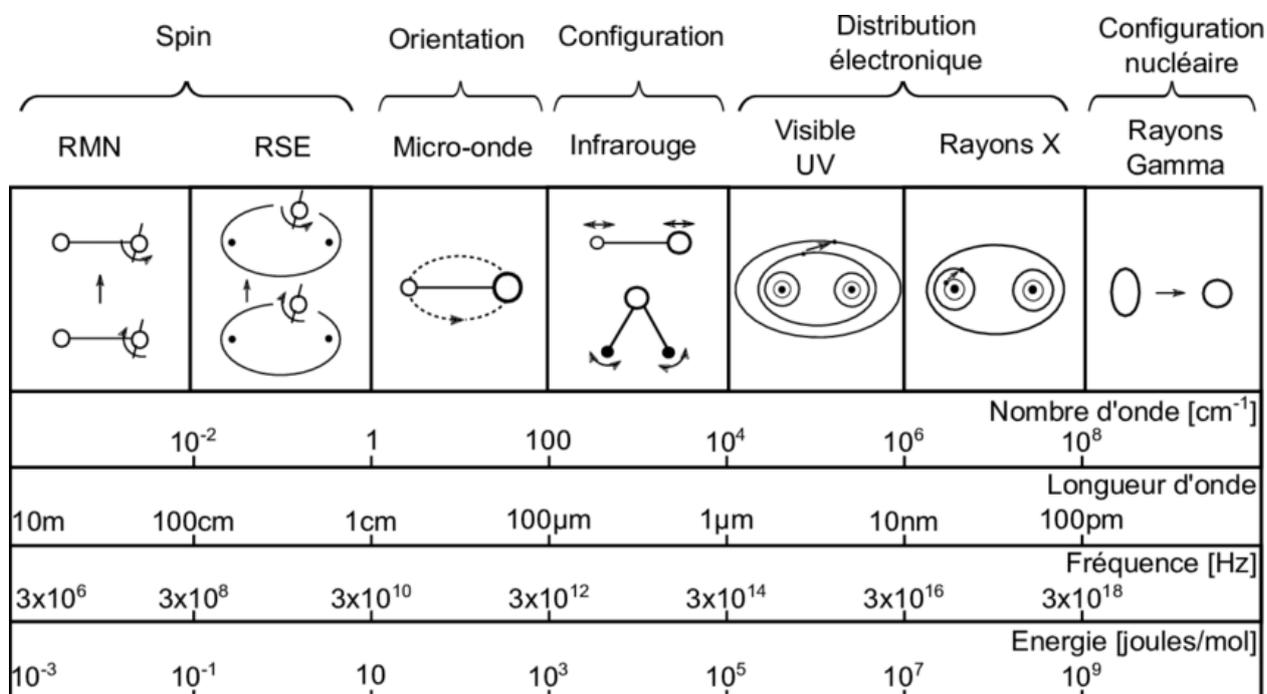


FIGURE 1.1 : Spectre électromagnétique divisé en gammes spectroscopiques courantes avec une représentation schématique du mode d'excitation [1]

Chacune de ces régions est exprimée dans une unité dépendant des pratiques de la communauté. Par exemple :

- les rayons X sont exprimés dans une unité d'énergie comme l'électron-volt (eV),
- le proche-infrarouge et l'UV-visible en longueur d'onde en nanomètre (nm),
- le Raman et le moyen infrarouge sont exprimés en nombre d'ondes dans l'unité par centimètre (cm^{-1}).

Dans la suite du mémoire, nous utiliserons le nanomètre (nm) comme l'unité de longueur d'onde pour les données spectroscopiques, sauf dans la gamme des rayons X où l'unité d'énergie électron-volt (eV) sera utilisée.

Le type d'acquisition est aussi spécifique du capteur et de la problématique à résoudre :

- des analyses ponctuelles permettent d'avoir une idée globale de la composition de l'échantillon,
- une analyse continue sur une ligne permet d'avoir une tendance sur la variabilité de l'échantillon suivant cet axe,
- une cartographie en effectuant une analyse point par point sur la totalité de l'échantillon permet de connaître la variabilité dans les deux directions de l'échantillon,
- une image qui est obtenue par l'acquisition d'une ligne pour obtenir comme précédemment la variabilité globale de l'échantillon.

Les deux premiers sont appelés données spectroscopiques, alors que la cartographie et l'image sont rassemblées sous le terme d'imagerie hyperspectrale (IHS). Cette IHS peut être caractérisée par une résolution spatiale et spectrale élevée.

Dans le cadre de mes travaux, des capteurs d'imageries hyperspectrales UV-visible, proche-infrarouge, fluorescence UV-visible sont utilisés, tout comme des capteurs linéaires de fluorescence UV-visible résolue en temps et de fluorescence des rayons X. Ces capteurs comme on pourra le voir dans le tableau 1.2 sont à des résolutions micro- ou milli-métriques ce qui permettra d'estimer des évolutions à l'échelle sub-annuelle comme la saison.

Les méthodes univariées

Une première approche pour extraire des informations à partir de données spectrales est de chercher des zones caractéristiques correspondant à une ou quelques longueur(s) d'onde. On parle dans ce cas d'approches univariées avec une approche spectrale locale plutôt que globale.

Les énergies d'absorption ou d'excitation dans les gammes présentées précédemment sont quantifiées à des niveaux d'énergie connues. Il est donc possible de créer des tables qui référencent les composés ou liaisons chimiques associées à ces énergies ou longueurs d'onde. Comme c'est le cas avec les spectroscopies moyen-infrarouge, la fluorescence UV-visible ou des rayons X. Dans certaines gammes cela est compliqué à réaliser du fait de la superposition de nombreuses propriétés et de la résolution spectrale des capteurs, comme en spectroscopie proche-infrarouge.

D'autres composés ont été spécifiquement étudiés et des indices existent pour les quantifier :

- avec la spectroscopie UV-visible :
 - la chlorophylle [3, 4, 5],
 - les caroténoïdes [6],
 - d'autres pigments [7],
 - certains minéraux [8, 9],
 - différenciation de pôles sédimentaires [10].

- avec la spectroscopie PIR :
 - l'humidité [11, 12],
 - les argiles minérales [12],
 - certains minéraux [13, 14].
- avec la spectroscopie LIF :
 - les acides humiques [15, 16, 17, 18].
- avec la spectroscopie XRF, de nombreux ratios existent, après avoir calculé les aires sous les pics correspondant aux atomes en question [19].

Il faut tout de même utiliser ces indices avec précaution, car plusieurs composés chimiques peuvent interagir dans les mêmes zones spectrales et la résolution spectrale peut ne pas être suffisamment fine pour distinguer ces composés. Il existe aussi de nombreux indices développés en télédétection pour des données RGB ou multispectrales [20], mais qui sont très peu utilisés en spectroscopie de laboratoire, car l'information recherchée n'est pas la même.

Par la suite, nous utiliserons deux indices pour estimer les possibilités de l'imagerie hyperspectrale sur une variable simple et globale. Le premier est présent dans la gamme UV-visible pour la caractérisation de la chlorophylle et de ses dérivés moléculaires, il s'agit d'un bon indicateur de la production de matière organique réalisée par les organismes présent dans le lac (productivité primaire) qui nous permettra d'estimer des changements environnementaux. Le second s'intéresse aux argiles minérales dans la gamme PIR, il sera comparé aux argiles granulométriques et pourra être employé pour la caractérisation de dépôts sédimentaires comme les crues.

Il est aussi possible de développer des modèles de régression en estimant un lien entre une méthode analytique de référence et une donnée spectrale d'une unique longueur d'onde. On parle de la régression linéaire simple (RLS) qui estime une relation entre une variable expliquée (y , analytique) et une variable explicative (x , spectral).

Les régressions multivariées

Plutôt que d'étudier des zones spectrales spécifiques pour un composé ou une liaison chimique, des approches globales qui utilisent l'ensemble du spectre ont été développées et se nomment méthodes multivariées. Une information bio-physico-chimique peut se retrouver dans différentes zones du spectre, elle peut aussi être en lien avec un autre composé corrélé, ou au contraire perturbé par un autre. Ces méthodes globales peuvent ainsi retrouver toutes ces informations ce qui permet de créer des modèles de prédictions performants.

Les principales méthodes de régression que l'on trouve dans la littérature ou qui se développent sont présentées ci-dessous et peuvent être schématisées avec la figure 1.2. Davantage d'informations sont disponibles dans le livre de Tufféry [21].

- Les méthodes linéaires :

- La régression linéaire multiple (RLM) est similaire à la RLS, la différence réside dans la multitude de variables explicatives (X) qui correspondent à une donnée spectrale à plusieurs longueurs d'onde.
 - La régression sur composantes principales (PCR) [22] est une RLM qui utilise comme variables explicatives les composantes principales (PC) de l'analyse en composantes principales (ACP) [23]. Les PC s correspondent aux regroupements des variables explicatives X portant des informations similaires. L'ACP permet ainsi de réduire la taille des données spectrales en regroupant les X corrélées. L'ACP calcule un nouveau repère géométrique, différent de l'espace spectral, qui est orienté suivant des axes indépendants expliquant la variabilité des données explicatives.
 - La régression des moindres carrés partiels (PLSR) [24] (qui peut également être non linéaire). La régression PLS estime des variables latentes (VLs) qui correspondent aux regroupements des variables explicatives X liées à celles à expliquer Y . Elle estime donc aussi un nouveau repère géométrique, qui s'oriente suivant des axes indépendants qui expliquent la variabilité des données explicatives X tout en maximisant la corrélation entre X et Y . C'est une des méthodes les plus utilisées en traitement de données spectroscopiques (chimométrie).
- Les méthodes non linéaires :
 - La régression multivariée par spline adaptative (MARS) [25] permet de modéliser des non-linéarités grâce à des règles, on parle d'une méthode non-paramétrique. Pour cela, elle utilise des partitionnements récursifs pour estimer des sous-zones pouvant être modélisées par des fonctions linéaires. Un modèle MARS peut donc être représenté par une succession de règles conduisant à des modèles linéaires terminaux.
 - Les machines à vecteurs de support (SVM) [26] utilisent un espace de grandes dimensions pour estimer un hyperplan ($n > 2$) linéaire afin de répondre à un problème non linéaire. L'hyperplan linéaire estimé subit ensuite une transformation inverse pour revenir dans l'espace initiale non-linéaire.
 - Les réseaux de neurones artificiels (ANN) [27, 28] cherche à reproduire la capacité du cerveau à apprendre. Cette méthode repose sur un ensemble d'unités fondamentales interconnectées, les neurones. Un réseau est un ensemble de couches de neurones qui fonctionne, les unes à la suite des autres. Chaque neurone reçoit une partie des informations qu'il traite et il communique les résultats avec ses plus proches voisins de la couche de neurones suivante. Le réseau le plus simple comporte trois couches, une d'entrée, une de calcul ou couche cachée et une couche de sortie.
 - Les réseaux d'apprentissage profond sont des méthodes qui se développent dans tous les domaines et aussi récemment en analyse de données spectroscopiques. C'est une méthode proche de l'ANN, la différence est que le réseau profond comporte plusieurs couches cachées et un nombre de neurones souvent important [29, 30].

D'un point de vue mathématique, on fait la différence entre un vecteur avec une lettre minuscule (x,y) et une matrice avec une lettre majuscule (X,Y).

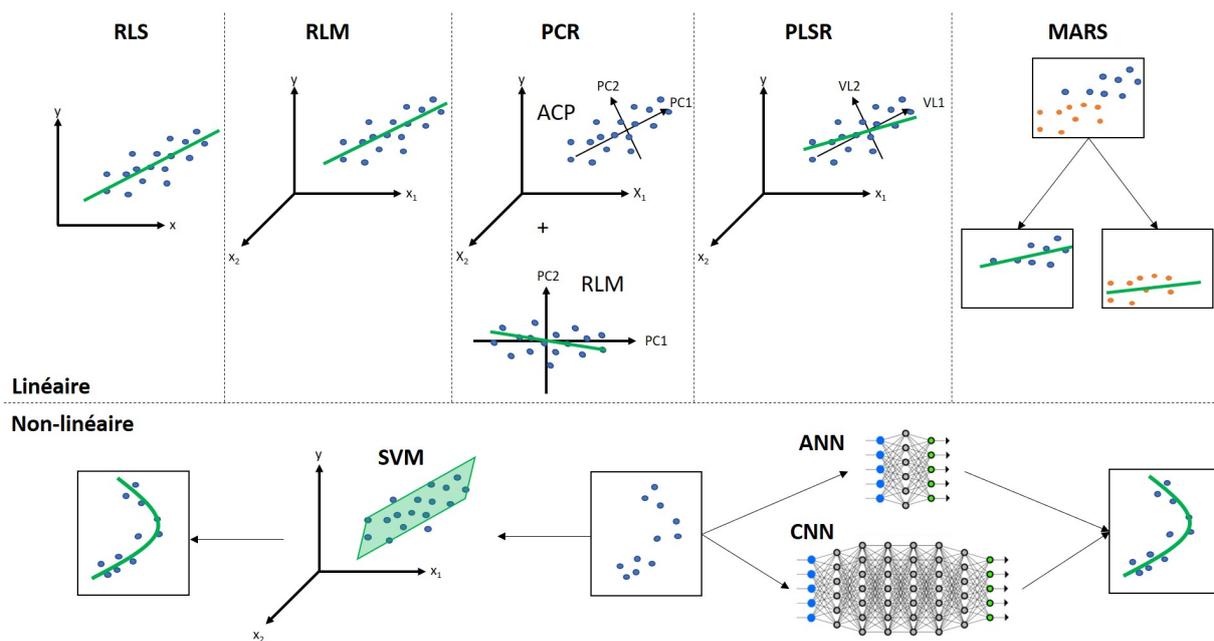


FIGURE 1.2 : Représentation schématique des méthodes de régression

Nous utiliserons principalement la méthode de régression des moindres carrés partiels (PLSR) par la suite pour la modélisation de certaines propriétés. Comme on va le voir ci-dessous, elle permet de créer des modèles quantitatifs pour des propriétés qui nous intéresseront pour l'étude de l'environnement et du climat passé. Il s'agit d'une méthode linéaire bien connue qui nous permettra d'estimer des premières tendances de prédiction avec l'imagerie hyperspectrale. L'analyse en composantes principales sera aussi utilisée pour la détection de données aberrantes et pour lesquelles les modélisations seront potentiellement discutables.

Afin d'améliorer les capacités de régression, il est souvent nécessaire de prétraiter les données. On peut les réduire pour accélérer le temps de calcul, cela est souvent réalisé avec une ACP afin d'enlever les variables redondantes et corrélées (colinéaires). Ou encore en sélectionnant des longueurs d'onde discriminantes pour une variable à prédire avec des algorithmes de sélection de variables. Il est aussi possible de débruiter le signal ou de mettre en avant les informations discriminantes avec des prétraitements spectraux, comme des corrections de ligne de base, des dérivées ou des normalisations [31, 32, 33]. Il faut vérifier leurs pertinences sur les signaux, car ils peuvent faire disparaître ou créer des informations [34, 35, 36].

L'annexe A.1 récapitule l'ensemble des articles retenues pendant la thèse pour l'analyse spectroscopique des sols et sédiments. D'autres synthèses bibliographiques existent dans la littérature [37, 38, 39, 40, 41]. Les principaux composés étudiés sont les suivants :

- La matière organique et le carbone organique font parties des composés les plus étudiés, ils sont donc bien connus (tableaux A.1 et A.2). Plusieurs appellations existent dans la littérature dépendant de la méthode analytique de référence et de ce qu'elles enregistrent : "Soil Organic Carbon" (SOC), "Soil Organic Matter" (SOM), "Total

Carbon" (TC), "Organic Carbon" (OC), "Organic Matter" (OM). Les gammes spectrales visible et infrarouge contiennent les informations sur les liaisons organiques, c'est pourquoi les capteurs Vis-PIR, PIR et MIR sont les plus utilisés pour leur modélisation. Les performances des modèles de prédiction permettent de réaliser une quantification avec des coefficients de détermination de validation entre 0.8 et 0.9. La méthode de régression la plus utilisée reste la PLSR, mais dans le cas d'une base de données importante et variée, les méthodes ANN, SVM, MARS, ainsi que plus récemment CNN permettent d'apprendre ces variabilités, qui au contraire déstabilisent la PLSR. Une des études comparatives les plus poussées [42] montre cela et s'intéresse davantage à la chimie derrière le signal. Les zones spectrales discriminantes que l'on retrouve dans la littérature sont autour de 450 nm (oxydes, minéraux), 700 nm (pigments chlorophylliens), 1200 nm (liaisons C-H), 1450 nm (liaisons O-H), 2100-2500 nm (minéraux). Certaines études [43, 44] ont montré que l'humidité avait un impact négatif sur la prédiction et qu'il fallait donc retirer ces zones (950-1150 nm, 1350-1450 nm, 1800-2000 nm).

- Les argiles granulométriques sont une des variables texturales les plus étudiées, elles représentent la taille des particules entre 1 et 4 micromètres [45] (tableau A.3). Les argiles granulométriques ne doivent pas être confondues avec les argiles minérales (silicates). Elles sont aussi étudiées avec les spectroscopies Vis, PIR et MIR. Comme la MO, la PLSR est la méthode la plus utilisée, suivie par des méthodes avancées (SVM, ANN, MARS) lorsque les données sont nombreuses et très variables. Les modèles quantitatifs ont des coefficients de détermination entre 0.7-0.85. Les zones spectrales discriminantes sont similaires entre les articles [42, 46] : 500 nm (oxydes, minéraux), 900-1000 nm (minéraux), 1400 nm (minéraux, humidité), 1900 nm (humidité), 2200 nm (argiles minérales), 2400 nm (argiles minérales).
- Les silts sont une variable texturale représentant les particules d'une taille entre 4 et 62.5 micromètres [45] (tableau A.3). Il s'agit sans doute de la classe la plus complexe à modéliser, car elle a des propriétés similaires aux deux classes qui l'entourent (argile et sable) et c'est aussi pourquoi leur définition est aussi variable d'une communauté à l'autre. C'est pourquoi les coefficients de détermination des modèles varient entre 0.3-0.8 pour des données Vis, PIR ou MIR. Les zones spectrales discriminantes sont un mélange entre celles des argiles et des sables. Vu les difficultés pour modéliser cette classe, il faudrait sans doute la subdiviser ou l'agglomérer avec ses voisins pour obtenir des quantifications fiables pour des classes de granulométries croissantes.
- Les sables sont une variable texturale représentant les particules d'une taille entre 62.5 microns et 2 millimètres, et subdivisés en cinq classes : très fin (62.5-125 microns), fin (125-250 microns), moyen (250-500 microns), grossier (0.5-1 mm), très grossier (1-2 mm) [45] (tableau A.3). Comme pour les composés précédents les données Vis, PIR et MIR sont utilisées pour créer des modèles quantitatifs avec des coefficients de détermination entre 0.7-0.85. Les zones spectrales discriminantes sont autour de : 450 nm (oxydes, minéraux), 650-750 nm (MO), 1950 nm (humidité), 2100-2400 nm (minéraux).
- L'azote total (TN) et le phosphore total (TP) sont aussi très étudiés puisqu'ils permettent d'estimer les nutriments disponibles dans le sol (tableau A.4). Les modélisations avec les données Vis, PIR et MIR sont variables en fonction des échantillons

et des matrices. Dans les cas où les modélisations sont possibles, les coefficients de détermination sont de l'ordre de 0.7-0.85 pour TN et de 0.6-0.75 pour TP.

- Le pH peut potentiellement être estimé avec des capteurs Vis, PIR, MIR avec des modélisations de l'ordre de 0.5-0.7 pour le coefficient de détermination [38, 40].
- Les métaux lourds et les autres éléments atomiques n'ont pas d'absorption caractéristique dans les gammes Vis, PIR et MIR, c'est pourquoi les modèles ne sont pas performants. Néanmoins, dans certains cas particuliers, il est possible de les déterminer, grâce à des co-variabilités avec des composants absorbants dans ces zones [40]. La XRF couplée à des méthodes multivariées peut aussi améliorer les estimations de certains éléments en étant moins impactés par des effets de matrice ou de variabilités entre échantillons [47, 48].
- Les hydrocarbures totaux (TPH) et les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) peuvent être estimés avec les spectroscopies Vis-PIR et MIR avec des modèles présentant des coefficients de détermination de 0.7-0.85 [49] (tableau A.5). Des zones discriminantes ont été déterminées vers $2800-3000\text{ cm}^{-1}$ (MIR) et vers 2300 nm (PIR) correspondant à des liaisons organiques. Certains hydrocarbures peuvent aussi être dissociés, comme les HAP qui fluorescent et sont donc détectables avec des capteurs LIF ou TRES.

La figure 1.3 récapitule les zones discriminantes que l'on vient de voir pour la création de modèles prédictifs.

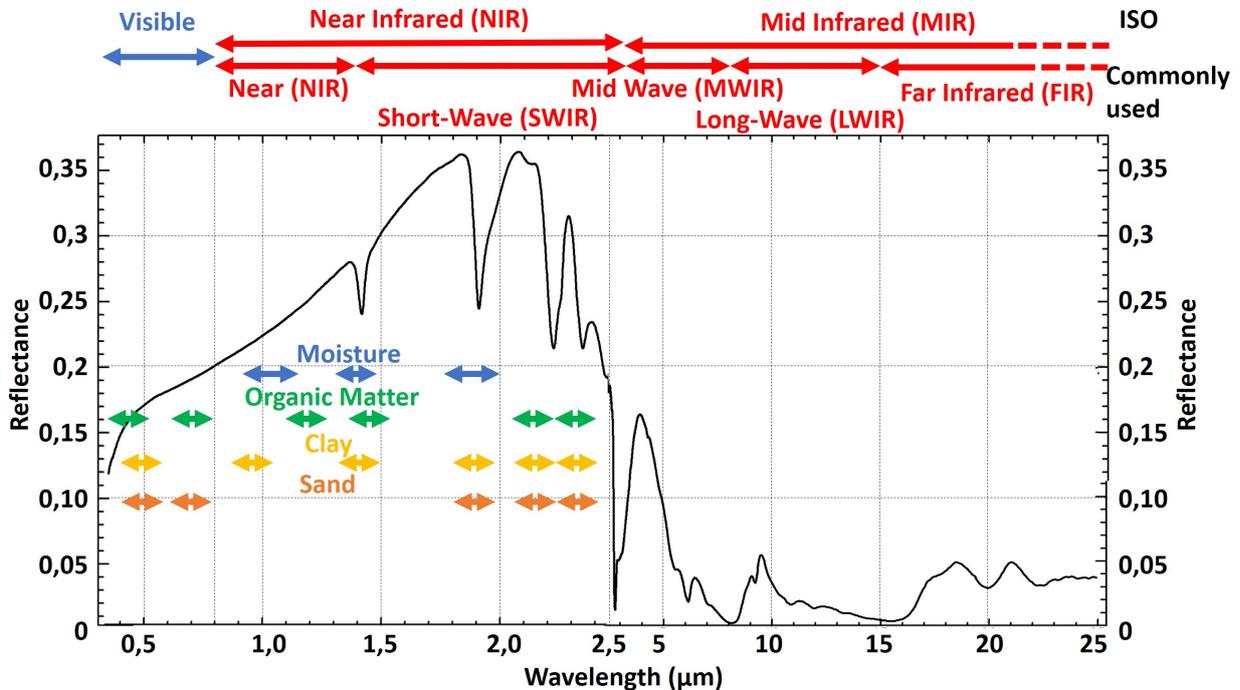


FIGURE 1.3 : Zones spectrales discriminantes de la matière organique, de l'humidité, de l'argile et du sable. (Spectre USGS du minéral Illite [50])

La combinaison de plusieurs capteurs ou gammes spectrales est devenue un domaine d'étude important [51, 52]. En effet, cela permet d'augmenter la quantité d'informations

spectrales et donc bio-physico-chimiques pour caractériser les échantillons. Des études ont été menées pour voir l'apport de multiples gammes pour l'estimation de certains composés. Le tableau A.6 en annexe récapitule certaines d'entre elles. Par exemple, l'étude de Péon [53] montre l'intérêt d'avoir une gamme spectrale 400-2500 nm, appelée Vis-PIR en spectroscopie de laboratoire, ou VNIR+SWIR en imagerie satellitaire. Ou encore l'étude d'Horta [54] qui montre l'intérêt de combiner des capteurs PIR et XRF sur le terrain pour estimer la présence de polluants, tant des métaux lourds que des hydrocarbures. Pour cela, ils proposent soit de concaténer les spectres acquis par les deux détecteurs sur les mêmes échantillons, soit de combiner les estimations de chaque capteur pour un polluant.

Par la suite, nous nous intéresserons aux propriétés globales comme la matière organique et les paramètres de textures qui sont bien modélisées en spectroscopie classique et qui sont des traceurs des changements environnementaux et climatiques. Ces variables globales permettront de développer de premières méthodologies pour leurs quantifications avec la PLSR et l'imagerie hyperspectrale.

L'estimation de signaux purs

A partir des données spectroscopiques, on peut obtenir des empreintes chimiques de composés si l'échantillon est pur et homogène, comme celle du minéral Illite de la figure 1.3. Dans le cas d'images multi- ou hyper-spectrales, c'est l'inhomogénéité de l'échantillon qui est étudiée, et est ensuite caractérisée à travers les différents composés qu'il contient en estimant des signaux purs, aussi appelés endmembers (EM) [55, 56]. On parle de méthodes de démixage pour l'extraction de signaux purs. Il existe trois groupes principaux de méthodes pour estimer ces signaux purs.

- Les méthodes dites géométriques se basent sur la possibilité de trouver une forme géométrique qui encadrent l'ensemble des données.
 - Le principe standard repose sur l'hypothèse qu'un signal spectroscopique est la somme de sous-signaux correspondant à des constituants de l'échantillon. De nombreuses méthodes existent et peuvent être décrites comme la détermination d'un simplexe (triangle à n-dimensions) qui englobe toutes les données, et ses extrémités correspondent aux EMs. Les méthodes les plus connues sont l'indice de pureté du pixel (PPI) [57], N-FINDR [58], Vertex Component Analysis (VCA) [59].
 - On peut aussi utiliser l'hypothèse inverse, c'est à dire trouver dans le cas d'un échantillon globalement homogène, des pixels différents de la majorité. Avec un calcul des distances, on peut les mettre en avant. Comme par exemple, l'algorithme de Kennard et Stone [60] est utilisé pour trouver les spectres les plus différents dans un jeu de données.

Ces deux méthodes sont représentées dans la figure 1.4, à travers un exemple d'un échantillon globalement homogène avec trois données distantes. Dans le cas de la méthode 1, un calcul de la distance à la moyenne permet de les faire ressortir. Dans le cas de la méthode 2, ces données ont été préalablement retirées pour estimer le simplexe qui permet d'estimer trois EMs.

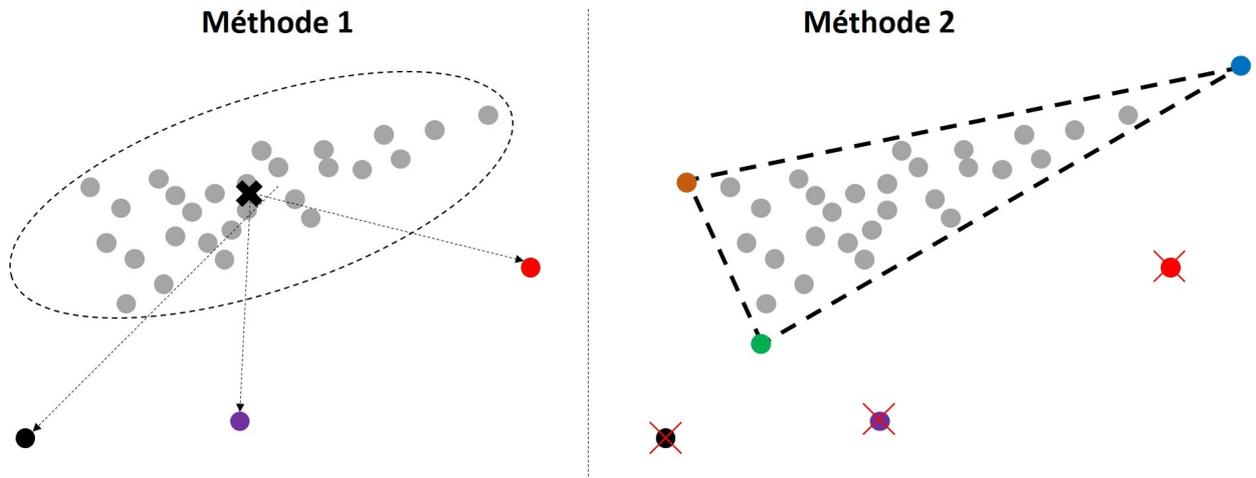


FIGURE 1.4 : Représentation des données dans un espace 2D par un simplexe correspondant à un triangle

- Les méthodes dites statistiques ou séparation de sources à l'aveugle sont utilisées lorsque les signaux purs sont très mélangés dans chaque pixel. C'est à dire que chaque pixel de l'IHS est constitué de plusieurs sources. Les méthodes géométriques ne sont pas assez performantes dans ce cas pour trouver des pôles représentatifs de la réalité. Alors que les méthodes statistiques, via un temps de calcul plus important, peuvent les estimer. On peut citer les méthodes : Analyse en Composantes Indépendantes (ICA) [61, 62] et Multivariate Curve Resolution Alternating Least Square (MCR-ALS) [63] qui sont utilisées dans différentes études.
- Enfin, on trouve les méthodes parcimonieuses ou sparse qui utilisent les connaissances sur les échantillons grâce à des bibliothèques ou spectres purs. Ces méthodes vont estimer la proportion de ces signatures dans chacun des spectres. Par exemple, on trouve les algorithmes : Fully Constrained Least Squares (FCLS) [64], Sparse Unmixing by Variable Splitting and Augmented Lagrangian (SUnSAL) [65].

Ensuite ces EMs permettent d'estimer leurs abondances dans chacun des spectres à partir d'un calcul de similarité sur la base d'une distance. Dans le cas d'une image, ceci permet d'estimer une carte d'abondance de ces EMs et ainsi voir leurs variations.

Ces signaux purs sont souvent comparés à des bibliothèques ou à des spectres d'échantillon pur pour les caractériser. Plusieurs bibliothèques existent, comme celles de l'USGS [50], CSIRO [66], ECOSTRESS [67], ou encore d'autres intégrées dans des logiciels commerciaux (ENVI).

Ces méthodes sont très utilisées en télédétection pour discriminer les principales entités (routes, bâtiments, forêts, rivières) ou la géologie au sol avec des données multi- et hyperspectrales. Elles sont aussi très utilisées pour caractériser les minéraux présents dans des échantillons géologiques, comme les carottes sédimentaires et ainsi déterminer l'origine des sédiments. L'annexe A.2, avec les tableaux A.7 et A.8, récapitulent quelques exemples d'applications de ce type de méthode pour l'analyse des échantillons environnementaux.

Ces méthodes sont intéressantes pour estimer des signaux de certaines propriétés chimiques sans connaissances à priori. Mais elles ne seront pas exploitées dans nos travaux, car nous avons choisi d'utiliser des méthodes quantitatives (PLSR) qui sont à notre connaissance peu utilisées pour l'analyse des IHS des carottes sédimentaires, contrairement à ces méthodes d'extraction des signaux purs semi-quantitatifs qui sont les plus étudiées. La PLSR a montré des performances de prédictions pour de nombreuses variables d'intérêt pour des analyses spectrales discrètes, alors que les méthodes de démélange ne peuvent les caractériser.

Bibliographie

- [1] C. N. BANWELL et E. MCCASH. *Fundamentals of molecular spectroscopy*. McGraw-Hill, 1994.
- [2] ISO. *ISO 20473 :2007 - Optics and photonics — Spectral bands*. Rapp. tech. ISO, 2007.
- [3] A. VAN EXEM et al. « Hyperspectral core logging for fire reconstruction studies ». In : *Journal of Paleolimnology* 59.3 (2018), p. 297-308.
- [4] T. SCHNEIDER et al. « A high-resolution pigment and productivity record from the varved Ponte Tresa basin (Lake Lugano, Switzerland) since 1919 : insight from an approach that combines hyperspectral imaging and high-performance liquid chromatography ». In : *Journal of Paleolimnology* (2018), p. 1-18.
- [5] N. MICHELUTTI et J. P. SMOL. « Visible spectroscopy reliably tracks trends in paleo-production ». In : *Journal of Paleolimnology* (2016).
- [6] C. BUTZ, M. GROSJEAN et W. TYLMANN. « Hyper-spectral imaging of lake sediments ». In : (2013).
- [7] C. BUTZ et al. « Hyperspectral imaging spectroscopy : a promising method for the biogeochemical analysis of lake sediments ». In : *Journal of Applied Remote Sensing* 9 (2015), p. 1-20.
- [8] M. TRACHSEL et al. « Inferring organic content of sediments by scanning reflectance spectroscopy (380–730 nm) : applying a novel methodology in a case study from proglacial lakes in Norway ». In : *Journal of Paleolimnology* 50.4 (2013), p. 583-592.
- [9] M. TRACHSEL et al. « Scanning reflectance spectroscopy (380–730 nm) : a novel method for quantitative high-resolution climate reconstructions from minerogenic lake sediments ». In : *Journal of Paleolimnology* 44.4 (2010), p. 979-994.
- [10] M. DEBRET et al. « Spectrocolorimetric interpretation of sedimentary dynamics : The new “Q7/4 diagram” ». In : *Earth-Science Reviews* 109.1 (2011), p. 1-19.
- [11] F. CASTALDI et al. « Reducing the influence of soil moisture on the estimation of clay from hyperspectral data : A case study using simulated PRISMA data ». In : *Remote Sensing* 7.11 (2015), p. 15561-15582.
- [12] N. LEVIN, G. J. KIDRON et E. BEN-DOR. « Surface properties of stabilizing coastal dunes : combining spectral and field analyses ». In : *Sedimentology* 54.4 (2007), p. 771-788.
- [13] S. ADAM, J. MONBALIU et E. A. TOORMAN. « Quantification of bio-physical intertidal sediment properties using hyperspectral measurements ». In : (2009).
- [14] M. MATHIEU et al. « Alteration mapping on drill cores using a HySpex SWIR-320m hyperspectral camera : Application to the exploration of an unconformity-related uranium deposit (Saskatchewan, Canada) ». In : *Journal of Geochemical Exploration* 172 (2017), p. 71-88.
- [15] K. KALBITZ, W. GEYER et S. GEYER. « Spectroscopic properties of dissolved humic substances ? a reflection of land use history in a fen area ». In : *Biogeochemistry* 47.2 (1999), p. 219-238.
- [16] D. M. B. P. MILORI et al. « Humification degree of soil humic acids determined by fluorescence spectroscopy ». In : *Soil Science* 167.11 (2002), p. 739-749.

- [17] D. M. B. P. MILORI et al. « Organic Matter Study of Whole Soil Samples Using Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy ». In : *Soil Science Society of America Journal* 70.1 (2005), p. 57-63.
- [18] Y. PERRETTE et al. « Speleothem organic matter content imaging. The use of a Fluorescence Index to characterise the maximum emission wavelength ». In : *Chemical Geology* 214.3 (2005), p. 193-208.
- [19] I. W. CROUDACE et R. G. ROTHWELL. *Micro-XRF studies of sediment cores : applications of a non-destructive tool for the environmental sciences*. 2015.
- [20] J. XUE et B. SU. « Significant Remote Sensing Vegetation Indices : A Review of Developments and Applications ». In : *Journal of Sensors* 2017 (2017), p. 1-17.
- [21] S. TUFFÉRY. *Data mining et statistique décisionnelle : l'intelligence des données*. Éd. Technip, 2012.
- [22] I. T. JOLLIFFE. « A Note on the Use of Principal Components in Regression ». In : *Applied Statistics* 31.3 (1982), p. 300.
- [23] K. PEARSON. « On lines and planes of closest fit to systems of points in space ». In : *Philosophical Magazine* 2.11 (1901), p. 559-572.
- [24] S. WOLD et al. « The Collinearity Problem in Linear Regression. The Partial Least Squares (PLS) Approach to Generalized Inverses ». In : *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 5.3 (1984), p. 735-743.
- [25] J. H. FRIEDMAN. « Multivariate Adaptive Regression Splines ». In : *The Annals of Statistics* 19.1 (1991), p. 1-67.
- [26] V. N. VAPNIK. *Statistical learning theory*. Wiley, 1998, p. 736.
- [27] W. S. MCCULLOCH et W. PITTS. « A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity ». In : *The Bulletin of Mathematical Biophysics* 5.4 (1943), p. 115-133.
- [28] F. ROSENBLATT. « The Perceptron : A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in The Brain ». In : *Psychological Review* 65.6 (1958), p. 386-408.
- [29] A. IVAKHNENKO et V. G. LAPA. *Cybernetic predicting devices*. New York : CCM Information Corp., 1965.
- [30] J. SCHMIDHUBER. « Deep Learning in Neural Networks : An Overview ». In : *Neural Networks* 61 (2015), p. 85-117. arXiv : 1404.7828.
- [31] Å. RINNAN, F. van den BERG et S. B. ENGELSEN. « Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra ». In : *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 28.10 (2009), p. 1201-1222.
- [32] M. VIDAL et J. M. AMIGO. « Pre-processing of hyperspectral images. Essential steps before image analysis ». In : *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 117 (2012), p. 138-148.
- [33] S. ASADZADEH et C. R. DE SOUZA FILHO. « A review on spectral processing methods for geological remote sensing ». In : *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation* 47 (2016), p. 69-90.
- [34] P. OLIVERI et al. « The impact of signal pre-processing on the final interpretation of analytical outcomes – A tutorial ». In : *Analytica Chimica Acta* 1058 (2019), p. 9-17.
- [35] Å. RINNAN. « Pre-processing in vibrational spectroscopy – when, why and how ». In : *Anal. Methods* 6.18 (2014).

- [36] J. ENGEL et al. « Breaking with trends in pre-processing? » In : *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 50 (2013), p. 96-106.
- [37] S. XU et al. « Comparison of multivariate methods for estimating selected soil properties from intact soil cores of paddy fields by Vis-NIR spectroscopy ». In : *Geoderma* 310 (2018), p. 29-43.
- [38] R. A. VISCARRA ROSSEL et al. « A global spectral library to characterize the world's soil ». In : *Earth-Science Reviews* 155 (2016), p. 198-230.
- [39] S. ARMENTA et M. de la GUARDIA. « Vibrational spectroscopy in soil and sediment analysis ». In : *Trends in Environmental Analytical Chemistry* 2 (2014), p. 43-52.
- [40] B. STENBERG et al. « Visible and near infrared spectroscopy in soil science ». In : *Advances in Agronomy* 107 (2010), p. 163-215.
- [41] R. VISCARRA ROSSEL et al. « Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties ». In : *Geoderma* 131.1-2 (2006), p. 59-75.
- [42] R. VISCARRA ROSSEL et T. BEHRENS. « Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra ». In : *Geoderma* 158.1-2 (2010), p. 46-54.
- [43] C. GOMEZ et al. « Evaluating the sensitivity of clay content prediction to atmospheric effects and degradation of image spatial resolution using Hyperspectral VNIR/SWIR imagery ». In : *Remote Sensing of Environment* 164 (2015), p. 1-15.
- [44] K. JACQ et al. « High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core ». In : *Science of the Total Environment* 663 (2019), p. 236-244.
- [45] C. K. WENTWORTH. « A Scale of Grade and Class Terms for Clastic Sediments ». In : *The Journal of Geology* 30.5 (1922), p. 377-392.
- [46] É. PINHEIRO et al. « Prediction of Soil Physical and Chemical Properties by Visible and Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy in the Central Amazon ». In : *Remote Sensing* 9.4 (2017).
- [47] B. HU et al. « Application of portable XRF and VNIR sensors for rapid assessment of soil heavy metal pollution ». In : *PLoS ONE* 12.2 (2017), p. 1-13.
- [48] D. XU et al. « X-ray fluorescence and visible near infrared sensor fusion for predicting soil chromium content ». In : *Geoderma* 352 (2019), p. 61-69.
- [49] R. K. DOUGLAS et al. « Evaluation of vis-NIR reflectance spectroscopy sensitivity to weathering for enhanced assessment of oil contaminated soils ». In : *Science of the Total Environment* 626 (2018), p. 1108-1120.
- [50] R. F. KOKALY et al. *USGS Spectral Library Version 7*. Rapp. tech. 2017.
- [51] A. de JUAN. « Hyperspectral image analysis. When space meets Chemistry ». In : *Journal of Chemometrics* 32.1 (2018), p. 1-13.
- [52] A. de JUAN et al. « Image Fusion ». In : *Data Fusion Methodology and Applications*. 2019. Chap. 11, p. 311-344.
- [53] J. PEÓN et al. « Evaluation of the spectral characteristics of five hyperspectral and multispectral sensors for soil organic carbon estimation in burned areas ». In : *International Journal of Wildland Fire* 26.3 (2017), p. 230-239.

- [54] A. HORTA et al. « Potential of integrated field spectroscopy and spatial analysis for enhanced assessment of soil contamination : A prospective review ». In : *Geoderma* 241-242 (2015), p. 180-209.
- [55] J. M. BIOUCAS-DIAS et al. « Hyperspectral Unmixing Overview : Geometrical, Statistical, and Sparse Regression-Based Approaches ». In : *IEEE Journal of selected topics in applied earth observations and remote sensing* 5.2 (2012), p. 354-379.
- [56] N. KESHAHA. « A Survey of Spectral Unmixing Algorithms ». In : *Lincoln Laboratory Journal* 14.1 (2003), p. 55-78.
- [57] BOARDMAN et J. W. « Automating spectral unmixing of AVIRIS data using convex geometry concepts ». In : *4th Annual JPL Airborne Geoscience Workshop*. 1993, p. 11-14.
- [58] M. E. WINTER. « N-FINDR : an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data ». In : *Proc. SPIE 3753, Imaging Spectrometry V*. Sous la dir. de M. R. DESCOUR et S. S. SHEN. International Society for Optics et Photonics, 1999, p. 266-275.
- [59] J. M. P. NASCIMENTO et J. M. B. DIAS. « Vertex Component Analysis : A Fast Algorithm to Unmix Hyperspectral Data ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 43.4 (2005), p. 898-910.
- [60] R. W. KENNARD et L. A. STONE. « Computer Aided Design of Experiments ». In : *Technometrics* 11.1 (1969), p. 137-148.
- [61] P. COMON. « Independent component analysis, A new concept ? » In : *Signal Processing* 36.3 (1994), p. 287-314.
- [62] D. RUTLEDGE et D. JOUAN-RIMBAUD BOUVERESSE. « Independent Components Analysis with the JADE algorithm ». In : *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 50 (2013), p. 22-32.
- [63] J. JAUMOT, A. de JUAN et R. TAULER. « MCR-ALS GUI 2.0 : New features and applications ». In : *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 140 (2015), p. 1-12.
- [64] D. HEINZ et CHEIN-I-CHANG. « Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 39.3 (2001), p. 529-545.
- [65] J. M. BIOUCAS-DIAS et M. A. T. FIGUEIREDO. « Alternating direction algorithms for constrained sparse regression : Application to hyperspectral unmixing ». In : *2010 2nd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing*. IEEE, 2010, p. 1-4.
- [66] I. C. LAU et al. *CSIRO Shortwave infrared spectral library – Evaluation and status report 2017 Report EP175249*. Rapp. tech. CSIRO Report EP175249, 2017, p. 23.
- [67] S. K. MEERDINK et al. « The ECOSTRESS spectral library version 1.0 ». In : *Remote Sensing of Environment* 230 (2019), p. 111196.

1.1.2 La segmentation des images pour révéler les structures des archives sédimentaires

Une image porte des informations sur les structures composant une scène ou un échantillon. Des méthodes existent pour les caractériser, on parle de segmentation. Elles peuvent être regroupées dans deux familles. Des exemples sont utilisés pour les illustrer pour la détection des lamines et l'estimation de la granulométrie.

- Les méthodes géométriques qui estiment à partir d'opérateur morphologique des structures dans l'image.
 - Les lamines peuvent être détectées grâce à des maxima ou minima d'intensité avec des méthodes comme H-maxima, ou encore la méthode de la ligne de partage des eaux [1] qui considère une image comme un relief topographique et qui va détecter les limites de ceux-ci en "inondant" l'image. Si les lamines pouvaient être caractérisées par des gammes de couleurs, on pourrait effectuer un seuillage à plusieurs niveaux, mais comme les couleurs varient le long de l'échantillon, il faudrait envisager un seuillage adaptatif pour extraire chaque lamine [2]. Il est également possible de détecter les limites de lamines, qui sont des ruptures plus ou moins nettes, avec des dérivées ou des gradients, ou en modélisant la limite avec la transformée de Hough [3, 4] par exemple.

La détection des lamines est souvent réalisée avec un signal 1D le long de l'échantillon, car il peut être suffisamment informatif s'il n'est pas très bruité. Dans le cas contraire, il est possible de multiplier les signaux 1D avec du recouvrement puis de les ré-associer. On peut également utiliser la totalité de l'image, mais souvent les lamines ne sont pas caractérisables sur toute la largeur de l'échantillon, il faut donc rassembler les différents "morceaux" pour la reconstituer, ce qui n'est pas une tâche aisée. Les travaux de Gan [5] sur le sujet, propose d'utiliser les opérateurs morphologiques de base comme l'érosion et la dilatation pour rattacher ou séparer ces zones (figure 1.5).

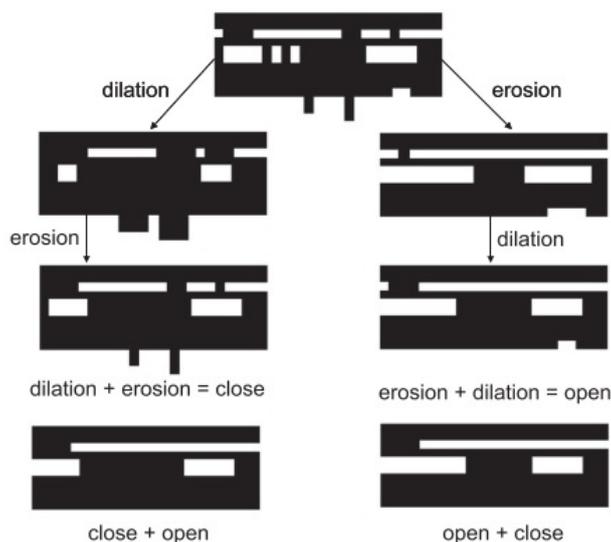


FIGURE 1.5 : Détection des lamines utilisant les opérations morphologiques [5]

- Pour la granulométrie, les méthodes sont similaires avec la détection des ruptures entre les grains grâce à des gradients ou la ligne de partage des eaux.
- Les méthodes statistiques qui estiment des similarités ou tendances dans l'image.
 - Dans le cas de la détection de lamines qui sont des phénomènes redondants et périodiques, on peut utiliser des approches basées sur la transformée de Fourier ou sur les ondelettes.
 - Pour l'estimation de la granulométrie, l'approche la plus utilisée est basée sur l'autocorrélation qui estime les dépendances internes dans l'image, puisque les pixels voisins d'une même particule sont dépendants.

Davantage d'informations sur les méthodes sont disponibles dans le livre de Henri Maitre [6]. L'ensemble des exemples synthétisés ci-dessus sont récapitulés dans l'annexe A.3.

Comme dans le cas de la création d'un modèle multivarié, les images nécessitent un ou des prétraitements pour réduire le bruit ou mettre en avant les structures, comme des normalisations, lissages, dérivées ou rehaussements de contraste. Et il faut aussi prendre garde à leurs effets qui peuvent faire disparaître des structures intéressantes ou au contraire en créer.

Nous utiliserons une méthode de segmentation à base de seuillage et de rehaussement de contraste adaptatif pour détecter les lamines grâce à leurs différences de couleurs. De plus, l'utilisation des opérateurs morphologiques pourrait être employée par la suite pour résoudre certains problèmes rencontrés lorsqu'un dépôt est divisé en multiples entités. Ces approches images étant complexes pour la caractérisation des dépôts sédimentaires, elles seront peu employées dans nos travaux pour des premières approches d'utilisation de l'imagerie hyperspectrale pour l'analyse des archives sédimentaires.

Bibliographie

- [1] L. VINCENT et P. SOILLE. « Watersheds in digital spaces : an efficient algorithm based on immersion simulations ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 13.6 (1991), p. 583-598.
- [2] K. ZUIDERVELD. « Contrast Limited Adaptive Histogram Equalization ». In : *Graphics Gems IV*. Academic Press, 1994, p. 474-485.
- [3] P. HOUGH. « Machine Analysis of Bubble Chamber Pictures ». In : *Proc. Int. Conf. High Energy Accelerators and Instrumentation*. 1959, p. 554-558.
- [4] R. O. DUDA et P. E. HART. « Use of the Hough transformation to detect lines and curves in pictures ». In : *Communications of the ACM* 15.1 (1972), p. 11-15.
- [5] S. Q. GAN et C. A. SCHOLZ. « Extracting paleoclimate signals from sediment laminae : An automated 2-D image processing method ». In : *Computers & Geosciences* 52 (2013), p. 345-355.
- [6] H. MAÎTRE. *Traitement des images*. Lavoisier. Hermès Science publications, 2002.

1.1.3 L'apprentissage automatique pour l'étude des échantillons naturels

Les données peuvent aussi être regroupées de manière qualitative, on parle de classification ou de reconnaissance de formes. On peut avoir des connaissances partielles des données et les utiliser, on parle de classification supervisée ou discrimination qui permettent d'estimer par exemple : la présence ou l'absence d'un composé, ou des niveaux d'abondances haut-moyen-élevé. Dans le cas de données inconnues, on parle de classification non-supervisée ou clustering. Ces méthodes peuvent s'appliquer aussi bien sur la dimension spatiale que spectrale.

Les principales méthodes utilisées dans la littérature sont présentées ci-dessous. Une représentation schématique de celles-ci est proposée avec la figure 1.6. Davantage d'informations sont disponibles dans le livre de Tufféry [1].

- les méthodes non supervisées (clustering) :
 - L'Analyse en Composantes Principales (ACP), qui a déjà été présentée avec la PLSR, permet de réduire les données et ainsi de visualiser rapidement leurs principales variabilités.
 - Les méthodes des K-moyennes (K-means) ou des K-médianes (K-medoids) estiment des centres représentatifs d'un nombre K de groupes [2]. Une méthode avancée utilisant des règles floues a été développée, C-moyennes floues (FCM) [3].
 - Les classifications hiérarchiques se divisent en deux familles, celles qui agglomèrent (classification ascendante hiérarchique CAH) et celles qui divisent (classification descendante hiérarchique CDH) [4]. Dans le cas de la CAH, les données sont agglomérées de proche en proche suivant un critère de distance jusqu'à obtenir un groupe unique, et inversement pour la CDH. Le résultat est un dendrogramme qui peut être coupé à un certain niveau définissant le nombre de groupes.
- les méthodes supervisées (discrimination) :
 - La méthode des K plus proches voisins (KNN) est une méthode non paramétrique qui estime une probabilité d'appartenance à un groupe suivant une règle, qui est ici la distance avec les individus environnants [5]. Elle calcule la distance entre un échantillon « inconnu » avec tous ceux connus. Puis ce nouvel échantillon est classé dans un groupe avec ses K voisins les plus proches. Il existe plusieurs approches pour améliorer ces prédictions, comme rajouter des règles floues avec la méthode KNN-floue [6], ou utiliser la théorie des fonctions de croyance EkNN (Evidential KNN) [7, 8].
 - L'analyse linéaire discriminante (LDA) cherche l'axe permettant de séparer au mieux les groupes [9]. On peut y voir une correspondance avec l'ACP et la PLS. Elle peut utiliser des fonctions non linéaires, comme avec l'Analyse Discriminante Quadratique.
 - Les arbres de décision (DT) sont des méthodes non paramétriques qui reposent sur la création d'un arbre de décision à choix binaire [10]. Pour une variable explicative l'algorithme va déterminer des règles pour séparer un ou des groupes. À la fin de celui-ci un ensemble de règles sur plusieurs variables est créé, et cela forme un arbre, où l'on trouve au niveau d'un nœud la décision binaire et au niveau des feuilles la classe estimée. Un apprentissage avec plusieurs arbres de décision permet de créer une forêt d'arbres décisionnels (RF) [11], puis les règles majoritaires sont conservées.

- Les réseaux profonds, comme on a pu le dire précédemment, sont composés de plusieurs couches constitués d'un nombre souvent important de neurones [12, 13]. Ces méthodes sont très utilisées dans le cas d'apprentissage d'images. En effet, elles vont les représenter grâce à leurs compositions, comme les niveaux d'intensité, les structures fines (arêtes d'un objet) et grossières (une région, une forme, un objet). On parle ici d'apprentissage à différents niveaux d'abstraction qui est fonction de la profondeur du réseau.
- Des méthodes de régression présentées précédemment peuvent aussi servir en classification : PLS-DA (discriminant analysis), MARS, SVM, ANN.

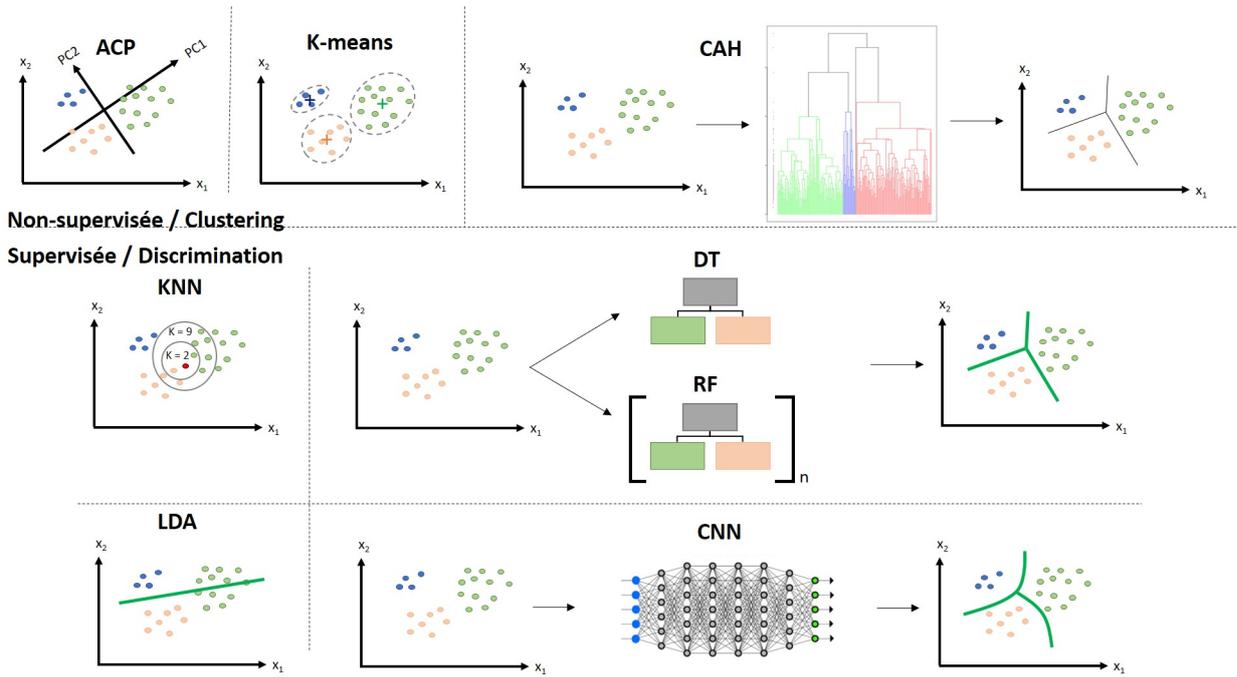


FIGURE 1.6 : Représentation schématique des méthodes d'apprentissage automatique

Quelques exemples sont présentés dans l'annexe A.4 dans les tableaux A.11 et A.12. Du fait de la complexité des données multi- et hyper-spectrale, ce sont principalement des méthodes non linéaires (SVM, ANN, CNN) qui sont employées pour classifier chaque pixel à partir de zones labellisées. Afin de réduire cette complexité et le temps de calcul, deux propositions de traitement sont utilisées. Certains réduisent les données avec des algorithmes de démélange (VCA, ICA). D'autres utilisent la dimension spatiale avec les pixels voisins autour du pixel à classifier.

Un comparatif des méthodes de classification supervisées (DT, RF, ANN, CNN) sera effectué pour caractériser des dépôts sédimentaires liés aux crues, dont on peut connaître potentiellement la date avec des chroniques historiques. La détection des lamines est aussi réalisée avec des réseaux de neurones, ce qui permettra de créer un modèle d'âge.

Bibliographie

- [1] S. TUFFÉRY. *Data mining et statistique décisionnelle : l'intelligence des données*. Éd. Technip, 2012.
- [2] H. STEINHAUS. « Sur la division des corps matériels en parties ». In : *Bulletin of the Polish Academy of Sciences* 4.12 (1956), p. 801-804.
- [3] J. C. DUNN. « A Fuzzy Relative of the ISODATA Process and Its Use in Detecting Compact Well-Separated Clusters ». In : *Journal of Cybernetics* 3.3 (1973), p. 32-57.
- [4] J. H. WARD. « Hierarchical Grouping to Optimize an Objective Function ». In : *Journal of the American Statistical Association* 58.301 (1963), p. 236-244.
- [5] P. HART. « The condensed nearest neighbor rule (Corresp.) ». In : *IEEE Transactions on Information Theory* 14.3 (1968), p. 515-516.
- [6] J. M. KELLER, M. R. GRAY et J. A. GIVENS. « A fuzzy K-nearest neighbor algorithm ». In : *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* SMC-15.4 (1985), p. 580-585.
- [7] T. DENOEU. « A k-nearest neighbor classification rule based on Dempster-Shafer theory ». In : *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* 25.5 (1995), p. 804-813.
- [8] G. SHAFER. *A mathematical theory of evidence*. Princeton University Press, 1976.
- [9] R. A. FISHER. « The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems ». In : *Annals of Eugenics* 7.2 (1936), p. 179-188.
- [10] L. BREIMAN et al. *Classification And Regression Trees*. Routledge, 1984.
- [11] TIN KAM HO. « Random decision forests ». In : *Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition*. T. 1. IEEE Comput. Soc. Press, 1995, p. 278-282.
- [12] A. IVAKHNENKO et V. G. LAPA. *Cybernetic predicting devices*. New York : CCM Information Corp., 1965.
- [13] J. SCHMIDHUBER. « Deep Learning in Neural Networks : An Overview ». In : *Neural Networks* 61 (2015), p. 85-117. arXiv : 1404.7828.

1.1.4 La fusion de données pour combiner des données multi-capteurs

Comme on a pu le voir, chaque domaine spectral apporte des informations bio-physico-chimiques qui lui sont propres et qui peuvent se retrouver dans d'autres. C'est pourquoi combiner différents jeux de données de plusieurs domaines spectraux est intéressant pour améliorer la caractérisation des échantillons. En fonction du type de capteur, les méthodes employées sont différentes, c'est pourquoi cette section est divisée en deux parties qui traitent de la fusion d'image (2D) et de signaux (1D).

Les méthodes de fusion d'image doivent pallier deux principales difficultés, (1) la modification de la surface des échantillons entre les acquisitions et (2) la non-homogénéité des résolutions. Ce sont des questions qui sont principalement étudiées dans les domaines de la télédétection (étude des terrains) et du médical (diagnostic plus complet d'un patient) pour agglomérer des données multicapteurs. Le domaine de la chimie analytique commence aussi à s'y intéresser en s'inspirant des méthodes développées dans ces deux domaines [1, 2].

Le recalage des images

Pour corriger les déformations de surface des échantillons entre les acquisitions (1), il faut recalibrer les images. Dans le cas d'image de télédétection, cela est plutôt simple grâce au géoréférencement des pixels. Dans le cas d'image de laboratoire, le plus simple est de les corréférer, c'est à dire d'acquérir les images avec plusieurs capteurs simultanément ou avec un délai court entre eux. Dans les autres cas, en laboratoire et sur le terrain, il faut des méthodes pour recalibrer les images. Pour cela, il existe essentiellement deux familles de méthodes [3, 4] :

- La première se base sur les intensités des images et est appelée approche iconique. Pour cela, les méthodes utilisent une distance entre les images et cherchent à la minimiser en la déformant sans tenir compte des structures géométriques mais seulement avec les intensités. Dans le cas d'images multi-capteurs, les intensités peuvent être reliées par une relation mathématique non-linéaire.
- La seconde utilise les caractéristiques des images, comme des courbes, des lignes, des points, on parle d'approche géométrique. Il est possible de le faire manuellement avec des points de repère ou automatiquement avec des algorithmes qui vont les détecter, comme par exemple le Speeded Up Robust Features (SURF) [5] et le Scale-Invariant Feature Transform (SIFT) [6]. Ces algorithmes estiment des descripteurs ou points de contrôle à l'échelle globale de l'image. Des versions locales ont ensuite été développées et sont plus performantes pour tenir compte des variations locales de l'échantillon qui sont souvent différentes des variations globales [7, 8]. Ces descripteurs 2D ont ensuite été généralisés pour des images 3D [9, 10], et plus spécifiquement pour des images hyperspectrales [11]. Une fois que les points de contrôle ont été définis, un modèle de déformation est estimé pour minimiser la distance entre ces points. Une image sert de base et l'autre image est donc déformée en conséquence pour être calée spatialement sur la première.

Une fois recalée, les images sont regroupées dans un capteur appelé capteur composite.

La méthode SIFT sera utilisée et discutée par la suite, pour le recalage des images hyperspectrales 3D, pour aligner des signaux spectroscopiques 2D, ainsi que pour réaligner les lamines d'une image (1D). Ensuite, ceci permettra de montrer l'apport de la combinaison de plusieurs capteurs pour la modélisation de propriétés d'intérêt.

La fusion d'image

L'homogénéisation des résolutions (2) peut être effectuée à plusieurs niveaux. Soit à la plus basse des résolutions, ce qui est effectué lors de l'étape de recalage (1), on peut parler de fusion à basse résolution, qui correspond à une combinaison des jeux de données. Soit on utilise des approches de fusion avancées pour une fusion à haute résolution. Ces méthodes peuvent être regroupées en trois familles suivant le type d'information fusionnée [12, 13, 14]. Elles peuvent être représentées par la figure 1.7.

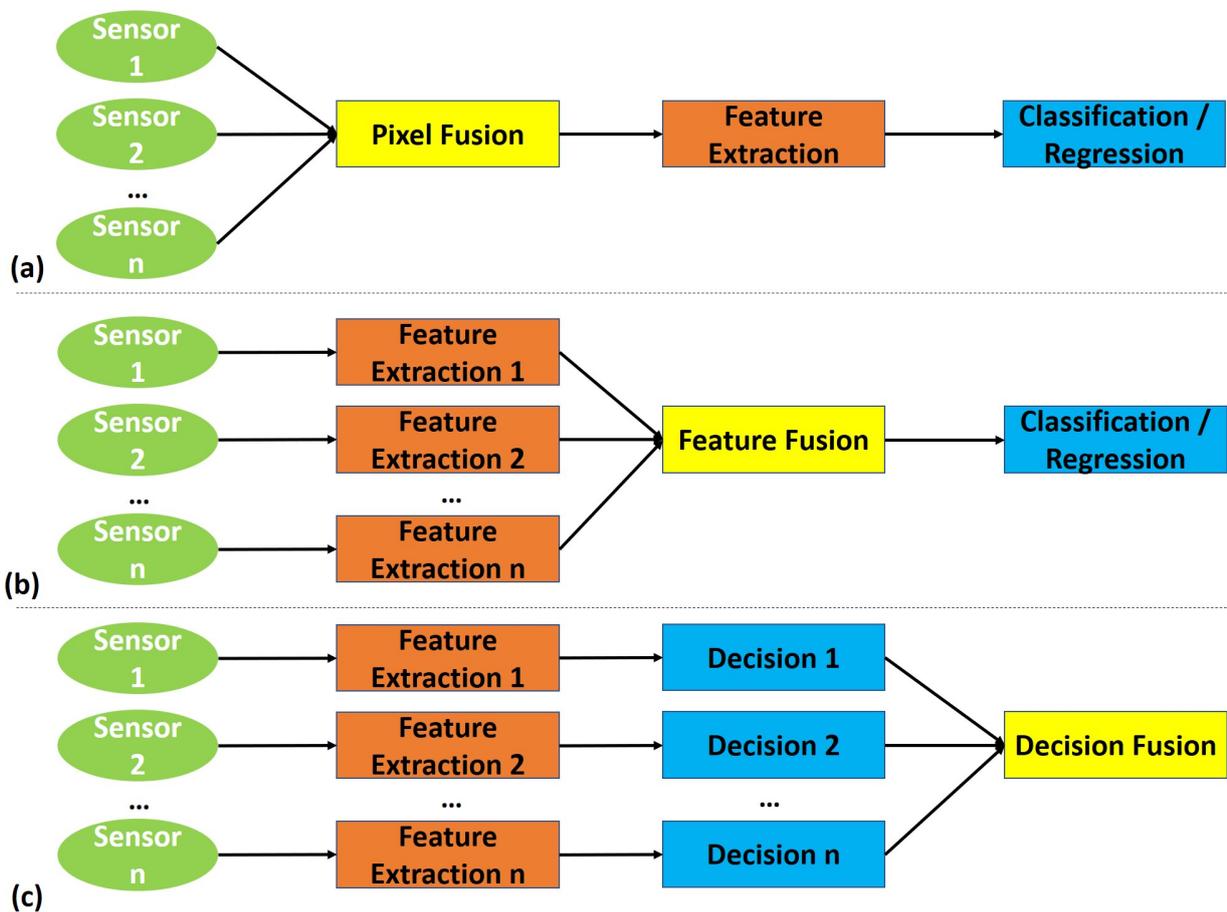


FIGURE 1.7 : Niveau de fusion, (a) Bas, (b) Moyen, (c) Haut (schéma adapté de [14])

- La fusion de bas niveau ou au niveau pixel consiste à fusionner les informations brutes après l'acquisition, ainsi toutes les informations sont retenues. Ensuite, le capteur composite est prétraité avant la création d'un modèle prédictif quantitatif ou qualitatif.
- La fusion de niveau moyen ou au niveau des attributs représente la fusion des données initiales réduites, comme par exemple avec une ACP, ou des méthodes de démixage, ou

de segmentation. Ceci permet de garder des informations globales sur l'échantillon, et d'enlever le bruit, ainsi que potentiellement des informations locales si des vérifications ne sont pas effectuées. Enfin, un modèle quantitatif ou qualitatif est créé.

- La fusion de haut niveau ou au niveau décision consiste en la fusion de données extraites des données initiales, comme par exemple avec les méthodes d'apprentissage automatique ou de régression. Chaque capteur est donc prétraité, puis un modèle quantitatif ou qualitatif est créé pour estimer des cartes d'abondance ou de classification qui sont ensuite fusionnées. Dans le cas, de l'étude d'une unique propriété, il faut s'assurer que des informations discriminantes soient disponibles dans chacun des capteurs.

Dans le cas des données spectroscopiques, comme on a pu le voir les gammes spectrales ne portent pas toujours des informations similaires. C'est pourquoi la fusion de haut niveau est intéressante pour la fusion de cartes de classification de variables différentes et complémentaires. Comme par exemple pour estimer la minéralogie d'un échantillon sédimentaire qui sont caractérisables avec différentes gammes spectrales qui portent des informations majoritaires. Mais dans le cas d'une même variable entre différents capteurs, cela a peu d'intérêt si certains de ces capteurs portent des informations minoritaires qui ne peuvent permettre une modélisation correcte.

Il se peut tout de même que des informations minoritaires sur une variable d'intérêt soient contenues dans certaines gammes spectrales, et que leur fusion avec une gamme spectrale portant des informations plus nombreuses, soit bénéfique pour augmenter les performances de modélisation. C'est pourquoi les méthodes de fusion au niveau pixel sont intéressantes et seront mieux détaillées par la suite [15, 16, 17, 18]. En effet, celles-ci peuvent être regroupées dans quatre familles que l'on peut schématiser avec la figure 1.8. Les deux premières familles ont été créées pour la fusion de données multispectrales avec une image panchromatique (similaire à une image en niveau de gris), c'est pourquoi ces méthodes sont appelées pansharpening. Elles ont ensuite été modifiées pour la fusion de données multi- et hyperspectrales, on parle d'hybersharpening.

- La substitution de composantes (CS) consiste à projeter les données basses (BR) et hautes (HR) résolutions dans un autre espace qui sépare les informations spatiales et spectrales. Ensuite, ces méthodes vont estimer les composantes BR qui sont les plus proches de celles à HR pour les substituer. Les méthodes les plus utilisées sont l'ACP [19], l'ICA, Intensity-Hue-Saturation (IHS) [20], Brovey transform (BT) [21], Gram-Schmidt (GS) [22, 23].
- L'analyse multirésolution (MRA) décompose les données BR et HR à plusieurs niveaux de résolution similaires en utilisant des ondelettes [24, 25, 26, 27] ou des pyramides laplaciennes [28, 29, 30, 31, 32] ou gaussiennes. Ensuite, des modèles de passage sont calculés entre ces différentes résolutions pour estimer les hautes et basses fréquences (aussi appelées détails et structures) manquantes dans les données BR interpolées à HR.
- Les méthodes qui utilisent des sous espaces sont appelées méthodes sparses, car elles utilisent les méthodes de démélange [33]. Les données BR et HR sont synthétisées à travers des composantes pures (endmembers) qui peuvent se retrouver entre les deux jeux de données. Cela permet de reconstruire le cube BR à HR.

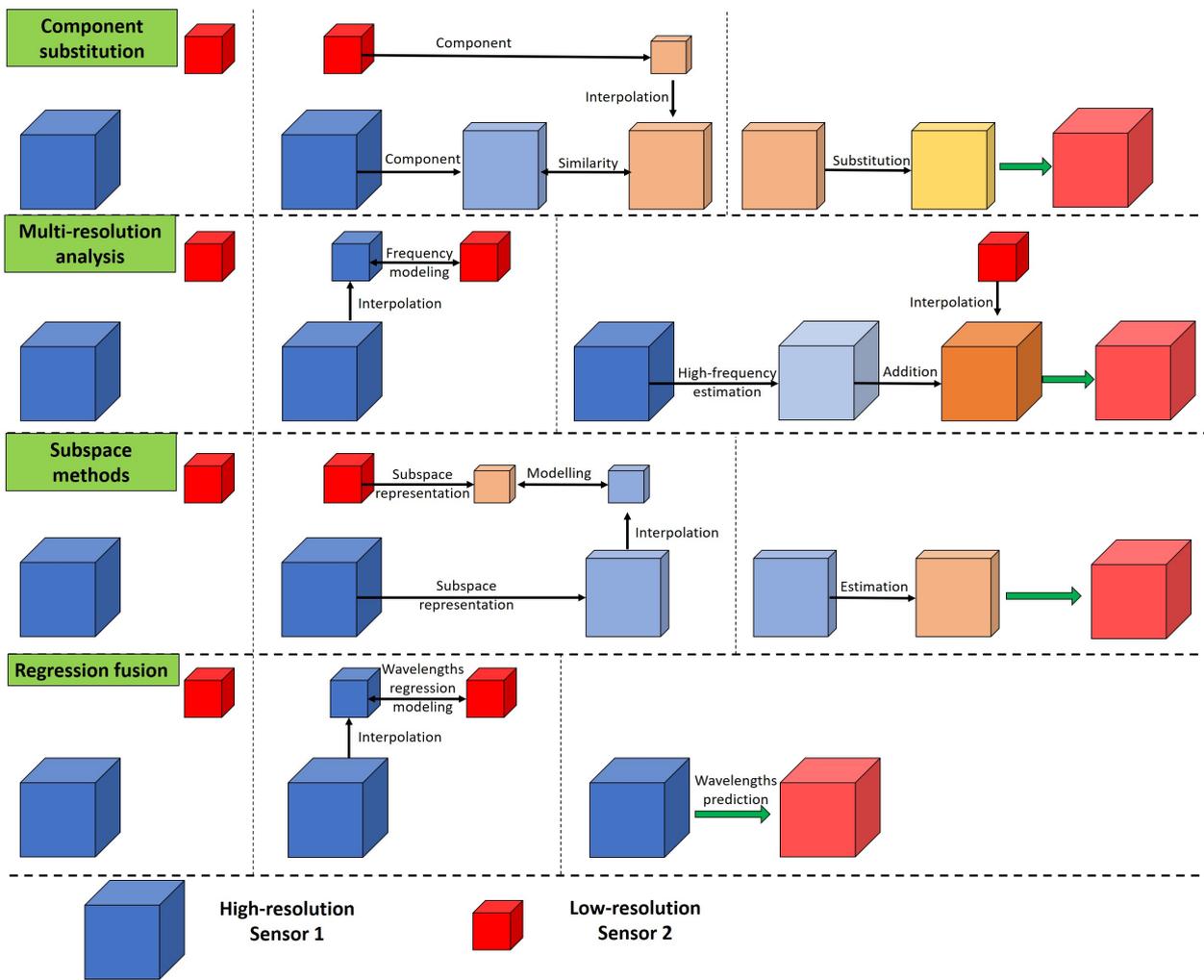


FIGURE 1.8 : Schéma des principales méthodologies de fusion au niveau pixel

- Les méthodes de régression créent un modèle liant les différentes bandes spectrales entre les données BR et HR réduite à la BR, pour ensuite l'appliquer à haute résolution pour la prédiction du cube BR à HR [1].

De nouvelles méthodes émergent avec l'utilisation d'approches bayésiennes [34] ou de réseaux d'apprentissage profond [35, 36, 37].

Un comparatif de ces méthodes de fusion d'images au niveau pixel sera réalisé et discuté dans le chapitre 4. Ceci permettra d'obtenir les données à la plus haute des résolutions permettant d'étudier l'échantillon à une échelle temporelle bien plus fine.

L'alignement de signaux

Les données spectroscopiques peuvent aussi être des signaux 1D le long de l'échantillon et sont potentiellement alignables sur un signal moyen de l'image hyperspectrale. Les lamines présentes dans une image sont aussi des signaux 1D périodiques qui peuvent être alignés

pour retrouver le modèle théorique de leur dépôt de façon parallèle. C'est pourquoi on s'intéresse à ce type de méthodes. Il en existe de nombreuses qui ont été développées pour aligner des signaux chromatographiques, de spectrométrie de masse et de résonance magnétique nucléaire. Des études comparatives ont été réalisées [38, 39] pour ce type de données :

- La Déformation Temporelle Dynamique (DTW) [40] consiste à recaler un signal sur un autre de proche en proche. Le premier signal n'est pas modifié et chacun de ces points doit obligatoirement être lié à un ou plusieurs points du second, les deux points extrêmes sont aussi obligatoirement liés.
- La méthode Correlation Optimized Warping (COW) [41] effectue l'alignement de plusieurs segments à différentes positions en les étirant ou les compressant sur un signal de référence. Puis la combinaison optimale des segments est déterminée avec une corrélation sur la totalité des signaux.
- Peak Alignment by Genetic Algorithm (PAGA) [42] utilise aussi une approche par segment, la différence réside dans la possibilité de translation du signal à aligner.
- Recursive Peak Alignment by FFT (RAFFT) et Peak Alignment by Fast Fourier Transform (PAFFT) [43] utilisent la cross-corrélation d'une transformée de Fourier afin de détecter les similarités entre les signaux.
- Recursive Segmentwise Peak Alignment (RSPA) [44] utilise aussi des segments qui sont composés de plusieurs pics. La subtilité de cette méthode est qu'elle utilise des segments de taille décroissante pour converger vers l'alignement optimal.
- Interval-Correlation-Shifting (icoshift) [45, 46] est basé sur des principes similaires aux deux précédentes méthodes, c'est à dire la cross-corrélation sur des segments qui peuvent être définis manuellement ou de manière automatique.
- Nasreddine [3] s'appuie sur l'estimateur robuste de Leclerc qui est insensible aux petites (bruits) et grandes variations (outliers). Il s'intéresse au recalage entre des anneaux de croissance de coquillage et des signaux climatiques, ces signaux n'étant pas linéairement dépendants (épaisseur des anneaux de croissance évoluant dans le temps).
- On peut aussi utiliser des méthodes reposant sur des descripteurs SIFT comme en analyse d'image. Ceux-ci vont estimer des zones dans les signaux qui sont invariantes, puis leurs associations deux à deux permet leurs alignements.

L'étude de Korifi [38] estime aussi les avantages et inconvénients de ces méthodes pour l'alignement de signaux RMN.

Ces méthodes ne semblent pas avoir été utilisées dans le cas de recalage de signaux spectroscopiques qui sont différents des données pour lesquelles ils ont été développés. Mais notre étude repose sur l'alignement des signaux spectroscopiques sur la dimension spatiale, et donc grâce aux dépôts sédimentaires, ces méthodes devraient permettre de trouver des correspondances.

Un comparatif de ces méthodes d'alignement des signaux sera réalisé, il permettra aussi de montrer l'apport de la combinaison de plusieurs capteurs pour la modélisation de propriétés d'intérêt. Ceci permettra potentiellement d'augmenter les performances des modèles pour une prédiction plus précise, grâce à la combinaison de toutes ces informations spectrales. Ils permettront aussi d'aligner les lames et les rendre parallèles pour leurs discrétisations permettant ainsi leurs comptages et études statistiques.

Bibliographie

- [1] A. de JUAN et al. « Image Fusion ». In : *Data Fusion Methodology and Applications*. 2019. Chap. 11, p. 311-344.
- [2] A. de JUAN. « Hyperspectral image analysis. When space meets Chemistry ». In : *Journal of Chemometrics* 32.1 (2018), p. 1-13.
- [3] K. NASREDDINE. « Recalage de signaux et reconnaissance de formes : application à l'analyse des otolithes de poissons ». Thèse de doct. 2010.
- [4] G. MALANDAIN. « Les mesures de similarité pour le recalage des images médicales ». Thèse de doct. Université de Nice Sophia-Antipolis, 2006.
- [5] H. BAY, T. TUYTELAARS et L. VAN GOOL. « SURF : Speeded Up Robust Features ». In : *9th European Conference on Computer Vision*. Graz, Autriche : Springer, Berlin, Heidelberg, 2006, p. 404-417.
- [6] D. LOWE. « Object recognition from local scale-invariant features ». In : *Proceedings of the Seventh IEEE International Conference on Computer Vision*. IEEE, 1999, 1150-1157 vol.2.
- [7] CE LIU, J. YUEN et A. TORRALBA. « SIFT Flow : Dense Correspondence across Scenes and Its Applications ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33.5 (2011), p. 978-994.
- [8] G. BRIGOT. « Prédire la structure des forêts à partir d'images PolInSAR par apprentissage de descripteurs LIDAR ». Thèse de doct. 2017.
- [9] Z. YI, C. ZHIGUO et X. YANG. « Multi-spectral remote image registration based on SIFT ». In : *Electronics Letters* 44.2 (2008), p. 107.
- [10] Y. XU et al. « Classification of Hyperspectral imagery Using SIFT for Spectral Matching ». In : *2008 Congress on Image and Signal Processing*. IEEE, 2008, p. 704-708.
- [11] S. L. AL-KHAFAJI et al. « Spectral-Spatial Scale Invariant Feature Transform for Hyperspectral Images ». In : *IEEE Transactions on Image Processing* 27.2 (2018), p. 837-850.
- [12] B. DASARATHY. « Sensor fusion potential exploitation-innovative architectures and illustrative applications ». In : *Proceedings of the IEEE* 85.1 (1997), p. 24-38.
- [13] A. MARTIN. *La fusion d'informations*. 2005.
- [14] H. GHASSEMIAN. « A review of remote sensing image fusion methods ». In : *Information Fusion* 32 (2016), p. 75-89.
- [15] N. YOKOYA, C. GROHNFELDT et J. CHANUSSOT. « Hyperspectral and Multispectral Data Fusion : A comparative review of the recent literature ». In : *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 5.2 (2017), p. 29-56.
- [16] S. LI et al. « Pixel-level image fusion : A survey of the state of the art ». In : *Information Fusion* 33 (2017), p. 100-112.
- [17] L. LONCAN et al. « Hyperspectral Pansharpening : A Review ». In : *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 3.3 (2015), p. 27-46.
- [18] G. VIVONE et al. « A Critical Comparison Among Pansharpening Algorithms ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 53.5 (2015), p. 2565-2586.

- [19] P. S. CHAVEZ, S. C. SIDES et J. A. ANDERSON. « Comparison of Three Different Methods to Merge Multiresolution and Multispectral Data : Landsat TM and SPOT Panchromatic ». In : *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing* 57 (1991), p. 295-303.
- [20] T.-M. TU et al. « A new look at IHS-like image fusion methods ». In : *Information Fusion* 2.3 (2001), p. 177-186.
- [21] A. R. GILLESPIE, A. B. KAHLE et R. E. WALKER. « Color enhancement of highly correlated images. II. Channel ratio and “chromaticity” transformation techniques ». In : *Remote Sensing of Environment* 22.3 (1987), p. 343-365.
- [22] C. A. LABEN et B. V. BROWER. « Process for enhancing the spatial resolution of multispectral imagery using pan-sharpening ». In : *U.S. Patent 6,011,875* (2000).
- [23] B. AIAZZI, S. BARONTI et M. SELVA. « Improving Component Substitution Pansharpening Through Multivariate Regression of MS+Pan Data ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 45.10 (2007), p. 3230-3239.
- [24] M. M. KHAN et al. « Indusion : Fusion of Multispectral and Panchromatic Images Using the Induction Scaling Technique ». In : *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 5.1 (2008), p. 98-102.
- [25] G. VIVONE et al. « Contrast and Error-Based Fusion Schemes for Multispectral Image Pansharpening ». In : *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 11.5 (2014), p. 930-934.
- [26] T. RANCHIN et L. WALD. « Fusion of high spatial and spectral resolution images : the ARSIS concept and its implementation ». In : *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing* 66.1 (2000), p. 49-61.
- [27] X. OTAZU et al. « Introduction of sensor spectral response into image fusion methods. Application to wavelet-based methods ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 43.10 (2005), p. 2376-2385.
- [28] B. AIAZZI et al. « MTF-tailored Multiscale Fusion of High-resolution MS and Pan Imagery ». In : *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing* 72.5 (2006), p. 591-596.
- [29] B. AIAZZI et al. « An MTF-based spectral distortion minimizing model for pansharpening of very high resolution multispectral images of urban areas ». In : *2nd GRSS/ISPRS Joint Workshop on "Data Fusion and Remote Sensing over Urban Areas"*. IEEE, 2003, p. 90-94.
- [30] B. AIAZZI et al. « Context-driven fusion of high spatial and spectral resolution images based on oversampled multiresolution analysis ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 40.10 (2002), p. 2300-2312.
- [31] C. K. LEE et al. « Partial Least Square Regression Method for the Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Soil Environment Using Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy ». In : *Water, Air, & Soil Pollution* 158.1 (2004), p. 261-275.
- [32] L. ALPARONE et al. « Comparison of Pansharpening Algorithms : Outcome of the 2006 GRS-S Data-Fusion Contest ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 45.10 (2007), p. 3012-3021.

- [33] N. YOKOYA, T. YAIRI et A. IWASAKI. « Coupled non-negative matrix factorization (CNMF) for hyperspectral and multispectral data fusion : Application to pasture classification ». In : *2011 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. IEEE, 2011, p. 1779-1782.
- [34] Y. ZHANG, S. DE BACKER et P. SCHEUNDERS. « Noise-Resistant Wavelet-Based Bayesian Fusion of Multispectral and Hyperspectral Images ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 47.11 (2009), p. 3834-3843.
- [35] Y. LIU et al. « Deep learning for pixel-level image fusion : Recent advances and future prospects ». In : *Information Fusion* 42 (2018), p. 158-173.
- [36] R. DIAN et al. « Deep Hyperspectral Image Sharpening ». In : *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 29.11 (2018), p. 5345-5355.
- [37] Z. SHAO et J. CAI. « Remote Sensing Image Fusion with Deep Convolutional Neural Network ». In : *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 11.5 (2018), p. 1656-1669.
- [38] R. KORIFI, Y. LE DRÉAU et N. DUPUY. « Comparative study of the alignment method on experimental and simulated chromatographic data ». In : *Journal of Separation Science* 37.22 (2014), p. 3276-3291.
- [39] T. N. VU et K. LAUKENS. « Getting your peaks in line : a review of alignment methods for NMR spectral data. » In : *Metabolites* 3.2 (2013), p. 259-76.
- [40] J. B. KRUSKALL. *The Symmetric Time-Warping Problem : From Continuous to Discrete*. 1983.
- [41] N.-P. V. NIELSEN, J. M. CARSTENSEN et J. SMEDSGAARD. « Aligning of single and multiple wavelength chromatographic profiles for chemometric data analysis using correlation optimised warping ». In : *Journal of Chromatography A* 805.1-2 (1998), p. 17-35.
- [42] J. FORSHED, F. O. ANDERSSON et S. P. JACOBSSON. « NMR and Bayesian regularized neural network regression for impurity determination of 4-aminophenol. » In : *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis* 29.3 (2002), p. 495-505.
- [43] J. W. H. WONG, C. DURANTE et H. M. CARTWRIGHT. « Application of Fast Fourier Transform Cross-Correlation for the Alignment of Large Chromatographic and Spectral Datasets ». In : *Analytical Chemistry* 77.17 (2005), p. 5655-5661.
- [44] K. A. VESELKOV et al. « Recursive Segment-Wise Peak Alignment of Biological ¹H NMR Spectra for Improved Metabolic Biomarker Recovery ». In : *Analytical Chemistry* 81.1 (2009), p. 56-66.
- [45] F. SAVORANI, G. TOMASI et S. ENGELSEN. « icoshift : A versatile tool for the rapid alignment of 1D NMR spectra ». In : *Journal of Magnetic Resonance* 202.2 (2010), p. 190-202.
- [46] F. van den BERG, G. TOMASI et N. VIERECK. « Warping : Investigation of NMR Pre-processing and Correction ». In : *Magnetic Resonance in Food Science : The Multivariate Challenge*. 2005, p. 131-138.

1.1.5 Conclusion

Pour répondre à notre problématique portant sur la reconstitution du climat et de l'environnement passé grâce à des technologies permettant l'analyse à haute résolution des archives naturelles, nous nous sommes tournés vers des technologies d'imageries hyperspectrales. Ce type de donnée est composé de deux dimensions spatiales liées à la surface de l'échantillon, et une dimension spectrale liée à la composition bio-physico-chimique de l'échantillon. Elle permet ainsi de combiner les avantages de la spectroscopie et de l'imagerie (figure 1.9).

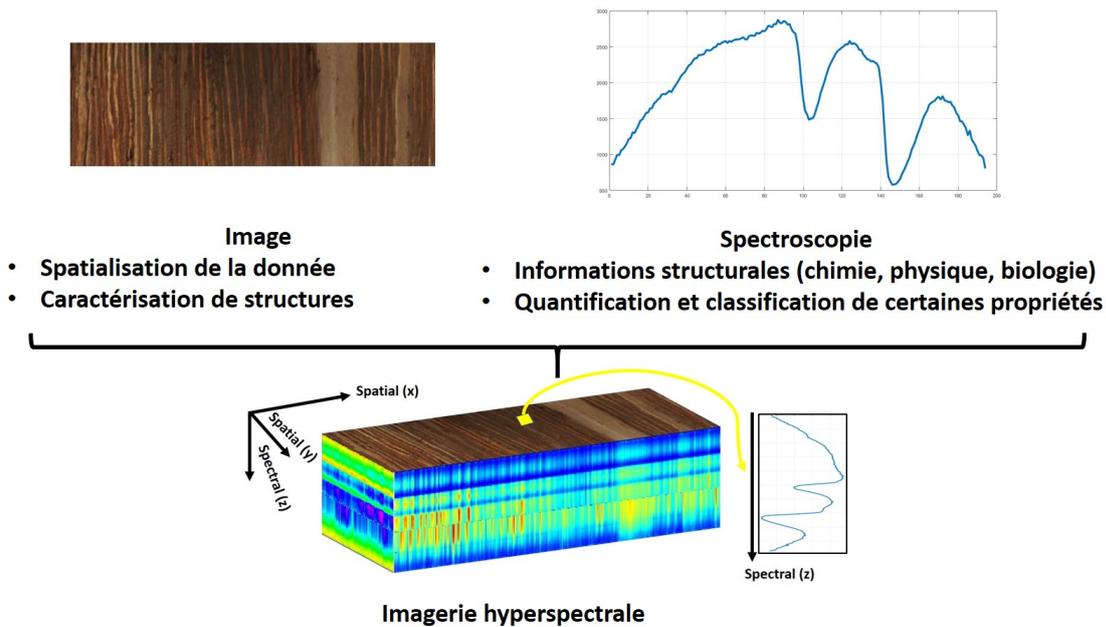


FIGURE 1.9 : Méthodes d'analyse spatiales et spectrales, ainsi que les informations pouvant en être extraites

Comme on vient de le voir, il existe de nombreuses directions que l'on peut emprunter pour extraire des informations d'intérêt des données hyperspectrales. Celles-ci peuvent être résumées avec la figure 1.10. Différentes gammes spectrales existent et permettent d'avoir accès à certaines propriétés bio-physico-chimiques des échantillons. La dimension spatiale de l'image permettra de caractériser des structures (strates, crues, dépôts) à la surface de l'échantillon. La combinaison de ces dimensions rend possible la segmentation des structures au sein de l'échantillon, puis la caractérisation de ses propriétés bio-physico-chimiques. Dans le cas de structures datables, il sera possible de créer une chronique des propriétés étudiées.

Il sera donc possible d'étudier la carotte sédimentaire à plusieurs niveaux spatiales, allant du pixel (discret) à la globalité de l'échantillon, en passant par des dépôts spécifiques (lamines, crues), comme le montre la figure 1.11.

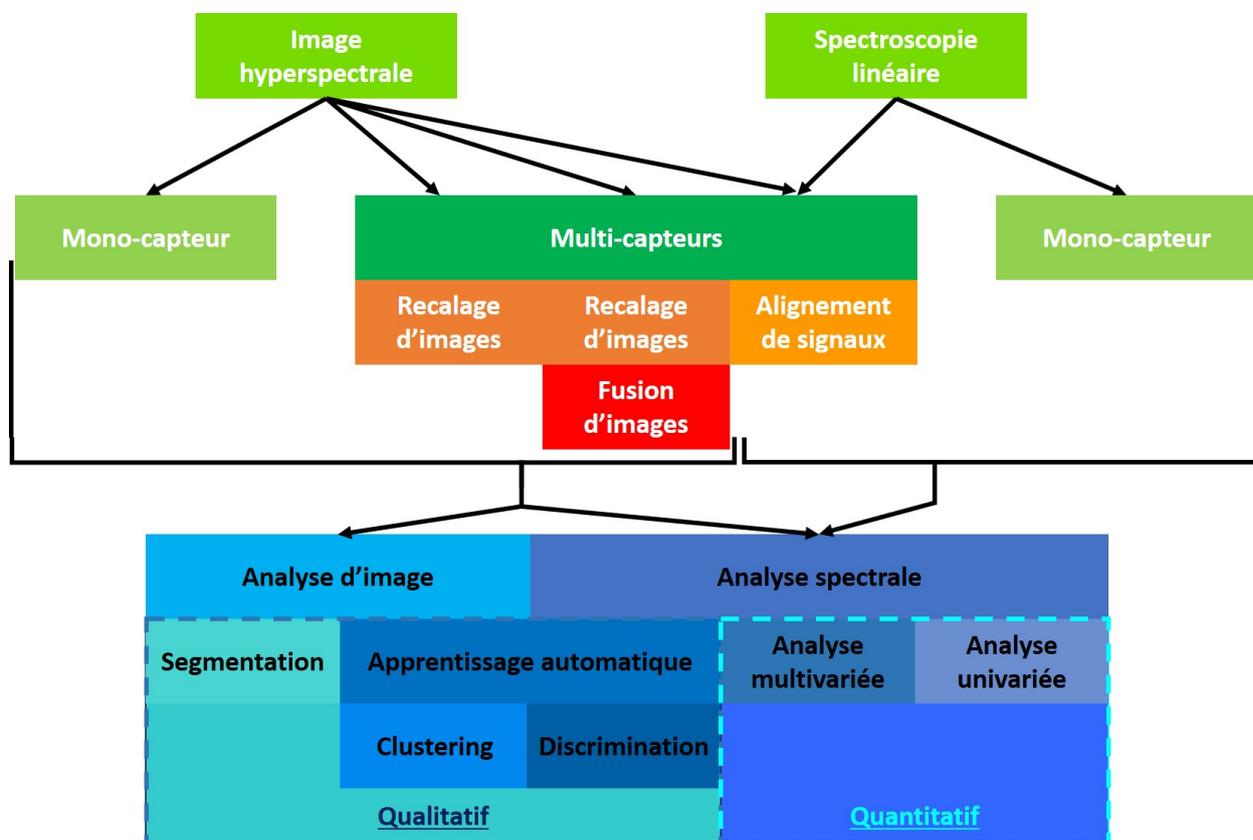


FIGURE 1.10 : Diagramme récapitulatif des méthodes à utiliser en fonction de la question étudiée et du/des capteur(s)

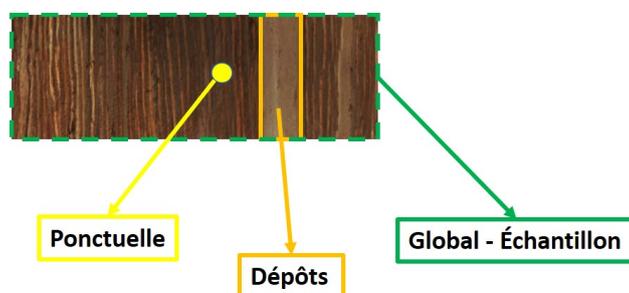


FIGURE 1.11 : Analyse spatiale de l'échantillon et de l'image hyperspectrale à plusieurs niveaux

1.2 Objectifs des travaux et méthodologies proposées

Afin de développer des méthodologies pour l'utilisation de l'imagerie hyperspectrale pour l'analyse des archives sédimentaires, nos travaux vont se reposer sur ces objectifs :

- Choisir des échantillons de natures et de compositions variées pour vérifier que les méthodes sont généralisables. Nous nous limiterons aux archives naturelles de type carotte sédimentaire lacustre qui permettent d'enregistrer des informations liées à un bassin versant.
- Employer différents capteurs d'imagerie hyperspectrale pour avoir davantage d'informations spectrales et donc bio-physico-chimiques.
- Utiliser des méthodes de traitement de données, dont on a pu discuter précédemment, pour extraire des propriétés d'intérêt à partir des données spectrales.
- Utiliser des méthodes d'analyse d'image pour extraire des structures (strates, crues, dépôts) pour ainsi créer des chroniques de la composition des échantillons.
- Combiner les données des différents capteurs qui ont leurs propres paramètres d'acquisition (résolution, gamme spectrale...).

La **première section** présentera les trois **sources de matériels** utilisées pour la réalisation de nos travaux. (1) Les capteurs d'imageries hyperspectrales et spectroscopiques pour la caractérisation non destructive des échantillons. (2) Les carottes sédimentaires à analyser pour répondre aux différentes problématiques bio-physico-chimiques et/ou spatiales. (3) Les analyses qualitatives et quantitatives pour la calibration de modèles prédictifs. Ces sources de matériels permettent dans une **seconde section** de mettre en avant **les verrous et limites** de chacune d'elles, ainsi qu'entre elles deux à deux et entre les trois. Ceux-ci nous ont permis dans une **troisième section** de **développer des méthodologies** pour lever ces verrous et limites, afin d'obtenir des informations d'intérêt fiables à partir des données hyperspectrales pour l'étude du climat et de l'environnement passés.

1.2.1 Les matériels utilisés

Les capteurs d'imageries et spectroscopiques

Trois capteurs d'imageries hyperspectrales et deux capteurs spectroscopiques ont été utilisés durant la thèse pour répondre aux différentes problématiques. Ils permettent de couvrir une grande partie du spectre électromagnétique, allant des rayons X aux infrarouges, en passant par la fluorescence. Les images hyperspectrales couvrent les gammes du visible et proche-infrarouge (Visible Near InfraRed, VNIR), des ondes courtes infrarouge (Short Wave Infrared, SWIR), et ultra-violet visible avec la fluorescence des états stationnaires (Laser Induced Fluorescence, LIF). Les capteurs spectroscopiques quant à eux permettent l'analyse des gammes des rayons X avec de la fluorescence (X-Ray Fluorescence, XRF) et ultra-violet visible avec de la fluorescence en temps résolu (Time Resolved Emission Spectroscopy, TRES). Chacun des capteurs a des spécificités d'acquisition qui lui sont propres, ils sont résumés dans le tableau 1.2. Les informations bio-physico-chimiques enregistrées avec ces capteurs sont diverses et peuvent être complémentaires, comme le montre ces quelques exemples :

- Visible : certaines molécules organiques et inorganiques colorées spécifiques, certaines empreintes minéralogiques.
- Proche infrarouge : la matière organique totale et quelques molécules organiques spécifiques, l'eau, les fractions granulométriques, des empreintes minéralogiques.
- Fluorescence des états stationnaires et fluorescence en temps résolu : certains polluants (hydrocarbures aromatiques polycycliques HAP), des molécules organiques fluorescentes spécifiques (chlorophylles, matières humiques, caroténoïdes).
- Fluorescences des rayons X : analyse élémentaire et matière organique.

Type	Capteur	Gamme	Résolution spectrale	Résolution spatiale
Image	Visible (VNIR)	400-1000 nm	6 nm	60 μm^*
	Proche infrarouge (SWIR)	1000-2500 nm	12 nm	200 μm^*
	Fluorescences des états stationnaires (lasers à 266 et 355 nm, LIF)	400-1000 nm	0.3 nm	50 μm^{**} et 200 μm^{**}
Linéaire	Fluorescences en temps résolu (lasers à 266 et 355 nm, TRES)	400-1000 nm, 0-25 ns	0.3 nm, 10 ps	200 μm^*
	Fluorescences des rayons X (XRF)	(a) 0.03-61.99 nm (0.02-40 keV); (i) 0.06-6.59 (0.19-18.95 keV)	(a-i) $6 \cdot 10^{-6}$ nm (0.02 keV)	(a-i) 5 mm x 8 mm * , 200 μm x 8000 μm^{**}

TABLE 1.2 : Capteurs utilisés (2 XRF différentes, (a) Avaatech, (i) Itrax) et paramètres d'acquisition (en analyse usuelle * ou pour nos problématiques **). A noter : les pixels sont considérés carrés d'où une unique valeur pour la résolution spatiale, sauf pour le capteur XRF ou il s'agit d'un rectangle

Les échantillons étudiés

Afin de répondre aux problématiques environnementales et climatiques passés, comme on a pu le dire, on se limitera aux archives de type carottes sédimentaires lacustres.

Le prélèvement d'une carotte sédimentaire, aussi appelé carottage, consiste à remplir un tube cylindrique de sédiment par gravité au fond d'un lac. Celui-ci est ensuite ouvert en deux pour obtenir deux demi-cylindres. Dans l'idéal un est utilisé pour les analyses destructives et l'autre est conservé en tant qu'archive ou pour les analyses non destructives comme les méthodes spectrales et d'imageries. Mais dans certains cas, ce sont les deux qui sont détruits.

On a aussi choisi de s'intéresser uniquement à des variables globales, comme la matière organique et la taille des particules aussi appelée paramètres de texture. C'est pourquoi sept carottes de tailles et d'âges variables sont utilisées pour ces travaux et toutes n'ont pas été analysées avec l'ensemble des capteurs, comme le montre le récapitulatif du tableau 1.3.

Lac	Carotte	Code	Longueurs	VNIR	SWIR	XRF	LIF	TRES
Bourget	LDB09P101	A	54 cm	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui
Annecy	LDA09P302D1	B	73 cm	Oui	Oui	Non	Non	Non
Léman	LEM10P602b	C	59 cm	Oui	Oui	Non	Oui	Non
Allos	ALO09P13A	D	153 cm	Oui	Oui	Oui	Non	Non
Aiguebelette	AIG17III	E	706 cm	Oui	Oui	Oui	Non	Non
Bourget	LDB18I	F	986 cm	Oui	Oui	Oui	Non	Non
Bourget	LDB17P11Ax	G	121 cm	Oui	Oui	Oui	Non	Non

TABLE 1.3 : Carottes sédimentaires utilisées dans ces travaux et capteurs les ayant analysées

Plusieurs carottes sédimentaires lacustres courtes (<1,5 m) ont été retenues grâce aux panels d'informations obtenues lors de programmes de recherche, comme avec le programme IPER-RETRO qui a étudié les grands lacs des Alpes de l'ouest (lacs du Bourget, Annecy, Léman) pour des paramètres biologiques, physiques et chimiques (MO, PCB, taille des particules, micro-algues, micro-organismes, analyse élémentaire) [1, 2]. D'autres carottes courtes ont été sélectionnées pour avoir de la variabilité dans les environnements sédimentaires pour une variable d'intérêt donnée : le lac d'Allos pour sa granulométrie [3], le lac du Bourget pour ses crues [4]. Enfin, d'autres carottes longues ont été retenues, car elles sont récentes (2017-2018), ce qui permet d'ajouter de la variabilité sédimentaire et elles ont été analysées avec les mêmes méthodes que les précédentes (MO, taille des particules), il s'agit de carottes des lacs du Bourget (9,86 m) et d'Aiguebelette (7 m).

Les analyses quantitatives usuelles

Trois groupes de variables à prédire ont été retenus, car ce sont des analyses très souvent réalisées ou qui aideront pour la description des échantillons (tableau 1.4). Le premier groupe s'intéresse à la matière organique, à travers la perte au feu (LOI550), le carbone organique total (TOC par RockEval) et l'étude des pigments. Celui-ci permettra d'étudier ces variations et changements d'origine liés à l'environnement. Le second est la taille des particules qui donne des informations sur les sources de dépôt, sur les processus d'érosion et de transport des particules. Le troisième s'intéresse aux structures, comme les dépôts laminés ou instantanés, afin de créer des méthodes de détection automatique à haute résolution.

Carotte	A	B	C	D	E	F	G
Perte au feu (LOI550)	Oui	Oui	Oui	Non	Oui	Non	Non
Carbone Organique Total (RockEval)	Oui	Non	Non	Non	Non	Non	Non
Pigments	Oui	Non	Non	Non	Non	Non	Non
Granulométrie	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui	Non	Non
Dépôts instantanés identifiés	Oui	Non	Oui	Oui	Non	Oui	Oui
Dépôts laminés	Oui	Non	Oui	Non	Oui	Non	Non

TABLE 1.4 : Analyses destructives réalisées et dépôts caractérisés

Pour créer des modèles prédictifs, il est important que les carottes retenues aient été analysées avec les analyses destructives correspondantes. Du fait des dépôts sédimentaires "homogènes" au fond des lacs, dire que deux carottes d'un même lac à la même profondeur de sédiments ont les mêmes propriétés est trop rapide et demande à être validée avant toutes réutilisations de données d'une carotte sur une autre qui satisfont ces conditions.

C'est pourquoi dans ces travaux, nous n'utilisons que des données obtenues sur les carottes analysées par nos capteurs.

Résumé

La figure 1.12 résume les capteurs utilisés avec leurs gammes spectrales, les échantillons et les analyses de références retenues pour répondre aux problématiques liées à la matière organique, la granulométrie et la détection des dépôts sédimentaires. Il faut noter que les images hyperspectrales ont été acquises entre 2017-2018, alors que les autres analyses ont été effectuées dans l'année suivant le carottage (2009-2010 : A-D, 2017-2018 : E-G).

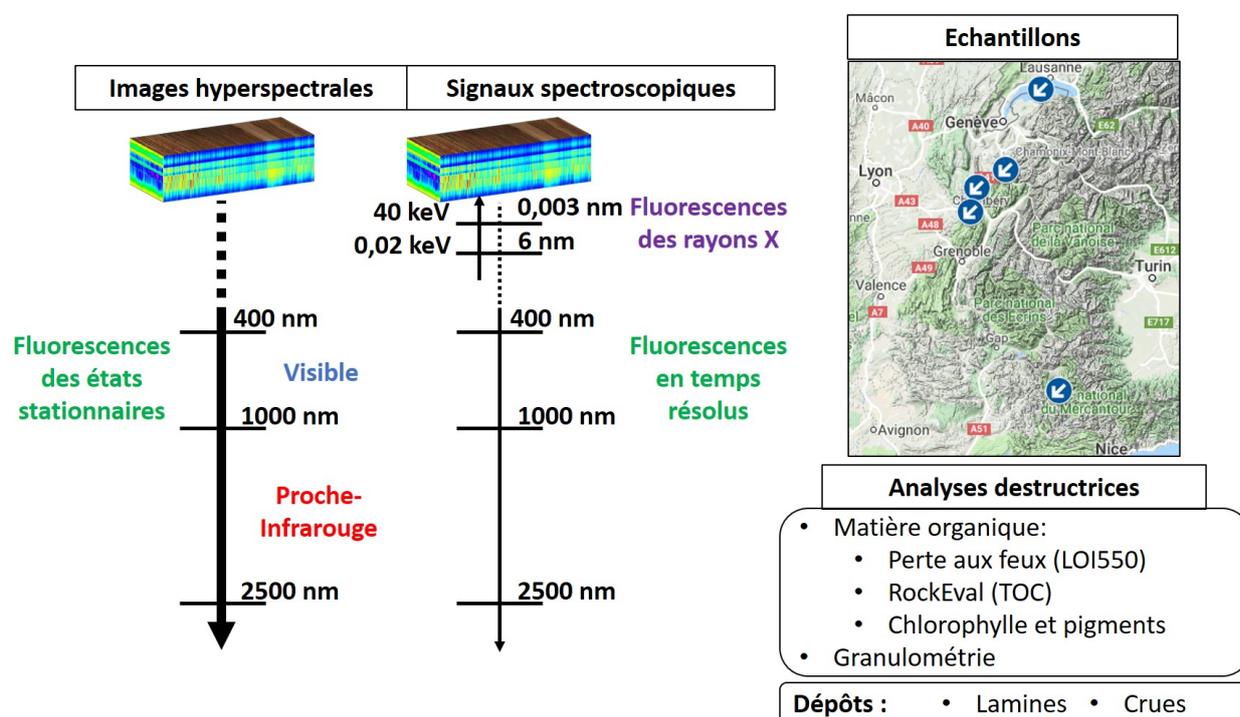


FIGURE 1.12 : Matériels et données utilisés pendant la thèse

On voit donc que ces capteurs vont permettre d'analyser ces archives sédimentaires à haute résolution à l'échelle de la saison pour des propriétés globales (matière organique, granulométrie, structure). Le développement des méthodes étant important, il sera au centre des travaux de cette thèse. Les études paléo-environnementale et paléo-climatique seront donc secondaires. On utilisera principalement un échantillon pour mettre en place une méthode qui permettra d'étudier des variables environnementales. On se placera donc à l'échelle d'un bassin versant et non pas à une échelle globale (continent, Terre). C'est pourquoi la figure 1.13 montre le cheminement proposé pour pouvoir caractériser le climat et l'environnement passés à partir d'une variable ou d'un proxy, en passant par la sélection d'archives naturelles pouvant enregistrer des informations sur une ou des sphères de la Terre. Notre approche étant locale à l'échelle d'un bassin versant, les conclusions en seront limitées.

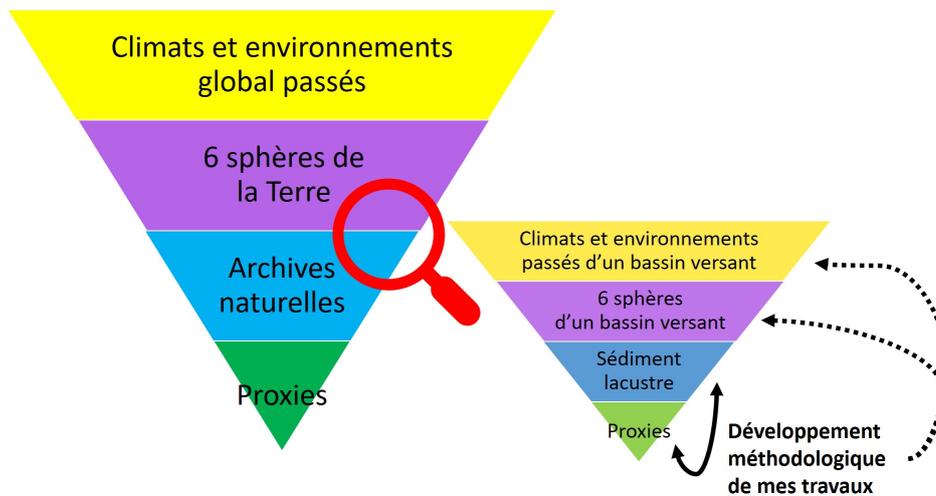


FIGURE 1.13 : Situation de la thèse dans les études paléo-climatiques et paléo-environnementales, approche locale et non globale

1.2.2 Les verrous et limites existants pour l'analyse des archives naturelles

Nous disposons donc de nombreuses données pour l'étude de différentes archives sédimentaires, mais avant de pouvoir les analyser et les interpréter, il faut en connaître les limites et les verrous. Il en existe pour chaque type de matériel (échantillons, analyses usuelles et hyperspectrales), ainsi qu'avec leurs combinaisons comme ils peuvent influencer l'un sur l'autre. Les principaux sont listés ci-dessous et synthétisés dans la figure 1.14.

Les **échantillons sédimentaires** possèdent un verrou lié au caractère plastique de l'échantillon qui continue de se déformer et d'évoluer avec sa composition bio-physico-chimique, comme notamment l'oxydation une fois l'échantillon prélevé car il était préservé de l'air avec la profondeur. De plus, une exigence de non-destruction s'ajoute car ces échantillons sont uniques et ne peuvent être retrouvés à l'identique par la suite. En effet, ils sont représentatifs d'une zone localisée du lac et enregistrent donc des informations spécifiques du bassin versant.

Les limites des **capteurs spectroscopiques** sont liées à leurs paramètres d'acquisition avec principalement les résolutions spatiales dans les deux directions (longueurs, largeurs), ainsi que certaines limites analytiques, comme les limites de détection et les effets de matrices. Une contrainte s'ajoute liée aux gammes spectrales enregistrées par différents capteurs qui ne permettent pas de les comparer directement à cause des dissimilarités des informations qu'ils acquièrent.

Les limites des **analyses usuelles** sont généralement bien connues avec les limites analytiques de ces méthodes. On peut notamment citer la nécessité de prélever une quantité d'échantillons (volume, masse), les limites de détection et de quantification, l'utilisation de solvants, les temps de préparation et d'analyse, certaines méthodes peuvent être impactées par les matrices et demander des traitements spécifiques. La zone d'échantillonnage définit aussi la résolution spatiale de l'analyse.

Entre les **deux types de méthodes analytiques** (IHS et usuelles), il existe deux limites en lien avec les résolutions spatiales et la dimension spatiale. En effet, le pixel hyperspectral est généralement micrométrique et celui de l'analyse usuelle est milli- ou centi-métrique, la mise en correspondance n'est donc pas directe. De plus, du fait de ces différences de résolutions, il se peut que les informations enregistrées ne soient pas les mêmes à cause

d'effets d'échelle (masquage ou mise en lumière à certaines résolutions). A ceci s'ajoute que les méthodes usuelles utilisent des prélèvements volumiques (3D), alors que les analyses spectrales ne considèrent principalement que la surface (2D).

La principale limite entre **l'analyse usuelle et l'échantillon** est la création des gammes de concentrations pour avoir une tendance représentative de ses variations tout au long de l'échantillon. Pour cela, un échantillonnage continu peut-être réalisé mais il peut être chronophage et conduit à la destruction complète de l'échantillon.

Les contraintes entre **l'imagerie hyperspectrale et l'échantillon** sont liées à l'interaction entre le rayonnement et la matière, ce qui induit une sensibilité aux variations de lumière et de température. La quantité de lumière est impactée par la distance à l'échantillon qui peut varier avec la surface de celui-ci qui n'est pas plane. De plus, le trajet du faisceau optique pénètre dans l'échantillon et est impacté par les particules (textures) et sa composition interne, comme l'humidité qui a souvent un effet significatif sur les spectres [5, 6, 7, 8, 9, 10]. La température est aussi connue pour avoir une incidence sur les signaux, c'est pourquoi la pièce doit être climatisée. Mais l'échantillon qui était stocké en chambre froide, pour sa conservation, peut abaisser légèrement la température ainsi que créer une couche d'humidité à sa surface. La source lumineuse induit au contraire une augmentation de la température qui peut dégrader l'échantillon avec l'évaporation de l'eau de surface qui peut faire craqueler l'échantillon et induire à son tour une modification de la surface et des dépôts. La climatisation peut aussi induire ces dégradations.

Enfin la contrainte centrale entre **les deux types de méthodes analytiques et l'échantillon** est de connaître avec précision la position de l'échantillonnage, afin de pouvoir faire les correspondances entre les différentes méthodes. Et ceci doit être valable pour un délai court et long, ce qui n'est pas aisé comme on a pu le voir avec le caractère déformable de l'échantillon et induit par l'environnement (capteurs, expérimentateurs).

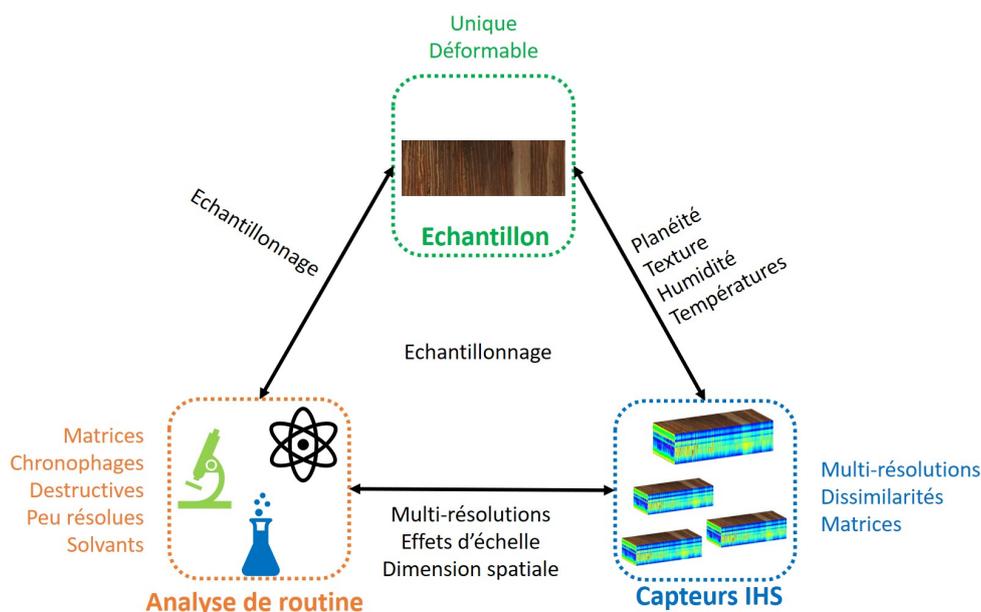


FIGURE 1.14 : Principaux verrous identifiés avec les matériels utilisés

A terme, il serait intéressant d'avoir réduit ou fait disparaître les analyses usuelles à cause des leurs limites qui ne peuvent être réduites et qui sont en contradiction avec les attentes actuelles pour l'analyse et la préservation des archives naturelles. Les contraintes

liées à l'échantillon ne pourront être levés et doivent donc être pris en compte. **Les travaux de la thèse vont donc se focaliser sur les limites et verrous liés aux capteurs hyperspectraux et spectroscopiques, ainsi que leurs interactions avec les autres matériels.**

1.2.3 Les méthodologies proposées

Afin de lever les verrous et limites liés aux capteurs spectroscopiques et ceux avec les autres matériels, une méthodologie en quatre axes est proposée.

1. **Développer une méthode pour lier des analyses destructrices centimétriques avec des pixels hyperspectraux micrométriques** : afin de créer des modèles prédictifs, il est nécessaire d'avoir une concordance et un effectif identique entre les variables expliquées (analyses destructives) et les variables explicatives (images hyperspectrales ou signaux spectroscopiques).
2. **Homogénéiser les résolutions spatiales des images hyperspectrales et capteurs spectroscopiques pour la création d'un capteur composite à la plus basse des résolutions** : combiner les différentes images et données spectroscopiques permettra de créer un jeu de données composite unique, afin d'augmenter la quantité d'informations spectrales et donc bio-physico-chimiques pour améliorer les performances des modèles prédictifs.
3. **Fusionner les différents capteurs images pour créer un capteur composite à la plus haute des résolutions** : en complément de l'axe 2, il est possible d'homogénéiser les résolutions à la plus haute résolution en estimant les informations manquantes dans les capteurs à basse résolution présentes dans les capteurs à haute résolution.
4. **Caractériser les structures à la surface de l'échantillon grâce à la complémentarité des dimensions spatiales et spectrales** : l'utilisation de ces deux dimensions permet d'avoir différentes stratégies (analyse d'image, statistique) pour révéler de manière semi- ou automatiques les processus de sédimentation.

Le développement de ces axes est réalisé sur différents échantillons, afin de vérifier leurs transférabilités à d'autres données et ne pas développer une méthode utilisable dans un cas spécifique.

Le plan proposé pour la partie développement méthodologique est divisé en quatre chapitres centrés chacun sur un des axes (figure 1.15) :

1. Le **chapitre 2** présente la méthode que l'on propose d'utiliser pour créer des modèles prédictifs entre une image hyperspectrale et des analyses usuelles destructives qui ont des résolutions spatiales différentes. Pour cela, on se base sur la régression des moindres carrés partiels (PLSR) qui est une des méthodes les plus utilisées pour estimer une variable à partir de signaux spectroscopiques. En complément, on ajoute une sélection de variables pour ne garder que les longueurs d'onde d'intérêt et ainsi avoir une modélisation plus performante. Cette méthodologie sera employée pour la prédiction de la matière organique qui est un bon traceur des changements environnementaux et climatiques.

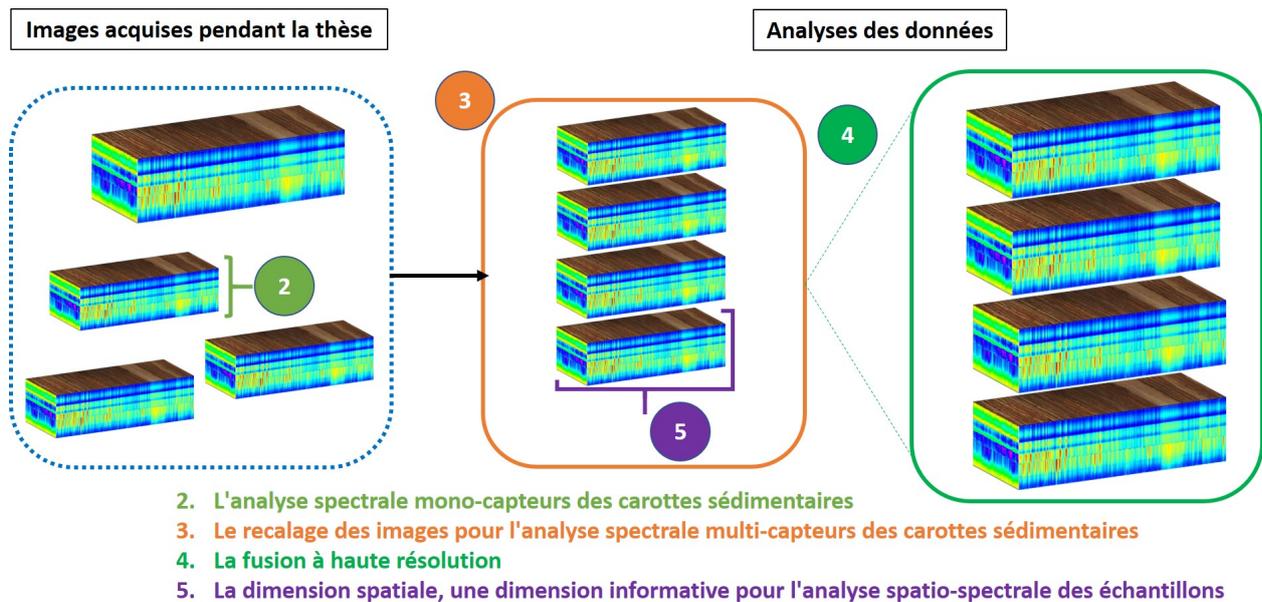


FIGURE 1.15 : Plan du manuscrit

2. Le **chapitre 3** s'intéresse à la combinaison de capteurs que ce soit des images hyperspectrales avec une méthode de recalage d'image avec les descripteurs Scale-Invariant Feature Transform (SIFT), ou des signaux continus le long de l'échantillon avec des méthodes d'alignement de signaux. Tout ceci est réalisé sur une propriété bio-physico-chimique similaire entre les capteurs pour permettre et justifier la déformation spatiale de ces images ou signaux. Ces méthodes homogénéisent les résolutions spatiales à la plus basse des résolutions. Ensuite, des modèles prédictifs PLSR seront estimés pour discuter l'intérêt et l'apport de la combinaison de ces capteurs en un capteur composite pour la prédiction de la MO, de la classe granulométrique des argiles, ainsi que pour l'estimation du profil de distribution des particules.
3. Le **chapitre 4** cherche comme au chapitre 3 à combiner les images hyperspectrales pour les regrouper en une image hyperspectrale composite à la même résolution, mais cette fois-ci à la plus haute des résolutions. Pour cela, des méthodes de fusion de données au niveau du pixel sont utilisées. Un comparatif est réalisé grâce à de nombreuses méthodes exploitées pour la fusion de capteurs en télédétection. Les chapitres 3 et 4 sont donc en opposition concernant la résolution du capteur composite (haute-basse), la création ou le lissage de la donnée pour l'homogénéisation de la résolution. L'utilisation de la plus haute résolution permettra d'étudier les variations au sein de l'échantillon à une échelle plus précise temporellement.
4. Le **chapitre 5** se concentre sur les structures à la surface des échantillons qui peuvent être extraites par deux principaux groupes de méthodes. La première cherche les structures pour les détourner grâce à leur similarité, on les regroupe dans la famille des analyses d'images ou d'alignement de signaux qui utilisent la dimension spatiale de l'image. La seconde cherche les similarités et dissimilarités entre ces structures, on parle de méthodes de classification qui exploitent la dimension spectrale de l'image. Ceci permettra d'obtenir des indicateurs temporels au sein des échantillons, et créer une carte référençant chaque dépôt, qui servira ensuite de référentiel pour les propriétés

bio-physico-chimiques.

5. Enfin, le dernier chapitre regroupera les conclusions et perspectives de nos travaux.

Les chapitres à venir seront tous composés d'un ou deux articles scientifiques en anglais présentant nos travaux, certains déjà publiés, d'autres en cours de développement. Ils seront précédés d'une introduction générale présentant le contexte environnemental et les contraintes actuelles, puis un résumé long qui présentera la méthode proposée pour pallier ces derniers, ainsi que les résultats obtenus. Ils seront suivis par des compléments de résultats, des perspectives de développement pour pallier aux verrous et limites qui n'auront pas pu être levés pendant ces travaux. Enfin, un résumé fera le point sur les besoins environnementaux, les contraintes résolues et celles restantes. Ce résumé sera schématisé avec un diagramme ternaire représentant les trois groupes de développement possibles (figure 1.16) : "Environnement" qui représente l'étude de ce type de propriété et ses contraintes ; "Théorique" qui permet de synthétiser les verrous et limites existant pour l'ensemble des matériels à notre disposition ; "Numérique" qui regroupe les méthodes algorithmiques utilisées.

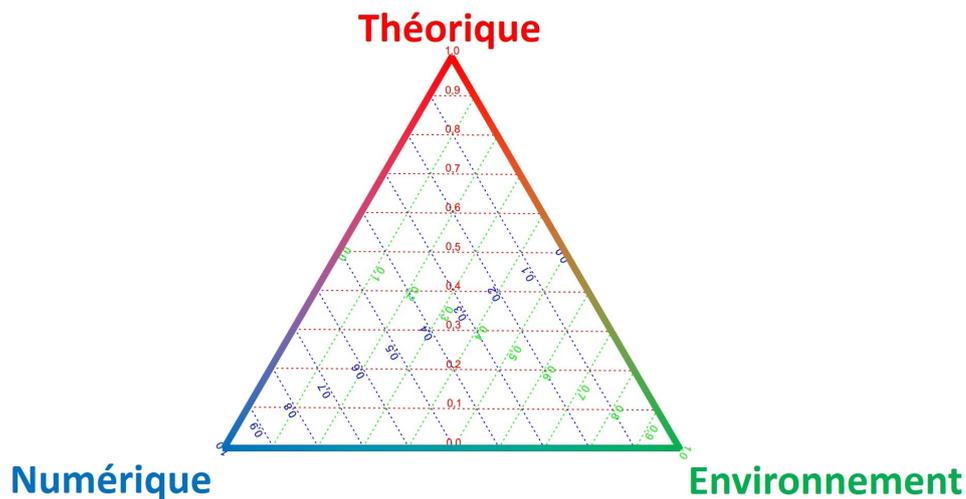


FIGURE 1.16 : Diagramme ternaire résumant les résultats de chaque chapitre

Bibliographie

- [1] INRA. *Projet ANR IPER-RETRO : Impact des PERTurbations sur les REseaux TRO-phiques lacustres : approche paleo-écologique*. 2009.
- [2] M.-E. PERGA et al. « High-resolution paleolimnology opens new management perspectives for lakes adaptation to climate warming ». In : *Frontiers in Ecology and Evolution* 3 (2015), p. 72.
- [3] B. WILHELM et al. « 1400 years of extreme precipitation patterns over the Mediterranean French Alps and possible forcing mechanisms ». In : *Quaternary Research* 78.1 (2012), p. 1-12.
- [4] J.-P. JENNY et al. « A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps) ». In : *Journal of Paleolimnology* 51.4 (2014), p. 469-483.
- [5] R. N. CLARK. « Spectroscopy of Rocks and Minerals, and Principles of Spectroscopy ». In : *Remote Sensing for the Earth Sciences : Manual of Remote Sensing, 3 ed.* Sous la dir. d'A. N. RENCZ. T. 3. John Wiley & Sons, Inc., 1999. Chap. 1, p. 1-50.
- [6] J. P. WIGHT, A. J. ASHWORTH et F. L. ALLEN. « Organic substrate, clay type, texture, and water influence on NIR carbon measurements ». In : *Geoderma* 261 (2016), p. 36-43.
- [7] W. JI, R. A. VISCARRA ROSSEL et Z. SHI. « Accounting for the effects of water and the environment on proximally sensed vis-NIR soil spectra and their calibrations ». In : *European Journal of Soil Science* 66.3 (2015), p. 555-565.
- [8] P. ROUDIER et al. « Evaluation of two methods to eliminate the effect of water from soil vis-NIR spectra for predictions of organic carbon ». In : *Geoderma* 296 (2017), p. 98-107.
- [9] E. LANCELOT et al. « Potential of near-infrared hyperspectral imaging spectroscopy to quantify water content in biscuits ». In : *2016 8th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*. IEEE, 2016, p. 1-3.
- [10] C. VERPOORTER, V. CARRÈRE et J.-P. COMBE. « Visible, near-infrared spectrometry for simultaneous assessment of geophysical sediment properties (water and grain size) using the Spectral Derivative-Modified Gaussian Model ». In : *Journal of Geophysical Research : Earth Surface* 119.10 (2014), p. 2098-2122.

Chapitre 2

L'analyse spectrale mono-capteur des carottes sédimentaires

Les changements de type de matières organiques sont l'un des principaux marqueurs de modification de l'environnement, comme les changements de végétation ou encore l'érosion [1].

De nombreuses méthodes destructrices et non destructrices permettent de les caractériser, dont les méthodes spectroscopiques comme on a pu le voir dans le paragraphe 1.1.1.

Mais les modélisations actuelles, avec des techniques prédictives, sont discrètes, peu résolues spatialement et donc temporellement. De plus, la différence de résolution et de dimension entre les données hyperspectrales surfaciques micrométriques et usuelles volumiques millimétriques peuvent induire des différences d'enregistrement des informations bio-physico-chimiques.

C'est pourquoi on se propose dans ce chapitre d'utiliser l'imagerie hyperspectrale proche-infrarouge pour quantifier la matière organique de manière continue. La haute résolution (200 μm) de ces images permet d'étudier les variations de la MO à l'échelle sub-annuelle.

Dans la suite, nous présentons une méthode développée pour lier des données quantitatives millimétriques usuelles avec des pixels hyperspectraux micrométriques, afin d'avoir une prédiction fiable à l'échelle du pixel. Elle est résumée ci-dessous, puis développée dans un article publié dans la revue Science of the Total Environment.

Chacun des capteurs utilisés possède des informations spectrales spécifiques sur certains composés chimiques. Le choix du capteur est donc crucial pour l'étude d'une variable d'intérêt. Dans le cas de la matière organique, le domaine proche-infrarouge porte cette information à travers plusieurs liaisons chimiques.

La difficulté majeure pour créer un modèle prédictif supervisé avec des données hyperspectrales est leur mise en correspondance avec les analyses destructrices. En effet, les analyses physico-chimiques usuelles effectuées sur les carottes sédimentaires sont le plus souvent réalisées sur des bulks d'une zone correspondant à quelques millimètres ou centimètres, alors que les données hyperspectrales ont une taille de pixels de l'ordre de quelques dizaines ou centaines de micromètres. C'est pourquoi une méthode a été développée pour lier ces deux types de données malgré cette différence de résolution. Il faut aussi noter que les dimensions de l'analyse diffèrent, l'imagerie ne considère que la surface, alors que les bulks sont des

analyses volumiques. On fait donc l'hypothèse que l'information portée dans un volume se retrouve dans une surface.

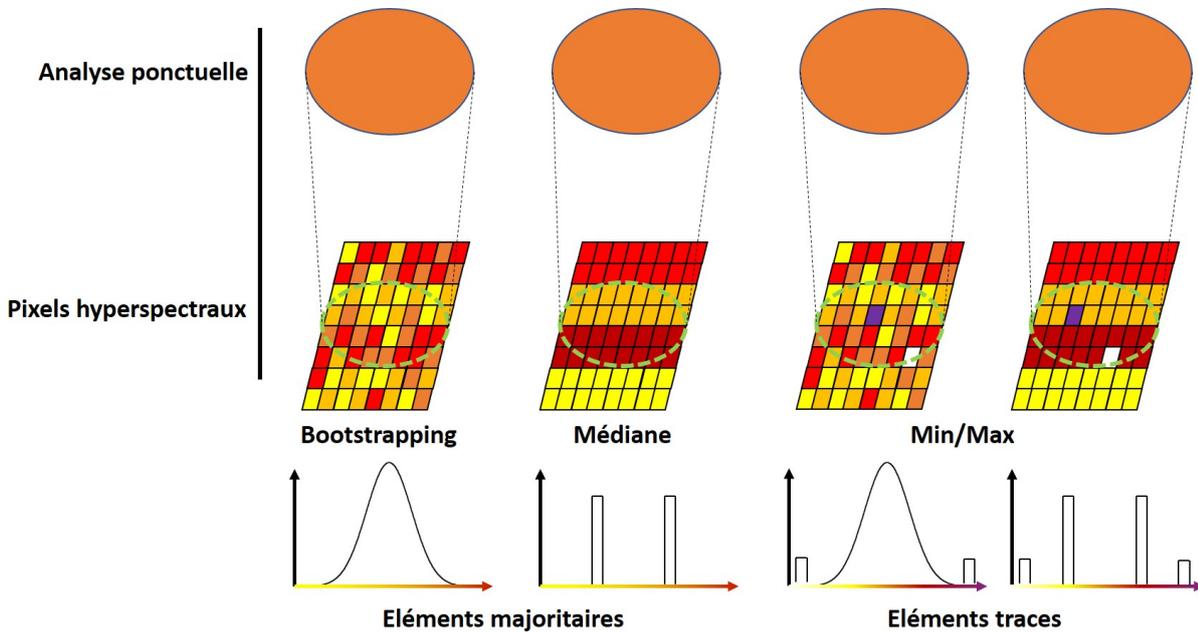


FIGURE 2.1 : Approches proposées pour sous échantillonner les données hyperspectrales pour correspondre aux analyses usuelles

La mise en correspondance des deux types de données repose sur trois hypothèses qui déterminent la stratégie à mettre en œuvre (figure 2.1). La valeur de l'analyse destructrice correspond à une moyenne de tous les points du bulk. Si le composé étudié est majoritaire dans le signal, alors deux méthodes de sous-échantillonnage peuvent être employées. La première hypothèse est qu'il est possible que l'information de l'analyse milli- ou centi-métrique se retrouve dans un pixel micrométrique, du fait d'une distribution continue. Dans ce cas, la valeur moyenne du bulk se retrouvera en certains pixels. C'est pourquoi, de multiples tirages aléatoires en utilisant du bootstrapping, doivent permettre de déterminer les pixels les plus adaptés pour la représentation de la gamme de concentration déterminée avec les bulks. La seconde hypothèse est que l'information ne se retrouve pas dans les pixels à cause d'une distribution discontinue. La valeur moyenne du bulk peut donc ne pas être présente dans les pixels. Un pixel médian est donc calculé pour chaque zone d'échantillonnage, afin d'obtenir les spectres correspondant à la gamme de concentration. On a choisi la médiane pour diminuer l'impact des données aberrantes. Dans le cas de composés minoritaires ou traces, une étude approfondie de la distribution des pixels est nécessaire pour estimer ceux correspondant à ces variations qui pourront être caractérisés avec des valeurs minimales ou maximales.

La régression des moindres carrés partiels (PLSR) a été retenue pour cette étude. Cette méthode repose sur l'extraction de prédicteurs orthogonaux (ou variables latentes) portant le maximum de variabilités des bandes spectrales liées à une ou plusieurs variable(s) à prédire. Elle est associée à une sélection automatique des longueurs d'onde portant les informations chimiques sur la variable à prédire. Elle est utilisée pour améliorer la performance du modèle, ainsi que pour simplifier son interprétation (réduction des redondances, retrait des bandes non informatives). Deux étapes de validation quantitatives sont réalisées (figure 2.2), une

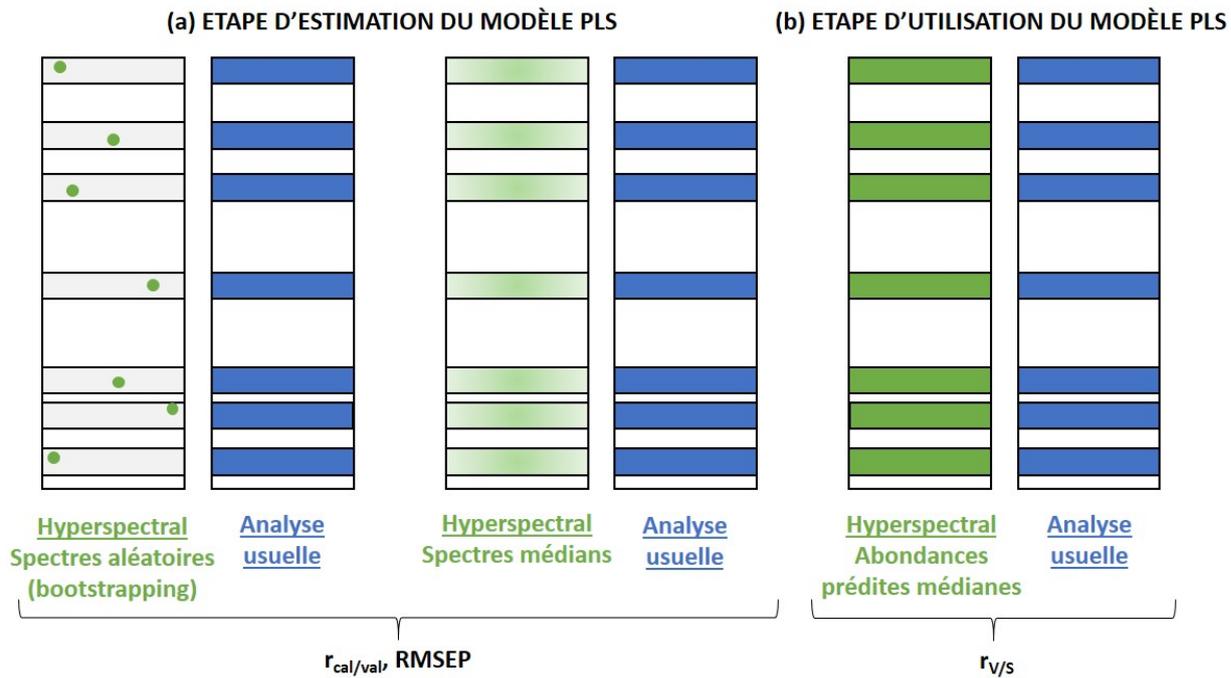


FIGURE 2.2 : Validations quantitatives d'un modèle PLS (a) lors de l'étape d'estimation du modèle en fonction du type de sous-échantillonnage, (b) lors de son utilisation

première lors de l'estimation du modèle grâce à des sets de calibration et de validation (avec des corrélations (r_{cal} , r_{val}) et un écart quadratique moyen de prédiction ($RMSEP$)), une seconde lors de l'utilisation du modèle pour comparer les valeurs surfaciques hyperspectrales avec celles volumiques des analyses usuelles (corrélation $r_{V/S}$). Une étape de validation qualitative est aussi réalisée pour estimer la pertinence de la carte de prédiction en fonction des connaissances a priori sur l'échantillon (présence de structures laminées et d'autres dépôts).

Cette étude a montré, avec des corrélations supérieures à 0.9 pour la prédiction de la matière organique, qu'il était possible de relier des analyses millimétriques ou centimétriques de volume avec des données micrométriques de surface. Les prédictions ont été validées par la comparaison avec une estimation de la matière organique effectuée par spectroscopie de fluorescence des rayons X à une résolution similaire. Elle a aussi montré que la sélection des longueurs d'onde améliore la performance des modèles et que l'eau a un impact négatif sur la prédiction de la matière organique. Les longueurs d'onde sélectionnées correspondent à des liaisons organiques (C-H, C=O, C-O, N-H) et minérales (argiles) [2], ce qui montre que la MO est étroitement liée aux minéraux dans certaines parties de l'échantillon. Une carte de prédiction est obtenue avec l'utilisation du modèle PLSR appliqué à l'IHS, celle-ci permet de caractériser des lamines dans la zone eutrophisée qui sont plus ou moins enrichies en MO, ces zones peuvent expliquer l'importance des longueurs d'onde minérales pour le modèle.

High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core

Kévin Jacq^{a,b}, Yves Perrette^a, Bernard Fanget^a, Pierre Sabatier^a, Didier Coquin^b, Ruth Martinez-Lamas^{c,d}, Maxime Debret^c, Fabien Arnaud^a

a Univ. Grenoble Alpes, Univ. Savoie Mont Blanc, CNRS, EDYTEM, 73000 Chambéry, France

b Laboratoire d'Informatique, Systèmes, Traitement de l'Information et de la Connaissance (LISTIC), Université Savoie Mont-Blanc, 74944 Annecy Le Vieux Cedex, France

c Laboratoire de Morphodynamique Continentale et Côtière, Université de Rouen, UMR CNRS 6143, 76821 Mont-Saint-Aignan, France, Université de Caen, UMR CNRS 6143, 14000 Caen, France

d IFREMER, UR Géosciences Marines, Laboratoire Géophysique et Enregistrements Sédimentaires, BP70, 29280 Plouzané, France

Corresponding Author:

Kévin Jacq

Environnements, Dynamiques et Territoires de la Montagne (EDYTEM)

Université Savoie Mont Blanc, Campus Scientifique,

73376 Le Bourget du Lac Cedex, France

kevin.jacq@univ-smb.fr

Abstract

In the case of environmental samples, the use of a chemometrics-based prediction model is highly challenging because of the difficulty in experimentally creating a well-ranged reference sample set. In this study, we present a methodology using short wave infrared hyperspectral imaging to create a partial least squares regression model on a cored sediment sample. It was applied to a sediment core of the well-known Lake Bourget (Western Alps, France) to develop and validate a model for downcore high resolution LOI550 measurements used as a proxy of the organic matter. In lake and marine sediment, the organic matter content is widely used, for example, to reconstruct carbon flux variations through time. Organic matter analysis through routine analysis methods is time- and material-consuming, as well as not spatially resolved. A new instrument based on hyperspectral imaging allows high spatial and spectral resolutions to be acquired all along a sediment core. In this study, we obtain a model characterized by a 0.95 r prediction, with 0.77 wt% of model uncertainty based on 27 relevant wavelengths. The concentration map shows the variation inside each laminae and flood deposit. LOI550 reference values obtained with the loss on ignition are highly correlated to the inc/coh ratio used as a proxy of the organic matter in X-ray fluorescence with a correlation coefficient of 0.81. This ratio is also correlated with the averaged subsampled hyperspectral prediction with a r of 0.65.

Keywords: Hyperspectral Imaging, Chemometrics, Near-Infrared Spectroscopy, High Resolution Analysis, Organic Matter

1. Introduction

The organic matter is usually used for sediment studies. For example, it can be used to estimate the carbon stocks over time. Among different methods, the organic matter can be approximated through Loss of Ignition at 550°C (Heiri et al., 2001), which are a widely used method in paleo-environmental studies. All these methods are time-consuming, relatively expensive, destructive and have low spatial resolution (0.5-1 cm sampling).

Hyperspectral imaging is a method at the interface of spectroscopy and imaging. The ability to predict the organic matter has been demonstrated based on visible (Vis, 400-800 nm) and near-infrared (NIR, 800-2500 nm) spectroscopy, known as Vis-NIR spectroscopy (Li et al., 2015; Nawar and Mouazen, 2017; Van Exem et al., 2018; Viscarra Rossel and Behrens, 2010). Predictions are still efficient with only NIR spectroscopy (Clairotte et al., 2016; Leach et al., 2008; Zornoza et al., 2008). Mid-infrared (MIR, 2500-25000 nm) spectroscopy also has the same ability (Clairotte et al., 2016; Rosén et al., 2011; Vohland et al., 2014). X-ray fluorescence (XRF) spectroscopy is also used as an indirect qualitative proxy of the organic matter (Bajard et al., 2016; Chawchai et al., 2016; Croudace and Rothwell, 2015; Lintern et al., 2016).

Chemometrics methods can be used to extract relevant information from spectral bands by comparison with discrete sample measurements and can be used downstream to predict the organic matter or other variables. Partial least squares regression (PLSR) has probably been the most used method to extract organic matter information from spectra (Clairotte et al., 2016; Dhawale et al., 2015; Nawar and Mouazen, 2017; Viscarra Rossel and Behrens, 2010; Vohland et al., 2014). However, other methods can be used with their specific conditions. For instance, the artificial neural network (ANN) and the support vector machine (SVM) require a large dataset. A comparison of different chemometrics methods show that advanced methods such as ANN, SVM, and Multivariate Adaptive Regression Splines (MARS) can slightly improve the performance (Kuang et al., 2015; Li et al., 2015; Viscarra Rossel and Behrens, 2010). Transferring a model between several samples can be very interesting, and PLSR is better than ANN to model local variations, while they are quite similar for global variations (Wijewardane et al., 2016). In order to improve model performance and robustness, spectral variable selection is achieved to reduce the spectral collinearity. As a side effect, this reduction makes chemical interpretation easier (Peng et al., 2014; Viscarra Rossel and Behrens, 2010; Vohland et al., 2014). Furthermore, coupling spectroscopic datasets have been shown to improve model performance (Clairotte et al., 2016) by the increase of the spectral and thus chemical information.

Chemometrics methods have been widely used in the biochemistry and the pharmacology domains. These methods are usually based on an experimentally built sample set in which the target concentrations are known or spiked. A direct chemometrics approach is promising to predict concentrations in environmental solids such as sediments, soils, and biological tissues. The challenge is here to propose a procedure designed to build a robust model based on a natural dataset only. Indeed, we can expect that the range and

spread of real target values of a learning dataset is less robust than a model generated with an experimentally designed dataset.

The aim of this study is to propose a way to build a PLSR model with hyperspectral data on a natural environmental sediment using the opportunity of its heterogeneity to generate robust models without the constitution of an experimental set. We applied this method to predict the organic matter content in a sediment core by the way of a PLSR model. A sample from the Lake Bourget was used and analyzed with short-wave infrared (SWIR, 900-2500 nm) hyperspectral imaging. The loss on ignition (LOI) was the reference method for the organic matter values. LOI is predicted from a hyperspectral image and a variable selection applied to increase the robustness of the model. Predictions were validated with LOI550 measurements and compared with the inc/coh ratio calculated with XRF as a qualitative proxy of the organic matter. Finally, the pixel prediction validity with the scale law (micrometer and millimeter) is discussed.

2. Materials and methods

2.1. Site descriptions

Lake Bourget (231.5 masl, 18 km long, and 2.8 km wide) is a hard-water lake at the northwestern edge of the French Alps (figure 1). The lake was formed between the Pre-Alpine and Jura Mountain ranges within the Molasse Basin by the retreat of Wurmian glaciers. Two small rivers (Leysse and Sierroz) usually flow into Lake Bourget, which then flows into the Rhone River by the Saviere Channel. However, during flooding of the Rhone River, the water-current of this channel is reversed, and river water flows into Lake Bourget.

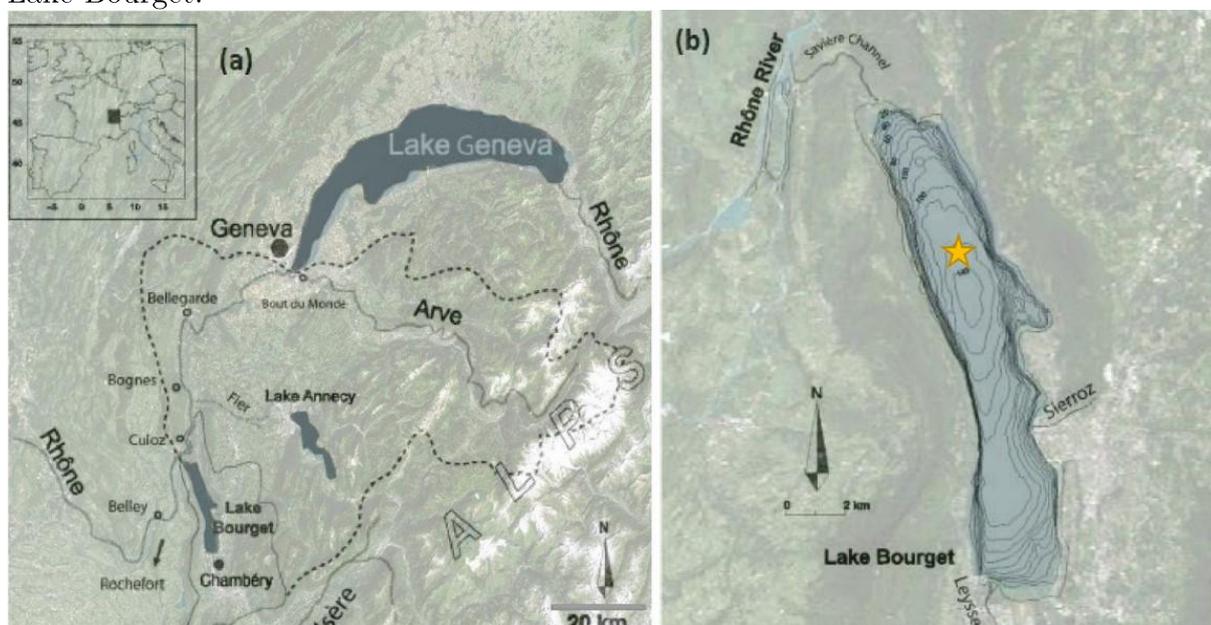


Figure 1: (a) Location and catchment area of Lake Bourget. (b) Bathymetry, tributaries and effluents of the lake.

In the northern deep basin, flood deposits from the Rhone contribute to a variable sediment fraction. During such flood events, the Lake Bourget catchment area is 4,600 km², including tributaries draining part of the Jura Mountains and the Inner Alps. Otherwise, excluding the Rhone, it is 580 km². Over the last 10,000 years, the river-borne

silicate fraction has ranged between 10 and 40% of the bulk sediment, with the remaining amount composed of carbonate depending on past climate conditions (Arnaud et al., 2012, 2005; Debret et al., 2010; Giguët-Covex et al., 2010; Jenny et al., 2014).

In 2009, sediment (LDB09-P101, length = 54 cm, width = 9 cm) was cored in the northern basin of Lake Bourget (N45 45.334, E5 51.332, 145 m water depth) in the frame of the IPER-RETRO program (ANR-08-VUL 005, (Perga et al., 2015)). This core was selected for this study because it contains both seasonally paced bioinduced millimeter lamina as well as interbedded deposits brought by Rhone River flood events.

2.2. Sample preparation and LOI550 measurement

The core was sampled every ca. 2 cm in 5 mm slices cautiously avoiding the mixing of different sediment facies (i.e., lamina and flood deposits for example). However, in this 5 mm, there can be several lamina which are around 2 mm thick. Discrete samples were dried at 60 °C for 72 h then crushed (Basma et al., 1994).

The LOI was measured following the methodology detailed in (Heiri et al., 2001). Briefly, the protocol is as follows: (1) heat to 550 °C over 4 h to estimate the organic content and (2) heat to 950 °C over 2 h to estimate the mineral carbon content. At each step, the sample was weighed to calculate the loss of weight (wt%) with equations (1) and (2).

$$LOI550 \text{ (wt\%)} = \frac{m_0 - m_1}{m_0} * 100 \quad (1)$$

$$LOI950 \text{ (wt\%)} = \frac{(m_1 - m_2)}{m_0} * 100 \quad (2)$$

where m_0 is the initial weight of dried sediment, m_1 is the weight after the first step, and m_2 is the weight at the end.

The uncertainty of this method is 0.14 wt% ($\alpha = 0.05$, $n = 63$) for LOI550 values and 0.04 wt% ($\alpha = 0.05$, $n = 63$) for LOI950 values. It was estimated with 7 samples and 9 replicates each from several cores.

2.3. SWIR hyperspectral imaging acquisition

Hyperspectral imaging consists of acquiring an image with high spatial resolution, in which each pixel contains spectral information with a continuous spectral resolution.

The core was analyzed in less than 15 minutes with the SWIR hyperspectral camera (Specim Ltd., Finland) with the lens OLES22,5 at the M2C lab, University of Normandie-Rouen. It covers the SWIR range between 968 nm and 2574 nm with a reflectance spectral resolution of 12 nm (144 wavelengths) and a spatial theoretical resolution of 200 μm in both directions all along the core. The spectral unit is reflectance by 10,000 ($R \times 10,000$).

The protocol followed to acquire the hyperspectral image is detailed in (Butz et al., 2015). The core was cleaned before acquisition. Then, the camera was calibrated with a spectralon reference (white), and the shutter was closed (black) for determining the spectral dimensions. Spatial calibration was achieved by the way of imaging a known object for its shape (squared pixels) and color (intensity). Deviation was checked at the end of the acquisition in the same manner, and no deviation was observed.

2.4. X-ray fluorescence spectroscopy

The relative contents of major elements were analyzed by X-ray fluorescence (XRF) at a 200 μm resolution on the surface of the sediment core with an ITRAX XRF Core Scanner (Cox Analytical Systems) at the CEREGE laboratory in 2010. The split core surface was first covered with a 4- μm -thick Ultralene film to avoid contamination and desiccation of the sediment. The X-ray beam was generated with a molybdenum tube at 35 kV and 30 mA, with a runtime of 15 s. Compton (incoherent) and Rayleigh (coherent) scattering data were extracted from it, and the inc/coh ratio was calculated. It has been used in many studies as a qualitative proxy of organic matter (Bajard et al., 2016; Chawchai et al., 2016; Croudace and Rothwell, 2015; Lintern et al., 2016).

2.5. Data analysis

Data acquisition was performed using Specim hardware ENVI 4.8. The data was then converted, processed and analyzed with MATLAB (R2017a, MathWorks). Several free and open MATLAB toolboxes were used and are detailed afterwards.

A key point to predict the LOI550 from hyperspectral imaging is the coupling of the volume of the sample at 5 mm resolution with surface pixels of approximately 0.2 mm. The proposed method is composed of four main steps. (1) A bootstrapping selection in the hyperspectral spectra of the LOI sampling area was performed to construct several datasets. (2) Then, PLSR was used to model LOI550 thanks to these spectra and the discrete LOI550 measurements for all the datasets. (3) The 10 optimal models were retained based on their performances. (4) Wavelengths highly correlated with LOI550 were identified with variable selection on the retained models in (3). A final reduced model was estimate with these wavelengths. The complete workflow followed in this study is presented in Figure 2.

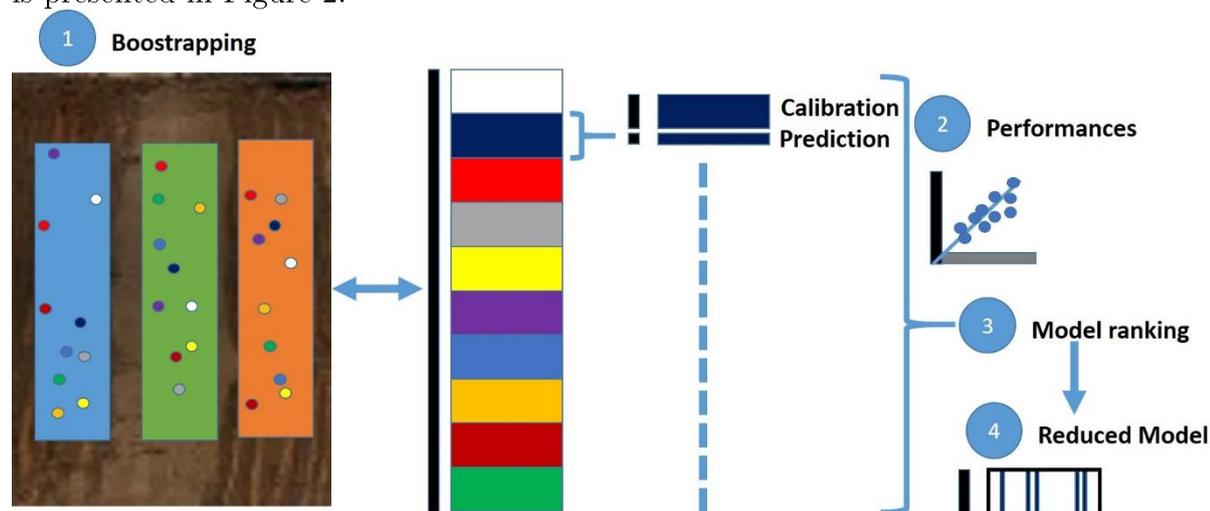


Figure 2: The four principal steps followed to create a model: (1) dataset creations with bootstrapping in the sampling area that are associated with the corresponding LOI550 value, (2) create models, estimate performances and estimate the regression coefficients, (3) rank the models based on their performances, and (4) reduce the number of wavelengths with 10 optimal models and create the reduced model.

2.5.1. Spectral preprocessing

Spectral bands between 968-1127 nm (15 wavelengths) and 2418-2574 nm (15 wavelengths) were excluded from the processing because of their very low signal-to-noise ratio. In fact, noise is known to artificially increase the prediction of a chemometrics model (Tetko et al., 1995). 39 wavelengths of H₂O absorption bands (between 1094 and 1176 nm, 1339 and 1465 nm, and 1773 and 2005 nm) were removed as proposed by (Gomez et al., 2015). Consequently, 75/144 wavelengths were retained (figure 3).

In order to produce a robust model, some data in the spectra and LOI550 values have been removed based on two standard deviations of the Mahalanobis distance in a principal component analysis space (Mark and Tunnell, 1985). These data were due to spectral artifacts (specular reflection, not enough signal, too noisy) or aberrant values. Pixels that correspond to high surface variations (gap areas for example) were removed by setting a lower limit for the standard deviation of a spectrum. This threshold must be set for each image and based on the spectrum regions without noisy bands. For Lake Bourget images, a standard deviation limit is set at 250 R x 10,000 (reflectance per 10,000).

Several standard spectral preprocessing (detrend, standard normal variate (SNV), Savitzky-Golay derivatives) were tested to correct spectra from the scattering effect and/or to normalize spectra (Vidal and Amigo, 2012). Finally, in order to optimize the prediction model, the data were preprocessed by the way of an autoscaling by mean-centering and standardizing each wavelength (Z-score).

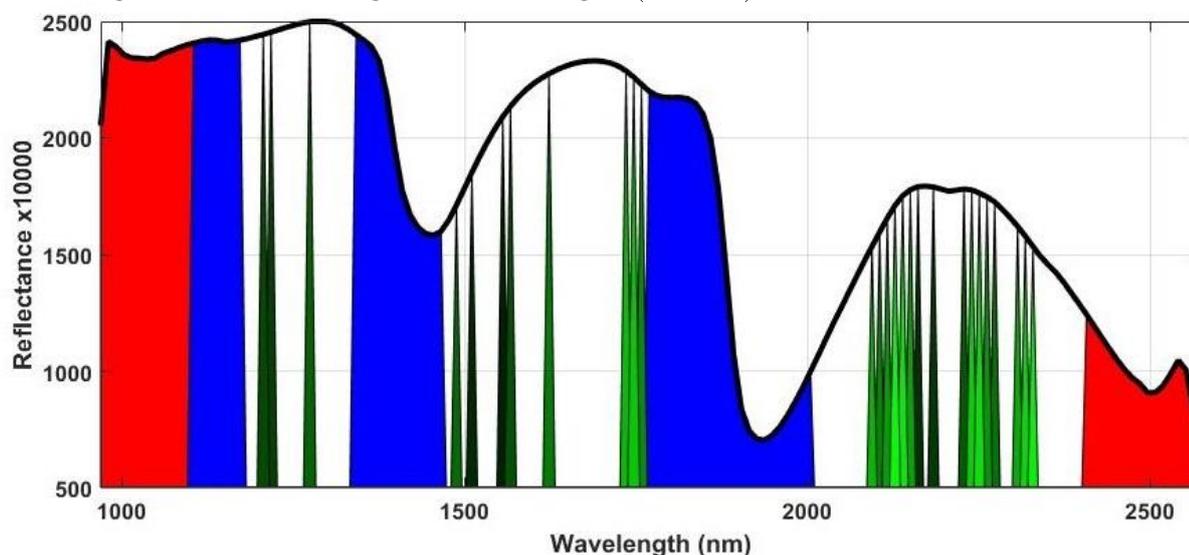


Figure 3: 27 most correlated wavelengths to LOI550 are highlighted with a green gradient (light green: most), the water bands are in blue, and the noise bands are in red on the mean spectrum in black.

2.5.2. Spectral sub-sampling

Our goal is to build a regression model between a set of 20 data of LOI and a set of 20 regions of thousands of pixels on the image which correspond to the sampling area. Different techniques could be used to generate a representative value of the spectrum used for regression with LOI data, (mean, bootstrap, min or max, mode or median spectrum). The limit of a mean spectrum for each sampling area leads to smooth spectral

variabilities; resulting model were not relevant. We applied a bootstrapping procedure rather than a mean spectrum assuming that LOI could be better explained by a specific spectrum of the region of interest than by the mean spectrum of this region.

Bootstrapping was used to randomly select 100 spectra in each sampling area to generate 100 datasets of 20 spectra.

2.5.3. Partial least squares regression

PLSR was used to establish a relationship between the LOI550 values and SWIR hyperspectral imaging. This method is based on the extraction of orthogonal predictors (also called latent variables, LV) corresponding to the maximum variability in the spectral bands used as predictors linked to one or several predicted variable(s) (Wold et al., 1984).

Each of the 100 bootstrapped datasets was divided in a calibration set (13 data) and a validation set (the 7 unused data). For each of the 100 bootstrapped datasets, a PLSR model is generated based on the calibration set, and then applied to the validation set in order to assess the performances of the prediction.

The optimal number of latent variables was estimated by the use of the Durbin Watson test (Durbin and Watson, 1950) which is similar to a signal-to-noise ratio and was used to improve the robustness of the model.

Performances of the prediction model were estimated using the coefficient of correlation, r , and the uncertainty of both data sets (calibration and validation sets). They are calculated by equations (3) and (4).

$$r = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3)$$

$$\text{Model uncertainty} = 2 \times \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}} \quad (4)$$

where y_i is a LOI550 reference value, \hat{y}_i is a LOI550 predicted value, \bar{y} is the mean LOI550 reference value, and n is the number of values.

2.5.4. Variable selection

Variable selection algorithms were used to decrease the redundancy between neighboring wavelengths and remove non-informative ones to make the models more robust and easier to interpret chemically. The algorithms that were used can be found in MathWorks and are detailed in (Learidi and Lupiáñez, 1998; Li et al., 2014). The genetic algorithm was the method that gives the optimal model performance, as it aims is to solve an optimization problem by finding the lowest number of wavelengths to have the optimal prediction performance. It is inspired by natural selection, where wavelengths that are highly correlated to the LOI550 are first selected and then the optimal combination is chosen.

The GA-PLSR of the 10 best performing bootstrapping models were used to increase the certainty for the selected wavelengths. Then, the wavelengths are ranked by their number of occurrences. PLSR models are calculated by increasing the number of ranked selected wavelengths. Finally, a model is chosen with the optimal r and model

uncertainty. At last, a geochemical map is estimated by the prediction of all the hyperspectral pixels to observe the distribution down and across the core. Once an optimal model is created, it can be used theoretically without other sampling on other cores sampled in the similar sedimentation environment.

3. Results

3.1. Lithology and OM content

The Lake Bourget sediment core presents three main units, which were described in detail in (Giguët-Covex et al., 2010). The uppermost one, between 0 cm and 18 cm, presents millimeter-thick biochemical varve and corresponds to anoxic conditions at the lake-sediment interface, with LOI550 values greater than 6 wt% (Giguët-Covex et al., 2010; Jenny, 2013). The second unit, between 18 cm and 26 cm, presents disturbed varve and LOI550 values that are stable at 6 wt%. In the lowermost unit, between 26 cm and 54 cm, there are fuzzy laminated structures, and the LOI550 values are quite stable at 5 wt%. Flood-triggered deposits (Jenny et al., 2014) are also present in the two first units, with a major one between 13.5 cm and 14.5 cm. Twenty measurements of the LOI were performed with a range between 4.97 wt% and 8.60 wt% and a mean value of 6.41 wt% along with a standard deviation of 1.37 wt%. LOI550 variations according to the depth can be seen in figure 4.d.

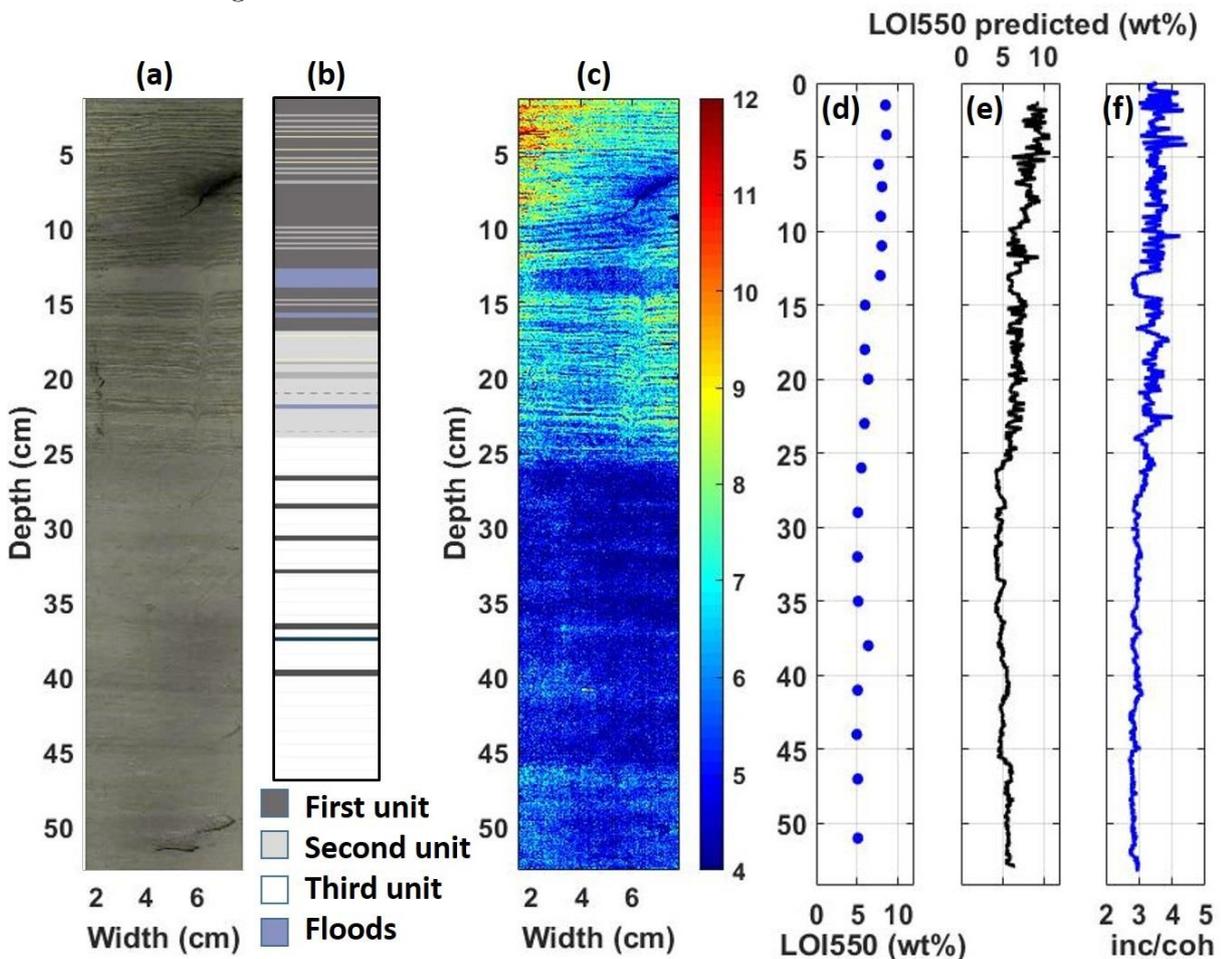


Figure 4: Lake Bourget (a) RGB image, (b) lithology units, (c) LOI550 predicted concentration map with the reduce model, (d) LOI550 reference values, (e) average LOI550 predicted values, and (f) inc/coh ratios.

3.2. Organic matter predictive models

Four PLSR models are presented in table 1 to illustrate the importance of removing water bands and wavelength selection.

Having a high number of LVs can increase the r of calibration but decrease the model robustness because more LVs increase the calibration noise, which is not present in the validation set. This is shown between models with and without water bands (table 1 blue and green). When the number of LVs is higher, the calibration r is too, but the validation r is lower.

Wavelength selection leads to increase the performance of the prediction model. This is visible with a number of latent variables (LV) that is smaller (6-8) and an uncertainty that decreases when less wavelengths are used.

Finally, the best compromise was found with a model with 27 wavelengths, validated with 6 latent variables, and a prediction r of 0.95 ($p < 0.05$). A model uncertainty of 0.77 wt% ($\alpha = 0.05$, $n = 20$) for LOI550 prediction by hyperspectral imaging was found, whereas it is 0.14 wt% ($\alpha = 0.05$, $n = 20$) for the LOI550 analysis. This is in agreement with PLSR models developed with spectroscopic devices in the literature (Clairotte et al., 2016; Leach et al., 2008; Li et al., 2015). This uncertainty is quite important because of the low number of LOI550 values and their low dispersion. We expect that a greater and spreader set of LOI values should lead to a more accurate PLSR model.

Table 1: Performance of complete and reduced PLSR models for the LOI550 prediction without removing water bands in blue and after removing them in green.

Wavelengths	Latent Variable	r calibration	r prediction	Model uncertainty (wt%)
121	8	0.99	0.80	1.40
21	7	0.96	0.88	1.20
75	7	0.99	0.92	1.02
27	6	0.98	0.95	0.77

3.3. Wavelength correlation with organic matter

Variable selection algorithms are dependent on the spectral preprocessing (Peng et al., 2014). First models with O-H bands show that they were selected as relevant, whereas some organic bands were missing. These models, however, were less robust in terms of prediction. These results could depend on O-H water bands that disturb the model. Removing O-H wavelengths can increase the performance and robustness if other bands can add relevant information to replace the missing information of organic matter O-H bands.

The genetic algorithm allows the number of wavelengths to be reduced to 27 (figure 3). They can be divided into three main classes, organic, carbonate and clay bands according to (Peng et al., 2014; Viscarra Rossel and Behrens, 2010). Organic bands correspond to C-H bonds (1205, 1217, 1622, 1735, 1746, 1757, 2250, 2261, 2272, 2306, 2317, and 2328 nm), C-O bonds (2127 and 2138 nm), and N-H bonds (2093, 2105, and

2116 nm). Bands associated with C=O bonds (1487 and 1510 nm) corresponds to organic or carbonate bands, and these may discriminate the lamina type (dark or light). For clay bands, 5 bands were selected (2149, 2160, 2183, 2228, and 2239 nm). The three other bands are not directly associated with chemical bonds (1273, 1555, and 1566 nm). Some bands are spectrally close (for example, 1205-1217 nm and 1746-1757 nm), which could reveal some band shape changes due to organic mineral interaction.

3.4. Range, prediction and confidence intervals

The PLSR model was made with LOI550 measurements that have a range of 4.97 wt% to 8.60 wt%. We assume that LOI550 model intercept at the origin (there is no organic matter spectroscopic signal when there is no organic matter in the sediment). Then we consider that we can predict LOI550 in the range 0 wt% to 8.60 wt%. 93 % of the data are included in it and have a minimal prediction error of 2.25 wt% ($\alpha = 0.05$) in the center of the calibration (6.26 wt%).

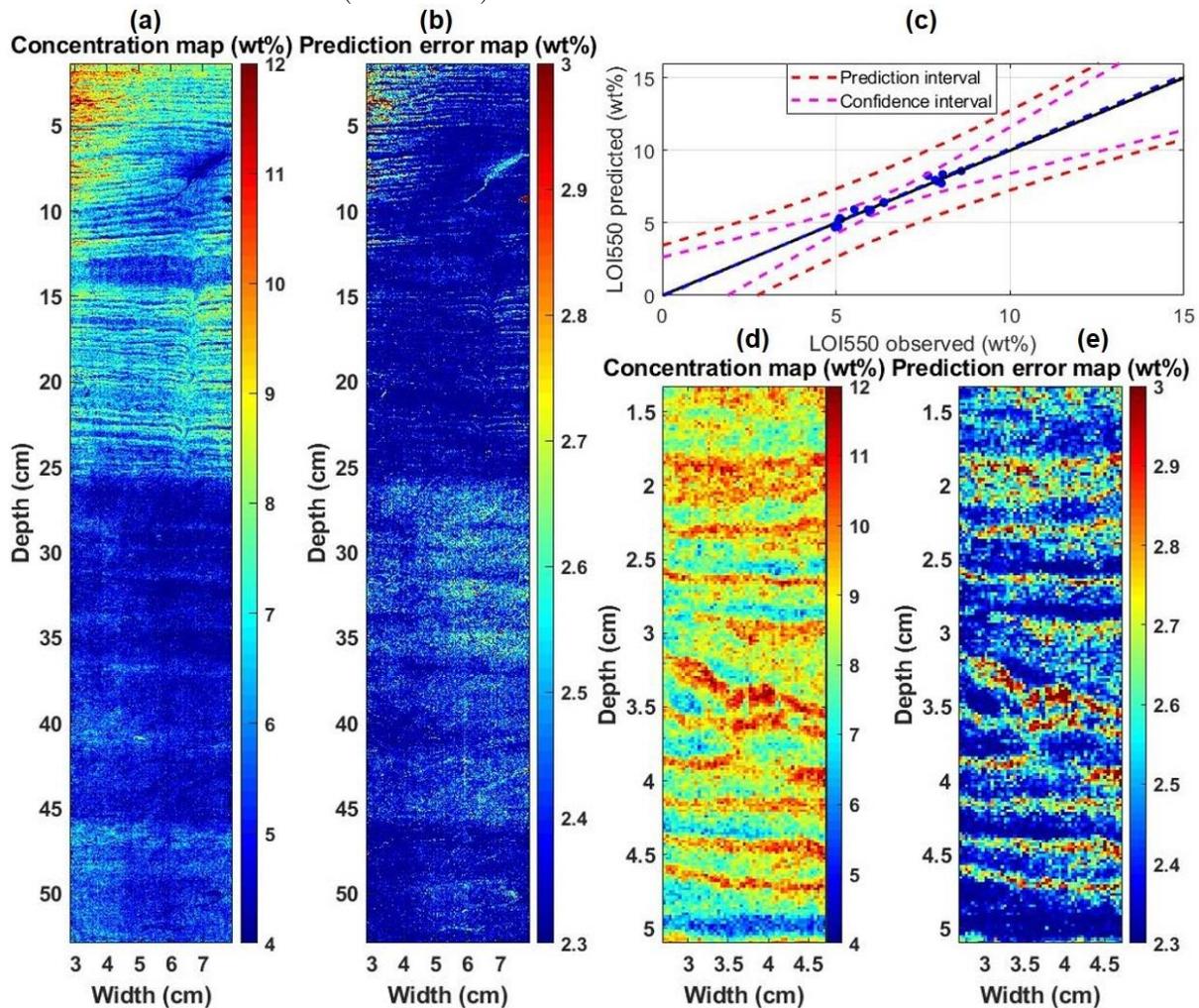


Figure 5: (a) Concentration map of the core with its prediction error map (b). (c) Prediction and confidence intervals of the LOI550 model. (d) Concentration map of a varved area and his prediction error map (e).

Prediction and confidence intervals were calculated thanks to the complete dataset (figure 5.c). The prediction error map (figure 5.b) shows side effects (right and left), which can be due to surface variation or illumination. This observation is also visible in the

concentration map. Obviously, areas with high surface variations (gap, fissures) will not be used in the LOI550 profile, and their prediction errors are more important than other predicted values at the same depth. Figure 5.e shows that the prediction error is high in the middle of light lamina (near 2.90 wt%), whereas it is low for the dark lamina (near 2.30 wt%). Predictions of these light lamina concentrations have a range between 9-12 wt% (figure 5.d). These predictions, out of the calibration range, must be interpreted cautiously.

3.5. Prediction distribution

The LOI550 concentration map in figure 4.c shows the three lithology units. A horizontal merging is used to estimate a time series of LOI550 (figure 4.e) prediction to be compared with LOI550 reference values (figure 4.d). The first unit presents LOI550 prediction values that oscillate with a maximum near 11 wt% and a minimum of 4 wt%, and the global trend is a decrease from 11 wt% to 6 wt%, which is similar to the reference values. The second unit is characterized by a lower variation between 5-7 wt% and a steady trend at approximately 6 wt%. The last unit is quite homogeneous at 5 wt%. Floods can be characterized with a rapid decrease in the prediction value, for example, the one between 13.5 and 14.5 cm.

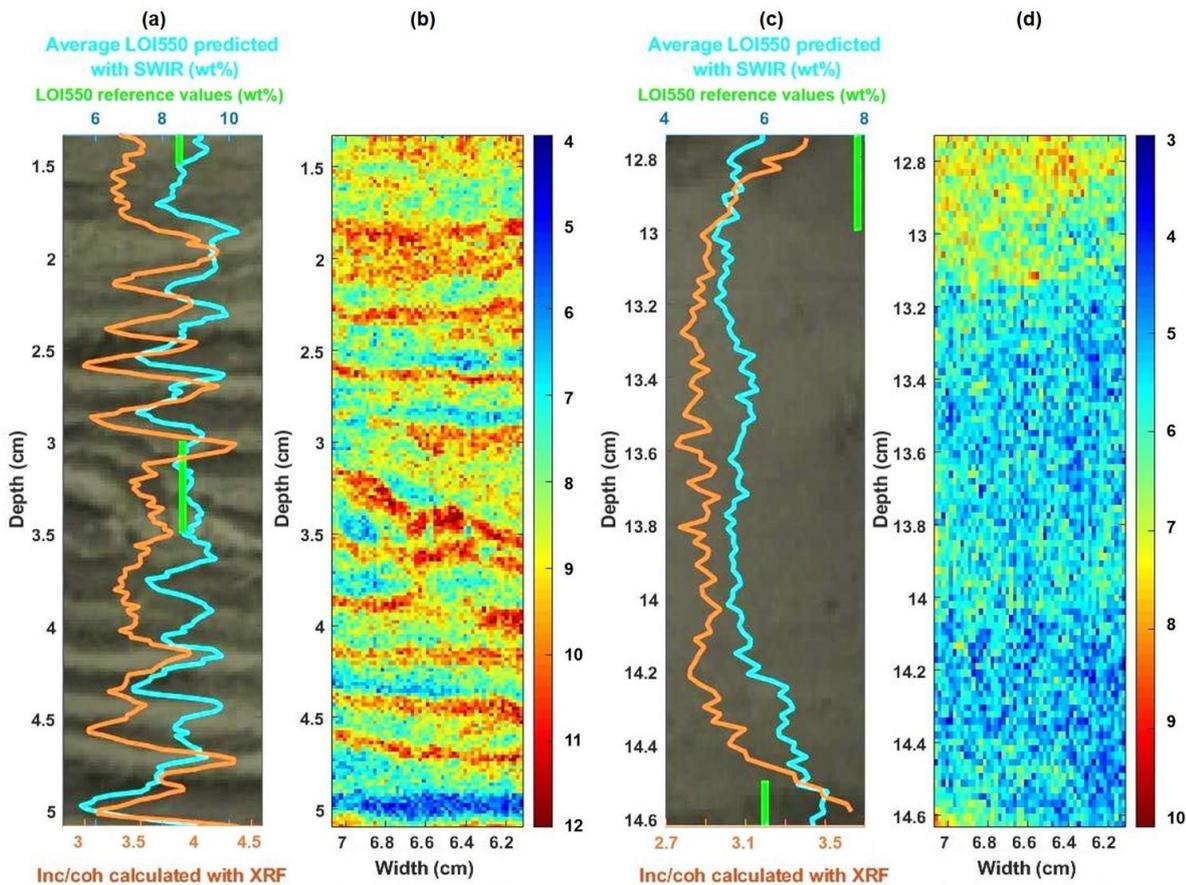


Figure 6: Zoom in for two areas on unit 1: varve (a-b) and flood (c-d). RGB image (a-c) with LOI550 reference values (green line) predicted by SWIR data (blue curve) and the inc/coh ratio (orange curve) as well as LOI550 concentration maps (b-d)

Focusing on unit 1, the variations of the average LOI550 predicted values (figure 6.a, blue curve) appear to closely match the varve laminations, with high values for light lamina and low values for black lamina. This is also in agreement with the LOI550 reference values (green line) by averaging a 5 mm thickness. In the LOI550 concentration map (figure 6.b), the sequence of varve is observable along the core with 200 μm resolution. Even if values are out of the range, a qualitative study can be made. Variations inside light lamina show that the middle has a higher concentration than the edges, and for dark lamina, an opposite trend exists, with the lowest values in the middle. There can be mixing between lamina inside the sediment or inside the spectra. Additionally, it is heterogeneous across lamina with LOI550 variations. In a flood, the average LOI550 predicted values (figure 6.c) present an upward decreasing trend from 5 wt% to 6.5 wt%. The LOI550 concentration map (figure 6.d) shows that values vary a lot, approximately 3 wt% across the core.

4. Discussion

4.1. Comparison of LOI550 with the inc/coh ratio by XRF

In order to discuss this prediction, we compare this prediction with another proxy of organic matter which can be measured at a similar spatial resolution. The incoherent to coherent ratio was calculated with an XRF core scanner on this core. This ratio is used as an indirect qualitative proxy of the organic matter, whereas the LOI550 is quantitative. To ensure the pertinency of the comparison of PLSR model and inc/coh proxy, we compare first with LOI550 with this proxy for this sample.

This ratio has been subsampled, the 25 pixels corresponding to 5 mm of LOI550 were averaged. LOI550 measurements and the inc/coh are correlated ($r = 0.81$; $p < 0.05$) and can thus be compared. Figure 4.d,e show that differences are mainly in unit 2 with inc/coh values similar to unit 1, whereas LOI550 measurements between these two units are decreasing. This could be due either to the surface state (oxidation) or to the difference between a surface (inc/coh) and a volume (LOI550) measurement.

The hyperspectral quantitative prediction can also be compared with the inc/coh ratio when resampled at the same resolution. Figure 4.f shows the ratio variations along the core, and the three units are characterized with high, medium, and low oscillations in the hyperspectral prediction as well as variation in the flood deposit. The correlation coefficient between the LOI550 prediction and inc/coh is 0.65 ($p < 0.05$). With the high-resolution image on varved lamina (figure 6.a, c), it is easier to show and compare both variations. The LOI550 quantitative prediction and inc/coh qualitative ratio are in agreement for varve lamina and flood deposits. When the varve are not parallel or mixed, XRF cannot detect them, whereas hyperspectral imaging can, and that can be seen at a 4 cm depth. Between depths of 3.2 cm and 3.6 cm, values of inc/coh and predicted LOI550 are steady because of the presence of irregularly shaped varve. For hyperspectral imaging, it is possible to see them on the concentration map, and with image processing, it will be possible to adjust the varve sequence. For the flood (figure 6.c), the inc/coh ratio

increases faster down the core than the hyperspectral prediction, which may indicate that one of the two methods is biased by grain size variations.

4.2. Micrometric surface prediction and volume analysis

The analysis of the LOI550 *vs* inc/coh leads to suspect a difference between surface *vs* volume measurement. This volume-surface correlation is noted $r_{V/S}$. LOI550 measurements and the average predicted values are correlated with a $r_{V/S}$ of 0.73 ($p < 0.05$) and a root mean square error (RMSE) of 1.72 wt%.

Some points between depths of 6 cm and 12 cm are affected by a surface variations such as the gap on the top right of the core (figure 4.a, c), and without this area, the correlation $r_{V/S}$ increased to 0.81 ($p < 0.05$). This induces a loss of spectral intensity and thus weaker LOI550 prediction values. Cores need to have as large as possible of a plane surface to have a correct prediction.

The $r_{V/S}$ is weaker than that of the model due mainly to chemical properties. The surface state can be the main explanation, as the oxidation of some chemical compounds can induce intensity variations on the selected bands in some pixels. That is why the core needs to be cleaned before beginning, and the acquisition needs to be fast for no reappearance of surface states between the first and the last spectra. The other differences can mean that the surface and volume sediment analysis don't evaluate the same property for the organic matter content.

4.3. Proposed methodology

The proposed methodology seems to be relevant with the validation of PLSR models by XRF comparison and by the characteristics of the chemical bonds selected with the variable selection algorithm. However, based on the concentration map and selected spectral bands, we can wonder if a unique PLSR model is the optimal method in a sediment characterized by three different mineralogical patterns: the two types of lamina (light and dark) and the homogeneous part. If PLSR models were created for each of these three patterns independently, prediction could be more accurate with different selected wavelengths. With our LOI measurements, it is not possible to estimate a model by the type of lamina because the sampling resolution of an operator does not allow the ability to distinguish between them. Improvement of such a model could occur by the way of a higher sampling resolution that is closer to the lithology of the sediment core.

4.4. Outlook for PLSR application on sediment cores and other environmental matrices

Quantitatively predicting proxies at high resolution along and across the core in less than an hour, from the acquisition to the prediction, is very effective and is not done by any other methods at this time. This is an important advance for the study of sediment cores to infer the paleo-environment and paleo-climate. The high spatial resolution allows us to look inside the laminae, and the spectral dimensions allow chemical variations to be studied with further work to identify the patterns of organic matter. The high-resolution approach is relevant in some type of sedimentary environments where there are successive deposits as the lamina or the varve and even in some homogenous sediment. In the case of

a very homogeneous sediment such as those subject to bioturbation or redistribution, the high resolution loses some interests, but the detection of specific compounds may still keep an interest for a global characterization (without chronology).

The use of other proxies may help to improve the quality of the predictions. With this application on the Lake Bourget core, grain size effects seem to skew the LOI550 modeling. Predicting several proxies at the same time can make the model more robust. For example, if the grain size has a real effect on the LOI550 prediction, creating a unique model could increase the robustness. Furthermore, the spatial and the spectral dimensions of the hyperspectral images may be combined in the data processing to improve our understanding of the sediment records. For instance, thanks to lamina, chemical, physical and biological variations could be estimated at the seasonal scale. In the Lake Bourget core, organic carbon fluxes could be estimated for each type of laminae (dark or light) and compared in eutrophic and non-eutrophic parts of the core (Jenny, 2013).

Creating a universal model that can be applied to several sedimentation sites (lake, marine, etc.) and types (eutrophic, detrital, etc.) needs standardized parameters. Obviously, the hyperspectral acquisition is a critical step that need to follow a strict protocol (Butz et al., 2015). Even if a model seems to be applied to a core which was not used on the model generation, some few chemical verifications may be achieved in order to avoid unexpected bias. As a first step, the model could be theoretically transferred on samples cored in similar sedimentary environments to keep the same type of matrix effects.

Obviously, with all these considerations, this methodology can be transferred to other natural heterogeneous samples, for example speleothems, soils, ice cores, and trees, to infer the paleo-environment, paleo-climate, soil health, and pollution.

5. Conclusion

Hyperspectral imaging is a high resolution (200 μm), nondestructive and fast analysis method (15 minutes). Coupling hyperspectral imaging and partial least squares regression shows great possibilities for the creation of quantitative predictive models and the prediction for any kind of natural sample at high resolution. In this study, a methodology was proposed to estimate a robust PLSR model using the heterogeneity of the sample without the constitution of a specific calibrated concentration range.

It was applied to LOI550 prediction and it was validated with LOI550 measurements with selected near-infrared wavelengths that correspond to relevant chemical bonds. It was also successfully compared with the inc/coh XRF qualitative ratio used as a proxy of the organic matter. Therefore, this methodology seems to be relevant and allows for the organic matter content to be quantitatively inferred at high resolution along and across the core. This proxy for laminated or varve sediment could be precise at the seasonal scale with the 200 μm pixel size.

This methodology must be tested on other cores or heterogeneous samples to verify its relevance. The “universality” of the model generated from this dataset, should be applied on different lake systems in order to test the ability to predict organic matter in

other environments and to set the limitations of this. It may be used on other proxies that are characteristic in the basin catchment. Predicting several proxies at the same time may also be studied to create a robust model that is not disturbed by some chemical or physical variabilities. The proposed methodology applied to sediment cores has great possibilities to more precisely infer the paleo-climate and paleo-environment that are recorded in the core inside each sediment structure.

Acknowledgements

The core used in this study is stored in the EDYTEM laboratory that also performed the LOI analysis in 2009 during the IPER-RETRO program (ANR-08-VUL 005).

Hyperspectral imaging was processed at the University of Normandie-Rouen and was funded by the Region Normandie, which supports the scientific consortium SCALE UMR CNRS 3730.

References

- Arnaud, F., Revel, M., Chapron, E., Desmet, M., Tribovillard, N., 2005. 7200 years of Rhône river flooding activity in Lake Le Bourget, France: a high-resolution sediment record of NW Alps hydrology. *Holocene* 15, 420–428.
<https://doi.org/10.1191/0959683605hl801rp>
- Arnaud, F., Révillon, S., Debret, M., Revel, M., Chapron, E., Jacob, J., Giguët-Covex, C., Poulénard, J., Magny, M., 2012. Lake Bourget regional erosion patterns reconstruction reveals Holocene NW European Alps soil evolution and paleohydrology. *Quat. Sci. Rev.* 51, 81–92.
<https://doi.org/10.1016/j.quascirev.2012.07.025>
- Bajard, M., Sabatier, P., David, F., Develle, A.-L., Reyss, J.-L., Fanget, B., Malet, E., Arnaud, D., Augustin, L., Crouzet, C., Poulénard, J., Arnaud, F., 2016. Erosion record in Lake La Thuile sediments (Prealps, France): Evidence of montane landscape dynamics throughout the Holocene. *The Holocene* 26, 350–364.
<https://doi.org/10.1177/0959683615609750>
- Basma, A.A., Al-Homoud, A.S., Al-Tabari, E.Y., 1994. Effects of methods of drying on the engineering behavior of clays. *Appl. Clay Sci.* 9, 151–164.
[https://doi.org/10.1016/0169-1317\(94\)90017-5](https://doi.org/10.1016/0169-1317(94)90017-5)
- Butz, C., Grosjean, M., Fischer, D., Wunderle, S., Tylmann, W., Rein, B., 2015. Hyperspectral imaging spectroscopy: a promising method for the biogeochemical analysis of lake sediments. *J. Appl. Remote Sens.* 9, 1–20.
<https://doi.org/10.1117/1.JRS.9.096031>
- Chawchai, S., Kylander, M.E., Chabangborn, A., Löwemark, L., Wohlfarth, B., 2016. Testing commonly used X-ray fluorescence core scanning-based proxies for organic-rich lake sediments and peat. *Boreas* 45, 180–189. <https://doi.org/10.1111/bor.12145>
- Clairotte, M., Grinand, C., Kouakoua, E., Thébault, A., Saby, N.P.A., Bernoux, M., Barthès, B.G., 2016. National calibration of soil organic carbon concentration using diffuse infrared reflectance spectroscopy. *Geoderma* 276, 41–52.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2016.04.021>
- Croudace, I.W., Rothwell, R.G., 2015. Micro-XRF studies of sediment cores: applications of a non-destructive tool for the environmental sciences. <https://doi.org/10.1007/978-94-017-9849-5>
- Debret, M., Chapron, E., Desmet, M., Rolland-Revel, M., Magand, O., Trentesaux, A., Bout-Roumazeille, V., Nomade, J., Arnaud, F., 2010. North western Alps Holocene paleohydrology recorded by flooding activity in Lake Le Bourget, France. *Quat. Sci. Rev.* 29, 2185–2200. <https://doi.org/10.1016/J.QUASCIREV.2010.05.016>
- Dhawale, N.M., Adamchuk, V., Prasher, S.O., Viscarra Rossel, R.A., Ismail, A.A., Kaur, J., 2015. Proximal soil sensing of soil texture and organic matter with a prototype portable mid-infrared spectrometer. *Eur. J. Soil Sci.* 66, 661–669.
<https://doi.org/10.1111/ejss.12265>
- Durbin, J., Watson, G.S., 1950. Testing for Serial Correlation in Least Squares

- Regression: I. *Biometrika* 37, 409–428. <https://doi.org/10.2307/2332391>
- Giguet-Covex, C., Arnaud, F., Poulenard, J., Enters, D., Reyss, J.-L., Millet, L., Lazzaroto, J., Vidal, O., 2010. Sedimentological and geochemical records of past trophic state and hypolimnetic anoxia in large, hard-water Lake Bourget, French Alps. *J. Paleolimnol.* 43, 171–190. <https://doi.org/10.1007/s10933-009-9324-9>
- Gomez, C., Drost, A.P.A., Roger, J.M., 2015. Analysis of the uncertainties affecting predictions of clay contents from VNIR/SWIR hyperspectral data. *Remote Sens. Environ.* 156, 58–70. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2014.09.032>
- Heiri, O., Lotter, A.F., Lemcke, G., 2001. Loss on ignition as a method for estimating organic and carbonate content in sediments: reproducibility and comparability of results. *J. Paleolimnol.* 25, 101–110. <https://doi.org/10.1023/A:1008119611481>
- Jenny, J.-P., 2013. Réponses des grands lacs périalpins aux pressions anthropiques et climatiques récentes : reconstitutions spatio-temporelles à partir d'archives sédimentaires. HAL. Université Grenoble Alpes.
- Jenny, J.-P., Wilhelm, B., Arnaud, F., Sabatier, P., Giguet Covex, C., Mélo, A., Fanget, B., Malet, E., Ployon, E., Perga, M.E., 2014. A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps). *J. Paleolimnol.* 51, 469–483. <https://doi.org/10.1007/s10933-014-9768-4>
- Kuang, B., Tekin, Y., Mouazen, A.M., 2015. Comparison between artificial neural network and partial least squares for on-line visible and near infrared spectroscopy measurement of soil organic carbon, pH and clay content. *Soil Tillage Res.* 146, 243–252. <https://doi.org/10.1016/j.still.2014.11.002>
- Leach, C.J., Wagner, T., Jones, M., Juggins, S., Stevenson, A.C., 2008. Rapid determination of total organic carbon concentration in marine sediments using Fourier transform near-infrared spectroscopy (FT-NIRS). *Org. Geochem.* 39, 910–914. <https://doi.org/10.1016/j.orggeochem.2008.04.012>
- Leardi, R., Lupiáñez, A., 1998. Genetic algorithms applied to feature selection in PLS regression: how and when to use them. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 41, 195–207. [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(98\)00051-3](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(98)00051-3)
- Li, H., Xu, Q., Liang, Y., 2014. libPLS: An Integrated Library for Partial Least Squares Regression and Discriminant Analysis. *PeerJ Prepr.* <https://doi.org/10.7287/peerj.preprints.190v1>
- Li, S., Shi, Z., Chen, S., Ji, W., Zhou, L., Yu, W., Webster, R., 2015. In Situ Measurements of Organic Carbon in Soil Profiles Using vis-NIR Spectroscopy on the Qinghai-Tibet Plateau. *Environ. Sci. Technol.* 49, 4980–4987. <https://doi.org/10.1021/es504272x>
- Lintern, A., Leahy, P.J., Zawadzki, A., Gadd, P., Heijnis, H., Jacobsen, G., Connor, S., Deletic, A., McCarthy, D.T., 2016. Sediment cores as archives of historical changes in floodplain lake hydrology. *Sci. Total Environ.* 544, 1008–1019. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.11.153>

- Mark, H.L., Tunnell, D., 1985. Qualitative near-infrared reflectance analysis using Mahalanobis distances. *Anal. Chem.* 57, 1449–1456.
<https://doi.org/10.1021/ac00284a061>
- Nawar, S., Mouazen, A.M., 2017. Predictive performance of mobile vis-near infrared spectroscopy for key soil properties at different geographical scales by using spiking and data mining techniques. *CATENA* 151, 118–129.
<https://doi.org/10.1016/j.catena.2016.12.014>
- Peng, X., Shi, T., Song, A., Chen, Y., Gao, W., 2014. Estimating soil organic carbon using VIS/NIR spectroscopy with SVMR and SPA methods. *Remote Sens.* 6, 2699–2717. <https://doi.org/10.3390/rs6042699>
- Perga, M.-E., Frossard, V., Jenny, J.-P., Alric, B., Arnaud, F., Berthon, V., Black, J.L., Domaizon, I., Giguët-Covex, C., Kirkham, A., Magny, M., Manca, M., Marchetto, A., Millet, L., Paillès, C., Pignol, C., Poulenard, J., Reyss, J.-L., Rimet, F., Sabatier, P., Savichtcheva, O., Sylvestre, F., Verneaux, V., 2015. High-resolution paleolimnology opens new management perspectives for lakes adaptation to climate warming. *Front. Ecol. Evol.* 3, 72. <https://doi.org/10.3389/fevo.2015.00072>
- Rosén, P., Vogel, H., Cunningham, L., Hahn, A., Hausmann, S., Pienitz, R., Zolitschka, B., Wagner, B., Persson, P., 2011. Universally Applicable Model for the Quantitative Determination of Lake Sediment Composition Using Fourier Transform Infrared Spectroscopy. *Environ. Sci. Technol.* 45, 8858–8865.
- Tetko, I. V., Livingstone, D.J., Luik, A.I., 1995. Neural network studies. 1. Comparison of overfitting and overtraining. *J. Chem. Inf. Model.* 35, 826–833.
<https://doi.org/10.1021/ci00027a006>
- Van Exem, A., Debret, M., Copard, Y., Vannière, B., Sabatier, P., Marcotte, S., Laignel, B., Reyss, J.-L., Desmet, M., 2018. Hyperspectral core logging for fire reconstruction studies. *J. Paleolimnol.* 59, 297–308. <https://doi.org/10.1007/s10933-017-0009-5>
- Vidal, M., Amigo, J.M., 2012. Pre-processing of hyperspectral images. Essential steps before image analysis. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 117, 138–148.
<https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2012.05.009>
- Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T., 2010. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma* 158, 46–54.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2009.12.025>
- Vohland, M., Ludwig, M., Thiele-Bruhn, S., Ludwig, B., 2014. Determination of soil properties with visible to near- and mid-infrared spectroscopy: Effects of spectral variable selection. *Geoderma* 223, 88–96.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2014.01.013>
- Wijewardane, N.K., Ge, Y., Wills, S., Loecke, T., 2016. Prediction of Soil Carbon in the Conterminous United States: Visible and Near Infrared Reflectance Spectroscopy Analysis of the Rapid Carbon Assessment Project. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 80, 973–982.
<https://doi.org/10.2136/sssaj2016.02.0052>
- Wold, S., Ruhe, A., Wold, H., Dunn, III, W.J., 1984. The Collinearity Problem in Linear

Regression. The Partial Least Squares (PLS) Approach to Generalized Inverses.

SIAM J. Sci. Stat. Comput. 5, 735–743. <https://doi.org/10.1137/0905052>

Zornoza, R., Guerrero, C., Mataix-Solera, J., Scow, K.M., Arcenegui, V., Mataix-Beneyto, J., 2008. Near infrared spectroscopy for determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. *Soil Biol. Biochem.* 40, 1923–1930. <https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2008.04.003>

2.1 Les biais et incertitudes de l'analyse hyperspectrale

On vient de voir, à travers cet article, que des modèles de prédictions entre des données hyperspectrales et destructrices usuelles peuvent être créés. Mais leurs utilisations requièrent que la donnée contenue dans chaque pixel de l'IHS soit fidèle à celles utilisées lors de la calibration des modèles. Comme il s'agit d'échantillons naturels, les spectres sont impactés par les changements physico-chimiques, dont notamment deux qui sont bien connus : **l'humidité et la taille des particules** (figure 2.3) [3, 4, 5, 6, 7, 8]. Ceux-ci sont complexes à corriger dans le cas d'un échantillon inhomogène du fait de leurs variabilités dans chaque pixel et de leur effet combiné.

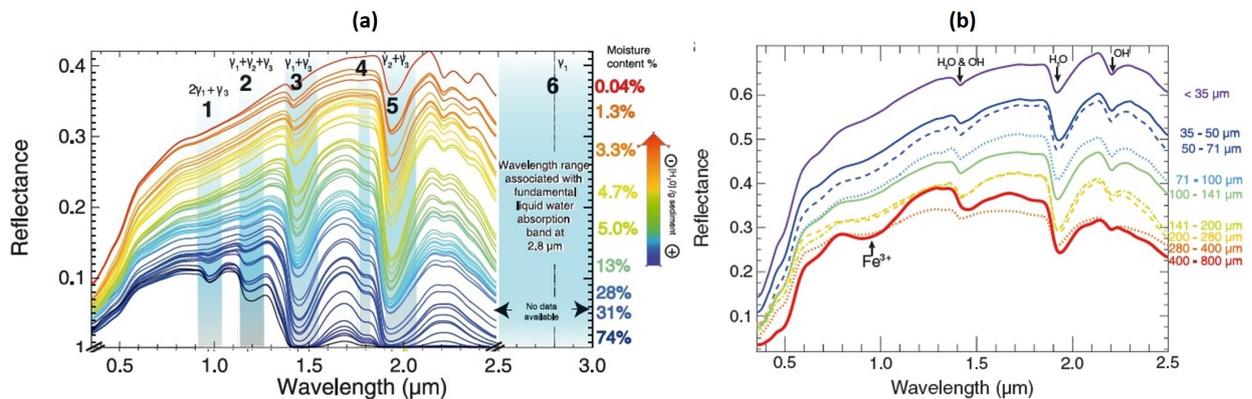


FIGURE 2.3 : Effet de (a) l'humidité et de (b) la taille des particules sur les spectres Vis-PIR de sédiment (images de [8])

L'humidité peut potentiellement être estimée grâce à ces zones d'absorptions caractéristiques [9], c'est pourquoi nous les avons retirées pour la modélisation de la MO. Mais pour d'autres variables à prédire ces zones spectrales peuvent être importantes pour la modélisation, car elles portent des informations sur les liaisons hydroxyles (O-H) caractéristiques de l'eau, mais aussi de certains composés organiques et minéraux. Elles doivent donc être gardées, tout en ayant ce potentiel biais induit par l'eau.

Le second est un effet physique avec la taille des particules, il s'agit d'un effet global et non localisé spectralement comme il n'est pas directement lié à la chimie de l'échantillon. Mais dans certains cas, il peut y avoir un lien entre la taille des particules et leurs compositions, il faut donc que le capteur soit sensible à ce type d'informations chimiques.

La figure 2.3 montre que ces deux effets tendent à faire diminuer l'intensité de réflectance avec l'augmentation de l'humidité et de la taille des particules, d'autant plus que ces effets peuvent être combinés. Mais à l'heure actuelle, il n'existe pas de solution universelle pour la correction de ces deux effets. Il faut s'y intéresser davantage, soit pour corriger le signal et avoir une prédiction pertinente, soit pour estimer une incertitude plus pertinente.

Les variabilités de niveau à la surface de l'échantillon peuvent aussi influencer sur le signal spectroscopique. En effet, la distance entre l'échantillon et le détecteur, appelée distance focale, ainsi que celle entre l'échantillon et les illuminants impactent l'intensité de la réflectance. De plus, la donnée spectrale ne sera viable qu'entre une certaine gamme de distances, appelée profondeur de champ, en dehors de celle-ci un effet de flou ou moyenne impactera le signal. Ces variations de surface peuvent faire apparaître des zones d'ombre, des angles qui vont causer des biais lors de la détection par le capteur qui ne seront pas présent

avec une surface plane. Pour corriger ces défauts, une méthode a été développée par Jakob et al. [10] pour le cas des IHS embarquées sur des drones. Pour cela, l'image hyperspectrale est recalée avec une image RGB orthorectifiée pour corriger les déformations de surface. Puis, une correction radiométrique pour l'intensité de réflectance est réalisée à partir d'un modèle numérique de surface. On pourrait donc s'appuyer sur ces travaux pour le cas de nos données, ainsi que sur notre approche pour la création de l'image RGB orthorectifiée (annexe B).

Les gammes de modélisation sont aussi à prendre en compte pour vérifier la validité des prédictions. En effet, le modèle PLSR a été calibré avec des données spécifiques (spectres et analyses destructrices), il a donc appris les liens entre ces variabilités (gammes de réflectance et de concentration) et ne peut donc être utilisé que pour celles-ci, pour avoir des estimations fiables (figure 2.4.a.1). En dehors de ces gammes, le modèle peut ne pas être apte à prédire, car la relation liant ces données peut ne pas suivre le modèle linéaire estimé par la PLSR. Ainsi avec des analyses destructrices effectuées avant l'IHS, on parle de données héritées, soit on estime une incertitude en dehors de la gamme en faisant l'hypothèse que le modèle PLSR est viable en dehors de la gamme, soit on effectue à posteriori des prélèvements pour valider ces valeurs (figure 2.4.a.2). Dans l'article précédent, nous avons utilisé la première hypothèse, car de nouveaux prélèvements étaient impossibles comme l'échantillon de travail (demi-cylindre) avait été détruit.

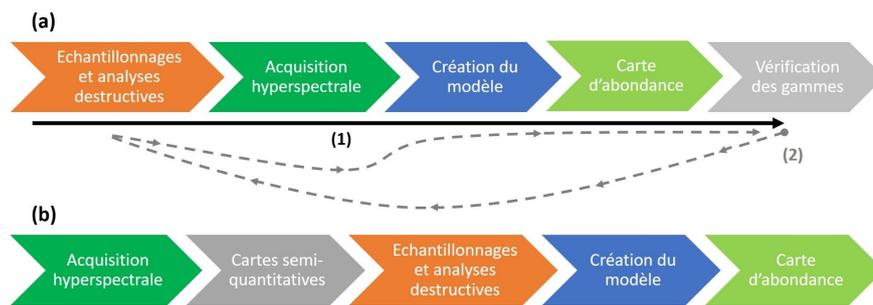


FIGURE 2.4 : Enchaînements des étapes pour prédire l'abondance ou la classe d'un pixel avec des données destructrices (a) héritées ou (b) définies avec l'IHS

Un autre moyen serait d'effectuer l'IHS avant les analyses destructrices usuelles (figure 2.4.b), pour sélectionner avec des cartes semi-quantitatives liées à certaines propriétés d'intérêt où prélever les échantillons et ainsi obtenir la gamme de concentration la plus étendue (figure 2.5). L'analyse en composantes principales peut aussi permettre de mettre en avant les principales variations spectrales au sein des images hyperspectrales et ainsi faire ressortir des zones spatiales importantes à échantillonner.

Les biais précédents sont liés à l'échantillon et à son échantillonnage. Le capteur lui aussi peut avoir un biais, dont notamment des **effets de bord** qui peuvent être induits par des décalages dans les longueurs d'onde dus à la lentille [11]. Ceux-ci peuvent être corrigés en déterminant ces décalages à l'aide d'un échantillon homogène.

2.2 Les différences d'échelle spatiale

Deux types de données sont mises en jeu dans nos études, les données hyperspectrales surfaciques et micrométriques, et les données destructrices volumiques et milli- ou centi-métriques.

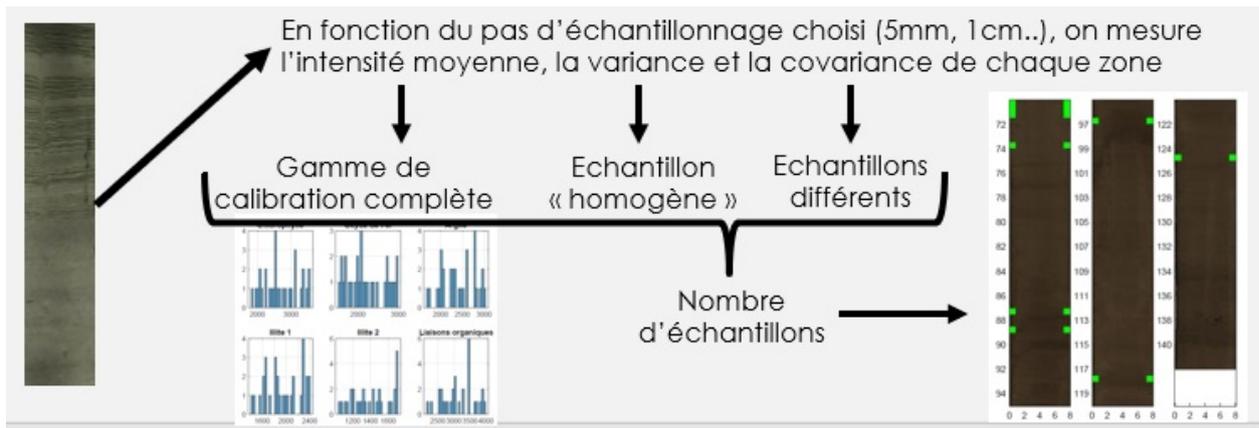


FIGURE 2.5 : Proposition d'une méthode pour le choix des zones d'échantillonnage avant l'utilisation des analyses destructrices usuelles

On voit donc qu'on a deux grandes différences entre elles : surface-volume, micro-milli-centimétrique.

Si l'on s'inspire de travaux réalisés en télédétection, Rodenas estime trois sources principales d'incertitudes (figure 2.6) [12]. (1) La première est liée aux échelles ou résolutions des deux types de données. Dans notre cas, la résolution du pixel hyperspectral est impactée par la planéité de l'échantillon, et celle de l'analyse destructrice de la zone prélevée. Un modèle numérique de surface pourrait estimer celle de la résolution hyperspectrale, pour l'autre, il faudrait estimer avec précision l'emplacement du prélèvement. (2) La seconde est liée à l'écart-géophysique, c'est à dire que l'échantillonnage est local alors que les données de télédétection sont globales. Ce qui est l'inverse dans notre cas, un échantillonnage global et des données hyperspectrales locales. (3) La troisième est liée à l'échantillonnage, c'est à dire à la capacité de l'outil analytique à représenter de manière fiable les variables d'intérêts et à la mettre en correspondance avec l'outil spectral. Ainsi l'auteur propose cinq méthodes pour corriger les effets liés à ces problèmes d'incertitudes : la modélisation statistique, la modélisation empirique, les simulations de Monte Carlo, la mise en correspondance des fonctions cumulées de densité et le bootstrapping. Nous avons proposé précédemment d'utiliser le bootstrapping et la modélisation statistique et qui semblent être viable avec des performances de modélisations correctes et une corrélation surface-volume du même ordre de grandeur.

2.3 La transférabilité entre échantillons

Grâce à l'ensemble des données disponibles (figure 1.12), il a été possible d'estimer des modèles de prédictions que l'on a appliqués sur d'autres échantillons pour déterminer leurs capacités de transfert. Un récapitulatif de certains des modèles estimés pendant la thèse est présenté dans la figure 2.7. On peut voir que la matière organique, à travers la LOI550 et le RockEval (carbone organique total), ainsi que les paramètres texturaux peuvent être prédits pour plusieurs échantillons sédimentaires à partir de l'imagerie hyperspectrale ($R^2 > 0.75$).

Les longueurs d'onde sélectionnées par les trois modèles de LOI550 sont concordantes comme le montre la figure 2.8, avec des zones spectrales caractéristiques de la matière organique (1200 nm, 1500-1700 nm) et minérale (2150-2400 nm). D'autres sont spécifiques de

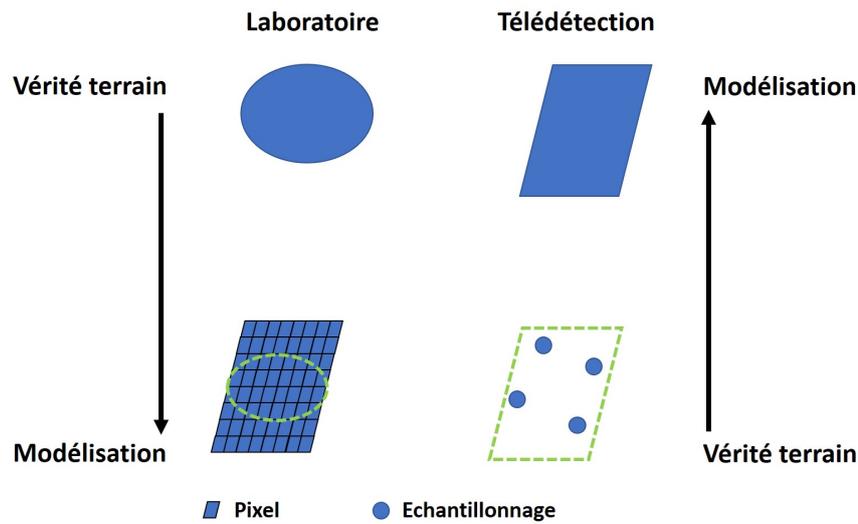


FIGURE 2.6 : Changement d'échelle en laboratoire et en télédétection entre un pixel (carré) et un échantillonnage (cercle)

Analyse	Proxy	Lac	n	Données de référence				Données IHS	Sous échantillonnage	Modèle				
				range	moy	std	unc			R ² cal	R ² val	vl	wl	unc
LOI	LOI550 (wt%)	LDB	20	4.96-8.59	6.41	1.37	0.14	SWIR sans les bandes de l'eau : 74 bandes	Bootstrap	0.97	0.91	6	27	0.76
		LDA	73	5.25-9.18	7.36	1.01				0.88	0.95	3	16	0.46
		LEM	59	1.22-8.44	4.54	1.45				0.50	0.84	4	11	0.98
RockEval	PC (%)	LDB	68	0.17-0.94	0.49	0.25	SWIR complet : 121 bandes	Médiane	0.83	0.83	5	17	0.18	
	RC (%)			0.41-2.03	1.08	0.51			0.88	0.91	7	25	0.27	
	TOC (%)			0.61-2.97	1.57	0.77			0.85	0.86	7	14	0.58	
	OI [mg CO ₂ /g TOC]			174.00-526-21	304.83	120.24			0.68	0.87	4	19	101	
	HI [mg HC/g TOC]			148.11-363.35	268.40	65.05			0.76	0.85	4	24	52.54	
	HI [mg HC/g TOC]			229.83-422.00	345.94	56.20			0.52	0.83	4	28	41	
	S1 [mg HC/g]			0.01-2.55	0.46	0.63			0.75	0.82	6	23	0.50	
	S2a [mg HC/g]			0-9.34	4.19	3.37			0.78	0.89	4	12	2.18	
	S3			2.58-6.46	3.98	1.02			0.66	0.75	5	27	0.92	
	% lacustre			-19.90-175.77	89.46	59.14			0.80	0.86	4	13	37.72	
Textures	Argile (1-4 μm)	LDB	21	11.21-51.36	30.80	13.05	SWIR complet : 121 bandes	Médiane	0.96	0.82	5	33	10.71	
		LDA	74	23.25-59.70	48.50	8.65			0.82	0.76	6	83	10.28	
	Silt (4-63 μm)	LDB	21	14.99-70.38	43.19	17.70			0.94	0.96	5	11	5.21	
		LDA	74	34.51-72.35	50.93	8.65			0.65	0.90	2	26	5.72	
	Sable très fin (63-125 μm)	LDB	21	27.16-72.30	49.44	15.73			0.95	0.91	5	8	9.16	
	Sable fin (125-250 μm)	LDB	21	0.48-7.78	3.14	2.39			0.94	0.92	5	17	1.42	
	Q50	LDB	20	2.89-25.04	11.76	7.79			0.96	0.90	6	7	4.30	
		LDA	74	3.26-8.5	4.39	1.30			0.60	0.79	5	25	1.26	
	Q90	LDA	74	8.81-114.97	14.66	13.25			0.75	0.71	6	69	5.76	

FIGURE 2.7 : Récapitulatif de quelques modèles estimés avec la caméra SWIR

l'échantillon avec les différentes compositions minérales et organiques.

L'utilisation de ces modèles, créés sur un site spécifique pour prédire ces variables d'intérêt pour d'autres échantillons, montre qu'ils ne sont pas ou difficilement transférables (figure 2.9). Ceci doit être causé par les effets de matrice avec des sources d'apports sédimentaires

2.3. LA TRANSFÉRABILITÉ ENTRE ÉCHANTILLONS

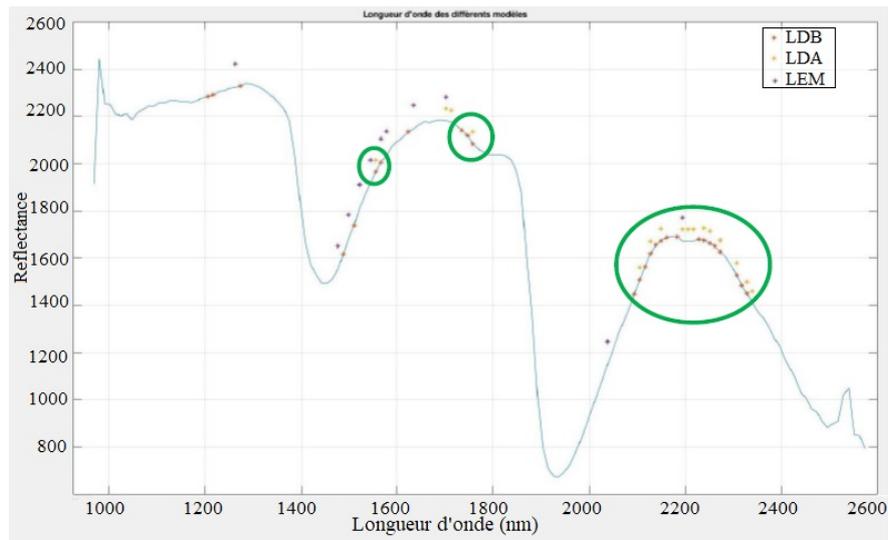


FIGURE 2.8 : Longueurs d'onde sélectionnées pour les trois modèles LOI550

organiques et minérales différentes. Les modèles PLSR ne peuvent donc être utilisés d'un site à un autre sans une base d'apprentissage englobant ces différentes variabilités.

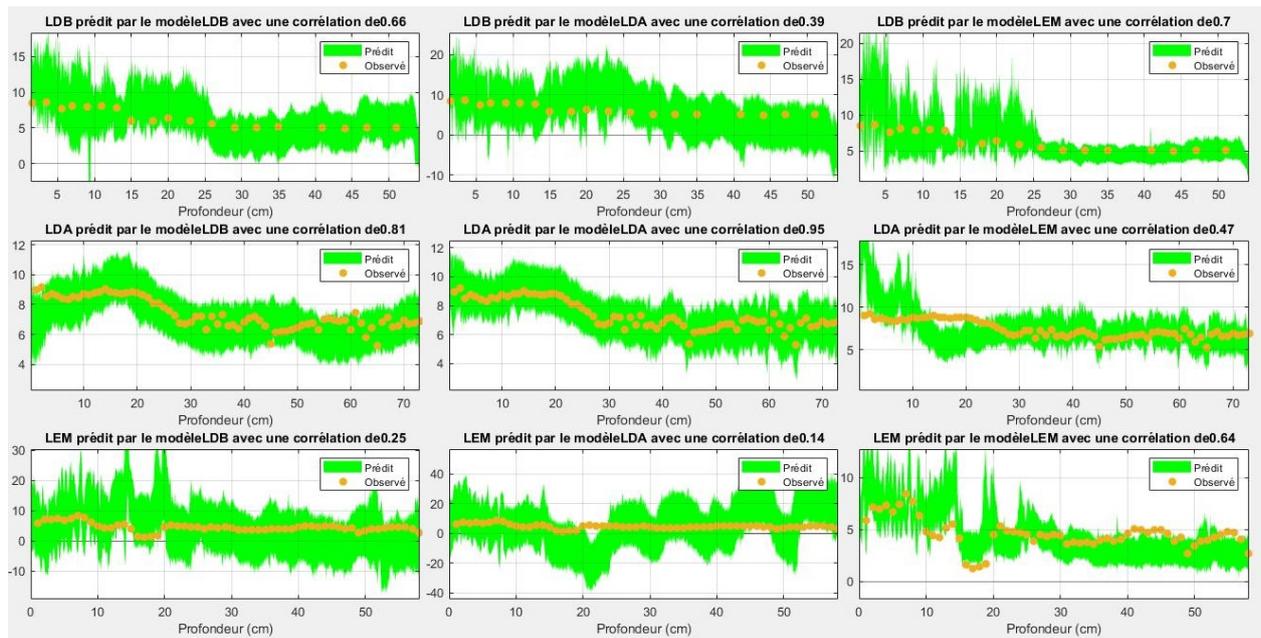


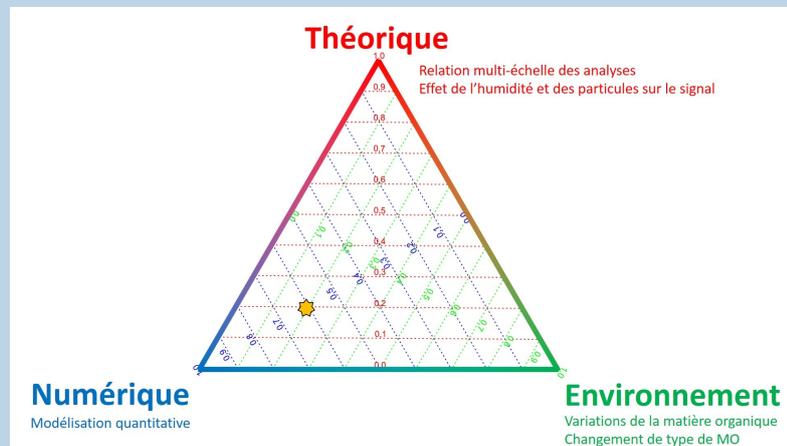
FIGURE 2.9 : Modèles développés pour la propriété LOI550 (matière organique) avec les corrélations entre prédits (dispersion vert) et observés (points oranges), en ligne les trois échantillons (LDB, LDA, LEM), en colonne les trois modèles créés pour chaque lac et transférés sur les autres (LDB, LDA, LEM)

L'imagerie hyperspectrale est donc une technique prometteuse qui permet des caractérisations bio-physico-chimiques et des dépôts, mais l'exploitation de ces données ne semble pas transférable d'un site à l'autre sans un apprentissage préalable. Il faudrait donc généraliser les modèles ou algorithmes en standardisant l'acquisition des images hyperspectrales. Pour cela, il faut se placer dans les mêmes conditions avec l'analyse d'un standard en début et

fin d'analyse, avoir les mêmes paramètres d'acquisition. Mais aussi justifier de la validité de chaque pixel de l'image par la modélisation numérique de la surface pour vérifier l'horizontalité de l'échantillon pour obtenir une sélection correcte des données pour la phase de modélisation. Avec ces deux paramètres initiaux, il serait possible de comparer les données de différents échantillons entre elles, ainsi que d'estimer une incertitude liée à l'acquisition.

Grâce à ces standardisations du protocole d'acquisition des données hyperspectrales, il serait aussi possible de générer des bases de données de modèles prédictifs quantitatifs et qualitatifs englobant différents échantillons. A terme, ceux-ci seraient ainsi exploitables par d'autres imageurs hyperspectraux, ainsi que des spectromètres. Grâce à cela, nos travaux avec une approche locale tendront vers une approche globale (figure 1.13).

Résumé :



Ce chapitre montre donc qu'il est possible de lier des analyses destructrices millimétriques avec des pixels hyperspectraux pour créer des modèles quantitatifs prédictifs permettant d'estimer des cartes d'abondance à haute résolution.

Ceci permet de caractériser des lamines saisonnières qui sont enrichies ou non en MO, et de déterminer des groupes de lamines pouvant induire des changements de types de MO.

Les valeurs de prédictions sont directement liées aux signaux spectroscopiques qui sont connus pour être impactés par l'humidité et les particules de l'échantillon, ainsi que par la distance entre le détecteur de l'échantillon (distance focale, profondeur de champ). Ces trois effets devront être étudiés pour vérifier l'incertitude et la pertinence des valeurs prédites. De plus, les modèles créés sur un site ne semble pas transférable sur un autre, il faudrait donc normaliser les données ou employer des méthodes de régression plus complexes.

Il serait maintenant intéressant d'améliorer les performances de la modélisation grâce à la combinaison de capteurs en utilisant des méthodes de recalage d'images et d'alignement de signaux. Mais pour cela, il faut résoudre les difficultés liées aux différences de résolutions, aux déplacements et modifications de l'échantillon entre les acquisitions.

Bibliographie

- [1] M. BOUSSAFIR. « La matière organique sédimentaire marqueurs d'environnement. Des roches mères pétrologènes aux sédiments organiques actuels. » Thèse de doct. Université d'Orléans, 2008.
- [2] R. VISCARRA ROSSEL et T. BEHRENS. « Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra ». In : *Geoderma* 158.1-2 (2010), p. 46-54.
- [3] R. N. CLARK. « Spectroscopy of Rocks and Minerals, and Principles of Spectroscopy ». In : *Remote Sensing for the Earth Sciences : Manual of Remote Sensing, 3 ed.* Sous la dir. d'A. N. RENZI. T. 3. John Wiley & Sons, Inc., 1999. Chap. 1, p. 1-50.
- [4] J. P. WIGHT, A. J. ASHWORTH et F. L. ALLEN. « Organic substrate, clay type, texture, and water influence on NIR carbon measurements ». In : *Geoderma* 261 (2016), p. 36-43.
- [5] W. JI, R. A. VISCARRA ROSSEL et Z. SHI. « Accounting for the effects of water and the environment on proximally sensed vis-NIR soil spectra and their calibrations ». In : *European Journal of Soil Science* 66.3 (2015), p. 555-565.
- [6] P. ROUDIER et al. « Evaluation of two methods to eliminate the effect of water from soil vis-NIR spectra for predictions of organic carbon ». In : *Geoderma* 296 (2017), p. 98-107.
- [7] E. LANCELOT et al. « Potential of near-infrared hyperspectral imaging spectroscopy to quantify water content in biscuits ». In : *2016 8th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*. IEEE, 2016, p. 1-3.
- [8] C. VERPOORTER, V. CARRÈRE et J.-P. COMBE. « Visible, near-infrared spectrometry for simultaneous assessment of geophysical sediment properties (water and grain size) using the Spectral Derivative-Modified Gaussian Model ». In : *Journal of Geophysical Research : Earth Surface* 119.10 (2014), p. 2098-2122.
- [9] M. CHAPLIN. *Water absorption spectrum*. 2000.
- [10] S. JAKOB et al. « The Need for Accurate Geometric and Radiometric Corrections of Drone-Borne Hyperspectral Data for Mineral Exploration : MEPHySTo—A Toolbox for Pre-Processing Drone-Borne Hyperspectral Data ». In : *Remote Sensing* 9.1 (2017), p. 88.
- [11] A. VAN EXEM. « Reconstructions de changements environnementaux dans les archives lacustres par imagerie hyperspectrale ». Thèse de doct. 2018.
- [12] B. M. M. RODENAS. « Différence d'échelle spatiale entre les mesures satellitaires et in situ d'humidité du sol : analyse par des approches spatio-temporelles ». In : *HAL* (2017).

Chapitre 3

Le recalage des images pour l'analyse spectrale multi-capteurs des carottes sédimentaires

L'étude des archives sédimentaires requiert de s'intéresser aussi bien aux matières organiques que minérales. Ces deux types d'informations peuvent être enregistrées dans différentes gammes spectrales, comme on a pu le voir dans le paragraphe 1.1.1. Il a aussi été montré que la combinaison de différents capteurs permet d'augmenter la précision sur les prédictions.

Néanmoins pour le cas des archives naturelles, des verrous restent à lever. Le premier est induit par les capteurs, qui peuvent avoir des résolutions spatiales et des gammes spectrales qui ne se recouvrent pas. Le second est lié à l'échantillon qui est plastique, il peut donc se déformer (fissures, trous) et changer de compositions bio-physico-chimiques de surface (oxydations, bio-films) entre les acquisitions des capteurs.

C'est pourquoi on propose par la suite une méthode pour recalibrer les images hyperspectrales et aligner les signaux spectroscopiques, afin de les combiner en un capteur composite, on parlera de fusion à la plus basse des résolutions. Cette méthode est appliquée à la prédiction des paramètres texturaux et à la granulométrie qui sont des indicateurs de l'érosion et des sources d'apport sédimentaire.

Chaque gamme spectrale donne accès à certaines propriétés bio-physico-chimiques des échantillons. C'est pourquoi l'utilisation de données provenant de différentes gammes spectrales a montré des capacités accrues pour la modélisation de certaines propriétés, comme on a pu le voir dans le paragraphe 1.1.1 avec des données multicapteurs spectroscopiques. Mais la combinaison d'images hyperspectrales ou de signaux spectroscopiques linéaires s'avère complexe en raison des déformations potentielles des échantillons environnementaux entre les acquisitions. A ceci s'ajoute que chacun des capteurs a ses propres paramètres d'acquisition (résolution, gamme spectrale...). C'est pourquoi ce chapitre présente une méthode utilisant le recalage d'images pour combiner les images hyperspectrales, ainsi que des méthodes pour l'alignement de signaux linéaires.

Ce chapitre présente une méthode développée pour recalibrer des données de types images hyperspectrales à travers un article en préparation, ainsi que pour combiner ce type de don-

nées avec des signaux spectroscopiques linéaires. Enfin, un article montre une application avec les données hyperspectrales recalées pour la prédiction de la granulométrie, ainsi que pour la caractérisation de sources d'apport sédimentaire et les estimations de leurs accumulations annuelles.

3.1 La méthode de recalage des données pour une fusion "basse résolution"

L'article en préparation ci-dessous présente une méthode pour le recalage des images hyperspectrales et l'alignement des signaux linéaires spectroscopiques. Celui-ci n'a pas encore été soumis dans un journal, car il demande quelques approfondissements.

Deux difficultés existent pour l'utilisation simultanée de différents capteurs : (1) les déplacements de l'échantillon entre les différentes acquisitions, (2) la non-uniformité des résolutions. Une méthode "simple" pour résoudre ces deux difficultés est d'homogénéiser les résolutions à celle du capteur le moins résolu, puis de les recaler spatialement, ceci peut être vu comme une fusion à la plus basse des résolutions. Dans le cas de nos capteurs, celle-ci est de 200 μm soit 25 fois supérieur à la résolution standard d'échantillonnage manuel de 5 mm d'épaisseur.

Le recalage doit être effectué sur une propriété bio-physico-chimique identique qui se retrouve entre les différents capteurs, ce qui n'est pas le cas pour nos capteurs qui n'ont pas de bandes spectrales communes. C'est pourquoi il est effectué pour des propriétés similaires ou corrélées, puis il est propagé sur les autres bandes spectrales. Par exemple :

- des bandes spectrales harmoniques et de combinaisons peuvent se retrouver dans les domaines visible et proche-infrarouge,
- des corrélations peuvent exister entre les informations moléculaires des gammes visible et proche-infrarouge avec les informations atomiques de la fluorescence des rayons X.

Deux capteurs d'imagerie hyperspectrale ont été utilisées sur trois carottes sédimentaires (A, D, E) : le visible et proche-infrarouge (400-1000 nm, 60 μm), et l'infrarouge à ondes courtes (1000-2500 nm, 200 μm). Ainsi qu'un capteur spectroscopique linéaire de fluorescence des rayons X (0.1-19 keV, 200 μm x 8000 μm) pour l'échantillon A. Ces différents capteurs ont analysé le même échantillon, mais pas aux mêmes moments. Comme il s'agit d'un échantillon plastique, il peut s'être déformé entre les acquisitions (apparition de fissures, de trou, oxydation de surface, apparition d'un bio-film). C'est pourquoi il faut recalibrer spatialement les images et les profils. Pour cela, il faut déterminer la combinaison de longueur d'onde optimale afin de créer un modèle de déformation spatiale à appliquer sur les données. Un jeu de données ne sera pas déformé et servira de base pour le recalage des images et l'alignement des signaux, il s'agit de l'image VNIR et des profils moyens VNIR-SWIR.

Pour le recalage des images hyperspectrales, nous proposons d'utiliser la méthode dense SIFT flow qui estime des points locaux invariants, aussi appelés descripteurs SIFT (Scale Invariant Feature Transform), entre les images et qui les associe avec précision avec une approche multi-résolution [1, 2]. L'alignement des profils liés aux signaux spectroscopiques linéaires est effectué avec quatre méthodes PAFFT (Peak Alignment by Fast Fourier Transform) et RAFFT (Recursive Alignment by Fast Fourier Transform) [3], IcoShift (global et local) [4] et avec la méthode dense SIFT flow adaptée pour cette question. Toutes les combinaisons de longueur d'onde sont testées afin de trouver les meilleurs couples.

Le recalage VNIR-SWIR montre plusieurs zones avec des corrélations inter-capteurs importantes liés à trois familles de composés : les matières organiques et minérales, ainsi que les liaisons chimiques hydroxyles (O-H) pouvant être liés à l'eau ou à des composés organiques et minéraux. Les bandes optimales pour effectuer le recalage des images sont liées aux liaisons hydroxyles qui sont liées à plusieurs propriétés très importantes dans les carottes sédimentaires (humidité, minéraux, MO). Le couple de longueurs d'onde retenu est 970 nm en VNIR et 1200 nm pour le SWIR avec une corrélation de 0.78, 0.93 et 0.87 entre ces bandes respectivement entre les échantillons A, D et E. Si l'on avait utilisé les niveaux de gris des images RGB et pseudo-RGB, on aurait obtenu une corrélation de 0.27, 0.17 et 0.15 respectivement. Ceci montre que le recalage des images hyperspectrales doit bien être effectué sur des propriétés bio-physico-chimiques similaires entre les capteurs pour estimer un modèle de déformation viable.

Quant à l'alignement VNIR-SWIR et XRF pour la carotte sédimentaire A, on retrouve aussi les trois familles de composés, même si l'association est plus complexe en XRF pour lier un élément chimique à une propriété physico-chimique. Les trois méthodes utilisées (PAFFT, RAFFT et IcoShift) sont basées sur une hypothèse forte qui implique que les signaux doivent avoir des débuts et des fins identiques, alors que dense SIFT flow n'est pas restrictif. C'est sans doute pour cela, qu'un alignement sur les profils initiaux ($r=0.69$) est moins performant qu'avec un alignement manuel ($r=0.74$), même si la corrélation initiale sans alignement est inférieure ($r=0.66$). C'est pourquoi on propose d'effectuer un alignement manuel rapide au préalable. Mais les trois méthodes PAFFT, RAFFT et IcoShift ne permettent pas d'améliorer la corrélation ($r=0.74$). La méthode dense SIFT flow permet quant à elle un meilleur ajustement ($r=0.78$). Toutes ces corrélations optimales ont été établies sur le même couple de bandes, 455 nm pour le capteur VNIR-SWIR qui correspond aux mélanges entre des bandes minérales, liées à des oxydes, et organiques comme les caroténoïdes ; et 3.36 keV pour la XRF correspondant au potassium. Ce couple est probablement lié à des minéraux argileux issus de l'hydrolyse des silicates, comme les minéraux feldspath et illite présent dans les bassins versants de ces échantillons. On voit donc que la méthode dense SIFT flow semble aussi bien adapté pour le recalage des images hyperspectrales que pour l'alignement de profils liés à des signaux spectroscopiques.

Le capteur composite VNIR-SWIR-XRF, pour la carotte sédimentaire A, est ensuite comparé aux capteurs initiaux pour la prédiction des teneurs en matière organique (LOI550) et en argile granulométrique. Les capteurs bruts SWIR et XRF sont les plus performants pour prédire respectivement la LOI550 et le taux d'argile granulométrique. Et le modèle optimal est celui combinant les trois capteurs. Les profils d'abondances des deux variables sont en accord avec les données de calibration et montrent des dispersions de prédictions plus importantes pour les modèles XRF et VNIR-XRF, et les moins importantes pour les modèles VNIR-SWIR et VNIR-SWIR-XRF. Les longueurs d'onde sélectionnées par les différents modèles sont en accord avec des bandes organiques et minérales pour la LOI550, à celles-ci s'ajoute les liaisons chimiques hydroxyles probablement liée à l'humidité, la porosité et à des minéraux pour le taux d'argile granulométrique.

The fusion of Visible - Near Infrared, Short Wave Infrared hyperspectral images and X-Ray Fluorescence line scan

Kévin Jacq^{1,2}, Didier Coquin², Yves Perrette¹, Bernard Fanget¹, Anne-Lise Develle-Vincent¹, Erwan Messenger¹, Pierre Sabatier¹, Maxime Debret³, Fabien Arnaud¹

1 Laboratoire des Environnements, DYnamiques, TErritoires de la Montagne, Université Savoie Mont-Blanc, UMR CNRS 5204,73376 Le Bourget du Lac, France

2 Laboratoire d'Informatique, Systèmes, Traitement de l'Information et de la Connaissance (LISTIC), Université Savoie Mont-Blanc, 74944 Annecy Le Vieux Cedex, France

3 Laboratoire de Morphodynamique Continentale et Côtière, Université de Rouen, UMR CNRS 6143, 76821 Mont-Saint-Aignan, France, Université de Caen, UMR CNRS 6143, 14000 Caen, France

Corresponding Author:

Kévin Jacq

UMR CNRS 5204 Environnements, Dynamiques et Territoires de la Montagne (EDYTEM)
Université Savoie Mont Blanc, Campus scientifique,
73376 Le Bourget du Lac cedex, France

kevin.jacq@univ-smb.fr

Abstract

Nowadays, many samples are analyzed with several spectroscopic sensors, but they are used independently. While their combined use in a composite sensor can improve the reliability of the extracted knowledge. This is especially important for the study of the internal variabilities of samples at high-resolution with the line or image scans. Our study will take place in the combination of these kinds of environmental sample analyses. The scale-invariant feature transform descriptors were used to estimate control points for the registration of hyperspectral images, and to compare with other alignment methods to combine line scan analysis. The Visible and Near-Infrared (VNIR, 400-1000 nm, 50 μm pixel size) and Short Wave-Infrared (SWIR, 1000-2500 nm, 200 μm pixel size) imaging, and the X-Ray Fluorescence line scans (XRF, 0.2-19 keV, 200 μm) were used in this study. They are used to analyze sediment core environmental samples with different bio-physical-chemical properties. Two essential proxies were retained to estimate the importance of creating a composite sensor: the organic matter and the clay content. We found that hydroxyl spectral bands are optimal for the registration of the SWIR with VNIR sensors, and minerals bands for the alignment of XRF with VNIR-SWIR sensor. Also, the combination of sensors allows improving the performances of the partial least squares regression from 0.9 to 0.95 for OM and 0.97 for clay content in prediction correlations.

Keywords: Hyperspectral Imaging, Spectroscopy, Image Registration, Signal Alignment, Data Fusion, Chemometrics

1 Introduction

Samples are more and more analyzed with several destructive and non-destructive analysis. Nowadays, the sensors allow making line and image scans of the samples at high resolution to study thin structural variations. There is also an interest in combining all these information in a unique dataset. For the case of non-destructive analysis, as imaging and spectroscopy or hyperspectral imaging, there are two main difficulties to solve, the inconsistency of the resolution and the potential surface shifts between the acquisition of each sensor. The first one is mainly resolved with subsampling at the lowest resolution (de Juan (2018); de Juan *et al.* (2019)), this is a data fusion at the lowest resolution. Fusion at the upper resolution is an important field of study, mainly for imaging and multi- or hyper-spectral sensors, in remote sensing and for the medical domain (Vivone *et al.* (2015); Yokoya *et al.* (2017)). The second can use several algorithms that can be divided into two families: the registration methods for the nD data (imaging, $n > 2$) and the alignment methods for the 1D data (line-scan spectroscopy). There are important methods to use in the case of solid environmental samples that still move between the acquisition.

Image data fusion methods have a great interest in being used. Three-level of fusion exist (Dasarathy (1997); Martin (2005); Ghassemian (2016)). The low or pixel level, the raw data of each sensor are combined directly (Loncan *et al.* (2015); Vivone *et al.* (2015); Yokoya *et al.* (2017)). They are the most interesting methods in the case of spectroscopic data to increase the spectral and thus the structural information (biological, physical, chemical) to estimate more robust predictive models (Horta *et al.* (2015); Peón *et al.* (2017)). Unfortunately, the most used pixel-level data fusion methods seem to be not usable in the case of laboratory hyperspectral imaging sensors (Jacq *et al.* (2019b)), so the pixel fusion at the lowest resolution need to be used. Recent and advanced methods that can use deep learning, spectral unmixing or super-resolution need to be studied for the laboratory sensors. The second is the mid or features level, various processing were used to reduce each sensor data before the fusion step. The last one is the high or decision level, the data are used to estimate predictive maps with each sensor that are then combined. It is very interesting to fuse maps of a similar variable, for example mineral maps that cannot be estimated with only one sensor.

Line scan data can also be aligned with a median signal of the image. One of the first methods was the Dynamic Time Warping (Kruskall (1983)), it is based on the pairwise distance in the succession of the global sequence. Then improvements were made with several local segment alignments or with the use of cross-correlation. Specific developments were made for chromatography, mass spectrometry and magnetic resonance data (Vu and Laukens (2013); Korifi *et al.* (2014)). Obviously, in the alignment of time series, it is an important step to compare them. Environmental samples have the same problem to match sensor measures and model estimations. For example, Nasreddine tries to estimate the growth rings of otolith to compare it with the temperature across time (Nasreddine (2010)). Recent algorithms try to learn the data to estimate a probabilistic alignment model, with neural, Gaussian or Bayesian approaches (Kazlauskaite *et al.* (2018)).

Natural samples, as sediment and soil, are often analyzed with several spectral range sensors to study interest variables. For example, X-ray fluorescence for the proportion of each element, X-Ray diffraction and Raman for mineral, UV-visible for pigments, near-infrared for organic matter, short and long wave infrared for mineral fingerprints, UV-visible fluorescence for polycyclic aromatic hydrocarbons and some fluorescent organic components. This shows that some spectral ranges have redundant information, but especially that there are complementary information. Both imaging and line scan sensors are used and thus image fusion and signal alignment are interesting methods to combine them to develop more performant predictive models.

This study shows the potential of the imaging registration from hyperspectral images in several spectral ranges (visible and near-infrared VNIR, short wave infrared SWIR) for the pixel level data fusion at the lowest resolution. It also shows the use of alignment methods for spectral line scan sensors (X-ray fluorescence XRF). Three sediment cores were analyzed by these sensors. Finally, the raw and composite sensors are used to create quantitative predictive models with the partial least squares regression PLSR, to show the improvement of the predictive performances.

2 Materials and methods

2.1 Sample preparation and measurement

2.1.1 Sediment cores

Lacustrine sediment core samples are natural samples that possess many structural variations. Three cores with several of these variations are chosen to compare the approach proposed in this paper. These variations can be due to depositional structures (fine/disturbed/fuzzy lamina, flood deposit, homogeneous sediment), colors (light, dark), textures (clay, silt, sand). The lakes Bourget (LDB, IGSN: IEFRA08BW, core A) (Jenny *et al.* (2014)), Aiguebelette (AIG, core B) and Allos (ALO, IGSN: IEFRA08JN, core C) (Wilhelm *et al.* (2012)) from western French Alps.

Sampling was made for destructive analysis on the core A, as loss on ignition for organic matter (Heiri *et al.* (2001)) or particle size distribution to identify sediment sources deposit (van Hateren *et al.* (2017)). For that the core A was sliced mainly in ca. 5 mm cautiously avoiding the mixing of different sediment facies (i.e., lamina and flood deposits for example). However, in this 5 mm, there can be several laminae.

2.1.2 VNIR and SWIR Hyperspectral Image acquisition

The cores were analyzed with the VNIR and the SWIR hyperspectral sensors (Specim Ltd., Finland) at the M2C lab, University of Normandie-Rouen. The VNIR camera covers the 400-1000 nm spectral range with a 6 nm resolution (98 wavelengths) and a theoretical spatial resolution of 50 μm in both directions all along the core. The SWIR spectral range covers

wavelengths between 968 nm and 2574 nm with a reflectance spectral resolution of 12 nm (144 wavelengths) and a 200 μm spatial theoretical resolution.

A specific protocol was created to acquire a hyperspectral image (HSI) of sediment core and is detailed in (Butz *et al.* (2015)). The cores were cleaned before acquisition to be as plane as possible and to reveal sediment structures than can be oxidized. The camera was calibrated with a spectralon reference, and a known object was imaged to have squared pixels and correct intensity.

2.1.3 XRF Line Scanning

The relative contents of major elements were analyzed by X-ray fluorescence (XRF). Only the core A was analyzed at a 200 μm resolution with an 8 mm cross-core opening on the surface of the sediment core with an ITRAX XRF Core Scanner (Cox Analytical Systems) at the CEREGE laboratory in 2010. The split-core surface was first covered with a 4- μm -thick Ultralene film to avoid contamination and desiccation of the sediment. The X-ray beam of the ITRAX XRF Core Scanner was generated with a molybdenum tube at 35 kV and 30 mA, with a runtime of 15 s.

2.2 Data Analysis

Hyperspectral data acquisitions were performed using ENVI 4.8. Then, MATLAB (R2018a, MathWorks) was used to convert, process and analyze the data. Two methods were proposed to register and fuse the VNIR and SWIR images and also the XRF profile. Then, the PLSR was used to create quantitative models for organic matter and clay contents with a different combination of sensors.

2.2.1 Image registration for fusion at the lowest resolution

The SIFT flow algorithm was used to register images. It is based on three main steps. First, an estimation of interest points (edge, corner) with SIFT descriptors (scale-invariant feature transform) for each image (Lowe (1999)). Then, their matching with an optical flow algorithm and finally, a multiresolution matching optimization. This method allows creating a distortion model that was applied to one of the two images. More details about the method can be found in (Ce Liu *et al.* (2011)), as well as the Matlab functions.

Generally, this method is applied to the grayscale image. In the case of hyperspectral images, there are hundreds of spectral planes to register. All the combinations of wavelengths were tested with the VNIR and SWIR at the same resolution. The VNIR sensor was down-sampled to obtain the same resolution of the SWIR one.

Reducing the data with the selection of a region of interest (ROI) or with spatial or spectral down-sampling can be used to reduce computation time. The ROI allows to select a sample spatial area without defect as high surface variations (holes, bumps) or sample contaminations, but the ROI needs to be structurally representative of the whole sample. The spatial down-sampling of the HSI images keep the whole information, but the spatial down-sampling ratio

can smooth too much the structural information. The spectral down-sampling or spectral range selections can allow removing wavelengths that do not vary inside the sample and that are not relevant for registration, but it can also remove important wavelengths. The combination of the three methods can also be used.

The optimal combination was chosen with assessment parameters. The quantitative quality assessments were performed by the Relative dimensionless Global Error in Synthesis (ERGAS) (Wald *et al.* (1997)), and the Universal Image Quality Index (UIQI) (Zhou Wang and Bovik (2002)).

$$ERGAS = 100 \times \frac{h}{l} \times \sqrt{\frac{RMSE(A,B)^2}{\bar{A}}} \quad (1)$$

with A a wavelength plane of the image 1, \bar{A} the mean of A , B a wavelength of image 2, h the high resolution and l the low resolution, $h/l = 1$ for registration.

$$UIQI = \frac{4 \times \sigma_{AB} \times \sigma_A \times \sigma_B \times \bar{A} \times \bar{B}}{(\sigma_A^2 + \sigma_B^2)(\bar{A}^2 + \bar{B}^2)} \quad (2)$$

with σ the standard deviation.

The optimal combination allowed to estimate the distortion model. It was applied to all the SWIR wavelength planes, because the VNIR sensor was the highest resolution and must not be modified.

2.2.2 Signal alignments

Four alignment methods and dense-SIFT image registration adapted for alignment were used to compare their performances against manual alignment. Manual alignment consists in the selection of a couple of positions for the two sensors and then an interpolation of each interval to have the same number of values. The automatic alignment algorithms can use the similarity between the signal and the succession (time, wavelengths) of them or try to learn the data to estimate a probabilistic alignment (Vu and Laukens (2013); Korifi *et al.* (2014); Kazlauskaite *et al.* (2018)). They were developed to align mass spectrometry, chromatography, or magnetic resonance signals. The icoshift (Savorani *et al.* (2010)), the peak alignment by fast Fourier transform (PAFFT) and the recursive alignment by fast Fourier transform (RAFFT) (Wong *et al.* (2005)) were used in this study. Icoshift can work on the whole signal or with interval, RAFFT and PAFFT work on the whole signal. SIFT flow was adapted for alignment by multiplying the signal by 100 to create a composite image that can be registered, then the centrally aligned signal is kept. They are used in all wavelength combinations between the VNIR-SWIR and the XRF profiles. The alignment step was realized with the VNIR-SWIR data in the reflectance and pseudo-absorbance units.

As for image registration, spatial and spectral down-sampling can be made to reduce computation time. The spatial one smoothes the profile, so depending on the resolution, it can be problematic. The spectral reduction can be made to remove some non-relevant spectral areas based on their spectral variabilities in the sample, or by using a reduction coefficient but

some important wavelengths can be missed. The reduction of $\frac{1}{2}$ and $\frac{1}{4}$ for VNIR-SWIR and XRF signal respectively were used to decrease redundancy, and an XRF selection between 1 keV and 8 keV to remove non-informative wavelengths.

The quality of the alignment was estimated with a correlation coefficient (r), and a normalized root mean square error (RMSE). The optimal combination allows estimating the deformation model to align all the other bands.

2.2.3 Predictive model estimation

The partial least squares regression (PLSR) was used to model the relation between the spectroscopic sensors and the destructive analysis (Wold *et al.* (1984)). Variable selection algorithms (random frog, genetic algorithm) were also used to reduce the wavelength redundancies and to find the essential spectral areas for the interest variables. To reduce the matrix effect, an autoscale preprocessing was used. According to the depth of the destructive sampling, the median spectra were calculated for the modeling. This methodology is more detail in (Jacq *et al.* (2019a)). A model was developed for each sensor and combined ones. To compare their performances, calibration and validation correlation coefficients were calculated, also the root mean square error, and a correlation between the median predictions of the sampling areas and the destructive values ($r_{V/S}$).

3 Results and interpretations

3.1 VNIR and SWIR image registrations for the three cores

Three ROI were chosen, one for each core, to see some sediment structures and spatial defect to find their impact on the registration. The core A was reduced to a laminated and flood area, the core B to a thin laminated part, and the core C to a spatial defect area. The down-sampling was not used to not smooth the structural information.

For the three cores, both parameters are in accordance (UIQI close to 1 and ERGAS close to 0) and can be seen in Figure 1. This allows to see three spectral range areas that can be used for registration: (1) 970-1200 nm, (2) 970-1650 nm (only for the cores A and B) and (3) 970-1450 nm (only for the core C). These areas can correspond to hydroxyl and water bonds (970, 1200, 1450 nm), organic bonds (1200 nm: alkyl; 1650 nm: aromatic) (Viscarra Rossel and Behrens (2010)), that are the main components of the sediment core and (1) was the hypothesis of registration in (Jacq *et al.* (2019b)). The compound attributions are based on a soil study in a different geological context, so there can be mixtures of organic and mineralogic compounds for the proposed spectral areas. The difference in the optimal combinations of wavelengths between the cores A and B with the C is due to the difference in the lacustrine environment. The lakes Bourget and Aiguebelette are quite similar with their geological and environmental properties, whereas the lake Allos is an altitude lake with dissimilarities in the sedimentation process. The hydroxyl and water bonds can be overlapped with other structural information of these lakes, as organic matter. The optimal combination (1) 970-1200 nm was chosen for the three registrations with the highest UIQI and lowest ERGAS.

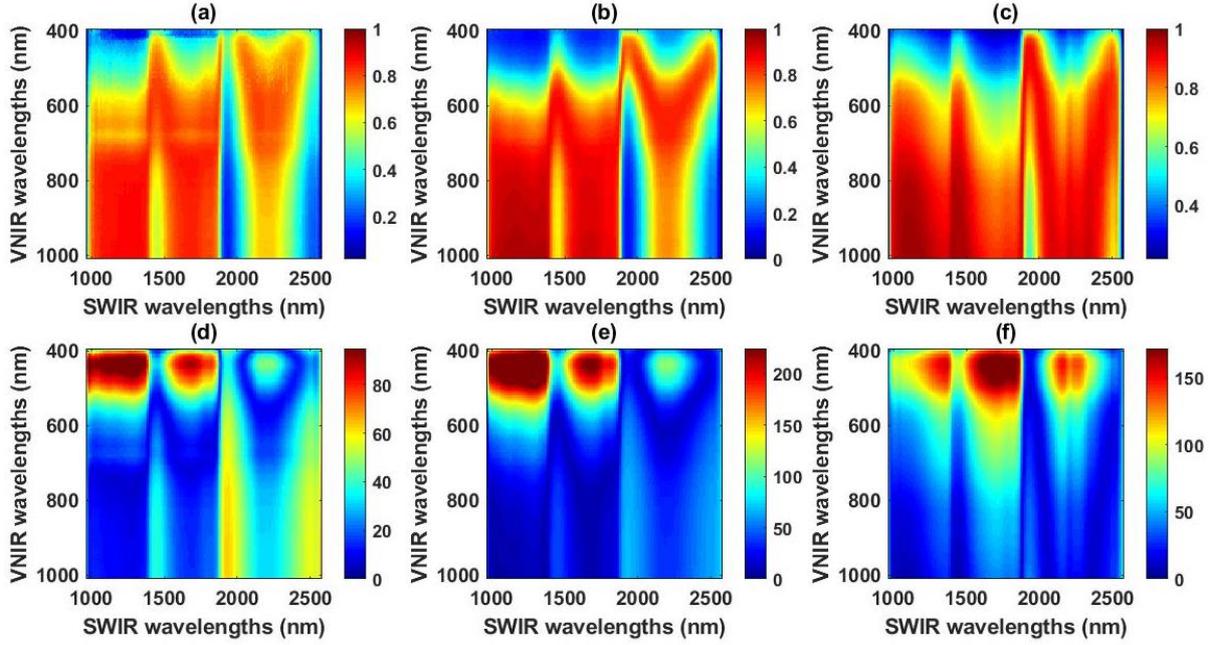


Figure 1: UIQI (a-c) and ERGAS (d-f) of the three cores (LDB: a, d; AIG: b, e; ALO: c, f)

Figure 2 shows the registration of the three ROI based on this optimal combination. The color variations are due to the structural information dissimilarities between the visible and the near-infrared ranges. SIFT flow is not affected by these color variations, because it works with the gradient of them. The difference images show the structures that shift between the two sensors: the strata for LDB and AIG, the structures and the fissures for ALO. Most of them were removed for LDB, ALO and AIG ROI after the registration, with UIQI of 0.39, -0.11, 0.82 before and 0.86, 0.94, 0.93 after registration; and ERGAS of 15.02, 28.16, 23.75 before and 10.63, 9.74, 16.83 after the registration.

The same registration is made on the complete image of LDB, ALO and AIG, and has UIQI of 0.78, 0.93, 0.87 and ERGAS of 10.98, 14.32, 11.59 respectively. If the registration with a grayscale of the RGB and pseudo-RGB was realized, a UIQI of 0.27, 0.17, 0.15 and ERGAS of 37.05, 43.66, 71.21 respectively were obtained. These show the necessity to register the hyperspectral images on similar biological-physical-chemical components and not on the RGB or random planes.

Then, the two HSI can be concatenated to create a new composite sensor (VNIR-SWIR) at the lowest resolution of 200 μm . This new sensor includes the visible and near-infrared infrared spectral information, as the biological-physical-chemical ones, and also the noise of each sensor.

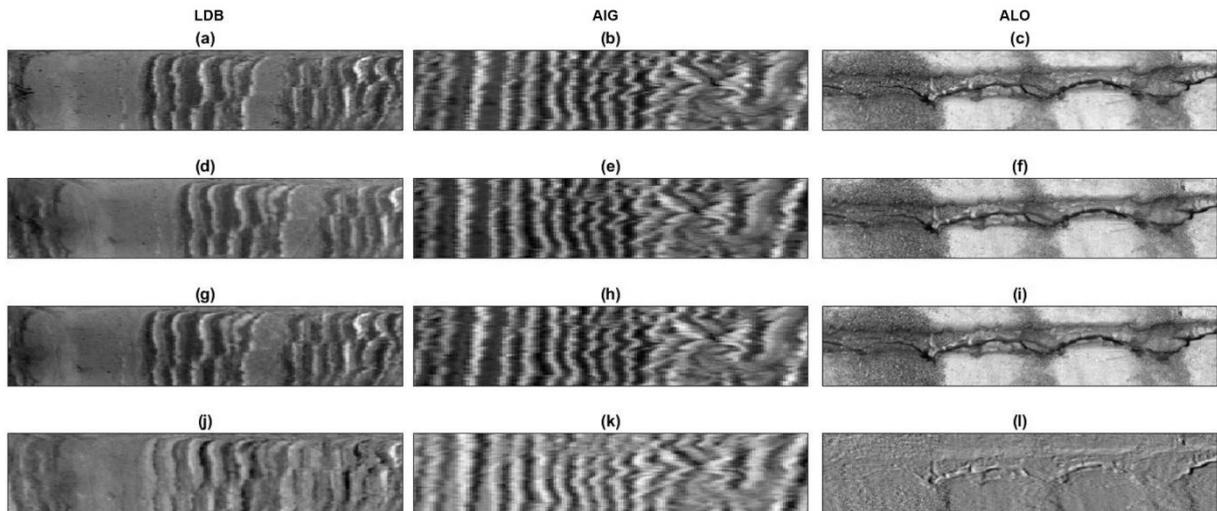


Figure 2: (a-c) 970 nm VNIR images; 1200 nm SWIR images (d-f) before and (g-i) after registration; (j-l) Difference images between the before and after images to see spatial shifts; for the three lakes (LDB: a, d, g, j; AIG: b, e, h, k; ALO: c, f, i, l)

Looking further at the wavelength correlations, three classes of components are obtained that are the main components known for sediment cores (Figure 3). The hydroxyl or moisture content has the main effect on the SWIR spectra with two areas around 1450 nm and 1950 nm, it is also in the VNIR spectra around 900 nm. Whereas for the VNIR spectra trend, it is mainly the mineral compounds with the oxides around 450-550 nm, it is also present in the SWIR spectra between 2100 nm and 2450 nm. Organic matters also reflected with these two sensors around 400-500 nm associated with carotenoids, 670 nm associated with chlorophylls, around 1100 nm and 2100 nm with organic bonds.

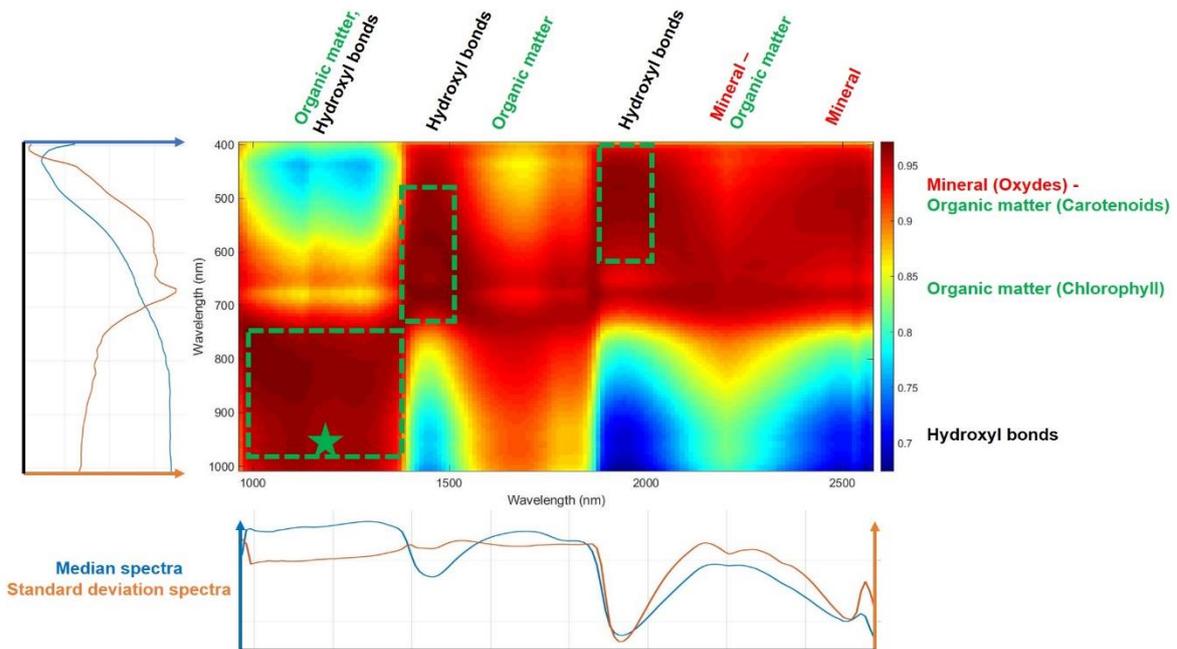


Figure 3: VNIR and SWIR spectral correlations and chemical associations for the core A

3.2 VNIR-SWIR and XRF signal alignments for the core A

The spectroscopic trend along the sample allows seeing the known variations, as the laminae or the instant event deposits. The alignment algorithms try to find these structures between the two sensor trends. The raw correlation was 0.60 (p-value < 0.05) for a RMSE of 0.21 for the combination of 451 nm and 3.39 keV. Whereas manual alignment allows a higher correlation of 0.71 (p-value < 0.05) and an RMSE of 0.20 for the same combination. Unfortunately, the automatic alignments of the raw data have not upper correlation values, the optimal one was 0.69 (p-value < 0.05) for the SIFT flow method with the combination of 660 nm and 3.65 keV. This may be due to the high constraints on the precise beginning and end depth of the signals, as well as the offset distances. Better alignments are obtained with a first fast manual alignment of XRF on reflectance VNIR-SWIR spectra. The correlation coefficients and the root mean squares of each model alignments are in accordance (Figure 4).

Two XRF areas are correlated with four VNIR-SWIR areas (Table I). They can be associated with three main families of components: hydroxyl, minerals (oxides, carbonates, illite in VNIR; Si, K, Ca in XRF), organics (P in XRF). These components are known to be the main ones in these sediment cores.

Table I: Main spectral related areas for VNIR-SWIR and XRF alignments

VNIR-SWIR		XRF	
Band	Attribution	Band	Attribution
450-800 nm	Minerals (Oxides) Organic (chlorophyll - carotenoid)	1.72-1.9 keV	Mineral (Si) Organic (P)
1500-1600 nm	Organics	3.2-4.1 keV	Mineral (K, Ca)
1950-2100 nm	Hydroxyl, Organics		
2350-2450 nm	Minerals (Carbonates, Illite)		

The optimal couples for the signal alignments are associated with oxides and or carotenoid organic matters in the VNIR (451-458 nm) and potassium in XRF (3.36 keV) for all the alignment methods. The PAFFT, RAFFT and IcoShifts methods have lower correlation (0.74) and higher RMSE (0.19), than those of SIFT flow (r=0.78, RMSE=0.17). SIFT flow was retained for the alignment. This optimal couple can be associated with clay minerals from silicate hydrolysis, as feldspath or illite minerals that are known for these watersheds.

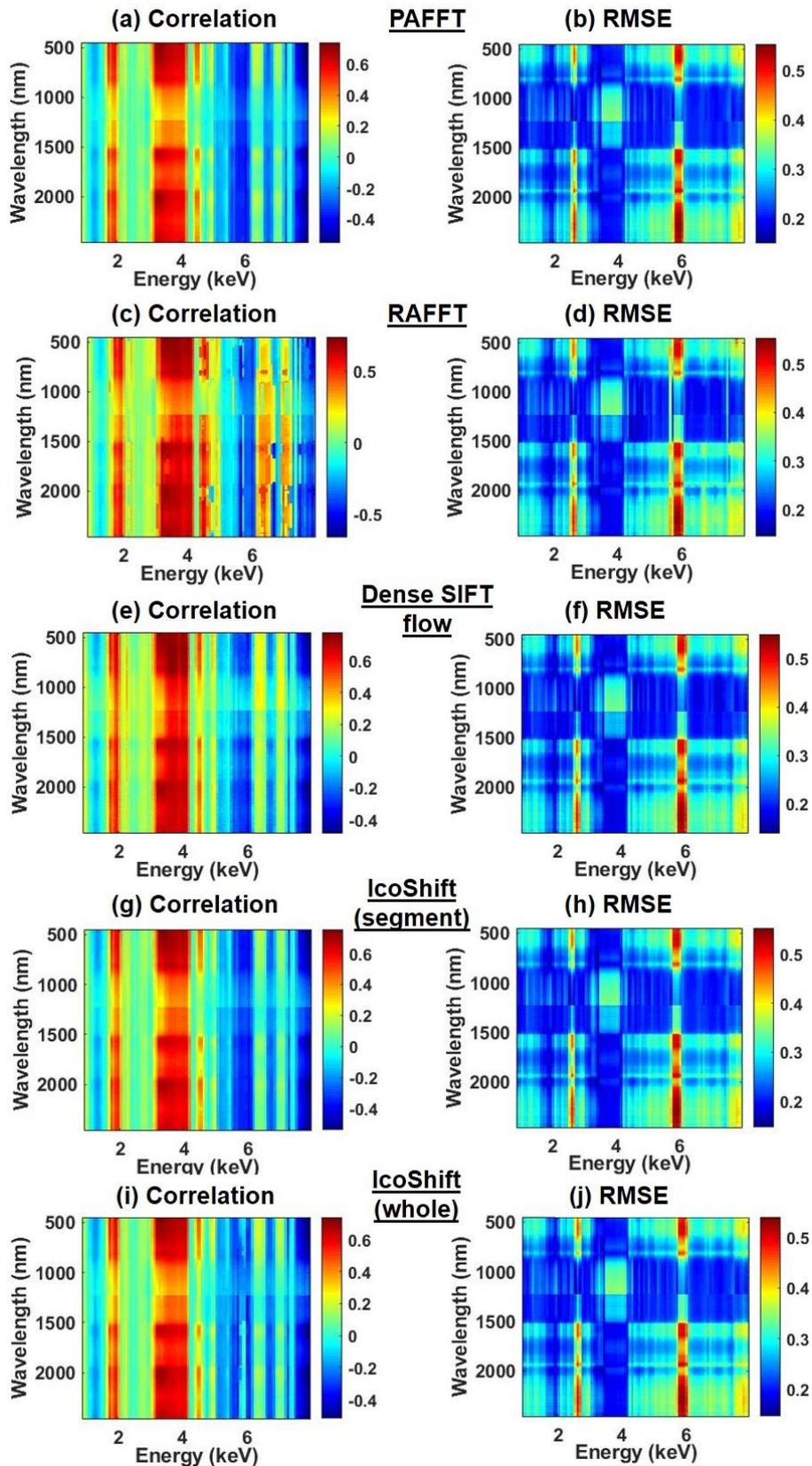


Figure 4: Correlation coefficients and RMSE of each alignment combination between the VNIR-SWIR and the XRF sensors with a first manual alignment: a-b: PAFFT, c-d: RAFFT, e-f: SIFT flow, g-h: IcoShift by segment processing, i-j: IcoShift on the whole spectra.

Figure 5 allows seeing the raw and aligned signals by SIFT flow. The raw signal is shifted in some areas from the aligned and the VNIR-SWIR ones. The normalized intensity variations are not the same, this can be explained by the different information of the two sensors. However, the global and local trends are related. In the laminated area, before 25 cm, the thin structures can validate the alignment with close observation. After this depth, the increase and decrease of the two signals are well aligned in the global view.

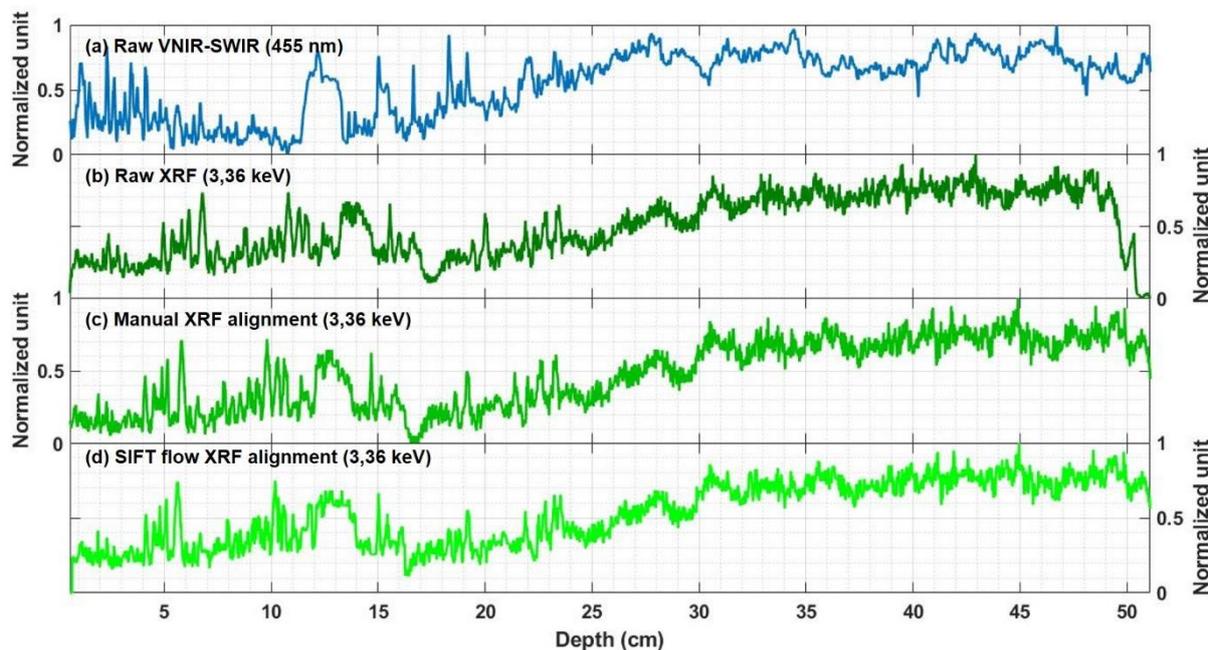


Figure 5: (a) VNIR-SWIR signal of the oxides coupled with carotenoid organic matter (451 nm), (b) raw, (c) manually aligned, (d) SIFT-flow automatic alignment of XRF signals of the potassium (3.36 keV)

Figure 6 allows seeing a laminated area alignments. The laminae are easier to see with the XRF signal, whereas the instant events (large structures similar to a slot with a plateau) are easier to see with the VNIR-SWIR signal. These last structures are very far from the raw signal, after the alignment, there is still a shift, but less than before (normalized RMSE: 0.21 before, 0.17 after alignment). These shifts are visual ones, but they can be relevant and have a chemical explanation. For the laminae parts, the peaks are related to most of them. Another observation can be that the XRF signals are noisy, the resolution can be nonoptimal and a moving-average downscaling can improve it. This XRF noise can also be due to the detector that can acquire the signal on non-plane surfaces, and the larger width detection window (8 mm) can smooth several sediment deposits.

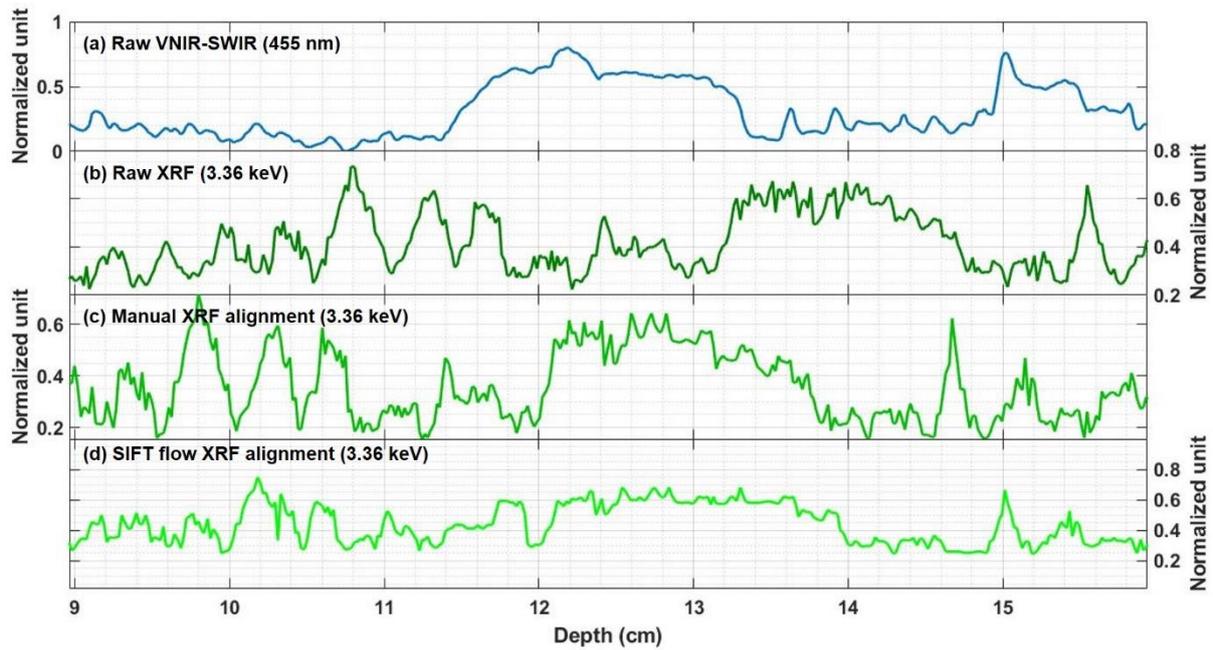


Figure 6: Zoom on an ROI for the (a) VNIR-SWIR signal of the oxides coupled with carotenoid organic matter (451 nm), (b) raw, (c) manually aligned, (d) SIFT-flow automatic alignment of XRF signals of the potassium (3.36 keV)

As for VNIR and SWIR spectral ranges, in XRF, the chemical element associated with mineral and organic compounds were retrieved (Figure 7). Four main VNIR-SWIR spectral areas and three for the XRF seem to be in accordance to say that the mineral and hydroxyl bonds are optimal for the alignment. The elements Si, K, Ca, Fe, Co are associated with mineral compounds with silicates, carbonates, clay (Croudace and Rothwell (2015)). Other elements as Ti can be associated with erosion (Croudace and Rothwell (2015)). These precise chemical attributions can help to understand the compound mixtures in the VNIR-SWIR spectra.

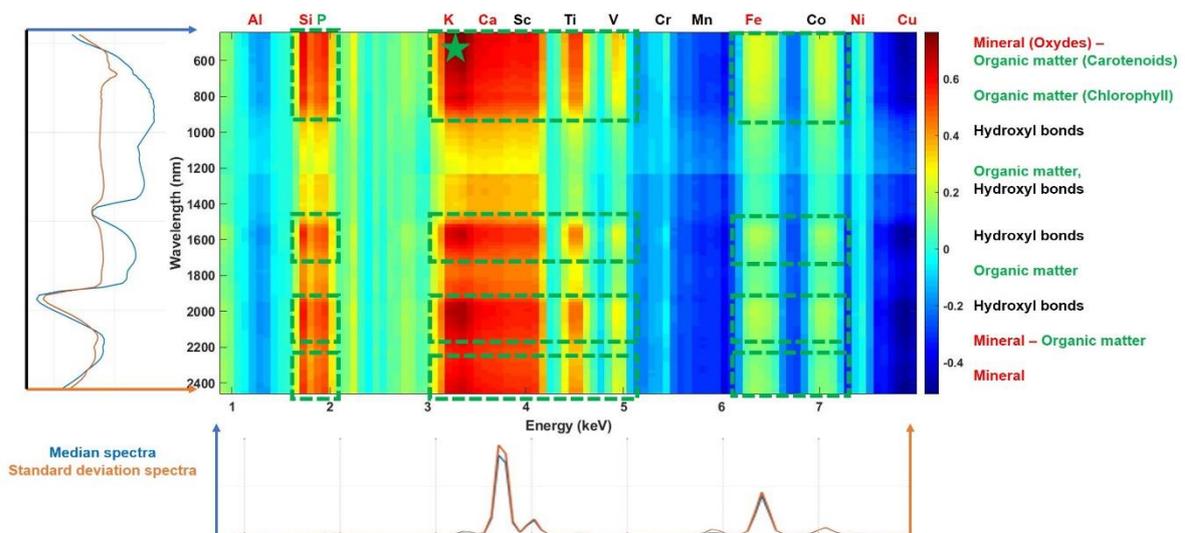


Figure 7: VNIR-SWIR and XRF spectra correlations and chemical associations

3.3 Prediction models for the core A

The PLSR is used to create quantitative models with all the sensors and composite sensors used to analyze the complete sample. The organic matter proportion and the textural information are two of the most important proxies studied for sediment and soil samples. The loss on ignition (LOI550) and the clay proportion are used to characterize these important proxies for the core A.

3.3.1 Model estimations

Table II shows the model performances of the PLSR and variable selections for all the sensors and combined ones. For the raw sensors, the SWIR and XRF sensors have the most spectral information for organic matter as well as for clay content, with low numbers of latent variables and selected wavelengths, also with high coefficients of correlations. This agrees with the combination of them that improve the performances. As expected, the optimal models are those estimated with the most sensors, and the VNIR sensor is the least important for LOI550 and clay.

Table II: Model performances for the two proxies, the four sensors and six combinations (dimension of the dataset (nD), number of latent variables (LV) and selected bands (wl), calibration and validation correlations (r_{cal} and r_{val}), root mean square error of prediction (RMSEP), volume-surface correlation ($r_{V/S}$))

Sensor(s) (bands)		VNIR (98)	SWIR (144)	XRF (1013)	VNIR + SWIR (142)	VNIR + XRF (1111)	SWIR + XRF (1157)	VNIR + SWIR +XRF (1255)
nD		2	2	1	2	1	1	1
LOI550 (wt%)	LV	8	6	7	5	5	5	5
	WI	13	27	21	10-2	30-3	9-1	0-4-7
	r_{cal}	0.98	0.98	0.99	0.91	0.90	0.92	0.96
	r_{pred}	0.91	0.95	0.94	0.91	0.93	0.94	0.94
	RMSEP	0.42	0.39	0.34	0.39	0.30	0.29	0.27
	$r_{V/S}$	0.87	0.73	0.92	0.93	0.93	0.90	0.97
Clay (%)	LV	4	5	7	6	6	6	5
	WI	27	10	15	8-7	2-27	4-10	10-10-12
	r_{cal}	0.93	0.92	0.99	0.97	0.99	0.96	0.96
	r_{pred}	0.89	0.95	0.94	0.97	0.95	0.97	0.95
	RMSEP	5.74	3.53	4.29	2.48	4.22	2.76	3.87
	$r_{V/S}$	0.91	0.81	0.93	0.87	0.97	0.94	0.97

Figure 8 and Figure 9 allow seeing the profiles across the depth of the LOI550 and the clay with these seven sensors. Two interesting thing is the largest variabilities of the XRF and VNIR+XRF sensors compare to the other may be due to the addition of sensor noises or modeling difficulties, another one is the smallest variations for the VNIR+SWIR and the VNIR+SWIR+XRF sensors. The prediction of the LOI550 with the VNIR+SWIR presents a bias that can be corrected afterward. These observations show the importance of knowing the

sensor properties, as their noises, and the biological-physical-chemical information they contained, because they can impact the global trend and also locally with different discriminant information. The sensor noise can also make the sensor combination and after the variable modeling irrelevant.

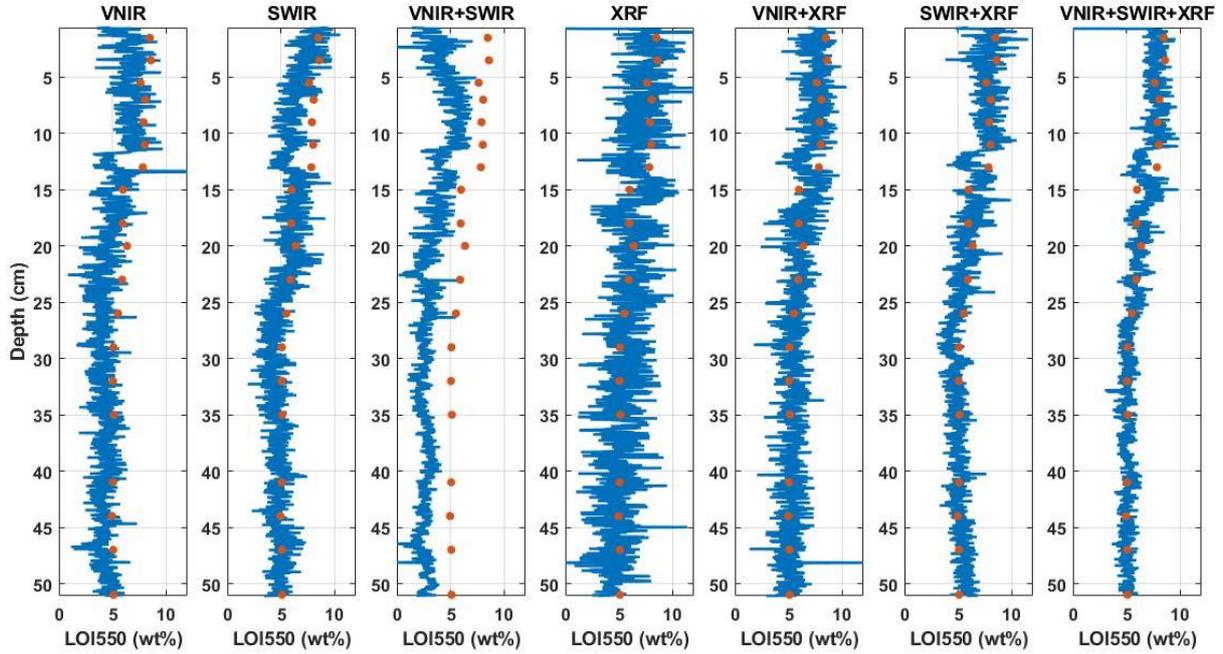


Figure 8: Estimated LOI550 profiles for the seven sensors (in wt%) in blue lines and the calibration data in orange points

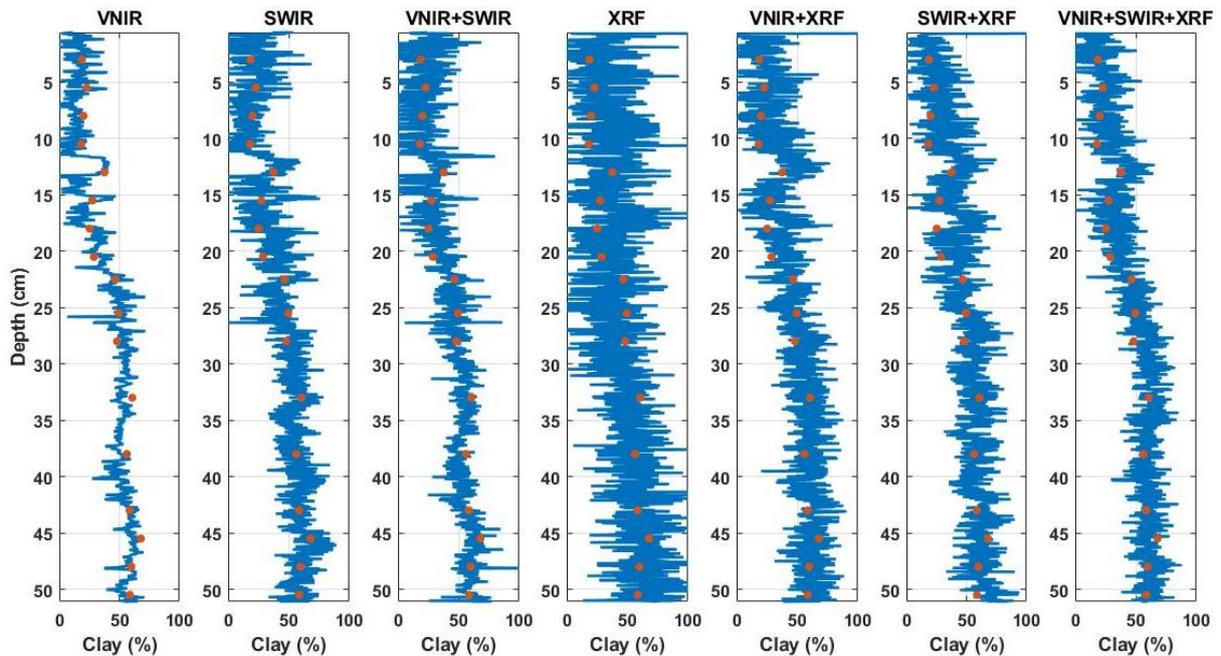


Figure 9: Estimated clay profiles with the seven sensors (in %) in blue lines and the calibration data in orange points

3.3.2 Model selected bands

Figure 10 shows the selected wavelengths by each sensor (raw and composite) in each sensor range. As for the registration and the alignment, the three groups of compounds (organic, mineral, and hydroxyl) are selected by the models. That shows the redundancy and the complementarity of the sensors to create a more performant prediction model with a smaller number of wavelengths. The visible and the XRF ranges seem to be not adequate to predict LOI550 and clay respectively, because of the selection of wavelengths on all the ranges and higher variabilities in the profiles.

The LOI550 model possesses discriminant areas associated with the organic (500 nm: carotenoids, 670 nm: chlorophylls, 750-850 nm: alkyl bonds) and mineral areas (450-550 nm and 880 nm: oxides) in the visible range. In the near-infrared, there are also organic (1000-1150 nm, 1700 nm: alkyl, 1500 nm and 2100 nm: amine, 1650 nm: aromatic) and mineral (2100-2250 nm and 2350 nm: clay minerals) areas. For the XRF range, some elements are discriminant, with their association according to Croudace and Rothwell (2015): aluminium (1.4 keV, mineral), chlorine (2.6 keV, organic), potassium (3.3 keV, mineral), scandium (4 keV), titanium (4.5 keV, mineral), bromine (11.9 keV, organic).

The clay content is also related to organic matter and mineral compound, and also hydroxyl bonds that could be associated with water and porosity, or hydroxyl mineral. The visible and near-infrared ranges use organic (400-500 nm: carotenoids, 670 nm: chlorophylls, 850 nm: alkyl bonds), mineral (450-550 nm and 880 nm: oxides, 2200 nm and 2350 nm: clay minerals) and hydroxyl (940 nm, 1400-1500 nm, 1900-2000 nm) areas. In the XRF spectral range, the clay content is associated with the elements: aluminum (1.4 keV, mineral), chlorine (2.6 keV, organic), potassium (3.3 keV, mineral), titanium (4.5 keV, mineral), chromium (5.4 keV, moisture).

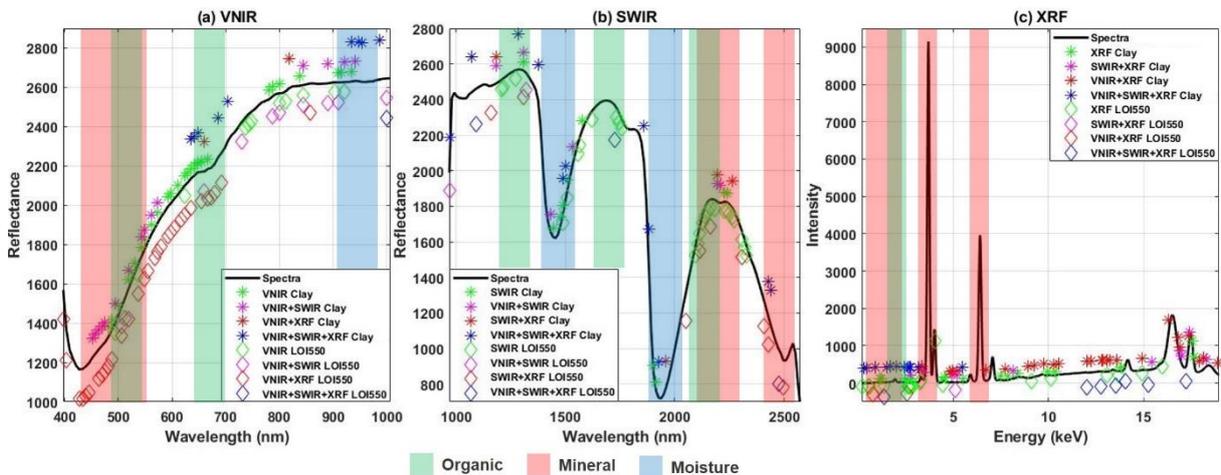


Figure 10: Variables selected by the predictive models for each sensor ((a) VNIR, (b) SWIR, (c) XRF) and for the two proxies (LOI550, clay)

4 Discussion

4.1 Considerations for multi-sensors combinations

The registration and alignment methods are in accordance with some important points to have relevant results.

The most important one is to have the same sample areas in the two or more datasets, with the same beginning and end to register or align. Because the alignment methods are based on the hypothesis that the deformations are inside the profiles between the beginning to the end. For the SIFT flow method, there is not this hypothesis, but if SIFT descriptors are not found between the profiles or the images, the deformation models can be disturbed, and deformation can still exist. In the case of a larger acquisition area for a sensor, for example, a width of 2 cm for a sensor and 2.5 cm for another, a manual region of interest selection can be made to adjust the area, and the outside areas will be lost for the combination of the sensor but can be used alone. For the combination of more than two sensors and different spatial areas, probability or plausibility methods can be used to overcome the missing sensor and have a relevant prediction of a variable of interest. Each sensor and combination allow to estimate an abundance and each of them has a weight associated with the relevance of it, in the case of a missing sensor, the other ones can still estimate a value (André (2013); Khaleghi *et al.* (2013)). The image registration is important to adjust the sample deformation in the two directions between the acquisition, for the case of the alignment, the hypothesis that they are no deformations in width is underlying, but can induce miss-alignment with different information contained in the sensors.

The spatial resolution is also a critical point, because high-resolution may mean noisier data. The noise may disturb the spatial deformation modeling, two strategies can overcome this. The first one consists in downsampling the data to reach a higher signal to noise ratio, but the highest resolution will be lost, or made a multi-resolution adjustment to keep it as SIFT flow. The second uses preprocessing to increase the signal to noise ratio, like Fourier or wavelet transforms, or smoothing. The two strategies can also be used together.

Another important point is to know the biological-physical-chemical properties of the sample to understand the optimal wavelengths to combine the sensors. Moreover, in some cases, when there are large deformations, to help the automatic registration or alignment with a first manually step on an estimated optimal couple of wavelengths. The three families of compounds are recorded in the VNIR, SWIR and XRF data, so the sample to registered must be precisely or qualitatively characterized for each of them. In other spectral ranges, the association of the properties registered with them may not be direct. In XRF spectroscopy, some elements were associated with OM and textural properties, but others cannot be associated with one of the three families (Croudace and Rothwell (2015)).

4.2 Data Fusion

The registration and alignment methods are very interesting to combine multiple spectroscopic data in a composite sensor at the lowest resolution. This new sensor allows having more biological-physical-chemical information, that can be redundant or new, to create efficient prediction models. This study focuses on spectroscopic sensors that are surface methods, but other kinds of devices can be used to add other types of information, as the volume (tomography), magnetism (magnetic susceptibility), resistivity. However, some of them can be poorly resolute and thus leads to loss of resolution of high-resolution sensors. As discussed in the introduction, several methods exist for data fusion at high resolution, but need to be adapted for the use with laboratory sensors. Because they were developed for remote sensing with several patterns in the registered scene, whereas in a sample there are variations but not as important. That is why the hypersharpening methods seem to be not usable for laboratory problematic (Jacq *et al.* (2019b)). However, other recent methods based on a convolutional neural network, or super-resolution, or spectral unmixing can improve the data fusion (Ghassemian (2016); Yokoya *et al.* (2017)). These kinds of methods can also allow estimating an image from a linear scan of the sample with the improvement of the resolution. This study was based on sediment cores, but it can be used for the analysis of all-natural environmental samples, and even to all the solid samples with internal variabilities to study.

5 Conclusions

The combination and the fusion of sensors are essential to increase the amount of biological-physical-chemical information. However, it is necessary to know the sensors before beginning this type of process, because some sensor properties, like noises, can disturb the combination methods and make this combination irrelevant. In other cases, the sensor combination will allow creating more efficient predictive models. Moreover, the use of high-resolution sensors makes it possible to study the global variation of a sample and also local trends, and the use of several sensors allows to interpret them more precisely.

In this study, two hyperspectral sensors (VNIR and SWIR) with consecutive and non-overlapping spectral ranges were registered to create a composite sensor. For that, the SIFT flow algorithm was used on a couple of wavelengths characterized by similar structural information associated with hydroxyl bonds to estimate a deformation model, then it was applied to all the other wavelengths. Similarly, a median signal of this composite sensor was aligned with an XRF line scan sensor for a couple of wavelengths associated with mineral bands. The alignment method used was the SIFT flow algorithm adapted to this one-dimensional profiles.

All these raw and composite sensors were then used to create quantitative predictive models with the PLSR for organic matter and textural proxies. This shows that the combination of sensors can allow creating more performant models with higher correlations and lower uncertainties. The predicted maps and profiles were also less variable, which can induce that the models are more efficient. The selected wavelengths of these models are also in accordance

with the biological-physical-chemical information necessary for the prediction of the two selected proxies.

All these registration and alignment methods allow fusing the sensor at the lowest resolution. Advanced pixel-level data fusion methods can allow the sensor combination at the highest resolution to study sample variabilities. Using other sensors than spectroscopic ones can improve the knowledge of the sample's physical properties.

6 Acknowledgements

The cores used in this study are stored in the EDYTEM laboratory, which also made the destructive analysis (LOI, particle size). Coring supports were provided by the French National Research Agency's with the IPER-RETRO program for lake Bourget (ANR-08-VUL 005), the Pygmalion project for lake Allos (ANR BLAN07-2_204489). Hyperspectral imaging was processed at the University of Normandie-Rouen and was funded by the Region Normandie, which supports the scientific consortium SCALE UMR CNRS 3730.

7 References

- André, C. (2013) *Approche Crédibiliste Pour La Fusion Multi Capteurs Décentralisée*. Université Paris Sud - Paris XI.
- Butz, C., Grosjean, M., Fischer, D., Wunderle, S., Tylmann, W., Rein, B. (2015) Hyperspectral imaging spectroscopy: a promising method for the biogeochemical analysis of lake sediments. *Journal of Applied Remote Sensing* 9: 1–20
- Ce Liu, Yuen, J., Torralba, A. (2011) SIFT Flow: Dense Correspondence across Scenes and Its Applications. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33: 978–994
- Croudace, I.W., Rothwell, R.G. (2015) *Micro-XRF Studies of Sediment Cores: Applications of a Non-Destructive Tool for the Environmental Sciences*
- Dasarathy, B.V. (1997) Sensor fusion potential exploitation-innovative architectures and illustrative applications. *Proceedings of the IEEE* 85: 24–38
- de Juan, A. (2018) Hyperspectral image analysis. When space meets Chemistry. *Journal of Chemometrics* 32: 1–13
- de Juan, A., Gowen, A., Duponchel, L., Ruckebusch, C. (2019) Image Fusion. *In: Data Fusion Methodology and Applications* 311–344.
- Deflandre, B., Mucci, A., Gagné, J.P., Guignard, C., Sundby, B. (2002) Early diagenetic processes in coastal marine sediments disturbed by a catastrophic sedimentation event. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 66: 2547–2558
- Ghassemian, H. (2016) A review of remote sensing image fusion methods. *Information Fusion* 32: 75–89
- Heiri, O., Lotter, A.F., Lemcke, G. (2001) Loss on ignition as a method for estimating organic and carbonate content in sediments: reproducibility and comparability of results. *Journal of Paleolimnology* 25: 101–110
- Horta, A., Malone, B., et al. (2015) Potential of integrated field spectroscopy and spatial analysis for enhanced assessment of soil contamination: A prospective review. *Geoderma* 241–242: 180–209
- Jacq, K., Perrette, Y., et al. (2019a) High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core. *Science of the Total Environment* 663: 236–244
- Jacq, K., Coquin, D., Fanget, B., Perrette, Y., Debret, M. (2019b) Study of pansharpening methods applied to hyperspectral images of sediment cores. *In: 2019 22nd International Conference on Information Fusion (FUSION) (FUSION 2019)* Ottawa, Canada.
- Jenny, J.-P., Arnaud, F., et al. (2013) A spatiotemporal investigation of varved sediments highlights the dynamics of hypolimnetic hypoxia in a large hard-water lake over the last 150 years. *Limnology and Oceanography* 58: 1395–1408

- Jenny, J.-P., Wilhelm, B., et al. (2014) A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps). *Journal of Paleolimnology* 51: 469–483
- Kazlauskaite, I., Ek, C.H., Campbell, N.D.F. (2018) Gaussian Process Latent Variable Alignment Learning. *In: 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS) 2019*
- Khaleghi, B., Khamis, A., Karray, F.O., Razavi, S.N. (2013) Multisensor data fusion: A review of the state-of-the-art. *Information Fusion* 14: 28–44
- Korifi, R., Le Dréau, Y., Dupuy, N. (2014) Comparative study of the alignment method on experimental and simulated chromatographic data. *Journal of Separation Science* 37: 3276–3291
- Kruskall, J.B. (1983) *The Symmetric Time-Warping Problem: From Continuous to Discrete*
- Loncan, L., de Almeida, L.B., et al. (2015) Hyperspectral Pansharpening: A Review. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 3: 27–46
- Lowe, D.G. (1999) Object recognition from local scale-invariant features. *In: Proceedings of the Seventh IEEE International Conference on Computer Vision IEEE*, 1150–1157 vol.2.
- Martin, A. (2005) La fusion d'informations. Cours ENSIETA
- Nasreddine, K. (2010) *Recalage de Signaux et Reconnaissance de Formes: Application à l'analyse Des Otolithes de Poissons*. Université de Bretagne occidentale - Brest.
- Peón, J., Fernández, S., Recondo, C., Calleja, J.F. (2017) Evaluation of the spectral characteristics of five hyperspectral and multispectral sensors for soil organic carbon estimation in burned areas. *International Journal of Wildland Fire* 26: 230–239
- Savorani, F., Tomasi, G., Engelsen, S.B. (2010) icoshift: A versatile tool for the rapid alignment of 1D NMR spectra. *Journal of Magnetic Resonance* 202: 190–202
- van Hateren, J.A., Prins, M.A., van Balen, R.T. (2017) On the genetically meaningful decomposition of grain-size distributions: A comparison of different end-member modelling algorithms. *Sedimentary Geology* 375: 49–71
- Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T. (2010) Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma* 158: 46–54
- Vivone, G., Alparone, L., et al. (2015) A Critical Comparison Among Pansharpening Algorithms. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 53: 2565–2586
- Vu, T.N., Laukens, K. (2013) Getting your peaks in line: a review of alignment methods for NMR spectral data. *Metabolites* 3: 259–276
- Wald, L., Ranchin, T., Mangolini, M. (1997) Fusion of satellite images of different spatial resolutions: Assessing the quality of resulting images. *Photogrammetric engineering and remote sensing* 63: 691–699

- Wilhelm, B., Arnaud, F., et al. (2012) 1400 years of extreme precipitation patterns over the Mediterranean French Alps and possible forcing mechanisms. *Quaternary Research* 78: 1–12
- Wirth, S.B., Gilli, A., et al. (2013) Combining sedimentological, trace metal (Mn, Mo) and molecular evidence for reconstructing past water-column redox conditions: The example of meromictic Lake Cadagno (Swiss Alps). *Geochimica et Cosmochimica Acta* 120: 220–238
- Wold, S., Ruhe, A., Wold, H., Dunn, III, W.J. (1984) The Collinearity Problem in Linear Regression. The Partial Least Squares (PLS) Approach to Generalized Inverses. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 5: 735–743
- Wong, J.W.H., Durante, C., Cartwright, H.M. (2005) Application of Fast Fourier Transform Cross-Correlation for the Alignment of Large Chromatographic and Spectral Datasets. *Analytical Chemistry* 77: 5655–5661
- Yokoya, N., Grohnfeldt, C., Chanussot, J. (2017) Hyperspectral and Multispectral Data Fusion: A comparative review of the recent literature. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 5: 29–56
- Zhou Wang, Bovik, A.C. (2002) A universal image quality index. *IEEE Signal Processing Letters* 9: 81–84

3.1.1 Quelques remarques

Cette étude a montré quatre considérations importantes à prendre en compte. (1) Il faut connaître précisément les zones spatiales acquises par les différents capteurs pour être sûr de leur recouvrement. On peut pour cela utiliser des "marqueurs" composés de propriétés chimiques différentes de l'échantillon et caractérisables par les différentes gammes spectrales. (2) Les propriétés des capteurs à combiner doivent être connues, dont notamment le bruit qu'ils apportent lors des acquisitions, car les méthodes de combinaisons peuvent conduire à de mauvais ajustements, voir si le bruit est trop important, cette méthodologie n'est pas pertinente pour combiner un capteur très bruité et un autre peu bruité. (3) L'impact du bruit après la combinaison des capteurs peut aussi conduire à des défauts de modélisation, il faut donc soit utiliser des prétraitements pour débruiter, soit dégrader la résolution pour augmenter le rapport signal sur bruit, ou également combiner ces deux méthodes. (4) Enfin, avoir des connaissances de la bio-physico-chimie de l'échantillon est un avantage pour interpréter les zones spectrales corrélées entre les capteurs. Il faut aussi noter que l'interprétation des bandes spectrales utilisées est qualitative et peut être discutable si la résolution spectrale est trop large ce qui peut englober différentes propriétés chimiques.

La combinaison des capteurs VNIR, SWIR et XRF a été réalisée avec chacune des longueurs d'onde, mais il est aussi possible de le faire avec des coefficients combinant de multiples longueurs d'onde. De futurs développements utiliseront donc les ratio d'éléments XRF, ou encore des indices univariés avec les capteurs VNIR, SWIR qui peuvent être davantage corrélés entre eux et ainsi obtenir une combinaison de ces capteurs plus fiable.

3.1.2 Les recalages et alignements locaux en utilisant les dimensions spatio-spectrales

La combinaison de capteurs que l'on vient de voir repose sur une approche globale 2D (recalage de plan d'images hyperspectrales) et 1D (alignement de profils de signaux spectroscopiques), alors que les données initiales sont 3D et 2D. Ces méthodes n'exploitent donc pas la totalité des données, alors que cela est un avantage qui pourrait augmenter la fiabilité de ces combinaisons. L'approche globale qui repose sur un couple de bandes représentant les principaux composés des échantillons (humidité, minéraux) peut ne pas être correcte localement. Notamment, avec la présence de variations bio-physico-chimiques différentes, comme par exemple avec des dépôts instantanés (crues, inondations, dépôts de cendres, incendies).

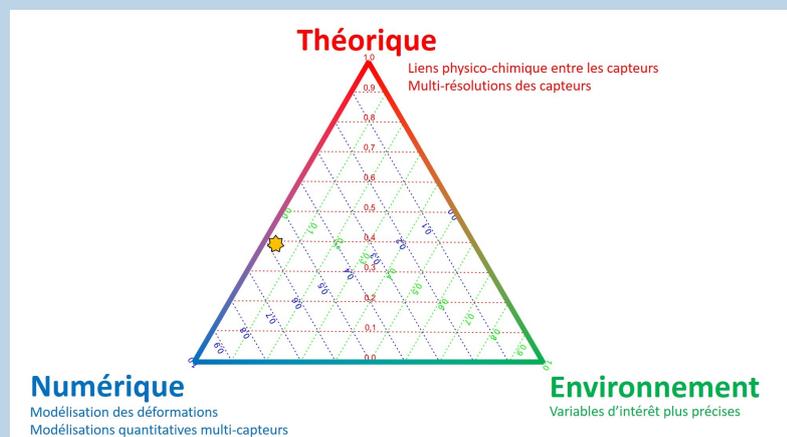
La méthode dense SIFT flow est une approche locale, mais n'utilise que des données 2D. Des descripteurs SIFT 3D ont été développés pour le recalage d'images médicales ou de vidéos [5, 6], mais la troisième dimension est liée au temps ou à des géo-références, ce qui est une relation très différente de la dimension spectrale de nos données hyperspectrales. C'est pourquoi Al-khafaji a proposé des descripteurs SIFT spatio-spectraux qui ont montré des performances plus importantes que des descripteurs SIFT 2D et 3D classiques pour le recalage d'images VNIR et Vis [7]. Il faut rappeler que les descripteurs SIFT sont la base des méthodes de recalage, car ils cherchent des points de contrôle dans chacune des images indépendamment les unes des autres, ensuite il faut utiliser des algorithmes pour la mise en correspondance.

3.1.3 Les co-évolutions entre les capteurs

Une fois les données recalées ou alignées, nous les avons concaténées pour créer des modèles prédictifs avec la PLSR. C'est une méthode simple qui donne de bons résultats. Mais on peut aller encore plus loin, en utilisant des méthodes avancées qui permettent de fusionner

des données multi-capteurs. Par exemple, on peut utiliser un opérateur pour le produit externe (Outer Product Analysis, OPA) qui consiste à multiplier chaque longueur d'onde d'un capteur avec celle d'un autre capteur pour chaque pixel pour créer une matrice augmentée de co-évolutions [8, 9]. Ceci peut aider les méthodes multivariées à trouver des zones discriminantes liées à la corrélation entre ces co-évolutions et une variable d'intérêt. Ce qui a d'ailleurs été mis en avant dans plusieurs études, et notamment récemment pour l'étude de la MO (Vis-PIR et MIR) et du chrome (Vis-PIR et XRF) dans le sol [10, 11]. Ils ont montré que la PLSR avec les co-évolutions faisait ressortir les longueurs d'onde des deux capteurs liées à la variable d'intérêt. Ils pensent que les co-évolutions permettent de faire ressortir les zones où il y a moins d'effets de masques induits par les importantes absorptions de certains minéraux masquant des composés mineurs dans ces zones.

Résumé :



Cet article en préparation montre qu'il est possible de recalibrer des images hyperspectrales avec des propriétés chimiques similaires et corrélées se retrouvant dans les différents capteurs. Nos échantillons sédimentaires sont composés entre autres de trois groupes de propriétés liées aux minéraux, à la matière organique et aux liaisons chimiques hydroxyles (OH, liées à l'eau, MO, minéraux) qui sont présents dans nos capteurs.

On a aussi montré que la combinaison de ces capteurs permettait d'améliorer les performances des modèles de prédiction. Des longueurs d'onde portant des informations liées à la matière organique et des paramètres texturaux sont présentes dans les différents capteurs utilisés. La méthode de modélisation proposée au chapitre 2 est donc robuste à ces combinaisons avec la sélection de longueurs d'onde pertinentes pour les différents jeux de données.

Mais les travaux actuels utilisent une partie des données pour les combiner (recalage d'images hyperspectrales 3D avec des données 2D, alignement de spectres 2D avec des profils 1D). Il faudrait s'intéresser aux descripteurs SIFT 3D spatio-spectraux développées récemment pour de futurs travaux.

Cette méthode peut donc maintenant être utilisée pour l'étude fine de certaines propriétés d'intérêt. Nous avons choisi la distribution des particules qui est ensuite utilisée pour l'estimation de sources d'apport sédimentaires.

3.2 La fusion "basse résolution" pour l'analyse des archives sédimentaires

La taille des particules est connue pour influencer sur les spectres de différentes gammes spectrales. Ces particules sont aussi caractérisées par leur minéralogie et compositions chimiques qui peuvent être estimées grâce aux informations spectrales. L'estimation de la taille des particules nécessite donc d'estimer leurs impacts physico-chimiques sur les spectres à notre disposition. L'article suivant décrit une méthodologie utilisant les données hyperspectrales recalées VNIR+SWIR pour la prédiction de la granulométrie. Il est en cours de review dans la revue *Sedimentary Geology*.

Nous avons montré que l'utilisation seule de l'imagerie hyperspectrale visible ou proche-infrarouge avec l'approche PLSR ne permettait pas de lier les données volumiques (granulométrie laser) et surfacique (imagerie). Les modèles prédictifs estimés pour le profil granulométrique (PSD) n'étaient pas assez performants (visible) ou ne permettaient pas d'obtenir l'évolution des dépôts sédimentaire attendue (proche-infrarouge). L'utilisation combinée des deux capteurs visible et proche-infrarouge avec un recalage spatial permet d'obtenir un modèle performant ($r_{val} = 0.83$) et des prédictions cohérentes ($r=0.93$) pour du profil granulométrique. Des modèles ont aussi été estimés et validés pour les classes granulométriques (argiles, silts, sables très fins, sables fins). Les longueurs d'onde sélectionnées pour ces deux types de modèles (classes et profil granulométrique) sont en accord, ainsi qu'avec la littérature. Elles correspondent à des zones minérales (oxydes : 400-600 nm, minéraux argileux : 2200 nm et 2400 nm), organiques (caroténoïdes : 470-550 nm, chlorophylle : 670 nm, liaisons hydroxyles et alkyles : 1150 nm) et enfin liées aux liaisons chimiques hydroxyles (900 nm, 1450 nm). A partir des PSD, on peut recalculer les classes granulométriques [12], les corrélations sont supérieures à 0.9, sauf pour la classe des silts, ceci est probablement dû à un défaut de modélisation du PSD dans ces tailles de particules ou aux caractères semi-argile/sable.

Le profil granulométrique est un bon indicateur des sources d'apport sédimentaire, car il s'agit d'une somme de sous-profils. Avec l'utilisation d'un algorithme de démélange comme AnalySize [13], il est possible d'estimer ces sources. Dans le cas du Bourget (carotte A), six sources avaient été déterminées, dans une précédente étude, par comparaison entre la microscopie et des profils granulométriques estimés par un granulomètre laser [14]. Quatre de ces sources ont été retrouvées avec les profils prédits par imagerie hyperspectrale. Les deux autres n'étant pas inclus dans la gamme de taille de particules prédites. Il est ainsi possible de voir leurs variations au cours du temps avec la résolution de 200 μm . La combinaison de ces sources permet de caractériser les structures de l'échantillon (lamines, crues) [15, 16]. Trois lamines peuvent être caractérisées correspondant aux saisons, le printemps lié aux diatomées et aux gros cristaux de calcite, l'été associé aux petits cristaux de calcite, et l'hiver aux particules détritiques. Ensuite, par délimitation de celles-ci, il est possible d'extraire des spectres purs moyens pour interpréter leurs physiques et chimies. Ceci a aussi permis de compter les lamines, ce qui est en accord avec le modèle d'âge de l'échantillon. Enfin, il est possible d'estimer des taux d'accumulations pour voir les évolutions annuelles et ainsi voir des changements environnementaux [15].

High-resolution grain size distribution of sediment core with hyperspectral imaging

Kévin Jacq^{1,2}, Charline Giguët-Covex¹, Pierre Sabatier¹, Yves Perrette¹, Bernard Fanget¹,
Didier Coquin², Maxime Debret³, Fabien Arnaud¹

1 Univ. Grenoble Alpes, Univ. Savoie Mont Blanc, CNRS, EDYTEM, 73000 Chambéry, France

2 Laboratoire d'Informatique, Systèmes, Traitement de l'Information et de la Connaissance (LISTIC), Université Savoie Mont-Blanc, 74944 Annecy Le Vieux Cedex, France

3 Laboratoire de Morphodynamique Continentale et Côtière, Université de Rouen, UMR CNRS 6143, 76821 Mont-Saint-Aignan, France, Université de Caen, UMR CNRS 6143, 14000 Caen, France

Corresponding Author:

Kévin Jacq

UMR CNRS 5204 Environnements, Dynamiques et Territoires de la Montagne (EDYTEM)

Université Savoie Mont Blanc, Campus scientifique,

73376 Le Bourget du Lac cedex, France

kevin.jacq@univ-smb.fr

Abstract

The study of sediment cores allows for the reconstruction of past climate and environment through physical-chemical analysis. Nevertheless, this interpretation suffers from many drawbacks that can be overcome with the newest technologies. Hyperspectral imaging is one of these and allows a fast, high resolution, and non-destructive analysis of sediment cores. In this study, we use visible and near-infrared hyperspectral imaging to predict particle size fractions and distribution (PSD) at a resolution of 200 μm on a previously well-studied sediment core taken from Lake Bourget (Western Alps, France). These predictions agree with previous studies on this core. Then, the PSD was used to estimate sedimentary deposit sources using the PSD unmixing algorithm AnalySize. It permitted estimation of the contribution of five sources (micrite, small and large bio-induced calcite crystals, diatom frustules, detrital particles), which had previously been characterized. The spatial dimension allowed for laminae to be discretized and counted, in agreement with the age-depth model previously established. We then evaluated the particle size and spectral signatures of each of these annual laminae, hence characterizing their physico-chemical composition. These high-resolution data also allowed for estimation of the accumulation rate (cm/year) of each of the main sources in the laminated unit and inferring the trophic status and the presence of instantaneous events of the lake.

Keywords: Grain size distribution, Hyperspectral Imaging, Chemometrics, Visible and Near-Infrared Spectroscopy, End-Members

1. Introduction

Particle size analysis is widely used in sediment studies. Several methods exist, such as gravimetric sedimentation, sieving or laser diffraction. The last one is the most used for fine lacustrine sediment. Such laboratory analyses of sediment textures are time and material consuming, labor-intensive, destructive and have low spatial resolution (0.5-1 cm sampling-steps are typically run) and thus temporal resolution. Spectroscopic methods show great possibilities to estimate particle size fractions (clay, silt, sand) without any sampling (Viscarra Rossel et al., 2016; de Santana et al., 2018; Nanni et al., 2018). The classically used coarser fractions, i.e., silt and sand, seem the most complicated to predict in several studies (de Santana et al., 2018; Nanni et al., 2018). The physical properties of the sediment can be estimated with the spectra baseline that is affected by the grain size in the visible and near-infrared ranges (Wetzel, 1983). It was also done in remote sensing with multispectral imaging (Casa et al., 2013; Demattê et al., 2015; Nouri et al., 2017). Multi- and hyper-spectral imaging are methods in the interface of spectroscopy and imaging with the acquisition of an image in which each pixel is characterized by a reflectance spectrum. Recently developed hyperspectral core loggers open new possibilities for the high-resolution prediction of organic matter (Van Exem et al., 2018; Jacq et al., 2019b) and pigments (Butz et al., 2017) and could thus be used also for the estimation of particle size.

The particle size distribution (PSD) is even more informative than the particle fractions. Some studies show the potential of visible and near spectroscopy to estimate the PSD (Hermansen et al., 2017). To go further, the PSD allows for differentiation and quantification of the different compounds of the sediment (deposition sources, processes), each of which is characterized by its PSD signature. Several algorithms have been proposed to estimate the relative contribution of these pure signatures in a sediment mixture (Heslop et al., 2007; Dietze et al., 2012; Paterson and Heslop, 2015; Yu et al., 2016; Zhang et al., 2017). Van Hateren et al. (2017) argued that only a statistical comparative study of these estimated end-members and or a geological background could validate these signatures. The particle size end-member analysis of annually deposited sediments permits discrimination of allochthonous and autochthonous compounds to study varve formation and seasonal deposit variations over time (Żarczyński et al., 2019). The estimated end-members also allow for characterization of their relative abundance in each sample and therefore through time. It is also interesting to study instantaneous events, such as floods, to estimate their intensity for example.

This study aims to use hyperspectral imaging to estimate particle size fractions and distribution, then to estimate and characterize end-members. Partial least squares regression (PLSR) is one of the most used multivariate methods for the development of a quantitative predictive model with spectroscopic and physical-chemical data. PLSR is used to estimate particle size fractions and distribution in the same way as for organic matter (Jacq et al., 2019b). Two hyperspectral imaging sensors were used to cover the spectroscopic ranges from visible to near-infrared light (Vis-NIR: 400-2500 nm). A laser grain-sizer was used to estimate

the particle size distribution and then after statistic treatment, the main fractions and other variables (D50, D90, skewness, kurtosis). The AnalySize Matlab function was used to unmix the PSD end-members and to estimate their abundance along the core. The proposed methodology is applied to a Lake Bourget sediment core and is compared with previous studies (Giguet-Covex et al., 2010; Jenny et al., 2013, 2014). Then, the end-members were used to characterize the annual laminations (varves), to count them, to estimate their accumulation rate per year and their Vis-NIR signatures.

2. Site description

Lake Bourget is a hard-water lake, 18 km long and 2.8 km wide, located at an altitude of 231.5 m at the northwestern edge of the French Alps (Fig. 1). The rivers Leysse and Sierroz flow into Lake Bourget, which then flows into the Rhone River by the Saviere Channel under normal hydrological conditions. However, during major floods, water from the Rhone River flows into Lake Bourget with the reversal of the water-current of this channel. The sediment is mainly composed of river-borne silicate, between 10-40%, and carbonate, between 60-90%. The ratio between these two compounds varies depending on past climate conditions (Arnaud et al., 2005, 2012; Debret et al., 2010; Giguet-Covex et al., 2010; Jenny, 2013; Jenny et al., 2014).

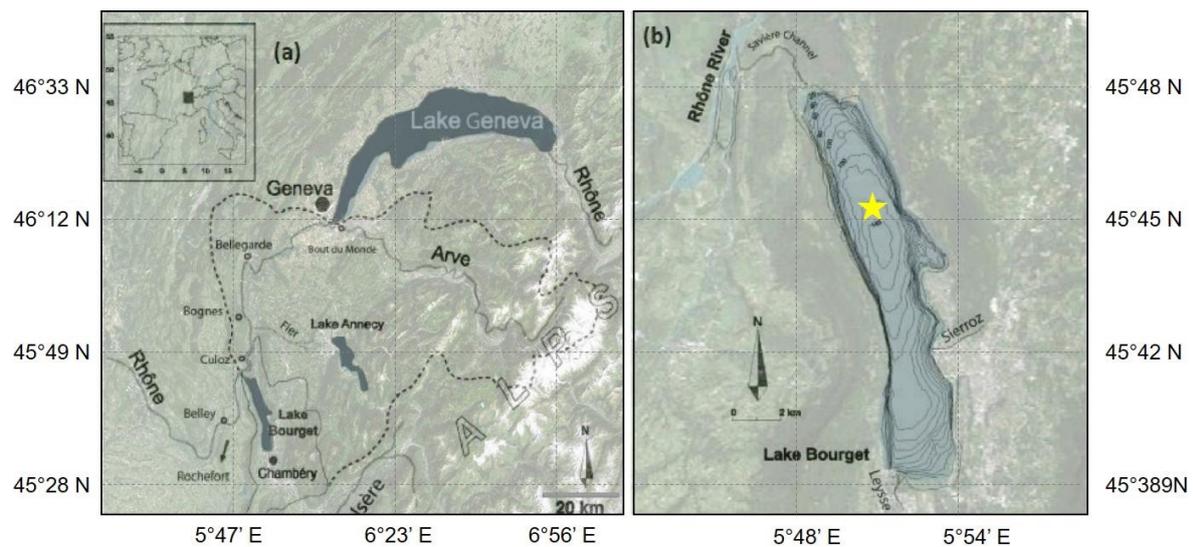


Fig. 1. (a) Location and the catchment area of Lake Bourget. (b) Bathymetry, tributaries and effluents of the lake with the coring site.

The location of core LDB09-P101 (length = 54 cm, width = 9 cm) was selected in the northern basin of the lake (45°45'20.0"N 5°51'19.9"E, 145 m water depth). It was sampled for the IPER-RETRO program (ANR-08-VUL 005; Perga et al., 2015)). This site was selected because it contains both laminated sediments as well as interbedded deposits triggered by the Rhone River (Jenny, 2013).

3. Materials and methods

3.1. Sample preparation and measurement

The core was divided into two halves, one that was used for PSD and several destructive analyses, the other used for non-destructive analysis such as the hyperspectral imaging. This LDB09-P101 core is correlated to dated reference cores sampled in this lake, thanks to radionuclides (^{210}Pb , ^{137}Cs , ^{241}Am), historically known instantaneous events and varve counting (Jenny, 2013).

3.1.1. Particle size distribution

Particle size distribution (PSD) analyses were carried out on bulk sediments (5 mm thick, $n = 18$) using a Malvern Mastersizer 800S. This device uses the laser diffraction principle to estimate the particle diameter and estimate a distribution of them for 64 known classes between 0.06 μm and 800 μm . Then statistics allowed to calculate the mean particle size, several percentiles (e.g., median, D90, D99), mode, sorting, and particle size fraction (clay, silt, sand).

3.1.2. Hyperspectral Imaging analyzes and registration

A hyperspectral image (HSI) is an image with high spatial resolution, in which each pixel contains a spectrum with a continuous spectral resolution.

The core was analyzed with two hyperspectral sensors (Specim Ltd., Finland) with the lens OLES22,5 at the M2C lab, University of Normandie-Rouen. The sensors are the Visible and Near InfraRed (VNIR, 400-1000 nm, 6 nm spectral resolution, 50 μm spatial resolution) and the Short-Wave InfraRed (SWIR, 968-2574 nm, 12 nm spectral resolution, 200 μm spatial resolution).

The sediment core must be as flat as possible for the analysis, so cleaning of the core was made, that also revealed the finest sediment structures. Spectral calibration of the camera was made with a spectralon reference to have reliable intensity. The spatial calibration was achieved by imaging a known object to obtain its true shape and thus obtain squared pixels. The calibration was checked at the end of the acquisition and no deviation was observed. More details about the acquisition protocol can be found in Butz et al. (2015).

A composite sensor was created by down-sampling the VNIR sensor at 200 μm and a spatial registration to fit spatially the two hyperspectral images. The registration was made with the moisture content that can be recovered in the two sensors at 970 nm for the VNIR and at 1200 nm for the SWIR (Ce Liu et al., 2011; Jacq et al., 2019a). The SWIR image was registered on the VNIR one, because it has a lower resolution. Thus, a deformation model was estimated with these wavelengths and used on all the SWIR spectral planes. Then the two registered hyperspectral images were put together to create a composite sensor that covers the

wavelengths between 400 nm and 2574 nm. It was not possible to up-sample the SWIR sensor at 50 μm because the spatial details cannot be estimated (Jacq et al., 2019a).

3.2. Data Analysis

ENVI 4.8 was used to perform the data acquisition. Then, MATLAB (R2018a, MathWorks) was used for advanced processing and analyzing these data. PLSR was used to establish a relationship between the HSI and the PSD of the core to create predictive models and then to estimate the PSD in each pixel. Then AnalySize Matlab function was used to unmix the predicted PSD to find pure sources (Paterson and Heslop, 2015).

3.2.1. Predictive model estimation

A multivariate method was used to create quantitative predictive models with the particle size and the VNIR-SWIR spectra of the core. Several noisy bands due to the detector were removed on two sides of the spectra of each sensor; consequently 202 of 242 wavelengths were used. An autoscale spectral pre-processing was realized to reduce the matrix effect. Calibration spectra are median spectra of the particle size sampling areas.

PLSR was used to model the relation between the spectra and the reference particle size values. This method is based on the extraction of orthogonal predictor variables (also called latent variables, LV) corresponding to the maximum variability in the spectral bands used as predictors linked to one or several predicted variable(s) (Wold et al., 1984). Two main algorithms exist, called PLS1 and PLS2, the difference is the number of dependent variables to predict. PLS1 is used when a single variable is predicted. When there are several variables to predict, several PLS1 can be realized, or a single PLS2 if variables to predict are dependent. PLS1 was used to predict particle size fractions, whereas PLS2 to predict the PSD because the fine particle fractions are highly correlated and co-dependent. The spectra register some biological-physical-chemical properties of the sample. For a specific proxy, all these spectral information were not mandatory, so we decided to use a variable selection algorithm (random frog, genetic algorithm) with the PLSR. This allowed to find the most relevant wavelengths, decrease redundancy and to interpret the model chemically. More details about this methodology can be found in Jacq et al. (2019b). Model accuracy was estimated with calibration and validation correlation coefficients and its uncertainty (Unc (%)). Another correlation is calculated between the median predictions of the sampling areas and the reference PSD to validate that the surface acquisition by hyperspectral methods contains the volume information of the particle size analyses ($r_{V/S}$).

3.2.2. Sedimentary deposition sources discrimination

Each PSD is a mixture of pure sub-PSD, that can be related to some specific sediment source. The Matlab function AnalySize (Paterson and Heslop, 2015) was used to unmix each PSD and find these end-members. The assumption behind this function is a linear model equation (Eq. 1):

$$X = A \times S^T + E \quad (\text{Eq. 1})$$

with X the reference PSD profile, A the estimated abundance, S^T the estimated PSD of the pure components and E the residual matrix.

The intensity of the PSD and its abundance should not be negative. Thus, non-negative spectra and concentrations constraints were used. Another constraint was added to have the sum of abundance and the intensity of S^T at 1.

AnalySize allows estimating end-members in two ways. One is called non-parametric end-member analysis (EMA) that estimates end-members empirically from the whole dataset. The other uses a parametric distribution (Weibull, skewed generalized Gaussian distribution) to fit the PSD. A parametric distribution was chosen to unmix the predicted PSD to overcome uncertainties of the model prediction that disturb the sum of Gaussian theoretical distributions.

4. Results

4.1. Lithology and particle size variations

The Lake Bourget sediment core presents three main units (Fig. 2b) that are mainly composed of clay and silt fractions (Giguet-Covex et al., 2010).

Unit I, between 0 and 18 cm depth, presents millimeter-thick biochemical varves and corresponds to perennial anoxic conditions at the lake-sediment interface, with a particle size mode near 22 μm (Giguet-Covex et al., 2010; Jenny, 2013). This facies is related to the development of human-triggered lake eutrophication. It is characterized by a triplet of laminae made of different components (Giguet-Covex et al., 2010) (Supplementary materials 1, 2). The lowermost lamina (dark-brown after oxidation) is deposited in spring and is mainly composed of diatom frustules and large bio-induced calcite crystals. The intermediate lamina (whitish to ochre after oxidation) is deposited in summer. It is composed of large and mostly small calcite crystals, micrite, few diatoms frustules and organic matter. The uppermost grey lamina corresponds to the winter deposit, which mainly contains organic matter and detrital particles. Some years a bloom of diatoms can occur in the fall. The presence of the large bio-induced calcite crystals and a high amount of diatoms is characteristic of the eutrophication period.

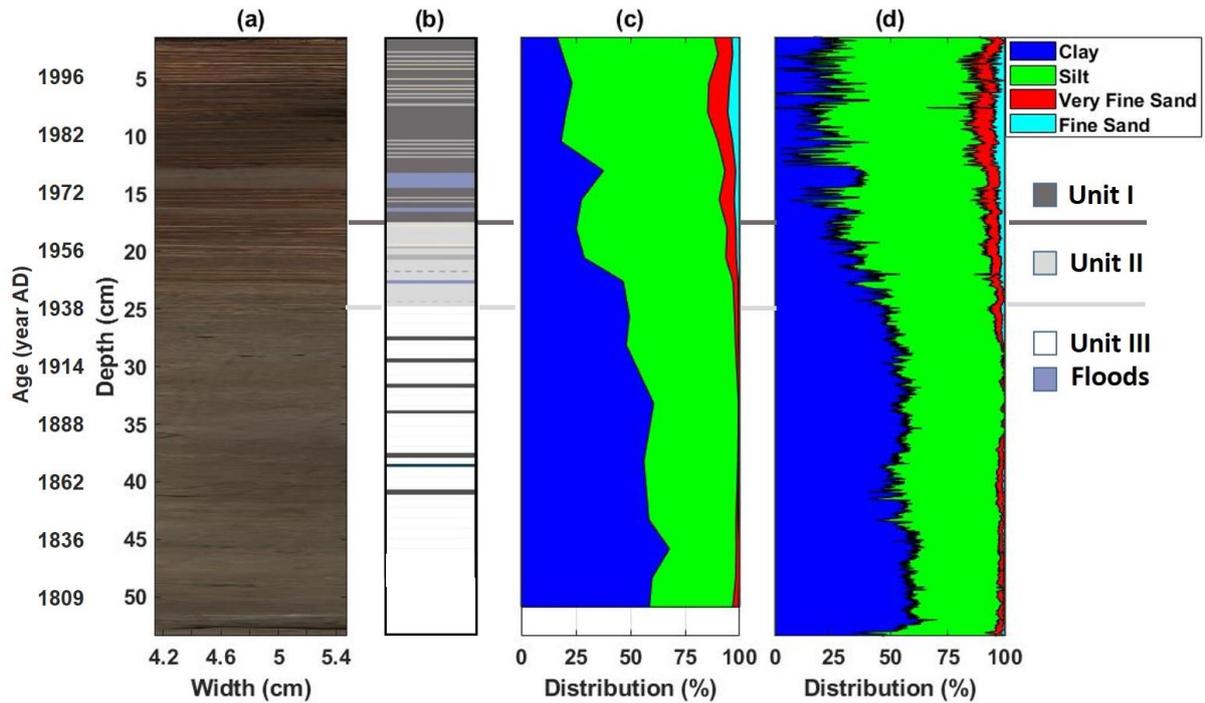
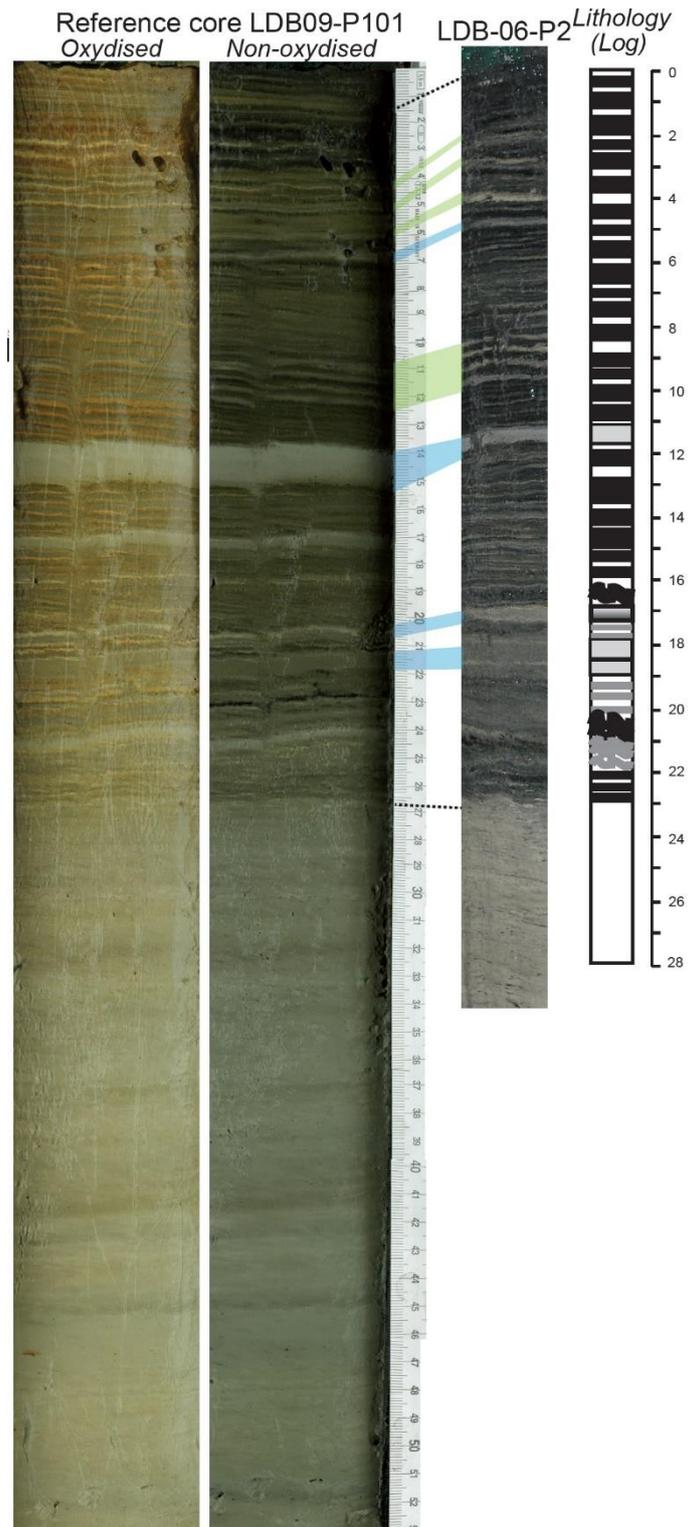
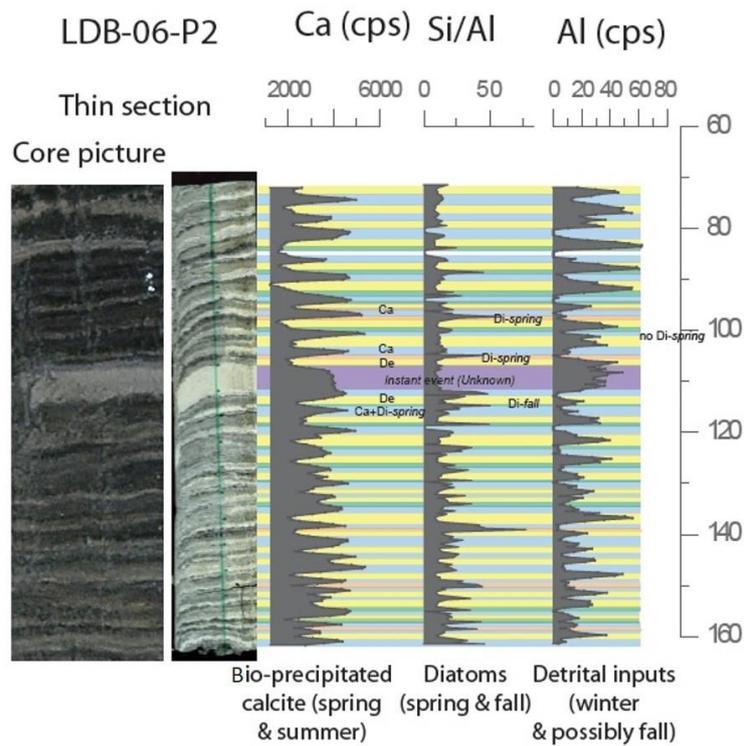


Fig. 2. (a) Image of the core, (b) lithology (with three units and flood deposits), (c) particle size fractions (in %) by the laser granulometer and (d) average predicted particle size fractions (in %) by the hyperspectral imaging.

Unit II, between 18 cm and 26 cm depth, presents disturbed varves with a decreasing particle size mode from 22 μm to 6 μm . Unit III, between 26 cm and 54 cm, is characterized by fuzzy laminated structures and a particle size mode near 6 μm . In the two first units, there are also instantaneous event deposits mostly triggered by floods (Jenny et al., 2014). One major instantaneous event occurs between 13.5 cm and 14.5 cm (Fig. 2b).



Supplementary material 1. Correlations of the sediment cores use for our (LDB09_P101) and Giguet (LDB06_P2) studies (*Giguet-Cover et al., 2010*)



Supplementary material 2. Thin section of the LDB06_P2 core used for the Ca, Al and Si counts by micro-XRF.

Eighteen measurements of PSD were performed on the core with a range of the clay fraction between 14-68% with a mean of 40%, and a range for the silt fraction between 30-71% and a mean of 53%. Particle size fraction according to depth can be seen in Fig. 2c and the equivalent PSD in Fig. 3b.

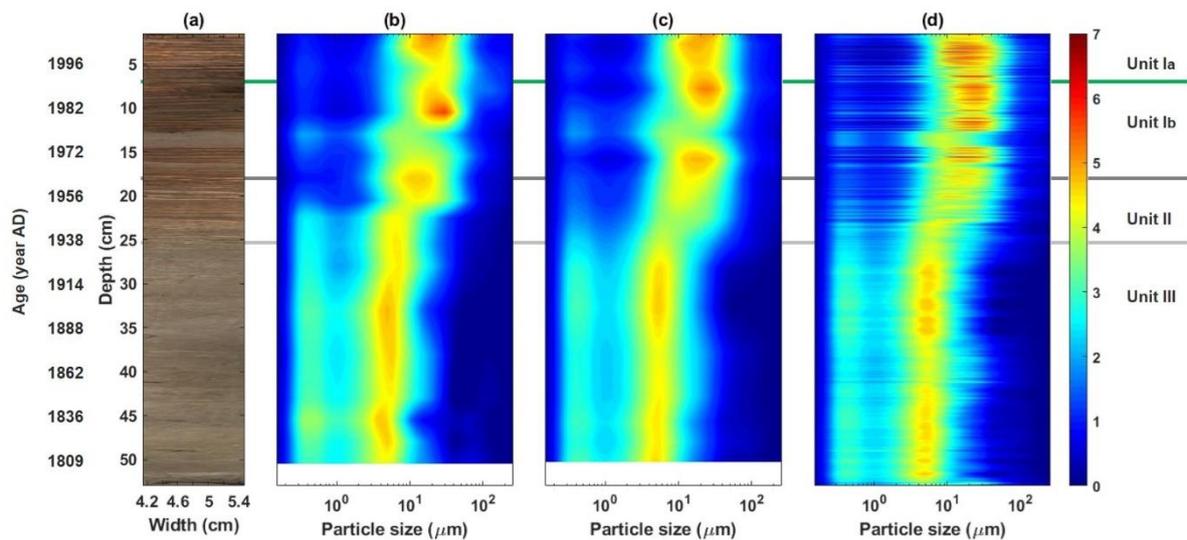
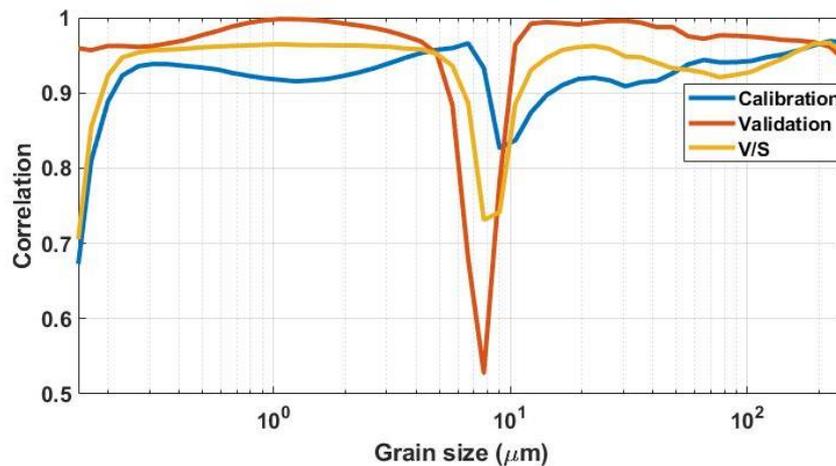


Fig. 3. (a) Image of the core, (b) PSD (in %) of the laser granulometer, (c) predicted PSD (in %) subsampled at the sampling resolution (5 mm), and (d) high-resolution predicted PSD (in %) by the hyperspectral imaging.

4.2. Predictive models of particle size fraction and PSD

PLSR was used to generate quantitative models of the four main particle size fractions (clay, silt, very fine sand and fine sand) and also one to predict the 50 (out of 64) PSD classes from 0.15 μm to 259 μm of the core. The other classes do not have enough variabilities or spectral information to be modeled. Consequently, five models were created. The performance of each is presented in Table 1. All the models are validated with correlation coefficients (r_{cal} and r_{val}) and $r_{\text{v/s}}$ above 0.9 except for five classes between 6 μm and 10 μm of the PSD model with correlations greater than 0.5 (Supplementary material 3) due to very low variability in these classes. A similar number of selected wavelengths and LV was found between these models. Except for the silt fraction (4.0-62.5 μm) with a higher number of LV that induces a more complex spectral modeling, this agrees with the five classes between 6-10 μm that present lower modeling performances.



Supplementary material 3. Correlation coefficients of the PSD models in calibration, validation and for $r_{\text{v/s}}$.

Table 1. Statistics of the reference data and models performances (number of latent variables (LV) and of selected wavelengths (wl), calibration and validation correlations (r_{cal} and r_{val}), uncertainty (Unc), volume-surface correlation ($r_{\text{v/s}}$)) for the four particle size fractions and the averaged of the fifty classes of the PSD.

	n	Reference			Prediction					
		Range (%)	Mean (%)	Std (%)	LV	wl	r_{cal}	r_{val}	Unc. (%)	$r_{\text{v/s}}$
Clay (1-3.9 μm)	18	14.33-67.85	39.94	18.06	4	21	0.91	0.94	7.39	0.96
Silt (3.9-62.5 μm)		30.49-71.09	53.56	13.40	7	11	0.91	0.90	9.01	0.92
Very Fine Sand (62.5-125 μm)		0.44-9.33	4.11	3.06	4	7	0.86	0.95	1.32	0.89
Fine Sand (125-250 μm)		0.05-5.36	1.77	1.63	4	6	0.93	0.95	0.86	0.69
50 PSD classes (averaged values)		0.68-3.40	1.99	0.90	4	44	0.85	0.83	0.71	0.93

The selected wavelengths of these models allow us to identify the structural information that are correlated with the particle size effect (Viscarra Rossel and Behrens, 2010; Jacq et al., 2019b). The selected wavelengths for the grain size fractions and PSD predictions are consistent. This allows for identifying precisely the spectral areas of each particle size fraction. Nine spectral areas can be seen (Fig. 4):

- (1) Carotenoids and/or iron oxides compounds can be associated with wavelengths around 470 nm;
- (2,3) Two other areas can be linked to the presence of iron oxides presence (around 550 nm and 625 nm);
- (4) Chlorophyll pigments absorb around 700 nm;
- (5,7) The absorption wavelengths around 900 nm and 1450 nm can be due to water content, and this can be residual water that can be related to porosity;
- (6) Organic and hydroxyl bonds are associated with wavelengths around 1150 nm;
- (8) Mineralogical clay compounds wavelengths around 2200 nm are needed to predict physical clay fraction;
- (9) around 2400 nm are wavelengths associated with some mineral hydroxyl bonds.

Areas 1-5 and 7-8 are used for the prediction of fine fractions, such as clays and silts, whereas areas 5-6 and 9 are related to coarser fractions (very fine and fine sand).

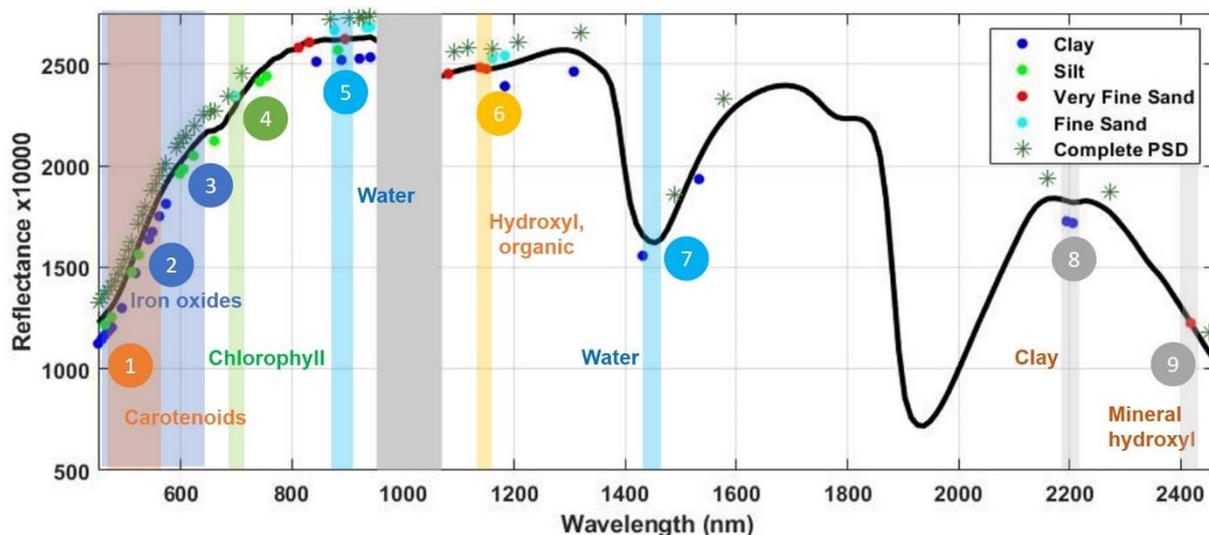


Fig. 4. Selected wavelengths and associated compound areas for the five models (four fractions and the complete PSD) in the visible range on the left, the near-infrared range on the right and a gap between them in the grey area.

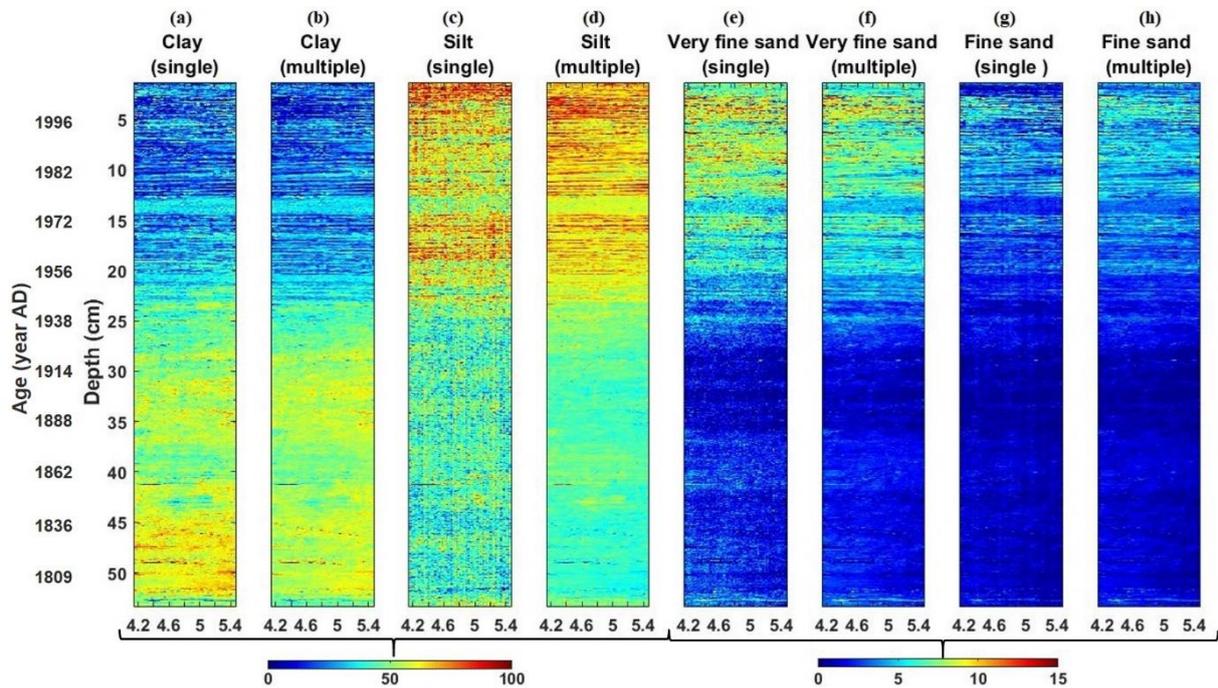
Most of the selected wavelengths (34 over 44) are in the VNIR range, but that does not imply that the SWIR selected wavelengths are not relevant, because they contain relevant particle size information. Furthermore, the use of only one of the two sensors, independently of the other, does not allow to obtain a performant model. If only the VNIR is used, the performances of prediction are lower than 0.9, and the uncertainty is slightly higher. The same applies to the SWIR with performance lower than 0.9 and an inversion of the grain size of laminae (in which

coarse grains are predicted as fine grains). This shows the importance of combining sensors of several spectral ranges to improve modeling performances with complementary information.

4.3. Prediction distribution

The predicted PSD in Fig. 3d evidence the same three units than the reference PSD in Fig. 3b (unit I: 22 μm , unit II: 22-6 μm and unit III: 6 μm). The down-sampling of the predicted PSD in Fig. 3c allows for surface and volume analysis to be linked together with a correlation of 0.96 ($p < 0.05$) with the reference PSD. Two instantaneous deposits are quite visible at 14 cm and 16 cm depth through a marked drop in particle size.

The 50 models (one for each grain size class of PSD) allow estimation of the particle size fractions with the sum of the fine classes associated to the fractions according to the Wentworth scale (Wentworth, 1922). The correlation between the prediction maps of a single or several models and the bias (difference of the predicted values) have been estimated (Table 2, Supplementary material 4). This shows that the coarser the particle size, the lower the correlation. Moreover, there is more bias for the silt fraction, which matches the observation of $r_{V/S}$ for the class between 6-10 μm . The $r_{V/S}$ is better for those estimated with a single model (Table 1), and the abundance maps (Supplementary material 4) seem to be smooth for those estimated from the predicted PSD.



Supplementary material 4. Abundance maps of the particle size fractions estimated with their models (single, a-c-e-g) or with the predicted PSD (multiple, b-d-f-h) (in %).

Table 2. Correlation and bias between the abundance maps of the particle size fractions estimated by their PLSR models or with the PSD prediction; volume-surface correlation of the map estimated with the PSD prediction.

Fraction	Correlation (p-value)	Bias (%)	$r_{V/S}$
Clay (1-3.9 μm)	0.95 (<0.05)	2.14	0.91
Silt (3.9-62.5 μm)	0.61 (<0.05)	9.17	0.93
Very Fine Sand (62.5-125 μm)	0.94 (<0.05)	0.03	0.77
Fine Sand (125-250 μm)	0.92 (<0.05)	-0.20	0.72

4.4. Sediment sources

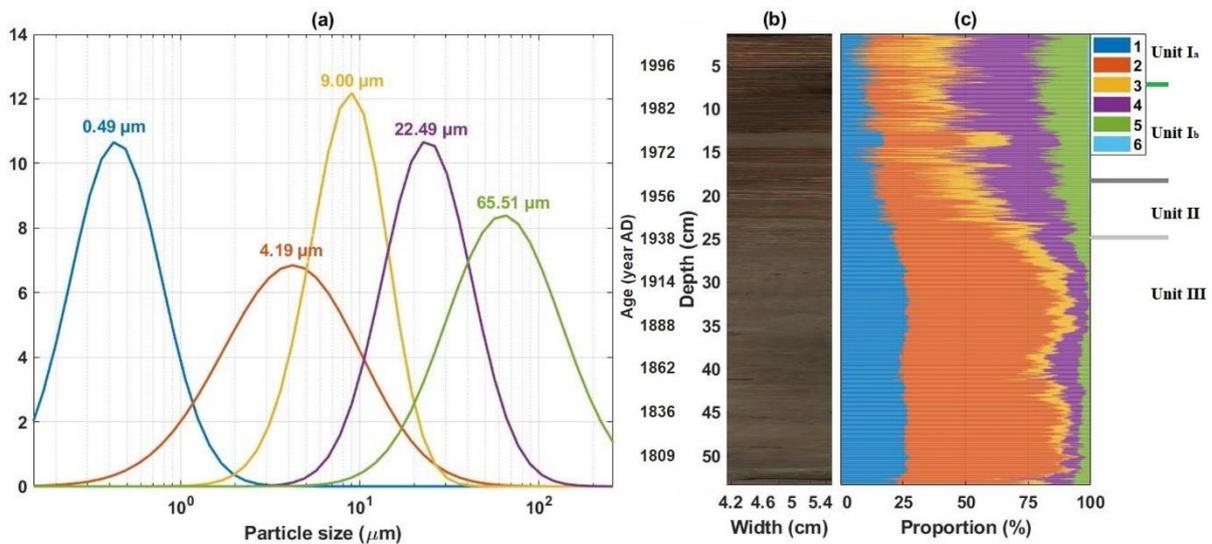


Fig. 5. (a) The five end-members estimated with the predicted PSD by HSI, (b) image of the core, (c) profiles of the five sources (1-5) and the residual part (6) estimated with the averaged of the EM maps along depth (in %).

Five classes (EM) with their modes and abundances were estimated using the AnalySize function applied to the PSD prediction (Fig. 5a-c):

1. The first one (EM1) has a mode at 0.42 μm (width at half height: 0.2-0.9 μm) and shows a decreasing abundance trend from the bottom to the top of the core, from 25% to 10%.
2. The second (EM2) is centered at 4.19 μm (width at half height: 1.44-12.21 μm). It has an upward decreasing trend from 62.5% to 5% and is mainly present below 25 cm depth and in instantaneous event deposit with values higher than 30%.
3. The third (EM3) has a mode at 9.00 μm (width at half height: 4.88-15.21 μm) and has an abundance quite stable at 10% except an increase at 15% in the instantaneous event.
4. The fourth (EM4) centered at 22.49 μm (width at half height: 12.21-45.51 μm) is mainly present in the first 25 cm (eutrophic part) with an increasing upward trend from 5% to 30%.

5. The fifth (EM5) has a mode at 65.51 μm (width at half height: 26.2-150.0 μm) and is mainly present in the first 25 cm (eutrophic part) with an increasing upward trend from 5% to 25%.
6. The residual part is mainly present in the two first units and has values lower than 2.5%.

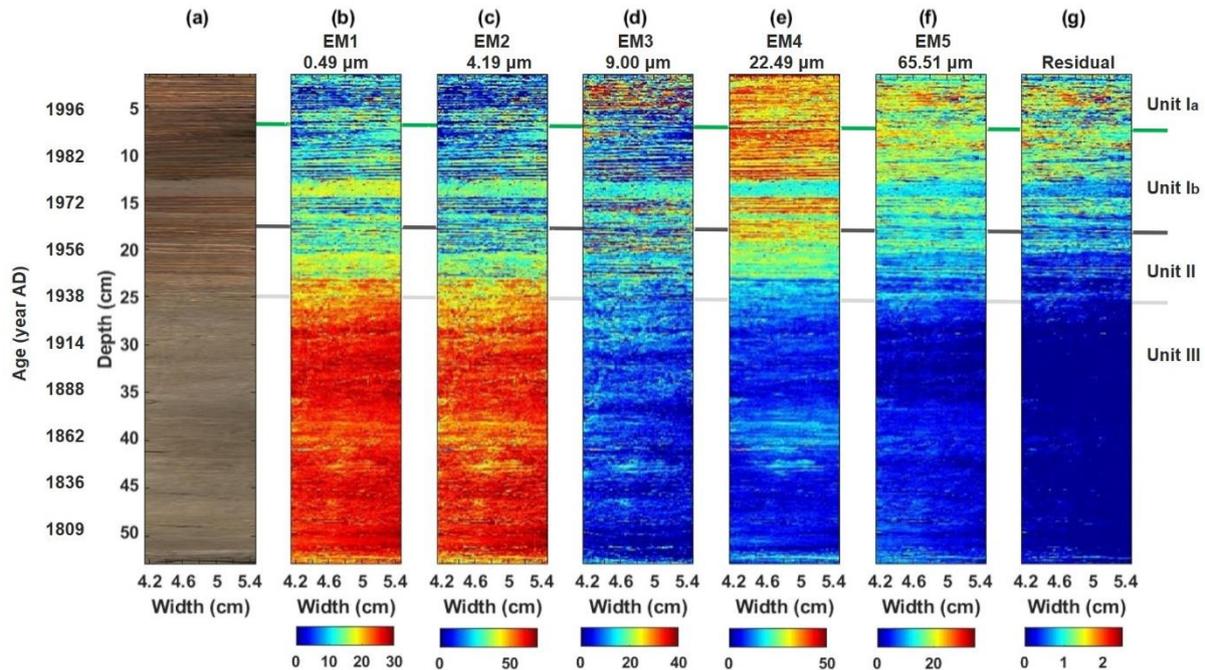


Fig. 6. (a) Image of the core, (b-f) the abundance maps of the five end-members estimated by AnalySize and (g) the residual fraction (in %).

The abundance maps in Fig. 6b-f show down and cross variations of the five pure classes. The two first (EM1-2) have the same variations and a high correlation of 0.99 ($p < 0.05$). They characterize unit III, i.e., the pre-eutrophication unit. Their trend along the core depth is the opposite of those of the two last (EM4-5) regardless of the proportions. EM4-5 are thus enriched in unit II and mostly unit I. The EM3 map is different with a quite homogeneous variation along the core except in specific lamina in the two first units. This end-member is also relatively abundant in the instantaneous event layer. The residual fraction (Fig. 6g) is more present in the laminated part of the core that might be explained by the presence of other sediment sources or a change in the size of previous sources.

5. Discussion

5.1. Interpretation of the sources based on the laminae succession

To interpret the end-members, we discuss a few laminae successions to see their compositions with the three main modes (EM2-3-4, Fig. 7) and to compare with previous descriptions of the laminae (Giguët-Covex et al., 2010) (Supplementary material 2). As presented in the lithological description, there are three different laminae, which are also well discriminated by the end-members (Fig. 7; Supplementary material 2). Based on PSD from the carbonated and

decarbonated fractions of the sediments, Giguet-Covex et al. (2010) defined six classes corresponding to different sediment components. Five of these classes can be associated with the end-members determined in this study. EM4 agrees with the size range for large calcite crystals (15-30 μm) and diatoms (30-45 μm). EM3 reflecting small calcite crystals were characterized by a mode between 4.5 μm and 8 μm by Giguet-Covex et al. (2010). EM2 fits well with the detrital particles previously defined with a mode between 6 μm and 9 μm . EM1, which is highly correlated to EM2 (0.99 ($p < 0.05$)), was also observed but not discussed in the previous study (Giguet-Covex et al., 2010). This mode was only present in the carbonated PSD. We thus interpret it as representing micrite deposits. EM5 can be associated with a mix between diatom frustules and organic matter because it is highly correlated with EM4, which characterizes the spring lamina (i.e., the time of diatom bloom).

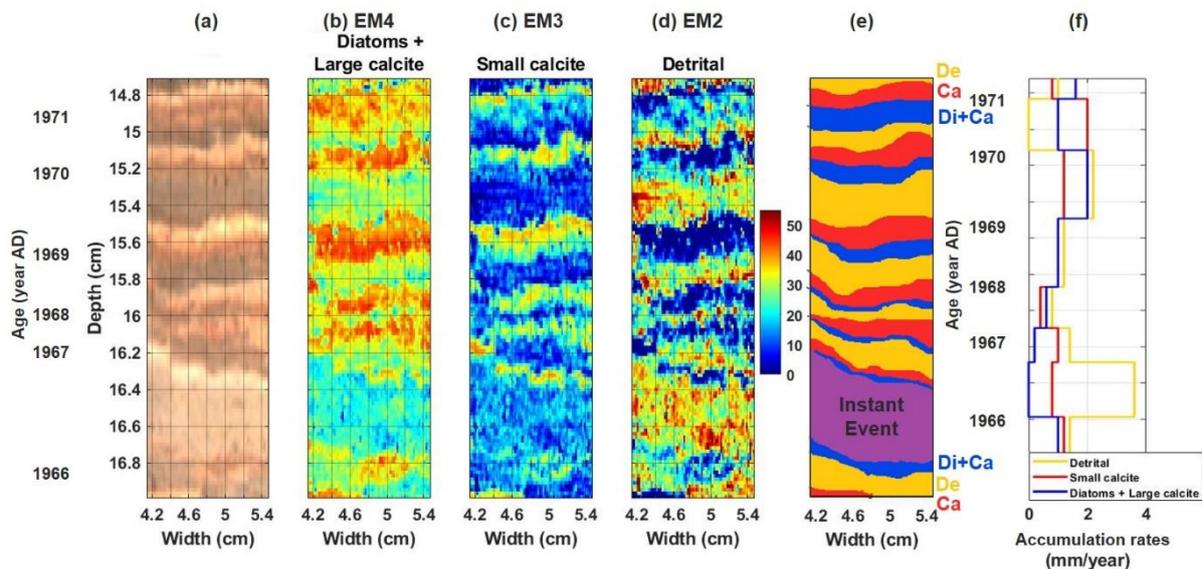


Fig. 7. (a) Image of a laminated area, (b-d) the three main end-members abundance maps (EM4-3-2 in %), (e) schematic succession of the lamina; (f) estimation of the annual accumulation source rates (in mm/year).

Due to the predicted PSD range (0.15 μm to 259 μm), two modes determined in the previous study cannot be estimated with hyperspectral data (OM: 150-350 μm and very large carbonate particles: 160-300 μm). The modes are not the same due to the data used for their estimations. In Giguet-Covex et al. (2010), PSD from the carbonated and decarbonated fractions of the sediments were used. Whereas in our study, we use the complete PSD that corresponds to a mix between the two fractions.

5.1.1. Lamina counting

The small calcite crystals (EM3; Fig. 7c), are quite localized and can be discriminated from the others. It is possible to enhance it with image processing. An abundance threshold is fixed at 40% to binarize the abundance map, in which upper values correspond to the EM3 deposit, and below this value to another one. A median filter is used to remove solitary points. Then, the lamina can be easily manually counted. They are correctly counted, until the year 1953, so 57 laminae can be discriminated. Before this, they are too fuzzy and thin. Also, the small calcite

crystal abundance decreases lower than 40%, and even a linear decreasing threshold allows with difficulty to discriminate this deposit because of laminae thinness.

5.1.2. Estimation of the accumulation rate for each lamina

The accumulation rate of each lamina can be estimated if the first pixel of each year is determined. The EM2-3-4 maps were reduced to a median signal along depth, the EM4 trend shows fluctuations that can allow the beginning of the year to be identified. Unfortunately, it is too variable to use automatic detection, so manual selections were made. Then, each pixel is associated with one of the three laminae based on their EM percentage. Because the spring and summer laminae are related to the same compounds (EM3-4) that overlap spatially, a rule based on the EM3-4 values is proposed to separate them. If the value of the EM3 is greater than 40% of the EM4 one, then the corresponding lamina is summer, otherwise, it is the spring. There is not this kind of problem with the winter lamina (EM2). Finally, this classification signal is used to count the number of pixels of each season in a year to estimate accumulation rate for each lamina (Fig. 7f and 8).

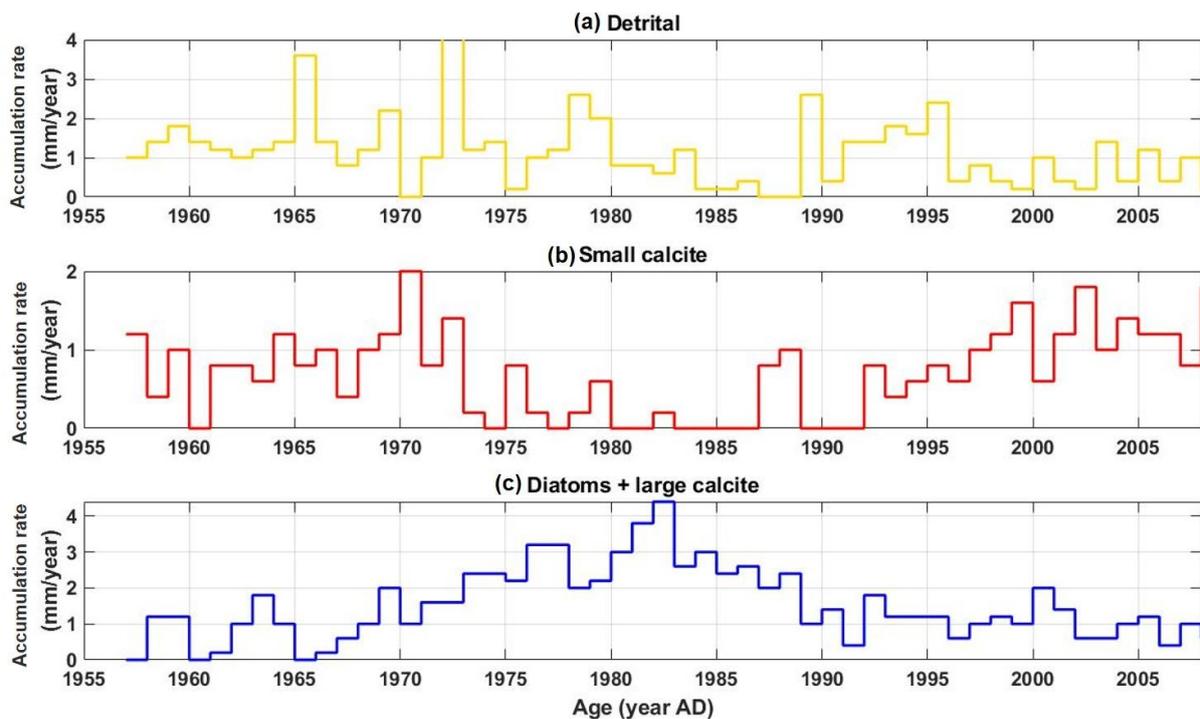


Fig. 8. Estimation of the annual lamina accumulation rates for (a) detrital particles, (b) small calcite crystals, (c) diatoms frustules associated with large calcite crystals.

Fig. 8c shows an increase in diatom and large calcite crystal accumulations until 1982, followed by a decrease. These components reflect primary productivity. Consequently, a decrease after 1982 indicates an improvement in trophic status, which is in agreement with the decrease in phosphorus supplies presented in Jenny et al. (2013). The small calcite crystal accumulation rate has an opposite trend relative to the large calcite crystals and diatoms (Fig. 8b). This can also be explained by changes in trophic status. Eutrophication favors the precipitation of large

calcite crystals compared to smaller ones. The accumulation rate of detrital particles (Fig. 8a) represents annual inputs from the Rhône River floods to the lake. The peak in 1990 represents the large floods of February 1990 (Jenny et al., 2014).

5.1.3. Visible and near-infrared spectra of each lamina

The three laminae, the instantaneous events and unit III were manually selected to find their pixels and then to extract their average spectral signatures (Fig. 9). The continuum removed (Clark and Roush, 1984) of the spectra allows for them to be normalized to compare the absorption spectra. It allows us to see five spectral ranges, which have different contributions in the different units and facies:

- The carotenoids and or iron oxides are mostly present in the laminated unit, in all the laminae.
- The chlorophyll pigments are mostly present in the spring and summer lamina and indicate the increase in lacustrine productivity due to eutrophication.
- The organic and hydroxyl compounds are higher in the summer and winter laminae as well as in the instantaneous events. This result is interpreted as reflecting lacustrine and terrestrial organic matter.
- The water content shows a gradient, from the lowest to the highest: non-eutrophic part, instantaneous event, winter, spring, summer laminae. This can be associated to residual water linked to porosity and compaction.

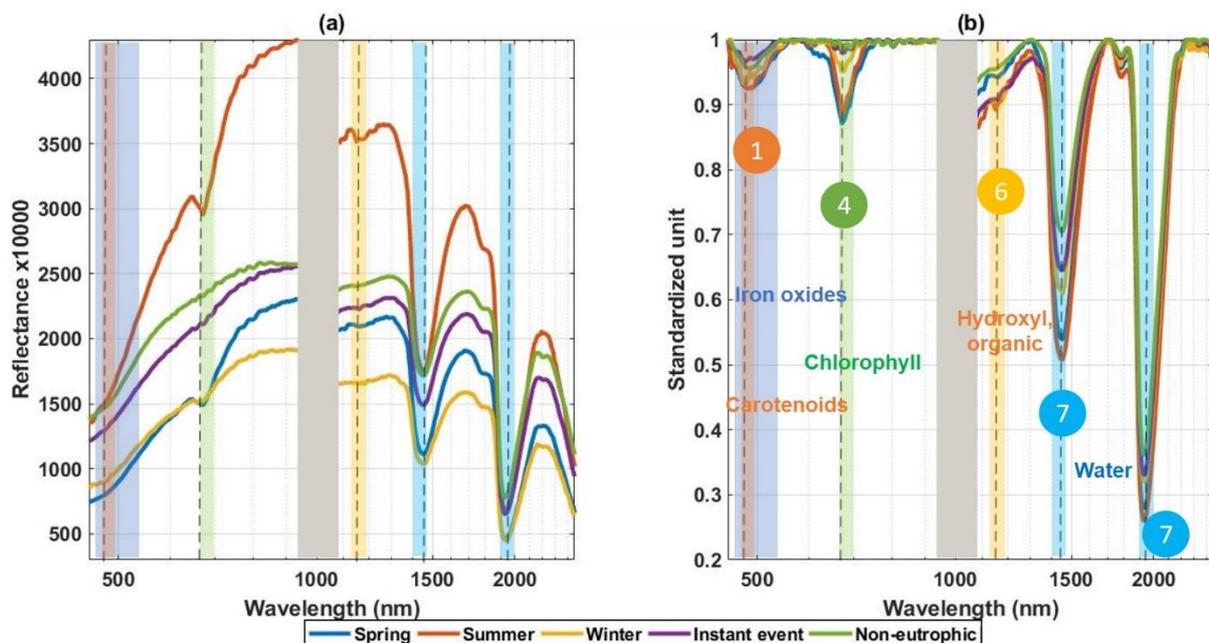


Fig. 9. (a) Visible and near-infrared signatures and (b) continuum removal with associated main absorptions of the three laminae (spring, summer, winter), an instantaneous event and the non-eutrophic part.

5.2. Detection of a sub-unit

The high resolution of analysis allows us to observe the trends with high precision and detect similar groups of trends for unit characterization. The Bourget core was divided into three units, but based on our evidence unit I was split into two sub-units, from 0 to 6 cm depth (2009-1992, unit I_a) and from 6 to 18 cm (1992-1962, unit I_b). The main observed changes in unit I are:

- A decrease of particle size in the PSD (Fig. 3d) that corresponds to an increase in small bio-induced calcite crystals, a decrease of large calcite crystals and diatom frustules (Fig. 5c and 6d-e),
- An increase in the residual part (Fig. 6g) that can be induced by modification of the environment.

The changes in this sub-unit can reflect the response of the lake to restoration programs, especially the diversion of treated waste-waters into the Rhône river in the 1990s that improved water quality and changed the biochemistry of the lake (Jacquet et al., 2005; Berthon et al., 2014).

5.3. Possibilities of the hyperspectral analysis

The use of high-resolution analysis, such as hyperspectral imaging, to estimate PSD associated with unmixing methods shows great possibilities to infer the provenance of the material and their transport, as well as some deposition processes (floods, landslide, eruption). And also their variations across times, with changes in the population of diatoms or other organisms, changes in the physical-chemistry of the lake or the watershed or beyond.

Hyperspectral imaging is a very informative tool which can be used for more than particle size studies. This method has already proved useful for the prediction of organic matter (Van Exem et al., 2018; Jacq et al., 2019b), pigments (Schneider et al., 2018), and to perform source to sink analysis (Van Exem et al., 2019). Some proxies can be estimated directly after HSI acquisition, and other proxies need to process the data with or without destructive analysis.

A Matlab toolbox was created for the study of particle size presented in this paper and for a previous study of organic matter (Jacq et al., 2019b), and also allows for the generation of models for organic matter (LOI550 and RockEval) and particle size on several lakes (unpublished works). This toolbox can be found at https://github.com/JacqKevin/HSI_PLSR, developed with Matlab R2018a (the Parallel Computing Toolbox can be used for faster calculations). It contains functions to create a PLSR model and to apply it to the data, and also spectral preprocessing and variable selection algorithms. The regular use of this toolbox allows for highlighting precautions and difficulties related to data. The destructive data used to calibrate the models need to be representative of the main variations observed in the sample. The creation of an optimal predictive model requires to have variability inside the destructive analysis values. Future works will focus on the determination of relevant sampling areas for a

proxy using only hyperspectral data. There are also the sediment matrix effects with the presence of several different lithologies that can disturb the modeling.

6. Conclusions

Hyperspectral imaging, with its spatial and spectral dimensions, is a very informative analytical method. This method promises great possibilities because it offers high resolution (200 μm), is non-destructive and fast (15 min for a 1.5 m core for each sensor). In this study, HSI allows estimation of particle size distribution and size fraction in each point of the lake Bourget core. Then, with an unmixing method, five sediment sources were estimated and characterized in a previous study on this lake. The high spatial resolution allowed discrimination of three laminae. With image processing methods, they were discretized to estimate their spectral signatures and thus their chemistry. They were also manually counted, and that agreed with the age model. Therefore, hyperspectral imaging for the prediction of PSD and characterization of end-members, as well as their annual accumulation rates, is very useful for the study of sediment cores and environmental samples.

Some improvements are needed for the extraction of a relevant number of end-members in this data. Sequential extraction of end-members with the study of residuals seems to be relevant because the existing algorithms find only the main ones. Further works using the spatio-spectral approaches can improve the relevance of the estimated PSD, the fine particles can be estimated with the spectral dimension and the coarse ones with the spatial dimensions

Acknowledgements

The Bourget core used in this study is stored in the EDYTEM laboratory that also performed the PSD analysis in 2009 during the IPER-RETRO program (ANR-08-VUL 005). The hyperspectral imaging acquisition was made at the University of Normandie-Rouen and was funded by the Region Normandie, which supports the scientific consortium SCALE UMR CNRS 3730.

References

- Arnaud, F., Revel, M., Chapron, E., Desmet, M., Tribovillard, N., 2005. 7200 years of Rhône river flooding activity in Lake Le Bourget, France: a high-resolution sediment record of NW Alps hydrology. *The Holocene* 15, 420–428.
- Arnaud, F., Révillon, S., Debret, M., Revel, M., Chapron, E., Jacob, J., Giguët-Covex, C., Poulenard, J., Magny, M., 2012. Lake Bourget regional erosion patterns reconstruction reveals Holocene NW European Alps soil evolution and paleohydrology. *Quaternary Science Reviews* 51, 81–92.
- Berthon, V., Alric, B., Rimet, F., Perga, M.-E., 2014. Sensitivity and responses of diatoms to climate warming in lakes heavily influenced by humans. *Freshwater Biology* 59, 1755–1767.
- Butz, C., Grosjean, M., Fischer, D., Wunderle, S., Tylmann, W., Rein, B., 2015. Hyperspectral imaging spectroscopy: a promising method for the biogeochemical analysis of lake sediments. *Journal of Applied Remote Sensing* 9, 1–20.
- Butz, C., Grosjean, M., Goslar, T., Tylmann, W., 2017. Hyperspectral imaging of sedimentary bacterial pigments: a 1700-year history of meromixis from varved Lake Jaczno, northeast Poland. *Journal of Paleolimnology* 1–16.
- Casa, R., Castaldi, F., Pascucci, S., Palombo, A., Pignatti, S., 2013. A comparison of sensor resolution and calibration strategies for soil texture estimation from hyperspectral remote sensing. *Geoderma* 197–198, 17–26.
- Ce Liu, Yuen, J., Torralba, A., 2011. SIFT Flow: Dense Correspondence across Scenes and Its Applications. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33, 978–994.
- Clark, R.N., Roush, T.L., 1984. Reflectance spectroscopy: Quantitative analysis techniques for remote sensing applications. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 89, 6329–6340.
- de Santana, F.B., de Souza, A.M., Poppi, R.J., 2018. Visible and near infrared spectroscopy coupled to random forest to quantify some soil quality parameters. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 191, 454–462.
- Debret, M., Chapron, E., Desmet, M., Rolland-Revel, M., Magand, O., Trentesaux, A., Bout-Roumazielle, V., Nomade, J., Arnaud, F., 2010. North western Alps Holocene paleohydrology recorded by flooding activity in Lake Le Bourget, France. *Quaternary Science Reviews* 29, 2185–2200.
- Demattê, J.A.M., Alves, M.R., Gallo, B.C., Fongaro, C.T., Souza, A.B., Romero, D.J., Sato, M.V., 2015. Hyperspectral remote sensing as an alternative to estimate soil attributes. *Revista Ciencia Agronomica* 46, 223–232.
- Dietze, E., Hartmann, K., Diekmann, B., IJmker, J., Lehmkuhl, F., Opitz, S., Stauch, G., Wünnemann, B., Borchers, A., 2012. An end-member algorithm for deciphering modern detrital

processes from lake sediments of Lake Donggi Cona, NE Tibetan Plateau, China. *Sedimentary Geology* 243–244, 169–180.

Giguet-Covex, C., Arnaud, F., Poulenard, J., Enters, D., Reyss, J.-L., Millet, L., Lazzaroto, J., Vidal, O., 2010. Sedimentological and geochemical records of past trophic state and hypolimnetic anoxia in large, hard-water Lake Bourget, French Alps. *Journal of Paleolimnology* 43, 171–190.

Hermansen, C., Knadel, M., Moldrup, P., Greve, M.H., Karup, D., de Jonge, L.W., 2017. Complete Soil Texture is Accurately Predicted by Visible Near-Infrared Spectroscopy. *Soil Science Society of America Journal* 81, 758–769.

Heslop, D., von Döbeneck, T., Höcker, M., 2007. Using non-negative matrix factorization in the “unmixing” of diffuse reflectance spectra. *Marine Geology* 241, 63–78.

Jacq, K., Coquin, D., Fanget, B., Perrette, Y., Debret, M., 2019a. Study of pansharpening methods applied to hyperspectral images of sediment cores, in: 2019 22nd International Conference on Information Fusion (FUSION) (FUSION 2019). Ottawa, Canada.

Jacq, K., Perrette, Y., Fanget, B., Sabatier, P., Coquin, D., Martinez-Lamas, R., Debret, M., Arnaud, F., 2019b. High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core. *Science of the Total Environment* 663, 236–244.

Jacquet, S., Briand, J.-F., Leboulanger, C., Avois-Jacquet, C., Oberhaus, L., Tassin, B., Vinçon-Leite, B., Paolini, G., Druart, J.-C., Anneville, O., Humbert, J.-F., 2005. The proliferation of the toxic cyanobacterium *Planktothrix rubescens* following restoration of the largest natural French lake (Lac du Bourget). *Harmful Algae* 4, 651–672.

Jenny, J.-P., 2013. Réponses des grands lacs périalpins aux pressions anthropiques et climatiques récentes : reconstitutions spatio-temporelles à partir d'archives sédimentaires. HAL. Université Grenoble Alpes.

Jenny, J.-P., Arnaud, F., Dorioz, J.-M., Covex, C.G., Frossard, V., Sabatier, P., Millet, L., Reyss, J.-L., Tachikawa, K., Bard, E., Pignol, C., Soufi, F., Romeyer, O., Perga, M.-E., 2013. A spatiotemporal investigation of varved sediments highlights the dynamics of hypolimnetic hypoxia in a large hard-water lake over the last 150 years. *Limnology and Oceanography* 58, 1395–1408.

Jenny, J.-P., Wilhelm, B., Arnaud, F., Sabatier, P., Giguet Covex, C., Mélo, A., Fanget, B., Malet, E., Ployon, E., Perga, M.E., 2014. A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps). *Journal of Paleolimnology* 51, 469–483.

Nanni, M.R., Cezar, E., Silva Junior, C.A. da, Silva, G.F.C., da Silva Gualberto, A.A., 2018. Partial least squares regression (PLSR) associated with spectral response to predict soil attributes in transitional lithologies. *Archives of Agronomy and Soil Science* 64, 682–695.

- Nouri, M., Gomez, C., Gorretta, N., Roger, J.M., 2017. Clay content mapping from airborne hyperspectral Vis-NIR data by transferring a laboratory regression model. *Geoderma* 298, 54–66.
- Paterson, G.A., Heslop, D., 2015. New methods for unmixing sediment grain size data. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 16, 4494–4506.
- Perga, M.-E., Frossard, V., Jenny, J.-P., Alric, B., Arnaud, F., Berthon, V., Black, J.L., Domaizon, I., Giguët-Covex, C., Kirkham, A., Magny, M., Manca, M., Marchetto, A., Millet, L., Paillès, C., Pignol, C., Poulenard, J., Reyss, J.-L., Rimet, F., Sabatier, P., Savichtcheva, O., Sylvestre, F., Verneaux, V., 2015. High-resolution paleolimnology opens new management perspectives for lakes adaptation to climate warming. *Frontiers in Ecology and Evolution* 3, 72.
- Van Exem, A., Debret, M., Copard, Y., Vannière, B., Sabatier, P., Marcotte, S., Laignel, B., Reyss, J.-L., Desmet, M., 2018. Hyperspectral core logging for fire reconstruction studies. *Journal of Paleolimnology* 59, 297–308.
- van Hateren, J.A., Prins, M.A., van Balen, R.T., 2017. On the genetically meaningful decomposition of grain-size distributions: A comparison of different end-member modelling algorithms. *Sedimentary Geology* 375, 49–71.
- Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T., 2010. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma* 158, 46–54.
- Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T., Ben-Dor, E., Brown, D.J., Demattê, J.A.M., Shepherd, K.D., Shi, Z., Stenberg, B., Stevens, A., Adamchuk, V., Aïchi, H., Barthès, B.G., Bartholomeus, H.M., Bayer, A.D., Bernoux, M., Böttcher, K., Brodsky, L., Du, C.W., Chappell, A., Fouad, Y., Genot, V., Gomez, C., Grunwald, S., Gubler, A., Guerrero, C., Hedley, C.B., Knadel, M., Morràs, H.J.M., Nocita, M., Ramirez-Lopez, L., Roudier, P., Campos, E.M.R., Sanborn, P., Sellitto, V.M., Sudduth, K.A., Rawlins, B.G., Walter, C., Winowiecki, L.A., Hong, S.Y., Ji, W., 2016. A global spectral library to characterize the world's soil. *Earth-Science Reviews*.
- Wentworth, C.K., 1922. A Scale of Grade and Class Terms for Clastic Sediments. *The Journal of Geology* 30, 377–392.
- Wetzel, D.L., 1983. Near-infrared reflectance analysis. *Analytical Chemistry* 55, 1165A–1176A.
- Wold, S., Ruhe, A., Wold, H., Dunn, III, W.J., 1984. The Collinearity Problem in Linear Regression. The Partial Least Squares (PLS) Approach to Generalized Inverses. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 5, 735–743.
- Yu, S.-Y., Colman, S.M., Li, L., 2016. BEMMA: A Hierarchical Bayesian End-Member Modeling Analysis of Sediment Grain-Size Distributions. *Mathematical Geosciences* 48, 723–741.

Żarczyński, M., Szmańda, J., Tylmann, W., Żarczyński, M., Szmańda, J., Tylmann, W., 2019. Grain-Size Distribution and Structural Characteristics of Varved Sediments from Lake Żabińskie (Northeastern Poland). *Quaternary* 2, 1–15.

Zhang, X., Zhou, A., Wang, X., Song, M., Zhao, Y., Xie, H., Russell, J.M., Chen, F., 2017. Unmixing grain-size distributions in lake sediments: a new method of endmember modeling using hierarchical clustering. *Quaternary Research* 1–9.

3.2.1 La comparaison de la prédiction avec les données VNIR, SWIR et VNIR - SWIR

Comme on a pu le mentionner dans ces deux précédents articles, ces trois capteurs (VNIR, SWIR, VNIR-SWIR) avec leurs différentes gammes spectrales n'ont pas les mêmes quantités d'information discriminante pour la prédiction de la classe granulométrique des argiles ($1-4\mu m$). Ainsi les performances des modèles et les cartes d'abondances sont différentes.

La figure 3.1 montre des défauts liés à la planéité de l'échantillon qui ont aussi été observés dans la chapitre précédent avec la carte de la matière organique. On retrouve les zones incurvées sur les bords et la présence de trous et de fissures. En ce qui concerne la tendance globale de la prédiction des argiles granulométriques, elle semble en accord entre les capteurs. Mais des différences locales existent, comme dans la zone laminée (première moitié) qui est plutôt homogène pour le capteur VNIR, alors que les deux autres séparent les lamines. Dans la zone non laminée (seconde moitié) le capteur SWIR voit davantage d'argiles granulométriques sur les bords, et dans des dépôts localisés qui ne sont pas ou peu visibles avec les autres capteurs.

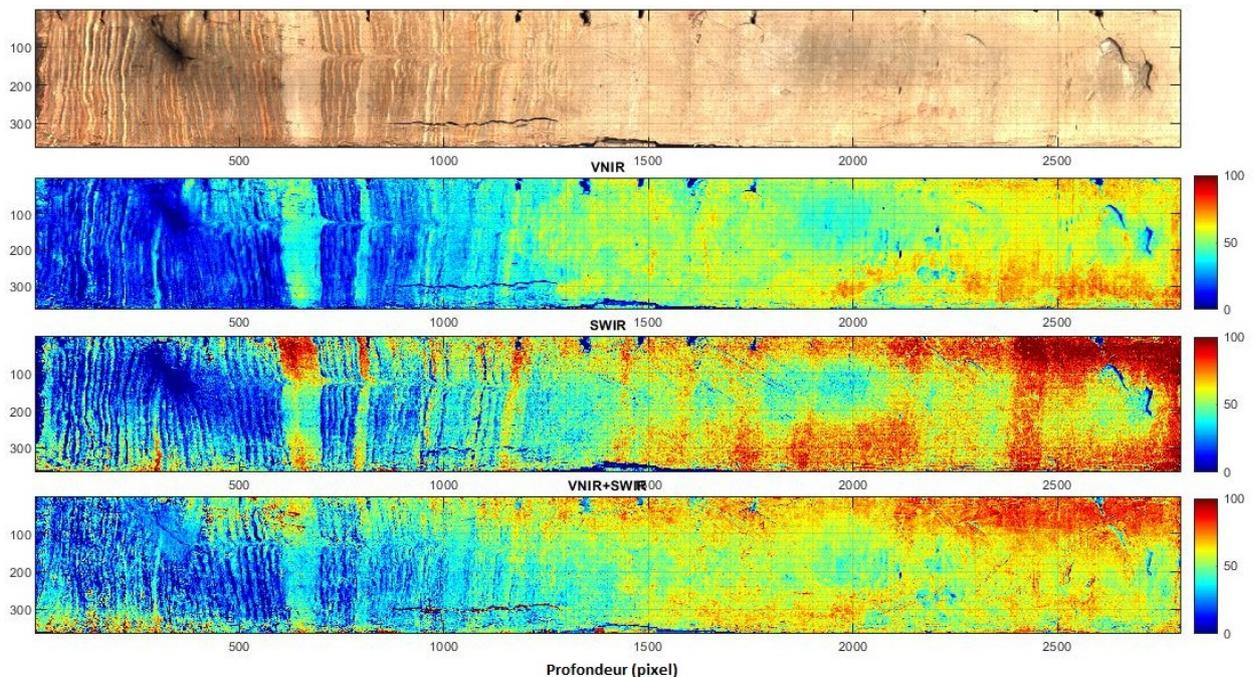


FIGURE 3.1 : (a) Image RGB et cartes d'abondance estimés avec chacun des capteurs hyperspectraux : (b) VNIR, (c) SWIR, (d) VNIR-SWIR pour la carotte A

Un zoom dans une zone possédant des lamines et un dépôt instantané est réalisé pour voir spécifiquement les variations à haute résolution (figure 3.2). La carte VNIR présente deux niveaux dépendant du type de dépôt (lamines claires ou foncées) et peu de variations internes, alors que la carte SWIR présente beaucoup de variations et montre des limites de dépôts davantage marquées. Les dépôts sur la droite des cartes VNIR et SWIR montrent que les lamines claires présentent une abondance en argile granulométrique plus élevée que les lamines foncées. Mais les lamines claires et marrons sont caractérisées par des grosses particules, alors que les lamines grises sont constituées principalement de petites particules correspondant à la classe granulométrique des argiles. Donc les capteurs VNIR et SWIR seuls semblent ne pas posséder suffisamment d'information pertinente pour discriminer les argiles

granulométriques et les deux types de lamines. La combinaison de ces deux capteurs permet quant à elle de trouver cette distribution attendue. On voit donc ici l'intérêt de combiner des capteurs couvrant différentes gammes spectrales et portant ainsi des informations bio-physico-chimiques complémentaires.

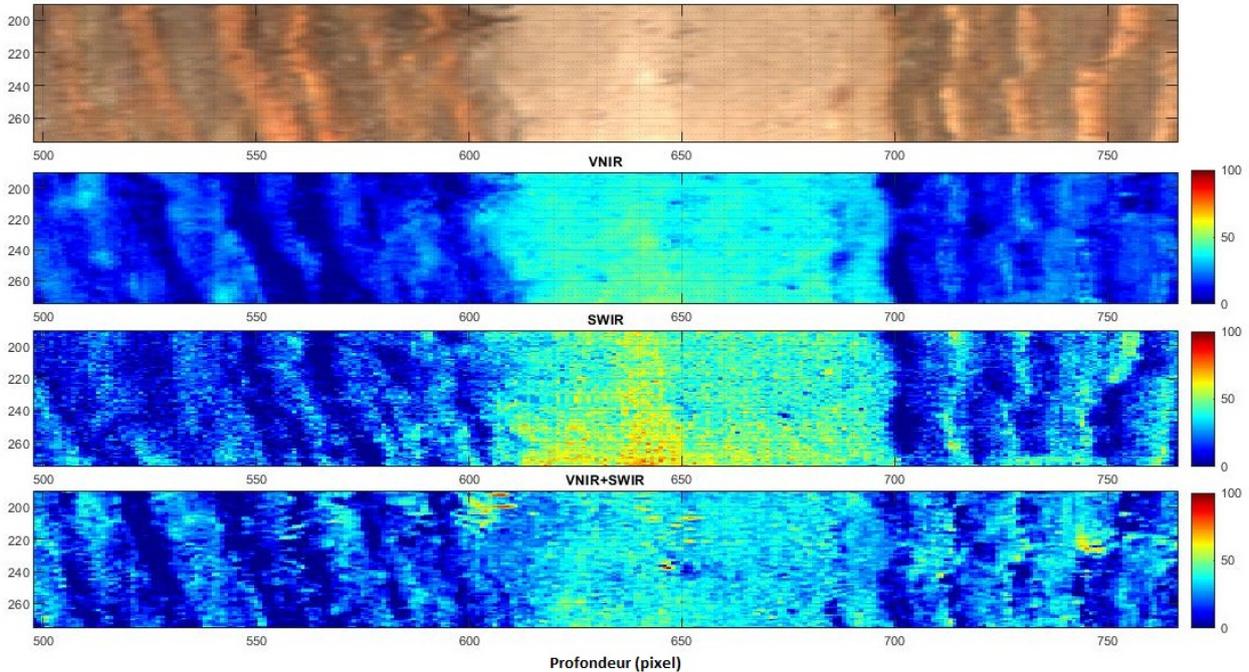


FIGURE 3.2 : (a) Image RGB et cartes d'abondance estimées sur une région d'intérêt avec chacun des capteurs hyperspectraux : (b) VNIR, (c) SWIR, (d) VNIR-SWIR pour la carotte A

3.2.2 Les argiles granulométriques et les argiles minérales

Comme on vient de le voir, il est possible d'estimer la classe des particules des argiles ($1-4 \mu\text{m}$) à partir d'un modèle de régression quantitatif qui utilise entre autre comme bandes spectrales, celle des argiles minéralogiques à 2200 nm [17]. On peut dans certains cas rapprocher ces deux types d'argiles granulométriques-minéralogiques, qui ont des définitions très différentes du fait de leurs caractéristiques physique-chimique [18].

La figure 3.3 montre les profils de ces deux propriétés qui présentent une corrélation de 0.74 ($p < 0.05$). On peut voir qu'il y a des liens possibles mais pas sur l'ensemble de l'échantillon. Cette longueur d'onde à 2200 nm liée aux argiles minéralogiques peut donc être un premier indicateur qualitatif de la granulométrie. Il peut par exemple être utilisé pour sélectionner des zones d'échantillonnage pour développer un modèle granulométrique quantitatif avec un nombre de prélèvement raisonné afin de conserver la carotte sédimentaire.

3.2.3 L'estimation de la granulométrie avec les dimensions spectrale et spatiales

La taille des particules comme on vient de le voir peut-être estimée grâce aux informations physico-chimiques contenues dans les spectres. Mais la performance des prédictions est liée à la quantité de ces informations qui décroît jusqu'à atteindre la taille du pixel. D'autres techniques peuvent être utilisés pour estimer la taille des particules avec la dimension spatiale,

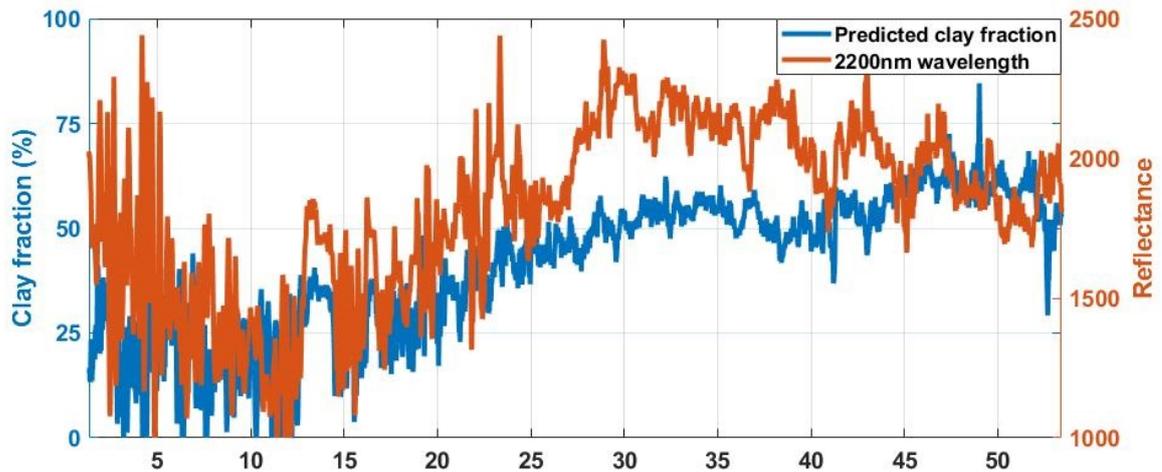


FIGURE 3.3 : Comparaison des profils de la classe granulométrique des argiles (bleu) et des argiles minérales (orange, bande 2200 nm)

comme on a pu en discuter dans le paragraphe 1.1.2, avec les méthodes morphologiques et statistiques. Celles-ci ne peuvent être utilisées dans le cas des particules fines qui seront vues comme des agglomérats en fonction de la résolution de l'image.

C'est pourquoi l'utilisation conjointe des informations spectrales et spatiales est un bon compromis pour estimer le profil réel et complet de la distribution des particules, en utilisant la dimension spectrale pour estimer les particules fines et les dimensions spatiales pour estimer les grosses particules. Et une zone où les deux dimensions pourront avoir des informations qui se recoupent (figure 3.4).

Ceci permettra aussi d'estimer la véracité de l'estimation de chacune des dimensions. En effet, certains pixels ne pourront être utilisés pour l'estimation des particules fines puisqu'ils correspondent à une zone spatiale d'une grosse particule. Inversement, avec des particules fines, il ne sera pas possible d'estimer la taille spatiale sous peine de voir des agglomérats.

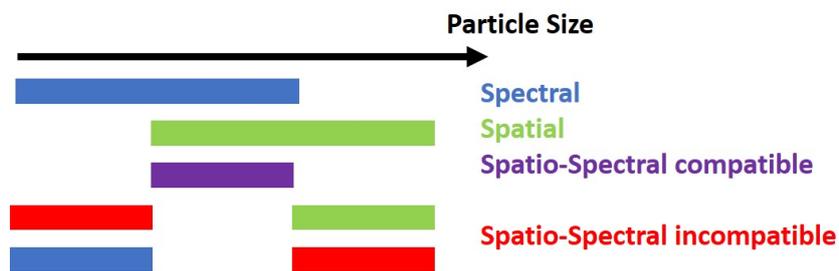


FIGURE 3.4 : Utilisation des approches d'estimation de la granulométrie avec les deux dimensions spatiales et spectrale

3.2.4 L'évolution temporelle des modes purs et apparitions de modes locaux

Même si cinq sources ont été estimées à travers leurs modes respectifs, il est possible qu'ils évoluent dans le temps, il se peut que des variations climatiques et environnementales aient un impact sur eux. C'est pourquoi il faut étudier la différence entre les PSD estimées par la PLS

et celles modélisées à partir des 5 sources, on parle des résidus du démelange granulométrique. Ils sont présentés dans la figure 3.5.

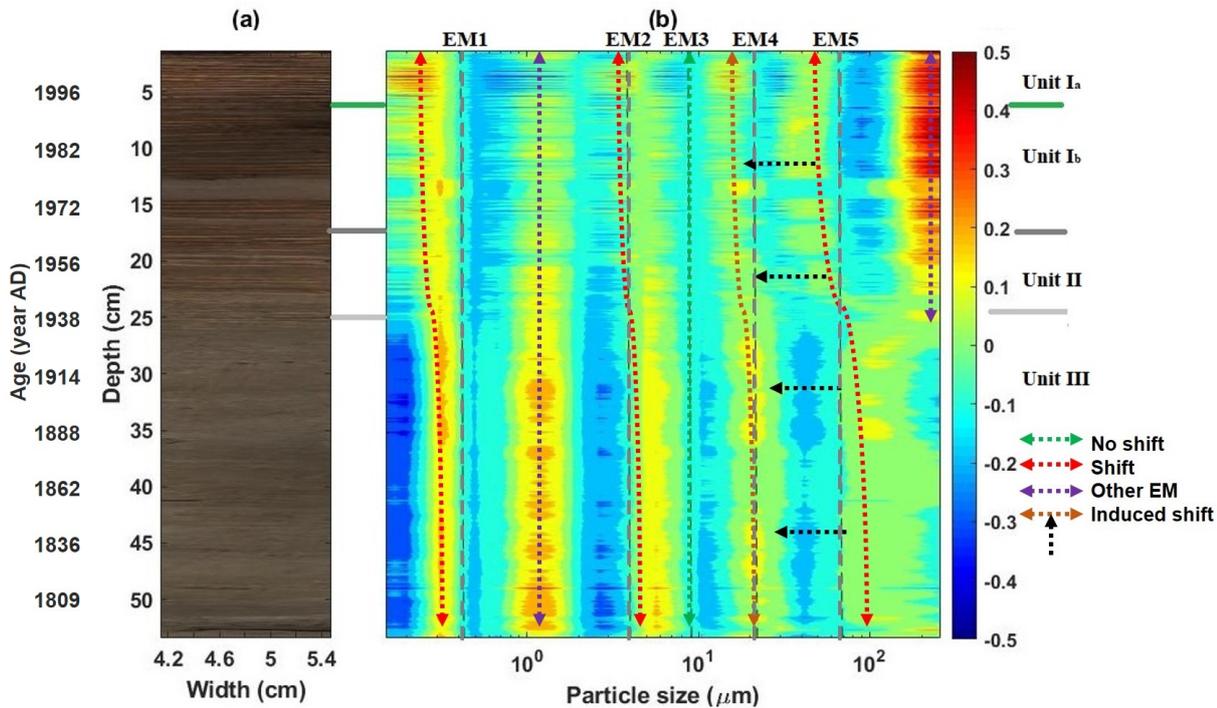


FIGURE 3.5 : Étude des résidus du démelange granulométrique (rouge : résidu positif, bleu : résidu négatif; en %)

1. Le résidu autour du mode des micrites ($0.49 \mu m$, endmember 1 (EM1)) est stable dans l'unité III. Dans les deux autres unités, il est différent avec un décalage des résidus vers des particules plus fines, ce qui suggère que les micrites sont plus fines dans la partie eutrophisée de la carotte. Ce mode demande à être approfondi, car il est proche de la limite de détection du granulomètre laser.
2. Le mode des particules détritiques ($4.19 \mu m$, EM2) est stable sauf dans les événements instantanés où il semble plus fin.
3. Les petits cristaux de calcite bio-induite (EM3) sont stables tout au long de la carotte.
4. Les gros cristaux de calcite avec les diatomées (EM4) sont aussi stables, malgré un décalage vers les particules fines dans la partie eutrophisée mais qui est sans doute induit par le mode suivant.
5. Pour le mode des diatomées avec la matière organique, il y a un décalage vers les particules fines dans les deux premières unités stratigraphiques, ce qui pourrait induire un changement de population dans les diatomées et/ou la présence de matières organiques fines. Des changements de populations chez les diatomées ont été étudiées et semblent aller dans ce sens [19, 20].

Deux autres zones ont des résidus significatifs. Une dans les deux premières unités stratigraphiques avec un mode plus grand que $200 \mu m$ qui peut correspondre à de la matière

organique ou des agglomérats de cristaux de calcite bio-induites. Ils sont respectivement estimés entre 150-350 μm et entre 160-300 μm [14], soit en dehors de la gamme de prédiction de la taille des particules. La matière organique peut être mieux préservée dans ces unités stratigraphiques que dans l'unité III à cause d'une période anoxique prolongée au fond des eaux du lac pendant l'eutrophisation. L'autre zone est autour de 1 μm et est stable tout au long de l'échantillon, et elle n'est pas caractérisée.

Ces conclusions qualitatives demandent à être approfondies avec des observations par microscopie pour vérifier leur véracité.

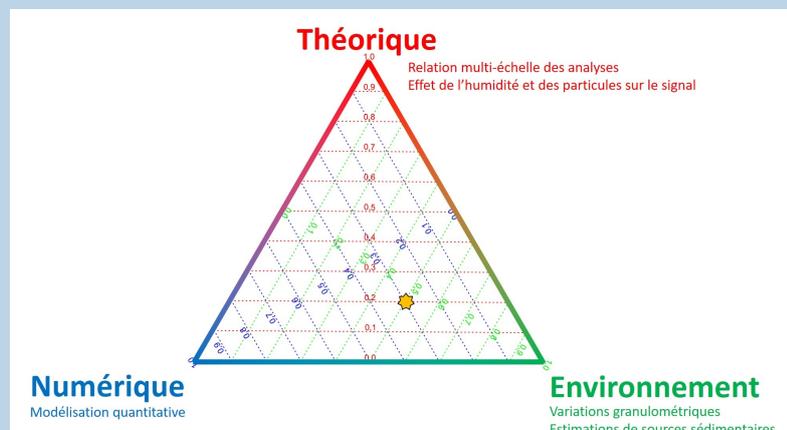
De plus, cette approche se base sur l'hypothèse qu'un mode est caractérisé par une source tout au long de l'échantillon. Or, il serait envisageable que les modes représentent différentes sources en fonction de la profondeur. Dans le cas du Bourget, il y a de grands changements au sein du lac entre l'unité I-II et III, ce qui peut induire un changement dans la taille des particules. Si l'on compare l'étude de Arnaud sur une carotte longue du Bourget (9 m, [21]) et de Giguet-Covex sur une carotte courte du Bourget (40 cm, [14]), à nos travaux avec le tableau 3.1, on peut voir que deux modes sont en accord, et les deux autres sont incertains pour l'attribution de notre étude. Notamment avec ce que nous pensons être des petites calcite à 9 μm qui correspondrait au mode carbonaté à 3-5 μm soit un net décalage, mais ce dernier mode semble augmenter au niveau de la zone eutrophisée correspondant à nos unités I et II dans les résultats de Arnaud. Ceci impacte l'autre mode que l'on détecte à 4.19 μm qui est dans la même gamme, mais qui correspondrait au mode décarbonaté à 6-9 μm . Cette comparaison peut impliquer que notre mode à 4.19 μm correspond à des calcites fines dans l'unité III, et à des particules détritiques dans les unités I et II.

Arnaud [21]	Giguet-Covex [14]	Jacq [22]
6-9 μm , décarbonaté	6-9 μm , décarbonaté, détritique	4.19 μm , détritique ou 9 μm , petite calcite
100-200 μm , décarbonaté	150-350, mélanges	X
<1 μm , carbonaté	<1 μm , carbonaté	0.49 μm , micrite
3-5 μm et augmente dans la zone eutrophisée, carbonaté	4.5-8 μm , carbonaté, petite calcite	4.19 μm , détritique ou 9 μm , petite calcite

TABLE 3.1 : Comparaison de notre étude avec deux autres sur le même site d'étude

Une autre explication possible de ces décalages, globalement vers une taille plus fine que prévue, pourrait être les réactions bio-physico-chimiques qui ont eu lieu entre 2009 (échantillonnage et analyses granulométriques) et 2017 (analyses hyperspectrales). Celles-ci pourraient être de type acide-base et expliquer une perte de volume des particules, surtout dans la partie eutrophisée (unités I et II).

Résumé :



Grâce au recalage des images, l'estimation de la granulométrie a montré qu'il était possible de déterminer des sources d'apport sédimentaire. Celles-ci permettent de caractériser les lamines pour ensuite les compter, interpréter leurs physico-chimies, estimer des taux d'accumulations annuelles pour voir leurs variations et ainsi déterminer des changements dans l'environnement. On a aussi pu montrer que les deux capteurs hyperspectraux pris séparément ne permettaient pas d'obtenir des variations représentatives de celles théoriques, alors que leur combinaison le permettait. La haute résolution a aussi permis d'étudier les variations internes d'abondances des sources sédimentaires, ainsi qu'estimer de potentiels changements induits par l'environnement.

Comme pour la prédiction de la MO, il faut s'intéresser davantage aux effets impactant le signal qui induit une incertitude. Avec ces valeurs de granulométrie, on pourrait potentiellement corriger l'effet des particules sur le signal. On a aussi pu observer des biais induits par les effets de surface.

Néanmoins, la combinaison de ces images est effectuée à la plus basse des résolutions ($200 \mu m$), alors que l'on pourrait utiliser la plus haute résolution ($60 \mu m$) et ainsi voir des variations d'autant plus fines et précises temporellement. Mais il faut pour cela estimer les informations manquantes aux capteurs basses résolutions pour les avoir à haute résolution.

Bibliographie

- [1] CE LIU, J. YUEN et A. TORRALBA. « SIFT Flow : Dense Correspondence across Scenes and Its Applications ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33.5 (2011), p. 978-994.
- [2] D. LOWE. « Object recognition from local scale-invariant features ». In : *Proceedings of the Seventh IEEE International Conference on Computer Vision*. IEEE, 1999, 1150-1157 vol.2.
- [3] J. W. H. WONG, C. DURANTE et H. M. CARTWRIGHT. « Application of Fast Fourier Transform Cross-Correlation for the Alignment of Large Chromatographic and Spectral Datasets ». In : *Analytical Chemistry* 77.17 (2005), p. 5655-5661.
- [4] F. SAVORANI, G. TOMASI et S. ENGELSEN. « icoshift : A versatile tool for the rapid alignment of 1D NMR spectra ». In : *Journal of Magnetic Resonance* 202.2 (2010), p. 190-202.
- [5] Z. YI, C. ZHIGUO et X. YANG. « Multi-spectral remote image registration based on SIFT ». In : *Electronics Letters* 44.2 (2008), p. 107.
- [6] Y. XU et al. « Classification of Hyperspectral imagery Using SIFT for Spectral Matching ». In : *2008 Congress on Image and Signal Processing*. IEEE, 2008, p. 704-708.
- [7] S. L. AL-KHAFAJI et al. « Spectral-Spatial Scale Invariant Feature Transform for Hyperspectral Images ». In : *IEEE Transactions on Image Processing* 27.2 (2018), p. 837-850.
- [8] A. BARROS et al. « Principal component transform — Outer product analysis in the PCA context ». In : *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 93.1 (2008), p. 43-48.
- [9] R. CLIMACO PINTO. « Development of new chemometric methods - application to the spectroscopic characterisation of food quality ». Thèse de doct. 2009.
- [10] F. S. TERRA, R. A. VISCARRA ROSSEL et J. A. DEMATTÊ. « Spectral fusion by Outer Product Analysis (OPA) to improve predictions of soil organic C ». In : *Geoderma* 335 (2019), p. 35-46.
- [11] D. XU et al. « X-ray fluorescence and visible near infrared sensor fusion for predicting soil chromium content ». In : *Geoderma* 352 (2019), p. 61-69.
- [12] C. K. WENTWORTH. « A Scale of Grade and Class Terms for Clastic Sediments ». In : *The Journal of Geology* 30.5 (1922), p. 377-392.
- [13] G. A. PATERSON et D. HESLOP. « New methods for unmixing sediment grain size data ». In : *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 16.12 (2015), p. 4494-4506.
- [14] C. GIGUET-COVEX et al. « Sedimentological and geochemical records of past trophic state and hypolimnetic anoxia in large, hard-water Lake Bourget, French Alps ». In : *Journal of Paleolimnology* 43.1 (2010), p. 171-190.
- [15] J.-P. JENNY et al. « A spatiotemporal investigation of varved sediments highlights the dynamics of hypolimnetic hypoxia in a large hard-water lake over the last 150 years ». In : *Limnology and Oceanography* 58.4 (2013), p. 1395-1408.
- [16] J.-P. JENNY et al. « A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps) ». In : *Journal of Paleolimnology* 51.4 (2014), p. 469-483.

- [17] N. LEVIN, G. J. KIDRON et E. BEN-DOR. « Surface properties of stabilizing coastal dunes : combining spectral and field analyses ». In : *Sedimentology* 54.4 (2007), p. 771-788.
- [18] S. GUGGENHEIM et R. T. MARTIN. « Definition of clay and clay mineral : joint report of the AIPEA and CMS Nomenclature Committees ». In : *Clays and Clay Minerals* 43.2 (1995), p. 255-256.
- [19] V. BERTHON et al. « Sensitivity and responses of diatoms to climate warming in lakes heavily influenced by humans ». In : *Freshwater Biology* 59.8 (2014), p. 1755-1767.
- [20] M.-E. PERGA et al. « High-resolution paleolimnology opens new management perspectives for lakes adaptation to climate warming ». In : *Frontiers in Ecology and Evolution* 3 (2015), p. 72.
- [21] F. ARNAUD. « Discriminating Bio-Induced and Detrital Sedimentary Processes from Particle Size Distribution of Carbonates and Non-Carbonates in Hard Water Lake Sediments ». In : *Journal of Paleolimnology* 34.4 (2005), p. 519-526.
- [22] K. JACQ et al. « High-resolution grain size distribution of sediment core with hyper-spectral imaging ». In : *Sedimentary Geology* 393-394.105536 (2019).

Chapitre 4

La combinaison ou fusion des capteurs à la plus haute résolution

L'étude des archives naturelles sédimentaires est déterminée avec une résolution temporelle correspondant à une décennie par l'étude de Pages2k [1]. L'augmentation de cette résolution permettra de révéler des cycles d'autant plus fins, c'est pourquoi il est intéressant de combiner les capteurs à la plus haute des résolutions.

Il existe de nombreuses méthodes regroupées sous l'appellation fusion de données, comme on a pu le voir dans le paragraphe 1.1.4. Elles sont principalement employées dans les domaines de la télédétection et du médical.

L'utilisation de ces méthodes pose des difficultés similaires au recalage d'images (résolutions et gammes spectrales différentes). Or pour utiliser ce type de méthode, il faut estimer un lien entre les capteurs qui s'appuient sur les mêmes informations physico-chimiques. Ce n'est pas le cas pour des gammes spectrales qui ne se recouvrent pas dans le cas de nos capteurs VNIR et SWIR, mais il y a des informations similaires ou corrélées comme on l'a vu au chapitre précédent. Celles-ci permettraient de reconstruire les données du capteur SWIR à basse résolution ($200 \mu m$) à haute résolution ($60 \mu m$), grâce au capteur VNIR ($60 \mu m$).

On propose donc, à travers un article, d'utiliser différentes méthodes existantes pour l'appliquer à notre problématique de fusion multi-capteurs à la plus haute des résolutions.

Dans le chapitre précédent, nous avons discuté de la fusion à la plus basse des résolutions des capteurs par l'utilisation de recalage spatial. Mais cette fusion au niveau pixel à basse résolution engendre une perte des informations apportées par les capteurs à plus haute résolution. C'est pourquoi des méthodes de fusion ont été développées principalement pour les domaines de la télédétection, pour les capteurs multi- ou hyper-spectraux avec des images panchromatiques, ou encore dans le domaine médical pour la fusion d'images de différentes modalités (IRM, scanner). Ces méthodes permettent d'augmenter la résolution des capteurs basses résolutions par leurs interpolations à haute résolution et par l'ajout d'informations manquantes estimées avec les capteurs hautes résolutions.

4.1 Les méthodes de fusion utilisées en télédétection

Dans la littérature trois familles principales de méthodes permettent ce type de fusion au niveau pixel en télédétection. Deux familles sont dérivées de la fusion d'un capteur image avec un capteur multi- ou hyper- spectrale : "substitution de composantes" (CS) et "analyse multi-résolution" (MRA). La troisième famille est composée de méthodes avancées pour la fusion de capteurs multi- et hyper- spectraux entre eux. Un article a été accepté au congrès IEEE Fusion 2019 pour la comparaison de vingt et une méthodes de fusion au niveau pixel appliquées à nos données hyperspectrales de laboratoire.

Deux capteurs d'imagerie hyperspectrale ont été utilisées sur trois carottes sédimentaires (A, D, E) : le visible et proche-infrarouge (VNIR, 400-1000 nm, 60 μm , haute résolution : HR), et l'infrarouge à ondes courtes (SWIR, 1000-2500 nm, 200 μm , basse résolution : BR). On effectue un recalage à basse résolution des images SWIR sur celles VNIR en utilisant la méthode dense SIFT flow sur les bandes liées à l'humidité à travers les liaisons hydroxyles O-H (5 bandes VNIR, 3 bandes SWIR). Celui-ci montre que le couple optimal est 970-1200 nm pour les trois carottes sédimentaires, comme on l'a montré précédemment.

Ensuite, 21 méthodes de fusion ont été comparées avec une simple interpolation des données SWIR à haute résolution. Ces méthodes interpolent les données SWIR BR à HR, puis estiment des informations manquantes ou des composantes à substituer à partir des données VNIR HR. Chacune des longueurs d'onde du capteur SWIR HR est estimée à partir d'une combinaison linéaire du capteur VNIR HR. La validation consiste à dégrader les données SWIR HR à BR et à les comparer aux données initiales SWIR BR. Trois indicateurs sont utilisés, pour vérifier les similarités des spectres (SAM : Spectral Angle Mapper), et des plans à chaque longueur d'onde (UIQI : Universal Image Quality Index, et ERGAS : Erreur Relative Globale Adimensionnelle de Synthèse).

Les résultats montrent que les méthodes de fusion de types MRA ont pour la plupart des valeurs d'UIQI proches de 1, des valeurs de SAM proches de 0. Contrairement aux méthodes CS qui présentent de faibles résultats (UIQI < 0.5) et celles avancées montrent des résultats intermédiaires (UIQI > 0.5). Les temps de fusion sont globalement similaires autour de 10-20 secondes. Les apports des méthodes de fusion BDSF et GS2 GLP aux données SWIR interpolées à la HR sont présentés sur toutes l'image, ils sont faibles et de l'ordre de 10^{-2} et 10^{-3} pour une image variant entre 0 et 1. Les méthodes les plus performantes sont donc celles de types MRA se basant sur les pyramides laplaciennes et la méthode optimale est l'interpolation bicubique seule.

Study of pansharpening methods applied to hyperspectral images of sediment cores

Kévin Jacq
*Laboratoire des Environnements,
 DYnamiques,
 TErritoires de la Montagne
 Université Savoie Mont-Blanc, UMR
 CNRS 5204*
 Le Bourget du Lac, France
 kevin.jacq@univ-smb.fr

Didier Coquin
*Laboratoire d'Informatique, Systèmes,
 Traitement de l'Information et de la
 Connaissance
 Université Savoie Mont-Blanc
 Annecy Le Vieux Cedex, France
 Didier.Coquin@univ-smb.fr*

Bernard Fanget
*Laboratoire des Environnements,
 DYnamiques,
 TErritoires de la Montagne
 Université Savoie Mont-Blanc, UMR
 CNRS 5204*
 Le Bourget du Lac, France
 bernard.fanget@univ-smb.fr

Yves Perrette
*Laboratoire des Environnements,
 DYnamiques,
 TErritoires de la Montagne
 Université Savoie Mont-Blanc, UMR
 CNRS 5204*
 Le Bourget du Lac, France
 yves.perrette@univ-smb.fr

Maxime Debret
*Laboratoire de Morphodynamique
 Continentale et Côtière
 Université de Rouen, UMR CNRS 6143
 Mont-Saint-Aignan, France
 maxime.debret@univ-rouen.fr*

Abstract

Spectroscopic and imaging sensors are very useful methods in analytical chemistry because they are fast, cost effective, very informative analysis. Recent works search to fused them to create a new sensor with different spectral range to increase spectral and thus chemical information to create robust and precise prediction models. Remote sensing already used fusion methods to increase spatial resolution for spectral sensors. In this paper, we propose to use pixel level data fusion methods on laboratory sensors to check their availability to increase spatial information with low effect on both dimensions (spectral and spatial). The methodology presents two steps, first the registration to fit spatially the sensors and then the fusion step to estimate each sensor at the optimal resolution. The proposed method was used on three sediment cores, that are living sample which can move, crack. They are imaged sequentially with two sensors that do not overlap spectrally: visible near infrared VNIR (400-1000 nm, pixel size: 60 μm), short wave infrared SWIR (1000-2500 nm, pixel size: 190 μm). The registration step allows to have a correlation above 0.9 with still spatial defect bring by the samples that cannot be removed. The twenty-one state of the art pixel level data fusion methods seems to be less relevant than a bicubic interpolation for the case of the laboratory hyperspectral images of sediment cores.

Keywords: Hyperspectral Imaging, Data Fusion, Hypersharping, Image Registration, Sediment Core, Visible and Near Infrared Spectroscopy

1. Introduction

Using multiple spectroscopic and imaging sensors that cover different spectral range is very widespread for the structural and spatial analysis of some sample [1]. Each sensor is often used independently from the other to study different chemical compounds. Recent studies have been realized for the combination of sensors in a unique dataset [2]–[4] and show that model performances and robustness increase. These methods are called data fusion.

Determining the best organization for data fusion remains an open issue. Indeed, the success of applications is such that it is not easy to find a generic strategy that can be applied in all cases. This diversity is mainly due to the level at which the merger operation is completed. Dasarathy [5] considers three levels of fusion:

- the fusion of measurements or low-level fusion, it concerns the fusion of data directly from the sensors.
- The fusion of attributes or characteristics is the intermediate level. It concerns the combination of information extracted after various phases of data processing.
- and, the fusion of decisions, it corresponds to the highest level of abstraction. For each input information, a decision is made. The fusion consists in providing a global decision based on the input decisions.

The sediment cores, on which we are working, have been digitized with the visible and the near infrared (VNIR), short wave infrared (SWIR) spectroscopic ranges, which do not have the same resolution and at different times (the core structure has degraded and the water has partially evaporated). To process these data, it will therefore be necessary to solve the following two problems: the acquired pixels are not necessarily at the same position, so it will be necessary to make an adjustment between the images from the sensors, and the sensors do not have the same resolution.

Adjustment methods must be used to fit spatially pixels between several sensors. Two main classes exist [6]. The first one is based on the extracted features (points, lines, curves) that can be recovered inside each image [7], [8]. The second is based on intensity or gradient correlation. The difficulty with hyperspectral image on different spectral ranges is to find something similar to make the adjustment.

To our knowledge, the methods developed in satellite imagery make it possible to merge images of different resolutions, known as pansharpening. The purpose of this paper is to study these methods and estimate if they can be applied to our sediment images. The low-level data fusion methods were chosen to keep as much spectral information as possible, without data reduction, in order to create robust and efficient multivariate prediction models with the fused spectral information. The algorithms based on pansharpening methods are known as hypersharpening for fusion of multi- (MS) or hyper-spectral (HS)

images. They can be divided into two main classes, following spatial or spectral approaches, the component substitution (CS) and the multiresolution analysis (MRA) [9]. The CS methods are based on the substitution of components, obtained with a spectral transformation of the lower resolution (LR) sensor, by a plane of the high resolution (HR) one. The MRA methods relies on the extraction of spatial details obtained from the HR image multiresolution decomposition that are then injected on the LR image. With the increasing of HS sensors availability, algorithms were developed to use the spectral dimension of both sensors. For that, spectral fingerprints, also called endmembers, of the sample were estimated by unmixing to create a subspace for the HS-HS or MS-HS fusion. Recently, deep learning methods present great interest and potential for the HSI fusion. Several architectures were proposed based on super-resolution or sparse representation [10]–[12].

In this paper a methodology based on the Scale Invariant Features Flow (SIFT flow) registration [7] and twenty-one pixel level data fusion algorithms were compared [9], [13], [14]. It was applied to two laboratories hyperspectral images of the VNIR and SWIR spectroscopic ranges, and three sediment cores from western French alps lakes.

The paper is organized as follows. In section 2 we describe the equipment used and the methods. In Section 3, we apply the methods and evaluate them. Finally, we will conclude and give some perspectives.

2. Materials and methods

2.1. Sediment cores

Lacustrine sediment core samples with several depositional structures (fine/disturbed/fuzzy lamina, flood deposit, homogeneous sediment), colors (light, dark), textures (clay, silt, sand) were used. The lakes Bourget (LDB, IGSN: IEFRA08BW) [15], Allos (ALO, IGSN: IEFRA08JN) [16] and Aiguebelette (AIG) from western French Alps were chosen for this study.

2.2. Hyperspectral imaging acquisitions

The cores were analyzed sequentially, at the University of Rouen, with the VNIR (PFD-V10E) and the SWIR hyperspectral cameras (Lens OLES22,5, Specim Ltd., Finland). Sensors specificities are presented in Table I.

Table I: Comparison of sensor properties

	Spectral range (nm)	Spectral resolution (nm)	Spectral bands	Pixel size (μm)
SWIR	968-2574	12	144	190
VNIR	400-1000	6	98	60

The cores were cleaned before acquisition to be as flat as possible and to reveal all sediment structures. The spectral calibration was made with a spectralon reference (white)

and the shutter closed (black). For the spatial calibration, tests on a known object were made to have his true shape (squared pixel) and color (intensity). This was done only at the beginning and no deviations were observed at the end of the acquisition. More details about the protocol can be found in [17]. The data were then converted and processed with Matlab R2018a and open functions.

2.3. Sensors registrations

The SIFT flow algorithm was used to register each image. The SIFT estimated in SIFT flow only use the locally feature extractions, whereas the SIFT proposed by Lowe [18] were extracted and detected at the global scale. It is based on three main steps, (1) an estimation of the dense SIFT descriptor, (2) their matching with an optical flow and (3) a multiresolution matching optimization. More details can be found in [7], as well as the Matlab functions. The SIFT matching allows to create a distortion model that was applied on one of the two images.

Table II: Assignment of the vibrational absorption bands of liquid water

VNIR		SWIR	
λ (nm)	Assignment	λ (nm)	Assignment
606	$a\nu_1 + b\nu_3$; $a + b = 5$	1200	$a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3$; $a + b = 2$
660	$a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3$; $a + b = 4$	1470	$a\nu_1 + b\nu_3$; $a + b = 2$
739	$a\nu_1 + b\nu_3$; $a + b = 4$	1900	$a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3$; $a + b = 1$
836	$a\nu_1 + \nu_2 + b\nu_3$; $a + b = 3$		
970	$a\nu_1 + b\nu_3$; $a + b = 3$		

The registration must be made with a grayscale image which has similar structural properties (bio-physico-chemical). The sediment cores have a high moisture rate, water spectral bands are well known [19] and are presented in Table II. These bands are overtones and combinations of the fundamental bands in the mid-infrared that are not in our study spectroscopic range. There are three fundamental bands depending on the bonds vibration: symmetric stretch (ν_1), asymmetric stretch (ν_3) and bending (ν_2). For the VNIR sensor, there are five water bands and three bands for the SWIR sensor, so fifteen combinations were tested for the registration. The VNIR image has the highest resolution, so each spectral plane of the SWIR sensor was distorted.

Quantitative quality assessment is generally performed using a reference image to assess the quality of the pansharpened image, as defined by Wald's synthesis property [20]. Relative dimensionless Global Error in Synthesis (ERGAS), and Universal Image Quality Index (UIQI) can be used to determine the global quality of these images. These two quality indexes were calculated for each of the 15 VNIR-SWIR combinations. The indices are presented in the paragraph 2.2.4.2. The optimal combination was retained, and the distortion model was applied on each spectral plane of the SWIR sensor.

2.4. Pixel level data fusion

2.4.1. Method descriptions

Twenty-one state-of-the-art fusion methods were used for the fusion of the SWIR data with the VNIR ones. They are based on three different approaches (CS, MRA, unmixing). The Matlab functions can be found at <http://openremotesensing.net/> and came from the research articles [9], [13], [14].

These methods are compared to a simplest fusion method based on LR bicubic interpolation of each spectral plan [21]. Seven CS methods were used:

- PCA: Principal Component Analysis [22],
- IHS: Intensity-Hue-Saturation [23],
- Brovey transform [24],
- BDSF: Band-Dependent Spatial-Detail with local parameter estimation [25],
- GS: Gram Schmidt (Mode 1) [26],
- GSA: Gram Schmidt Adaptive [27],
- PRACS: Partial Replacement Adaptive Component Substitution [28].

Eleven MRA methods based mainly on Generalized Laplacian Pyramid or Wavelet were also used:

- HPF: High-Pass Filtering [22],
- SFIM: Smoothing Filter-based Intensity Modulation [29],
- Indusion: Decimated Wavelet Transform using an additive injection model [30],
- ATWT: Additive A TrouS Wavelet Transform with unitary injection model [31], using the Model 2 (ATWT-M2) or the Model 3 (ATWT-M3) [32],
- AWLP: Additive Wavelet Luminance Proportional [33],
- MTF-GLP: MaTched Filter (MTF) [34] with Generalized Laplacian Pyramid (GLP) [35] with unitary injection model, and multiplicative injection model (MTF-GLP-HPM) [36] and Post-Processing (MTF-GLP-HPM-PP) [37], or regression-based injection model (MTF-GLP-CBD) [38],
- GS2-GLP: Gram-Schmidt (GS, mode 2) algorithm with GLP.

Three HS fusion methods were used:

- GFPCA: Guided Filter PCA [39],
- CNMF: Coupled Nonnegative Matrix Factorization [40],
- HySure: HS Superresolution [41].

The pansharpening methods CS and MRA were adapted to be used as hypersharpening. For that, three technics have been proposed in the literature [42]. (1) Use the mean plane of the high-resolution HR sensor to sharpen each plane of the low resolution LR one. (2) Use the highly correlated HR plane to the LR one. (3) Estimate a new plane which is a

linear combination of the HR plane to fit with a LR plane. We use the third technique that is in most of the cases the optimal one, and that is more relevant in a structurally way.

2.4.2. Quality measures

As defined in Wald's synthesis property [20], four parameters were calculated to compare these methods: (1) Spectral Angle Mapper (SAM), (2) ERGAS, (3) UIQI, (4) computation time (t). The SAM was calculated for all spectrum voxel, whereas the ERGAS and the UIQI were estimated for all wavelength planes of the LR image. The average values of each parameter were presented.

$$SAM = \arccos\left(\frac{\langle a, b \rangle}{\|a\| \|b\|}\right) \quad (1)$$

with a the spectra of the LR image, b the fused spectra subsampled at the original resolution.

$$ERGAS = 100 \times \frac{h}{l} \times \sqrt{\frac{RMSE(A,B)^2}{\bar{A}}} \quad (2)$$

with A a wavelength plane of the LR image, \bar{A} the mean of A , B a fused wavelength plane subsampled at the original resolution, h the high resolution and l the low resolution.

$$UIQI = \frac{4 \times \sigma_{AB} \times \sigma_A \times \sigma_B \times \bar{A} \times \bar{B}}{(\sigma_A^2 + \sigma_B^2)(\bar{A}^2 + \bar{B}^2)} \quad (3)$$

with σ the standard deviation.

3. Results and discussion

3.1. Registrations

The registration step is mandatory, because a sediment core is a living sample that move. The main cause of that is the dehydration of the core that can retract or crack the sediment and holes or fissures can appear. The registration cannot be optimal due to these apparitions between the acquisition of both sensors.

The SIFT flow algorithm allows to obtain UIQI above 0.90 and ERGAS lower than 15.00 for some wavelength combinations (Table III). The three ranked optimal values of each quality measurement parameters are highlighted with colors (green-blue-orange). The optimal one seems to be 970-1200 nm, that are the most closely bands and can possess similar structural information. Some defects still exist due to the complexity of the sample and the presence of some structures on an image and not on the other. The two worst combinations are 606-1200 nm and 970-1900 nm. Organic spectral bands can overlap with the moisture ones at 1900 nm, LDB and AIG are lakes with high variability of the organic compounds [17]. The weakest overtones do not have enough moisture signal to allow an optimal registration.

Table III: Registration performances for the three images
(ranking of the three best values, first: green, second: blue, third: orange)

LDB	UIQI			ERGAS		
λ (nm)	1200	1470	1900	1200	1470	1900
606	0.67	0.87	0.85	23.58	20.55	50.07
660	0.68	0.88	0.86	17.72	24.39	52.14
739	0.83	0.83	0.77	7.15	33.22	56.56
836	0.87	0.78	0.71	9.55	36.72	58.33
970	0.88	0.77	0.69	10.69	37.68	58.85
ALO	UIQI			ERGAS		
λ (nm)	1200	1470	1900	1200	1470	1900
606	0.96	0.96	0.92	54.64	40.69	14.56
660	0.97	0.96	0.92	47.15	34.09	17.08
739	0.98	0.96	0.92	34.36	23.17	22.64
836	0.98	0.96	0.91	22.09	13.35	28.56
970	0.98	0.97	0.92	14.83	8.68	31.97
AIG	UIQI			ERGAS		
λ (nm)	1200	1470	1900	1200	1470	1900
606	0.86	0.87	0.87	78.06	13.82	49.93
660	0.89	0.87	0.86	52.98	22.39	54.94
739	0.92	0.87	0.84	25.15	34.28	60.64
836	0.94	0.87	0.83	13.78	39.38	62.90
970	0.95	0.88	0.83	9.76	40.98	63.51

The Fig. 1 shows, with the two first lines, the images to register. The SIFT flow algorithm seems unaffected by the color differences of the RGB and pseudo-RGB images. This figure shows clearly, with the difference images, the strata shifts for LDB and AIG, the structure and the fissures shifts for ALO. Most of them were removed after the registration and allows to fit spatially the images.

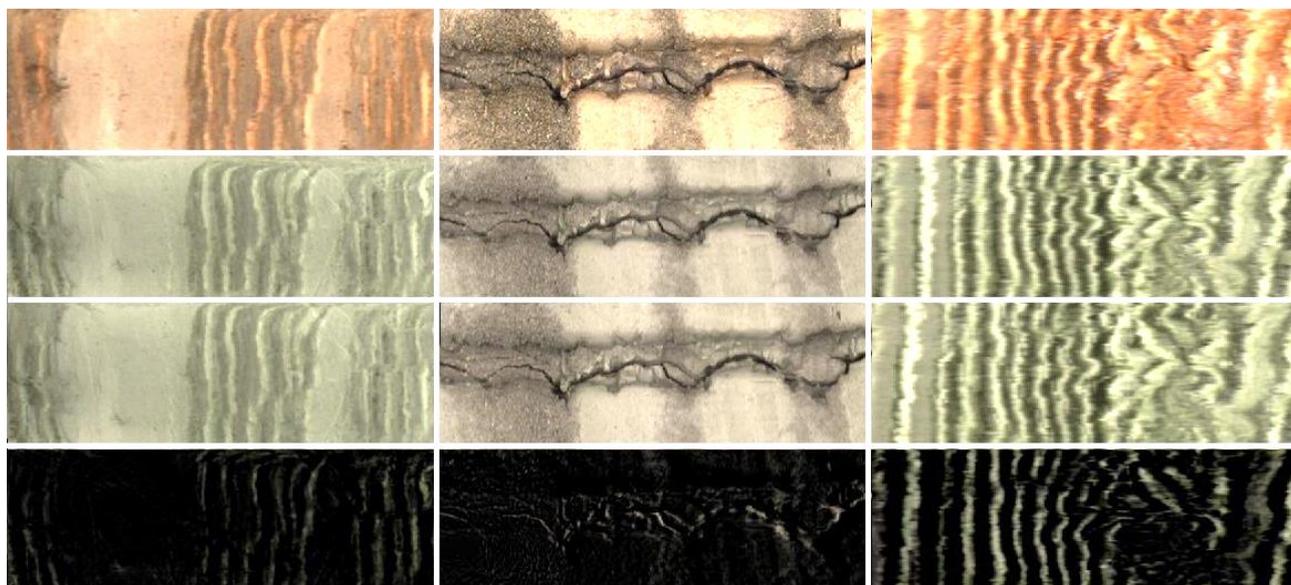


Fig. 1: RGB images of the three samples (line 1); Pseudo-RGB images before (line 2) and after registration (line 3); Difference images between the before and after images (line 4)

As moisture contents, others structural compounds may be used for registration, if they are recorded in the different sensors. So, knowledges of the sample or the scene imaged are advised. This registration method can also be used for other images digitized sequentially (laboratory imaging, UAV).

3.2. Results of fusion methods

The Table IV shows the performances of the twenty-one-pixel level data fusion methods for the fusion of the SWIR data with the VNIR ones. Two groups can be distinguished, one with optimal values (low SAM and ERGAS, high UIQI) and the others. The first one includes the MRA methods and the BSD method of CS. As for registration, the three ranked optimal values of each quality measurement parameter are highlighted with colors (green-blue-orange).

Table IV: Quantitative results for the fusion of the SWIR data with the VNIR ones, applied to the three hyperspectral images (ranking of the three best values, first: green, second: blue, third: orange)

Lake	Bourget Lake				Allos Lake				Aiguebelette Lake			
	SAM	ERGAS	UIQI	t (s)	SAM	ERGAS	UIQI	t (s)	SAM	ERGAS	UIQI	t (s)
Reference	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0
Exp	0.0050	0.20	0.99	1.69	0.008	0.39	0.98	3.09	0.0053	0.43	1.00	0.43
PCA	0.0248	2.40	0.29	1.37	0.046	7.54	0.05	23.34	0.0729	8.55	0.08	2.03
HIS	0.0248	2.40	0.29	10.44	0.046	7.54	0.05	8.11	0.0729	8.55	0.08	0.78
Brovey	0.0248	2.40	0.29	3.73	0.046	7.54	0.05	7.78	0.0729	8.55	0.08	0.77
BDSB	0.0048	0.23	0.99	3.58	0.008	0.39	0.99	76.68	0.0093	0.97	0.99	10.76
GS	0.0248	2.40	0.29	33.17	0.046	7.54	0.05	24.26	0.0729	8.55	0.08	2.21
GSA	0.0296	3.02	0.28	10.69	0.228	2043.72	0.04	60.47	0.8427	1819.09	0.01	4.72
PRACS	0.0187	1.82	0.58	25.65	0.027	6.05	0.52	59.65	0.0357	5.01	0.71	4.92
HPF	0.0052	0.24	0.98	26.09	0.008	0.42	0.98	16.42	0.0075	0.62	0.99	1.27
SFIM	0.0052	0.24	0.98	7.11	0.009	0.51	0.98	15.91	0.0075	0.66	0.99	1.26
Indusion	0.0050	0.28	0.98	7.14	0.008	0.49	0.98	30.81	0.0085	0.80	0.99	6.27
ATWT	0.0058	0.36	0.95	16.40	0.009	0.57	0.96	48.55	0.0113	1.07	0.98	2.96
AWLP	0.0058	0.36	0.95	20.17	0.009	0.57	0.96	52.20	0.0113	1.07	0.98	3.07
ATWT M2	0.0089	0.42	0.94	21.55	0.012	0.65	0.96	154.06	0.0173	1.76	0.93	8.22
ATWT M3	0.0238	0.39	0.95	59.48	0.014	0.63	0.96	159.56	0.0155	1.44	0.96	9.51
MTF GLP	0.0053	0.27	0.97	65.52	0.008	0.46	0.98	25.49	0.0088	0.75	0.99	3.05
MTF GLP HPM PP	0.0051	0.23	0.98	11.54	0.009	0.47	0.98	74.97	0.0067	0.57	0.99	9.50
MTF GLP HPM	0.0053	0.28	0.97	33.97	0.009	0.55	0.97	25.33	0.0088	0.80	0.99	3.03
GS2 GLP	0.0052	0.26	0.98	11.31	0.008	0.41	0.98	27.47	0.0055	0.45	1.00	3.39
GFPCA	0.0161	1.07	0.64	12.11	0.023	1.72	0.67	11.94	0.0369	4.44	0.52	4.22
CNMF	0.0227	2.49	0.29	6.67	0.021	9.06	0.15	411.84	0.0206	7.38	0.38	86.01
HySure	0.0216	1.56	0.50	1.39	0.027	5.51	0.36	879.22	0.4209	21.90	0.10	115.83

The optimal method is the bicubic interpolation (Exp), then the BDSB method, followed by GS2 GLP. The Fig. 2 shows the pseudo-RGB images of those methods and the real data. The ERGAS is observable with the image color differences. The qualitative inspection of the fused pseudo-RGB images do not reveal main changes. The difference images between the BDSB and GS2 GLP methods with the Exp one reveal the fused information. These values present a gaussian or a pseudo-gaussian distribution, with maximum values of 10^{-2}

for GS2 GLP and of 10^{-3} for BDSB for the three samples, whereas image range distribution is 0 to 1.

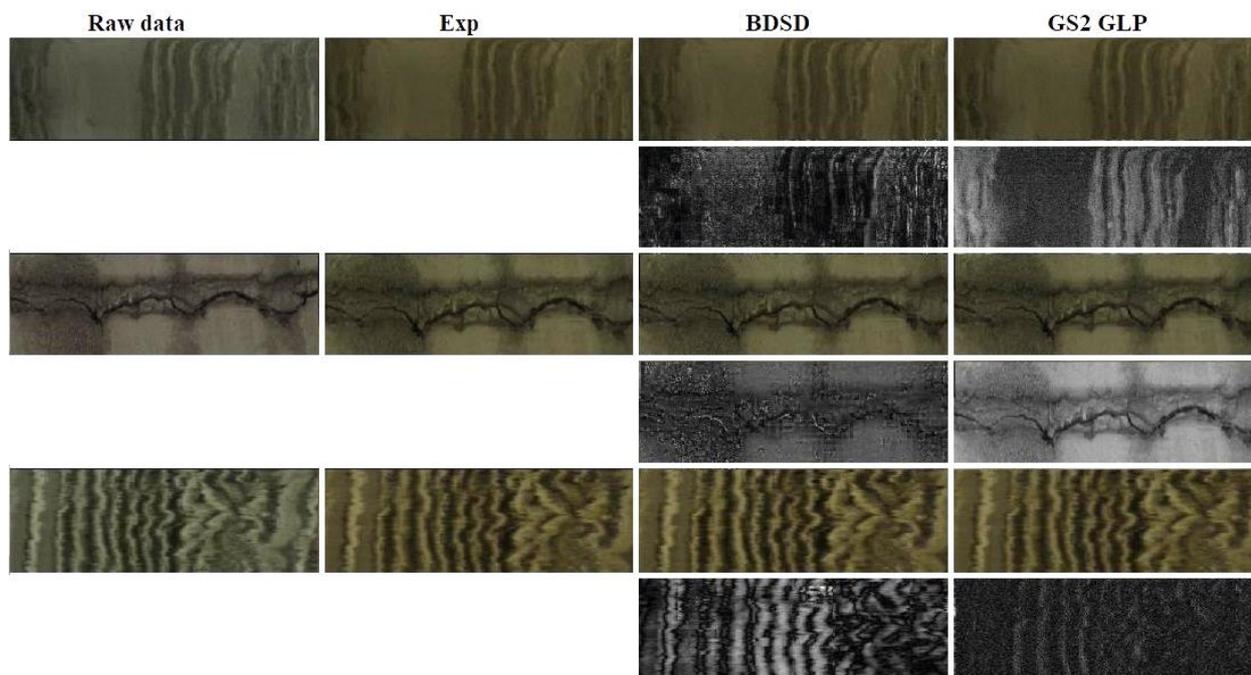


Fig. 2: Pseudo-RGB image of the real SWIR data, and the three fusion methods: Exp, BDSB, GS2 GLP (lines 1-3-5), and difference images between the BDSB and GS2 GLP methods with the Exp one (lines 2-4-6), the lighter or the darker the gray-level, the greater the difference (light for positive differences, dark for negative differences).

The bicubic interpolation seems to be the most relevant method for the HSI fusion, and the remote sensing hypersharpening fusion methods seem to be not enough relevant for proximal hyperspectral imaging [43]. The relation between the low frequencies (textures) and the high frequencies (edge details) is quite difficult to find in the case of a sediment sample that can disturb the fusion rules. For our hyperspectral data, there is also the difficulty of the non-overlapping wavelengths of the sensors. New methods for the reconstruction of a HR datacube for proximal data without overlapping bands need to be created. The physical-chemical information, that are similar between the sensors, need to be more use. Unmixing methods try to find spectral fingerprints, called endmembers. But in our case, they cannot be recovered between the sensors, due to the non-overlapping spectral range, the different structural information that they contain and the large similarity between the voxels. Deep learning methods can be used to learn the relation between these non-overlapping ranges and need to be investigated for our study.

4. Conclusion

Laboratory hyperspectral imaging is a very promising analytical method. Many sensors exist and are mainly used independently, whereas the structural information is complementary. Data fusion methods may create a composite sensor with them to increase structural information and thus allow improved the robustness of prediction models.

This study shows that registration of the hyperspectral image of living sample can be made based on known chemical compounds. This was validated with the moisture content of the sediment. This application can be generalized to registration of all image digitized sequentially by several sensors. The state-of-the-art data fusion methods seem to be not enough for laboratory hyperspectral imaging due to a lack of relation between the low-high frequencies. New methods based on the structural information contained by the sample need to be created or improved. For example, unmixing methods assume that the same structural information can be found in the different sensors. Another method could be the recursive super-resolution with deep learning approaches to find the relations between the main (matrix effects) and minor (specific compounds) structural information that can be recovered inside the different sensors.

Acknowledgment

Coring supports were provided by the French National Research Agency's with the IPER-RETRO program for lake Bourget (ANR-08-VUL 005), the Pygmalion project for lake Allos (ANR BLAN07-2_204489). We are grateful to Erwan Messenger and Charline Giguet-Covex for providing us the Aiguebelette core. Hyperspectral imaging was processed at the University of Normandie-Rouen and was funded by the Region Normandie, which supports the scientific consortium SCALE UMR CNRS 3730.

References

- [1] A. de Juan, “Hyperspectral image analysis. When space meets Chemistry,” *J. Chemom.*, vol. 32, no. 1, pp. 1–13, 2018.
- [2] Y. Peng, M. Knadel, R. Gislum, K. Schelde, A. Thomsen, and M. H. Greve, “Quantification of SOC and clay content using visible near-infrared reflectance-mid-infrared reflectance spectroscopy with jack-knifing partial least squares regression,” *Soil Sci.*, vol. 179, no. 7, pp. 325–332, 2014.
- [3] M. Clairotte *et al.*, “National calibration of soil organic carbon concentration using diffuse infrared reflectance spectroscopy,” *Geoderma*, vol. 276, pp. 41–52, 2016.
- [4] D. Wang *et al.*, “Synthesized use of VisNIR DRS and PXRF for soil characterization: Total carbon and total nitrogen,” *Geoderma*, vol. 243–244, pp. 157–167, 2015.
- [5] B. V. Dasarathy, “Information Fusion – what, where, why, when, and how?,” *Inf. Fusion*, vol. 2, no. 2, pp. 75–76, 2001.
- [6] F. Alam, S. U. Rahman, S. Ullah, and K. Gulati, “Medical image registration in image guided surgery: Issues, challenges and research opportunities,” *Biocybern. Biomed. Eng.*, vol. 38, no. 1, pp. 71–89, 2018.
- [7] Ce Liu, J. Yuen, and A. Torralba, “SIFT Flow: Dense Correspondence across Scenes and Its Applications,” *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, vol. 33, no. 5, pp. 978–994, 2011.
- [8] G. Brigot, E. Colin-Koeniguer, A. Plyer, and F. Janez, “Adaptation and Evaluation of an Optical Flow Method Applied to Coregistration of Forest Remote Sensing Images,” *IEEE J. Sel. Top. Appl. Earth Obs. Remote Sens.*, vol. 9, no. 7, pp. 2923–2939, 2016.
- [9] G. Vivone *et al.*, “A Critical Comparison Among Pansharpening Algorithms,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 53, no. 5, pp. 2565–2586, 2015.
- [10] J. Yang, Y.-Q. Zhao, J. Chan, J. Yang, Y.-Q. Zhao, and J. C.-W. Chan, “Hyperspectral and Multispectral Image Fusion via Deep Two-Branched Convolutional Neural Network,” *Remote Sens.*, vol. 10, no. 5, p. 800, 2018.
- [11] F. Palsson, J. R. Sveinsson, and M. O. Ulfarsson, “Multispectral and Hyperspectral Image Fusion Using a 3-D-Convolutional Neural Network,” *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, vol. 14, no. 5, pp. 639–643, 2017.
- [12] R. Dian, S. Li, A. Guo, and L. Fang, “Deep Hyperspectral Image Sharpening,” *IEEE Trans. Neural Networks Learn. Syst.*, vol. 29, no. 11, pp. 5345–5355, 2018.

- [13] N. Yokoya, C. Grohnfeldt, and J. Chanussot, “Hyperspectral and Multispectral Data Fusion: A comparative review of the recent literature,” *IEEE Geosci. Remote Sens. Mag.*, vol. 5, no. 2, pp. 29–56, 2017.
- [14] L. Loncan *et al.*, “Hyperspectral Pansharpening: A Review,” *IEEE Geosci. Remote Sens. Mag.*, vol. 3, no. 3, pp. 27–46, 2015.
- [15] J.-P. Jenny *et al.*, “A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps),” *J. Paleolimnol.*, vol. 51, no. 4, pp. 469–483, 2014.
- [16] B. Wilhelm *et al.*, “1400 years of extreme precipitation patterns over the Mediterranean French Alps and possible forcing mechanisms,” *Quat. Res.*, vol. 78, no. 1, pp. 1–12, 2012.
- [17] K. Jacq *et al.*, “High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core,” *Sci. Total Environ.*, vol. 663, pp. 236–244, 2019.
- [18] D. G. Lowe, “Object recognition from local scale-invariant features,” in *Proceedings of the Seventh IEEE International Conference on Computer Vision*, 1999, pp. 1150–1157 vol.2.
- [19] C. N. Banwell and E. M. McCash, *Fundamentals of molecular spectroscopy*. McGraw-Hill, 1994.
- [20] L. Wald, *Data fusion: definitions and architectures: fusion of images of different spatial resolutions*. Les Presses de l’École des Mines, 2002.
- [21] R. Keys, “Cubic convolution interpolation for digital image processing,” *IEEE Trans. Acoust.*, vol. 29, no. 6, pp. 1153–1160, 1981.
- [22] J. Chavez, P. & C. Sides, and J. Stuart & A. Anderson, “Comparison of Three Different Methods to Merge Multiresolution and Multispectral Data: Landsat TM and SPOT Panchromatic,” *Photogramm. Eng. Remote Sensing*, vol. 57, pp. 295–303, 1991.
- [23] T.-M. Tu, S.-C. Su, H.-C. Shyu, and P. S. Huang, “A new look at IHS-like image fusion methods,” *Inf. Fusion*, vol. 2, no. 3, pp. 177–186, 2001.
- [24] A. R. Gillespie, A. B. Kahle, and R. E. Walker, “Color enhancement of highly correlated images. II. Channel ratio and ‘chromaticity’ transformation techniques,” *Remote Sens. Environ.*, vol. 22, no. 3, pp. 343–365, 1987.
- [25] A. Garzelli, F. Nencini, and L. Capobianco, “Optimal MMSE Pan Sharpening of Very High Resolution Multispectral Images,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 46, no. 1, pp. 228–236, 2008.

- [26] C. A. Laben and B. V. Brower, “Process for enhancing the spatial resolution of multispectral imagery using pan-sharpening,” *U.S. Pat. 6,011,875*, 2000.
- [27] B. Aiazzi, S. Baronti, and M. Selva, “Improving Component Substitution Pansharpening Through Multivariate Regression of MS+Pan Data,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 45, no. 10, pp. 3230–3239, 2007.
- [28] J. Choi, K. Yu, and Y. Kim, “A New Adaptive Component-Substitution-Based Satellite Image Fusion by Using Partial Replacement,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 49, no. 1, pp. 295–309, 2011.
- [29] J. G. Liu, “Smoothing Filter-based Intensity Modulation: A spectral preserve image fusion technique for improving spatial details,” *Int. J. Remote Sens.*, vol. 21, no. 18, pp. 3461–3472, 2000.
- [30] M. M. Khan, J. Chanussot, L. Condat, and A. Montanvert, “Indusion: Fusion of Multispectral and Panchromatic Images Using the Induction Scaling Technique,” *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, vol. 5, no. 1, pp. 98–102, 2008.
- [31] G. Vivone, R. Restaino, M. Dalla Mura, G. Licciardi, and J. Chanussot, “Contrast and Error-Based Fusion Schemes for Multispectral Image Pansharpening,” *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, vol. 11, no. 5, pp. 930–934, 2014.
- [32] T. Ranchin and L. Wald, “Fusion of high spatial and spectral resolution images: the ARSIS concept and its implementation,” *Photogramm. Eng. Remote Sensing*, vol. 66, no. 1, pp. 49–61, 2000.
- [33] X. Otazu, M. Gonzalez-Audicana, O. Fors, and J. Nunez, “Introduction of sensor spectral response into image fusion methods. Application to wavelet-based methods,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 43, no. 10, pp. 2376–2385, 2005.
- [34] B. Aiazzi, L. Alparone, S. Baronti, A. Garzelli, and M. Selva, “MTF-tailored Multiscale Fusion of High-resolution MS and Pan Imagery,” *Photogramm. Eng. Remote Sens.*, vol. 72, no. 5, pp. 591–596, 2006.
- [35] B. Aiazzi, L. Alparone, S. Baronti, and A. Garzelli, “Context-driven fusion of high spatial and spectral resolution images based on oversampled multiresolution analysis,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 40, no. 10, pp. 2300–2312, 2002.
- [36] B. Aiazzi, L. Alparone, S. Baronti, A. Garzelli, and M. Selva, “An MTF-based spectral distortion minimizing model for pan-sharpening of very high resolution multispectral images of urban areas,” in *2nd GRSS/ISPRS Joint Workshop on “Data Fusion and Remote Sensing over Urban Areas,”* 2003, pp. 90–94.
- [37] J. Lee and C. Lee, “Fast and Efficient Panchromatic Sharpening,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 48, no. 1, pp. 155–163, 2010.

- [38] L. . Alparone, L. . Wald, J. . Chanussot, C. . Thomas, P. . Gamba, and L. M. Bruce, “Comparison of Pansharpening Algorithms: Outcome of the 2006 GRS-S Data-Fusion Contest,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 45, no. 10, pp. 3012–3021, 2007.
- [39] W. Liao *et al.*, “Processing of Multiresolution Thermal Hyperspectral and Digital Color Data: Outcome of the 2014 IEEE GRSS Data Fusion Contest,” *IEEE J. Sel. Top. Appl. Earth Obs. Remote Sens.*, vol. 8, no. 6, pp. 2984–2996, 2015.
- [40] N. Yokoya, T. Yairi, and A. Iwasaki, “Coupled non-negative matrix factorization (CNMF) for hyperspectral and multispectral data fusion: Application to pasture classification,” in *2011 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*, 2011, pp. 1779–1782.
- [41] M. Simoes, J. Bioucas-Dias, L. B. Almeida, and J. Chanussot, “A Convex Formulation for Hyperspectral Image Superresolution via Subspace-Based Regularization,” *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 53, no. 6, pp. 3373–3388, 2015.
- [42] M. Selva, B. Aiazzi, F. Butera, L. Chiarantini, and S. Baronti, “Hyper-Sharpener: A First Approach on SIM-GA Data,” *IEEE J. Sel. Top. Appl. Earth Obs. Remote Sens.*, vol. 8, no. 6, pp. 3008–3024, 2015.
- [43] J. Patrick, R. Brant, and E. Blasch, “Hyperspectral Imagery Throughput and Fusion Evaluation over Compression and Interpolation,” in *The 11th International Conference on Information Fusion*, 2008, pp. 575–582.

4.1.1 Des résultats supplémentaires

Ces approfondissements sont réalisés sur l'échantillon du lac du Bourget.

La corrélation inter-capteur

Comme on a pu le mentionner précédemment, les méthodes de pansharpening ont une approche 2D itérative, donc un plan spectral SWIR doit être lié à un plan spectral VNIR. Pour lier ces deux plans, trois possibilités ont été proposées [2]. (1) Soit utiliser le plan médian du capteur VNIR pour chaque plan SWIR, mais celui-ci ne prend pas en compte la composition de l'échantillon. (2) Soit utiliser le plan VNIR le plus corrélé au plan SWIR, dans ce cas-ci la composition de l'échantillon est prise en compte. (3) Pour aller plus loin, comme il y a des informations redondantes et complémentaires dans les spectres, on peut utiliser une combinaison linéaire des plans VNIR pour estimer un plan SWIR.

La figure 4.1 montre les corrélations obtenues pour les méthodes (2, optimale) et (3, synthétisée) entre un plan SWIR avec un ou des plans VNIR. On observe que les bandes VNIR synthétisées par combinaison linéaire ont des corrélations plus élevées avec les plans spectraux SWIR, qu'une bande VNIR optimale. On peut aussi observer que les corrélations chutent aux deux extrémités à cause d'une baisse de sensibilité du détecteur à ces longueurs d'onde et une hausse du bruit qui ne peut être modélisé.

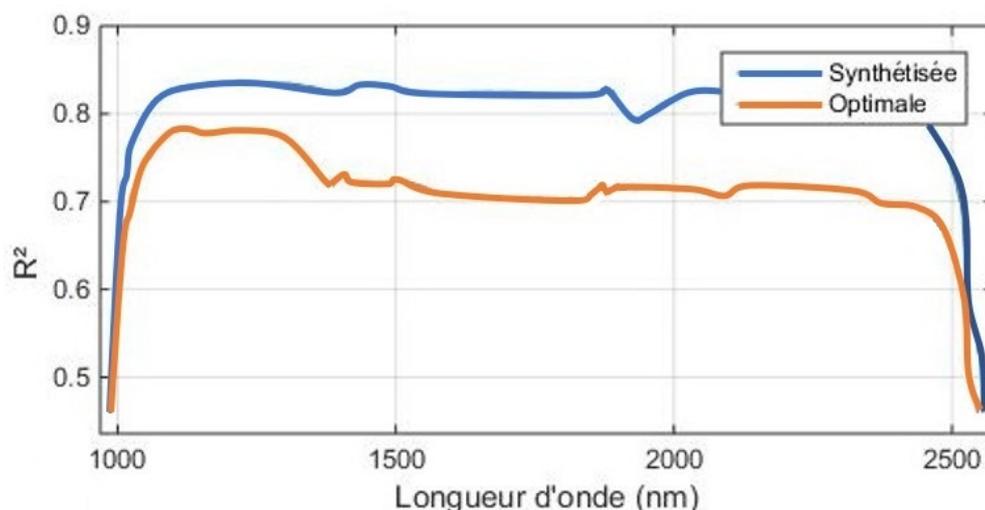


FIGURE 4.1 : Corrélation intercapteurs (VNIR-SWIR) avec la bande la plus corrélée (optimale) ou par régression linéaire (synthétisée)

La figure 4.2 montre les bandes VNIR optimales et les combinaisons linéaires réalisées pour lier les deux capteurs VNIR-SWIR. Pour les corrélations simples avec la figure 4.2a, on retrouve les observations du chapitre précédent lors du recalage des capteurs VNIR-SWIR (tableau 4.1) et sont liées aux composés organiques et minéraux de l'échantillon. Les corrélations composites présentent les mêmes tendances mais avec des valeurs légèrement plus élevées.

Pour les combinaisons linéaires, on observe globalement cinq bandes VNIR (600 / 700 / 780 / 830 / 1000 nm) qui sont les plus liées à toutes celles SWIR, c'est pourquoi les corrélations inter-capteurs linéaires et composites sont similaires. Des différences existent dans les coefficients de régression pour deux zones SWIR autour de 1400-1500 nm et 1930-

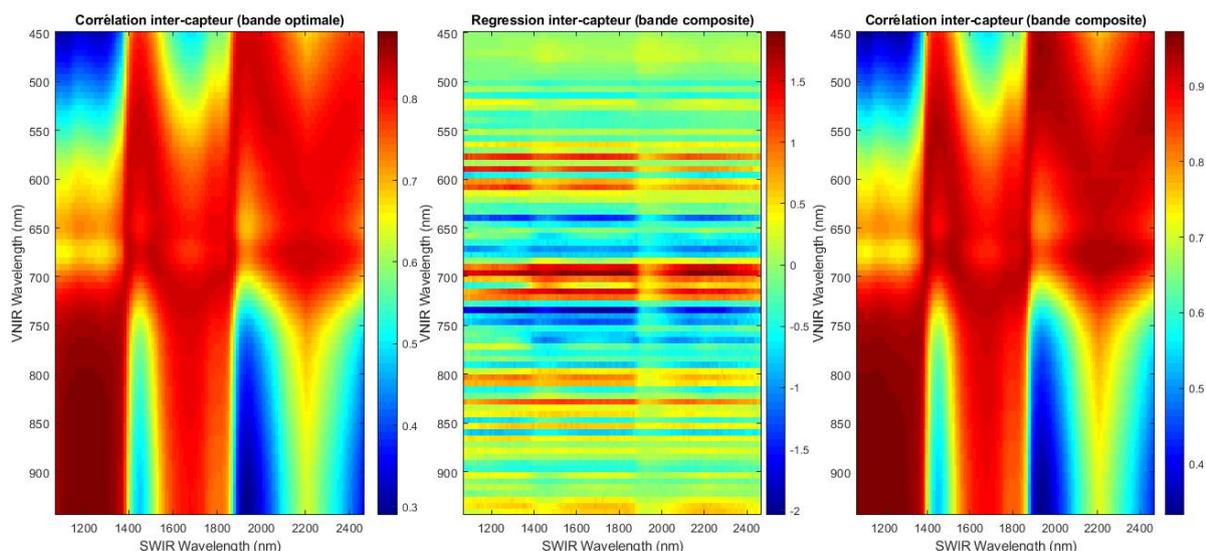


FIGURE 4.2 : (a) Corrélation entre les longueurs d’onde des deux capteurs déterminer la longueur d’onde VNIR optimale et les (b) coefficients de la combinaison linéaire des longueurs d’onde VNIR liée à chaque plan SWIR

VNIR (nm)	SWIR (nm)
750-1000	1000-1400
400-750	1400-1500
650-750	1500-1900
400-750	1900-2550

TABLE 4.1 : Zones spectrales corrélées entre les deux capteurs VNIR et SWIR

1970 nm, elles correspondent aux zones de l’eau et aux liaisons chimiques hydroxyles que l’on retrouve aussi dans les corrélations.

Il semble donc possible de reconstruire les données SWIR à haute résolution grâce aux données VNIR et aux liens entre ces deux capteurs.

Les performances des méthodes de fusion pour chaque longueur d’onde

Les résultats de fusion présentés dans le précédent article sont des moyennes de l’ensemble des longueurs d’onde. En effet, comme la validation est effectuée par dégradation de l’IHS SWIR HR à BR, il est possible d’estimer les performances (UIQI, ERGAS) de fusion à chaque longueur d’onde.

La figure 4.3 montre le critère UIQI de validation. On observe que la méthode exp (interpolation bicubique) est optimale pour la plupart des longueurs d’onde. Puis, la méthode BDSF qui a des résultats similaires. Ensuite, on trouve les méthodes MRA à base d’ondelettes et de pyramides laplaciennes, ainsi que HPF et Indusion. On observe comme pour les corrélations inter-capteurs des performances plus faibles aux deux extrémités induit par le détecteur, ainsi que vers 1450 nm et 1900 nm correspondant à des liaisons chimiques hydroxyles (O-H, liées à l’humidité, la MO, les minéraux). Pour les résultats des ERGAS (figure 4.4), les conclusions sont similaires, sauf pour la méthode Indusion qui présente des

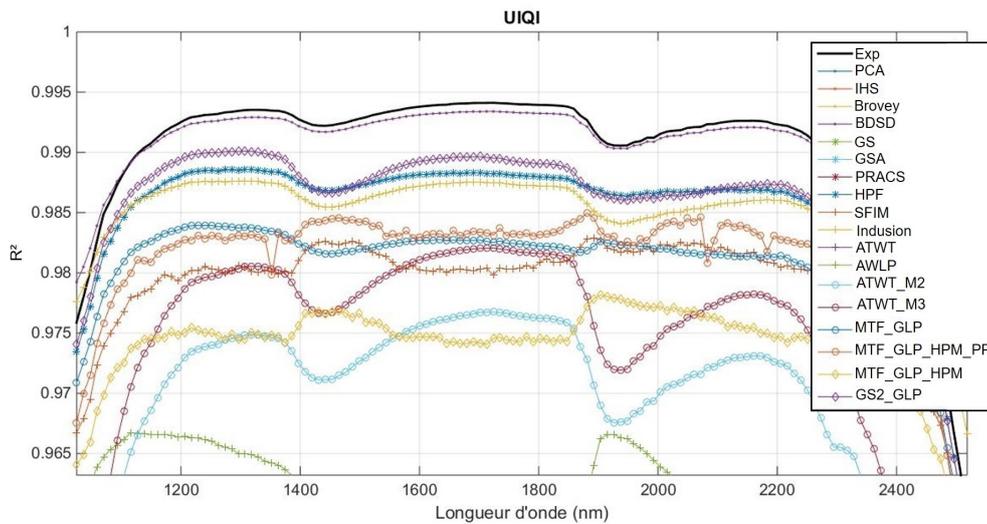


FIGURE 4.3 : UIQI calculés pour les différentes longueurs d'onde SWIR estimées à HR puis dégradé à BR

valeurs plus élevées que les autres.

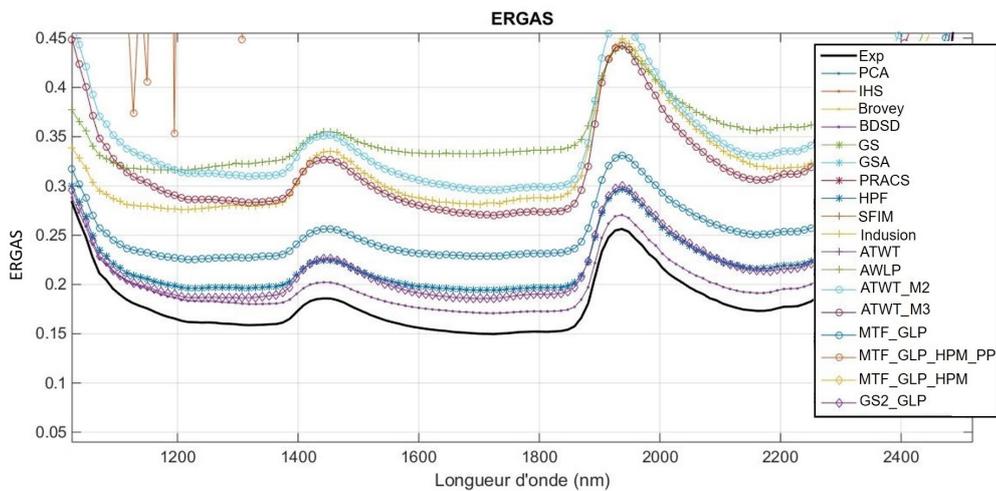


FIGURE 4.4 : ERGAS calculées pour les différentes longueurs d'onde SWIR estimées à HR puis dégradé à BR

La méthode optimale est donc l'interpolation bicubique, mais il faudrait l'étudier davantage pour estimer si cette méthode est réellement pertinente. Car sans approfondissement, rien n'indique qu'une simple interpolation puisse estimer de fines variations bio-physico-chimiques à partir de données plus grossières. Au contraire, il semble plus logique de penser que l'interpolation estime des variations "lissées" et non pas de fortes variations dans certains pixels, comme ce qui pourrait être le cas pour des échantillons naturels (figure 4.5). C'est pourquoi les méthodes de fusion utilisent les données HR ainsi que celles interpolées pour ajuster les valeurs estimées, mais les approches basées sur le pansharpening ne semblent pas adaptées aux données hyperspectrales de laboratoires.

Une étude portant sur la fusion d'images microscopiques classiques et Raman a aussi testé plusieurs algorithmes de pansharpening [3]. Elle a montré que les méthodes MRA sont les plus performantes avec les algorithmes : HPF, MTF-GLP, MTF-GLP-CBD et Indusion.

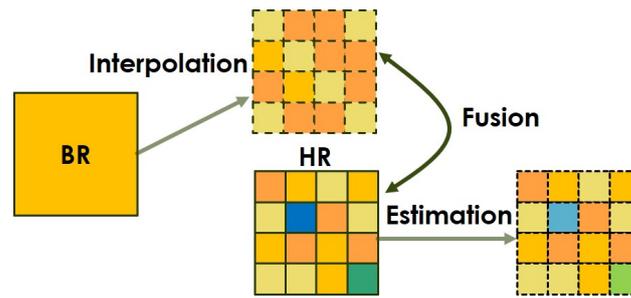


FIGURE 4.5 : Fonctionnement de l'interpolation et des méthodes de fusion

Cette étude est donc en accord avec nos observations. Mais les résultats n'ont pas été comparés à une simple interpolation. Les méthodes MRA ont donc le plus de potentiels pour la combinaison de capteurs de laboratoire à haute résolution.

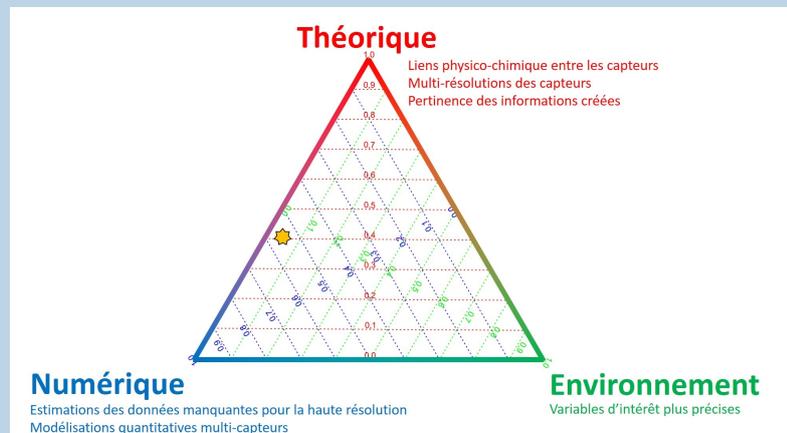
4.2 Des perspectives pour une fusion à haute résolution de capteurs de laboratoire

Comme on vient de le voir, les méthodes basées sur le pansharpening ne semblent pas applicables dans le cas de fusion de capteurs proximaux de laboratoire. Cela peut être dû à la trop grande similarité d'un pixel à l'autre ce qui ne permet pas de différencier les signaux hautes fréquences (détails) et basses fréquences (textures) sur lesquels se basent les méthodes utilisées. Les images hyperspectrales fusionnées à partir des méthodes de pansharpening sont estimées plan à plan, ce sont donc des approches 2D qui n'exploitent pas la totalité et la complémentarité des différents plans spectraux.

Une étude des algorithmes avancés existants pour des données hyperspectrales a été réalisée en 2018 et est régulièrement mise à jour par Jiang [4]. Elle montre les avancements dans les domaines de la fusion d'images qu'il rapproche à la super-résolution. Il regroupe ces méthodes en quatre familles : les approches bayésiennes, celles se basant sur des tenseurs ou des factorisations de matrices, ainsi qu'avec de l'apprentissage profond. L'ordre de citation des familles ci-dessus est globalement lié à leurs débuts de développement. Toutes ces méthodes se rejoignent sur la capacité d'apprentissage des données, soit indirectement avec l'utilisation de bibliothèque, soit directement avec des algorithmes de démélange et de réduction des données pour créer des sous-espaces permettant la modélisation des images à combiner [5].

Dans ce paragraphe, on va s'intéresser davantage aux réseaux d'apprentissage profonds qui sont aux centres d'études dans de nombreux domaines ces dernières années. Un récent état de l'art de ce type de méthodes a été proposée en 2018, il discute des difficultés des méthodes de fusion, des avantages des réseaux d'apprentissages profonds et des futurs développements [6]. Les principaux verrous qu'il mentionne concernent les multiples hypothèses sur lesquelles reposent ces méthodes : les transformations appliquées aux images, les règles de fusion, les critères de cohérences spatiales et spectrales, les capacités d'apprentissage, les critères de similarité et enfin les métriques utilisées pour la validation. C'est pourquoi il met en avant les réseaux d'apprentissage profond qui permettent selon lui d'extraire automatiquement les meilleures caractéristiques des images, de modéliser des relations complexes entre les deux types de données, d'avoir de meilleures représentations des images. Trois types de familles de réseaux d'apprentissage profond sont utilisés dans la littérature, les réseaux de neurones convolutifs (Convolutional neural network, CNN), les représentations sparse convolutifs (Convolutional sparse representation, CSR), les approches par auto-encodeurs (Stacked autoencoder, SAE). Une grande majorité des approches pour la fusion se basent sur les CNN. La plupart de celles-ci utilisent des approches à deux branches, chacune traitant une image pour en extraire ses caractéristiques, puis une concaténation des deux résultats pour apprendre la relation liant les images avant de reconstruire l'image fusionnée [7, 8, 9].

Résumé :



Les méthodes de fusion au niveau pixel utilisées pour les images multi- et hyper- spectrales de télédétection, ainsi que pour les images multicapteurs médicales ne semblent pas adaptées pour le cas de nos images hyperspectrales de laboratoire. Ceci provient potentiellement des gammes spectrales disjointes et/ou de la trop grande similarité entre pixels voisins.

La plupart des algorithmes testés sont dérivés des méthodes de pan-sharpening, c'est à dire de la fusion d'image 2D. C'est pourquoi il faut s'intéresser davantage à des méthodes avancées développées spécifiquement pour la fusion d'image 3D. Parmi celles-ci on trouve notamment les méthodes se basant sur de la super-résolution avec des réseaux d'apprentissage profond, ou encore du démélange spectral. Elles peuvent utiliser la complémentarité entre les dimensions spatiales et spectrales.

Pour vérifier la pertinence des méthodes de recalage et de fusion, il faut aussi s'intéresser au préalable à la caractérisation des structures présentes dans l'échantillon. Précédemment, nous nous sommes intéressés aux lamines mais de manière manuelle. C'est pourquoi il faudrait s'appuyer sur des méthodes d'analyse d'images (paragraphe 1.1.2) et/ou d'apprentissage automatique (paragraphe 1.1.3) pour automatiser leurs caractérisations.

Bibliographie

- [1] *Annual recorders of the past*. Rapp. tech. 2014.
- [2] M. SELVA et al. « Hyper-Sharpener : A First Approach on SIM-GA Data ». In : *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 8.6 (2015), p. 3008-3024.
- [3] C. POMREHN et al. *Multiresolution analysis pansharpening for the fusion of raman and conventional brightfield microscopy images*. 2019.
- [4] J. JIANG. *Hyperspectral Image Super-Resolution Benchmark*. 2018.
- [5] N. YOKOYA, C. GROHNFELDT et J. CHANUSSOT. « Hyperspectral and Multispectral Data Fusion : A comparative review of the recent literature ». In : *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 5.2 (2017), p. 29-56.
- [6] Y. LIU et al. « Deep learning for pixel-level image fusion : Recent advances and future prospects ». In : *Information Fusion* 42 (2018), p. 158-173.
- [7] Z. SHAO et J. CAI. « Remote Sensing Image Fusion with Deep Convolutional Neural Network ». In : *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 11.5 (2018), p. 1656-1669.
- [8] J. YANG et al. « Hyperspectral and Multispectral Image Fusion via Deep Two-Branches Convolutional Neural Network ». In : *Remote Sensing* 10.5 (2018), p. 800.
- [9] R. DIAN et al. « Deep Hyperspectral Image Sharpening ». In : *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 29.11 (2018), p. 5345-5355.

Chapitre 5

La dimension spatiale, une dimension informative pour l'analyse spatio-spectrale des archives naturelles

Dans les chapitres précédents, nous avons traité les images hyperspectrales d'un point de vue spectral sans tenir compte ou très peu des dimensions spatiales. Or, il peut y avoir des informations dans la structure spatiale des dépôts. Qu'ils soient ponctuels ou localisés, leurs caractérisations permettent de déterminer des cycles, et leurs variations des changements environnementaux et climatiques.

Comme on a pu le voir dans les paragraphes 1.1.2 et 1.1.3, il est possible de caractériser ces dépôts par plusieurs approches. Mais la variabilité sédimentaire implique souvent que les méthodes développées sont "site-spécifique".

C'est pourquoi on propose par la suite, à travers deux méthodologies, des approches liant l'analyse d'image et l'apprentissage automatique pour utiliser la complémentarité des dimensions spatiales et spectrales.

L'imagerie hyperspectrale permet l'étude bio-physico-chimiques des échantillons comme on a pu le montrer précédemment, mais aussi la détection de structures sédimentaires grâce aux dimensions spatiales de ce type de données. Pour les carottes sédimentaires lacustres, on peut trouver :

- Des dépôts :
 - des strates qui peuvent dans certains cas être des lamines ou des varves (dépôts successifs saisonniers),
 - des dépôts instantanés, comme des crues, des séismes, des éruptions.
- Des particules :
 - des grains grossiers comme des sables, des cailloux,
 - des macro-restes de végétaux ou d'animaux,
 - des indicateurs d'évènements, comme des cendres (incendie).

Toutes ces informations spatiales sont des indicateurs temporels, c'est pourquoi leurs identifications permettent d'ajouter une dimension temporelle aux données. Elles permettent aussi de caractériser les variations bio-physico-chimiques dans le temps, et ainsi estimer des cycles ou des tendances qui peuvent être importants, comme pour le cas des événements instantanés qui peuvent être destructeurs. Les approches de type image comme les segmentations et discrétisations sont le plus souvent réalisées sur des images RGB ou en niveau de gris, mais grâce aux données hyperspectrales, on peut aussi le faire à partir des cartes d'abondance. Les approches de type classifications sont aussi des méthodes pertinentes pour utiliser la complémentarité des dimensions spatiales et spectrales, et ainsi caractériser les informations spectrales et bio-physico-chimiques discriminantes pour un type de dépôt sédimentaire donné.

5.1 La détection d'événements instantanés par l'utilisation de méthodes d'apprentissage automatique

La détection des dépôts instantanés comme les crues est importante pour dater certaines profondeurs de sédiments. Mais surtout pour estimer des chroniques et leurs intensités, pour comprendre leurs fonctionnements afin de réduire les dommages qu'ils peuvent causer tant environnementaux, que sociétaux et économiques.

Les méthodes actuelles se basent sur des comptages à l'œil et des analyses sédimentologiques et géochimiques, ce qui est chronophage et peu résolu spatialement (millimétrique). C'est pourquoi des études cherchent à améliorer cette précision et à automatiser la détection de ces dépôts. Notamment, Vannière qui utilise les niveaux de rouge contenus dans une image RGB [1]. Mais la couleur peut ne pas être un bon indicateur des crues, c'est pourquoi le recours à de nouvelles méthodes analytiques apportant des informations bio-physico-chimiques est intéressant. Deux méthodes sont mises en avant, la tomographie par rayons X et l'imagerie hyperspectrale. La première permet d'estimer le volume des particules, et les ruptures de tendances peuvent induire la présence de crues. Comme on a pu le voir dans le chapitre précédent, l'IHS peut aussi prédire la granulométrie. Elle a aussi permis d'estimer des téphras qui sont des dépôts d'éruption volcanique à partir d'une caméra VNIR et d'une méthode de classification à base de réseau de neurones artificiels [2].

Dans l'article en préparation ci-dessous, on propose d'utiliser une méthodologie similaire à cette étude sur les téphras. On utilise la caméra VNIR, qui peut être réduite à des images RGB (adaptées à la vision humaine), HSV (adaptées pour la représentation des couleurs) et en niveau de gris (réduction complète des canaux). On utilise également la caméra SWIR et la combinaison des deux caméras par recalage sur les bandes liées aux liaisons chimiques hydroxyles. En conséquence, six jeux de données seront comparés pour permettre la discrimination des crues. Quatre carottes sédimentaires ont été retenues car leurs chroniques de crue ont été publiées : deux provenant du lac du Bourget (A, G, [3]), une du lac d'Allos (D, [4]) et une du lac Léman (C). Une labellisation manuelle de ces dépôts est effectuée par un expert, puis un modèle de discrimination est créé par échantillon. 70% des données sont utilisées en calibration tout en ayant des effectifs homogènes pour chaque classe (crue ou non-crue), et le reste en validation. Cinq méthodes de classification supervisée sont utilisées, les arbres de décision (DT), les forêts aléatoires (RF), les classifieurs de Bayes naïfs (NB), les réseaux de neurones artificiels et convolutifs (ANN et CNN). La méthode CNN est adaptée pour utiliser des cubes 3D de quelques pixels spatiaux sur quelques longueurs d'onde, on parle de patchs 3D, pour tenir compte des variations spectrales et spatiales des dépôts [5], alors que les autres méthodes n'utilisent que la dimension spectrale. Ce caractère spatio-spectral de la méthode CNN est au centre de notre travail. La validation des performances de ces modèles est estimée de manière quantitative (précision et rappel correspondant à l'exactitude et l'exhaustivité des classifications) et qualitative (visuelle et avec des éléments ou ratio-élémentaires déterminés par XRF mais à une résolution inférieure).

Les résultats montrent que les données hyperspectrales sont les seules qui peuvent permettre la création de modèles de discrimination sur la base des validations quantitatives et qualitatives pour les quatre carottes. Les images VNIR sont donc choisies pour la suite de l'étude car elles possèdent des performances supérieures aux autres capteurs hyperspectraux et ont une résolution supérieure qui permettra de détecter des dépôts plus fins.

Quant aux méthodes de classification, la méthode NB ne permet pas de créer des cartes

de classification pertinentes. Les quatre autres méthodes montrent des résultats similaires avec un léger gain de performance pour les réseaux de neurones classiques. Au niveau des temps de calcul, la méthode CNN demande 15 minutes, alors que l'ANN ne requiert que 50 secondes. Les profils XRF du manganèse et du ratio zirconium sur potassium permettent avec leurs augmentations de détecter les crues, mais la résolution étant moindre, on ne peut l'utiliser que comme une validation qualitative.

Il y a aussi des différences entre les échantillons qui sont liées aux compositions des dépôts de crues. LDB17 et ALO09 présentent des dépôts de crues foncés et une sédimentation continue claire. Pour LEM10, les dépôts de crues sont rougeâtres foncés, et la sédimentation continue est grise clair. Ces trois échantillons peuvent donc être séparés sur un critère de couleur. Alors que pour LDB09, cette différence est inversée avec une couleur claire pour les dépôts de crues, claires et foncés pour la sédimentation continue avec des lamines. Dans ce cas, la couleur ne sera pas discriminante et la chimie doit intervenir. L'étude des longueurs d'onde discriminantes pour les méthodes DT et ANN va dans ce sens. Avec des zones localisées portant des informations chimiques spécifiques pour les échantillons LDB09 et LEM10, alors que les deux autres utilisent des bandes sur la totalité du spectre ce qui correspond à une discrimination sur la couleur (foncée / claire).

Comme pour le transfert des modèles quantitatifs au chapitre 2, nous avons testé les capacités de transferts de ces modèles ANN estimés sur une carotte pour les utiliser sur les autres échantillons. Ceci montre que le transfert n'est pas possible, même si des tendances positives existent entre les deux carottes du Bourget, ce qui peut être lié à leurs compositions sédimentaires similaires. On observe aussi que les modèles de discrimination estimés sur les carottes LDB09 et LEM10 sont ceux présentant des cartes de classifications les plus pertinentes, ce qui va dans le sens que les informations bio-physico-chimiques contenues dans la gamme spectrale visible sont davantage discriminantes que la couleur.

Une fois les cartes de classification estimées, il faut s'intéresser à la caractérisation des dépôts pour déterminer leurs profondeurs et épaisseurs. Pour cela, si les pixels de crues représentent plus de la moitié de la largeur de l'image, alors on considère être dans ce type de dépôt. Ceci conduit à l'estimation d'un signal 1D fonction de la profondeur, ensuite les dépôts sont caractérisés suivant les deux paramètres cités précédemment. Ainsi, une chronique de ces événements (intensité fonction de la profondeur) peut être comparée à celles publiées pour ces différents échantillons. On peut aussi voir que 48% des dépôts estimés présentent une épaisseur inférieure au millimètre, ce qui montre l'importance d'utiliser des méthodes de classification avec des images à haute résolution.

Supervised classification modeling for the automatic and high-resolution detection of floods on several sediment cores with hyperspectral imaging

Kévin Jacq^{1,2}, William Rapuc¹, Alexandre Benoit², Anne-Lise Develle-Vincent¹, Yves Perrette¹, Bernard Fanget¹, Pierre Sabatier¹, Bruno Wilhelm³, Didier Coquin², Maxime Debret⁴, Fabien Arnaud¹

1 Laboratoire des Environnements, DYnamiques, TErritoires de la Montagne, Université Savoie Mont-Blanc, UMR CNRS 5204,73376 Le Bourget du Lac, France

2 Laboratoire d'Informatique, Systèmes, Traitement de l'Information et de la Connaissance (LISTIC), Université Savoie Mont-Blanc, 74944 Annecy Le Vieux Cedex, France

3 University Grenoble Alpes, CNRS, IRD, Grenoble INP, IGE, F-38000 Grenoble, France

4 Laboratoire de Morphodynamique Continentale et Côtière, Université de Rouen, UMR CNRS 6143, 76821 Mont-Saint-Aignan, France, Université de Caen, UMR CNRS 6143, 14000 Caen, France

Corresponding Author:

Kévin Jacq

UMR CNRS 5204 Environnements, Dynamiques et Territoires de la Montagne (EDYTEM)

Université Savoie Mont Blanc, Campus scientifique,

73376 Le Bourget du Lac cedex, France

kevin.jacq@univ-smb.fr

Abstract

Floods are dangerous and damaging events with several impacts on the environment, societies, and economies. The studies of their frequencies that are registered in natural archives are essential to understand their processes and to reduce their impacts. The main methods to identify them are time-consuming, have a low spatial resolution (millimeter), and are generally based on a naked-eye counting. High-resolution analytical methods can improve this problem, as X-ray computed tomography or hyperspectral imaging. They can also be coupled with algorithms that allow automatic identifications of these events. In this study, we used four sediment cores with published instantaneous events chronicle. We use two hyperspectral sensors (Visible Near Infrared VNIR, 60 μm , 400-1000 nm; Short Wave Infrared SWIR, 200 μm , 1000-2500 nm). The hyperspectral images of these four samples were used to create classification models with five classification methods (decision tree, random forest, naïve Bayes classifier, artificial and convolutional neural networks). The study shows that the VNIR sensor is the optimal one to create robust classification models with an artificial neural network (average test recall of 0.98 and precision of 0.98). The discriminated wavelengths are associated with organic matter and mineral compounds. The reconstruction of a chronicle of instantaneous events according to the depth and their thickness was estimated.

Keywords: Hyperspectral Imaging, Floods detection, Supervised Classification, Convolutional Neural Network, X-Ray fluorescence, Visible and Near-Infrared Spectroscopy

1 Introduction

Floods are among the most damaging climate-related disasters in terms of economic and societal losses (Gaume *et al.* (2009); Glur *et al.* (2013)). An assessment of the flood frequencies is then a public concern. For several years now, numerous studies are undertaken on geological paleoclimate records such as lake sediments to understand the fluctuations of the flood activities in contrasting climatic contexts (e.g. Noren *et al.* (2002); Moreno *et al.* (2007); Giguët-Covex *et al.* (2012); Wilhelm *et al.* (2012); Gilli *et al.* (2013); Glur *et al.* (2013); Wirth *et al.* (2013); Rapuc *et al.* (2019)). Flood events produce turbidity currents in the lake basin that will lead to a normal graded detrital layer that usually differs remarkably from the continuous sedimentation (Sturm and Matter (1978)). Currently, in an overwhelming majority of studies, the sediment facies are first described visually, then numerous sedimentological and geochemical analyses are undertaken. From those results, the event layers are identified and described. Then, layers with the same characteristics (e.g., color and texture) are usually counted by naked-eye observation. Unfortunately, this method is time-consuming, has a low spatial resolution potential and can lead to some interrogations such as: are color and texture sufficient to distinguish an event layer from the continuous sedimentation? Do all the deposits of the same color and texture are event layers? In the resolution, what is the limit of the detection of event layers by naked-eye counting? Vanni re first proposes an automatic way to detect events layers from RGB images (Vanni re *et al.* (2013)). To separate and count flood deposits, that presented a particular dark-brown color, they normalized the red compound of the RGB image with $1/\text{Red}$ signal. Each peak of this signal was then counted as a flood layer. The flood frequency originates from this approach was then compared to several naked-eye flood counting. Both methods gave equivalent results, and the automatic counting was then validated. However, this method suggests that the only useful parameter to distinguish flood events from continuous sedimentation is the color. Several other parameters such as texture, grain-size, chemical composition could vary between a flood event and the continuous sedimentation in a Lake. To enhance the automatic detection of this kind of events, it is preferable to use a method that can consider all of those parameters.

Hyperspectral imaging (HSI) and X-ray computed tomography scanning (CT-scan) are two non-destructive high-resolution analyses, which are currently under significant development for paleoenvironmental and paleoclimatic studies. CT-scan has already shown possibilities for 3D grain size analysis and thus to infer flood deposits (Cnudde and Boone (2013); Fouinat *et al.* (2017)). However, the extraction of the particle is based on the shape, and there is no information about the chemical properties of it (mineral or organic). Cnudde *et al.* propose to merge the CT 3D data with chemical or structural data (Cnudde and Boone (2013)). HSI can improve chemical knowledge in the analysis of the surface of the sample. It has already been used to characterize mineralogical fingerprints (Feng *et al.* (2018); Lorenz *et al.* (2019)), also organic matter (Schneider *et al.* (2018); Van Exem *et al.* (2018); Jacq *et al.* (2019b)), and particle size distribution (Jacq *et al.* (2019a)). It has also permitted to characterize the tephra layers on some sediment cores of the same geographic area with a visible and near-infrared

hyperspectral camera (VNIR, 400-1000 nm) with a supervised classification method based on artificial neural network (Aymerich *et al.* (2016)).

In this study, we propose to use the same artificial neural network (ANN) method combined with the convolutional neural networks (CNN) that have proved their ability to create classification models with large and variable datasets. ANN and CNN are combined in order to model the non-linear relationship between spectra and labeled voxel (volume pixel). CNN can use several voxels together to create a patch to model with spatial-spectral data. These methods are compared with three usual methods: decision tree, random forest, and naïve Bayesian classifier. The hyperspectral image used in this study come from a visible and near-infrared camera (VNIR, pixel size: 60 μm) and a short-wave infrared sensor (SWIR, pixel size: 200 μm). The VNIR image produces an RGB image, that can be processed to create HSV and grayscale images. In the same way, the SWIR sensor can be reduced to a pseudo-RGB image. The two sensors can also be combined with an image registration method. Consequently, the study proposes to compare six high-resolution images and five classification methods to create a flood classification model.

1.1 Site descriptions



Figure 1: Locations, tributaries and effluents of the lakes: (a) Bourget and Geneva, (b) Allos

Four sediment cores from western French alps were chosen for their representativeness of different watersheds leading to different flood compositions (intensity, biological-physical-chemical). The first core came from lake Allos (ALO09_P13, IGSN: IEFRA08JN, coring year: 2009) (Wilhelm *et al.* (2012)). Two cores came from lake Le Bourget, both collected in the deep basin of the lake (LDB09_P101, IGSN: IEFRA08BW, coring year: 2009; LDB17_P11, coring year: 2017) (Jenny *et al.* (2014)). Another core came from lake Geneva (LEM10, IGSN: IEFRA008N, coring year: 2010) (Jenny *et al.* (2014)). These three cores (LDB, LEM) can register incomes from the Rhone river.

Lake Geneva and Le Bourget are large peri-alpine lakes located on the western border of the alpine arc. Both are fed by the Rhône river which is their main tributary. However, the

watershed of those two lakes and so the chemical composition of the incoming sediment is different. Lake Geneva (372 m a.s.l, 580 km² of area) is located at the end of the Upper Rhône Valley, which can be dissociated into three main domains: the Penninic domain, mainly composed of oceanic sedimentary rocks and oceanic and continental basement with the presence of ophiolite. The Helvetic nappes and the External massifs are mainly composed of carbonates and metagranitoides (Stutenbecker *et al.* (2018)). Even if the Rhône river is the main tributary of Lake Le Bourget (231 m a.s.l, 44.5km² of area), Lake Geneva corresponds to a sink of sediment and no sediment of the Upper Rhône valley reach Lake Le Bourget (Bravard (1987)). Compared to Lake Geneva catchment, the watershed of Lake Le Bourget is mainly composed of carbonates units and granitoid and metamorphic rocks close to the Mont-Blanc massif. In those two lakes, sediments correspond to a mix between alumino-silicate minerals and detrital and biogenic carbonates, ophiolites can be founded in Lake Geneva sediments.

Lake Allos (2230 m a.s.l.) is a small (1-km-long by 700-m-wide) high-altitude lake in the southern French Alps situated in a 5-km²-north-facing watershed mainly composed of carbonated rocks, sandstones and quaternary deposits (till and screes). The sediment of Lake Allos is poor in organic matter content, and reach in alumino-silicate minerals due to a strong influence of detrital input in the lake.

2 Materials and methods

2.1 Sample preparation and measurements

2.1.1 VNIR and SWIR Hyperspectral Image acquisition

Two hyperspectral reflectance cameras were used to analyze these cores thanks to the M2C lab facilities, University of Normandie-Rouen. They covered two consecutive spectral ranges from 400 nm to 1000 nm (Visible and Near-Infrared, VNIR) and from 968 nm to 2574 nm (Short Wave InfraRed, SWIR). They have a theoretical spatial resolution respectively of 60 µm and 200 µm to have all the core width. Relevant data were obtained with a flattening and a cleaning of the core to have a plane surface and reveal sediment structures (Butz *et al.* (2015)). Then, a calibration of the camera was realized with a spectralon reference, and the imaging of a known object to have squared pixels (true shape) and correct intensities (color and signal to noise ratio).

The hyperspectral data cubes can be reduced to three planes corresponding to a Red-Green-Blue image of the VNIR sensor (611-549-464 nm according to sRGB standard) or a pseudo-RGB image for the SWIR one (pRGB, 2161-2206-2351 nm). The RGB images are representation modes adapted for eye vision. The true-RGB image can also be converted into Hue, Saturation, Lightness (HSV) or reduce in grayscale level. The HSV transformation has proved to be more adapted for classification purposes (Bora *et al.* (2015); Hernández-Hernández *et al.* (2016)). The grayscale levels are the simplest color space. The resolution of the two datasets can also be homogenized with image registration on a similar compound, as moisture for sediment cores (Ce Liu *et al.* (2011); Jacq *et al.* (2019c)). Therefore, a composite sensor was

created to merge the VNIR and SWIR datasets to cover the range of 400-2500 nm at a spatial resolution of 200 μm . In this study, we compare the classification performances of six datasets: VNIR, RGB, HSV and grayscale at a spatial resolution of 60 μm ; SWIR and VNIR+SWIR at 200 μm .

2.1.2 XRF analysis

Geochemical logging was performed with an Avaatech XRF core scanner at the EDYTEM laboratory (France) and with an ITRAX XRF core Scanner (Cox Analytical Systems) at the CEREGE laboratory (France). The first one analyzed the core from the lake Le Bourget (2017). The second analyzed the Bourget (2009) and Allos (2009) sediment cores. The resolution was fixed to 5 mm for both. Even if the Geneva lake core was not analyzed with an XRF core scanner, the core was used to test the robustness of the method from a chronicle of flood events established by naked-eye counting. For some sediment sections such as LDB17_P11 and ALO09_P13, core scanner data was used to validate naked-eye identification of event layers using Zr/Fe or Zr/K to trace fluctuation of grain-size at the base of the layers or Mn to trace oxygenation of the water at the interface with the sediment after an hyperpycnal flow (Croudace and Rothwell (2015)).

2.2 Flood detection

In the four selected sections, the sediment was first described and logged after a naked-eye observation. From sedimentological and geochemical results, when they were available, the event layers were distinguished from the continuous sedimentation. Once clearly identified, those layers were counted visually. In ALO09 and LDB17, the sediment sequence consists of homogeneous light gray silty clay alternating with dark coarser, normally graded beds interpreted as flood induced deposits. Whereas for LDB09 and LEM10, the instantaneous deposits present light gray and pale red color, respectively. The thickness repartition of the deposits in the different sediment sections varies.

2.3 Data Analysis

Hyperspectral data acquisitions were performed using Specim hardware ENVI 4.8. The data was then converted, processed and analyzed with MATLAB (R2019a, MathWorks). Several algorithms were used and compared to create classification models with the hyperspectral spectra and some labeled pixels (Figure 3). The Matlab codes used in this study are available in github.com/JacqKevin/HSI_SupervisedClassification.

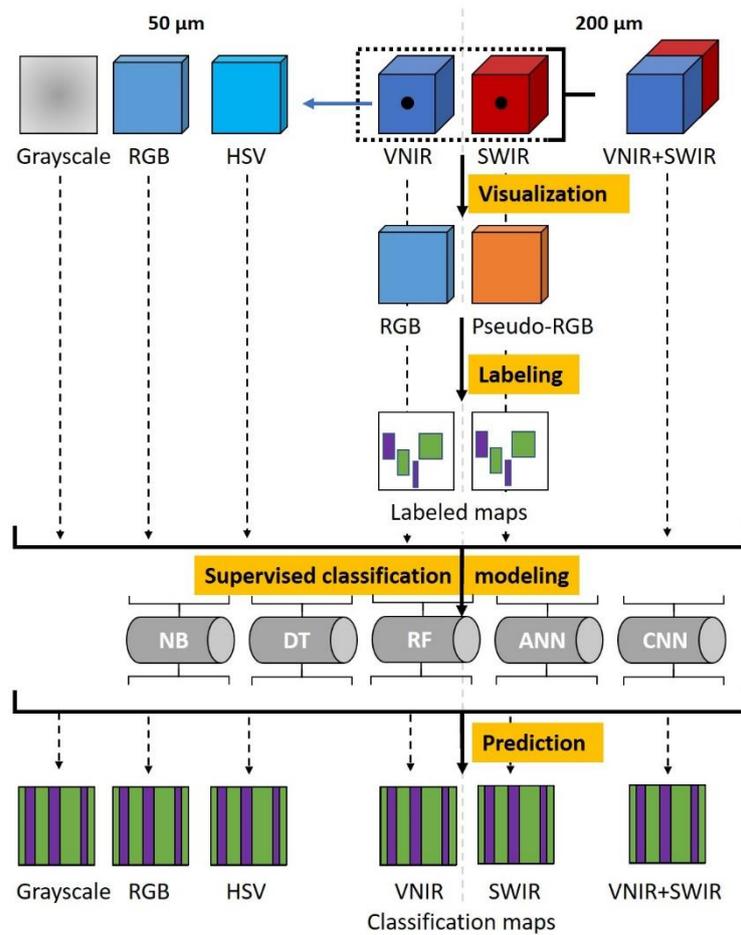


Figure 2: Data processing for the creation of a classification model to predict each voxel: (1) Visualization with RGB or pseudo-RGB images; (2) Manual labeling of these two images; (3) Creation of the supervised classification models for each dataset; (4) Prediction for each voxel of each dataset

2.3.1 Data labeling

The RGB or pseudo-RGB images were used to visualize the sample for the labeling step. For that, the user must select manually rectangle areas that correspond to the different studied classes. The resulting maps were used as a mask with 0 values for non-labeled pixels and other values for labeled pixels. It was also used to extract the labeled pixels and their corresponding spectrum (voxel, volumetric pixel).

2.3.2 Classification modeling

Five methods were used to create a supervised classification model to discriminate the classes of each voxel.

The decision tree (DT) method is based on a set of successive rules that can be represented as a tree (Breiman *et al.* (1984)). A rule is called a node which separates the two classes based on the Gini purity criterium, it estimates the optimal rule to separate them. A final step removes the unnecessary rules and branches to prevent overfitting. The final rules are the leaves and allow the classification. The random forest (RF) approach is based on a multiple DT learning

on different data subset, the estimated class for one sample is the main prediction of all the multiple DT (Tin Kam Ho (1995)).

A naive Bayes classifier is a linear classification based on Bayes' probability theorem, it uses a set of independent hypotheses said naive to classify the classes (Maron and E. (1961)).

Artificial neural network (ANN) learns the data with one layer of neuron(s) (McCulloch and Pitts (1943); Rosenblatt (1958)). ANN uses between 2 and 10 neurons and a scaled conjugate gradient backpropagation for the training.

Convolutional Neural Network (CNN) use several layers of neuron(s) to learn how to separate each class (Ivakhnenko and Lapa (1965); Schmidhuber (2015)). A CNN was adapted in Matlab from Ben Hamida *et al.* (2018) to take into account the 3D of the HSI and not only the 2D of a spectrum like for the other methods (Figure 3). For that, a patch of voxels was used by this method corresponding to a square spatial area ($k*k*wl$). The CNN method needs several parameters to fix. It is composed of a succession of four layers: a convolution layer to extract and learn the features, a rectified linear unit (ReLU) layer to correct the data from negative values, a pooling layer to compress the data with a down-sampling and another ReLU layer. Each layer is characterized by four main parameters: the number of neurons, the filter size that is the size of the learning window in the patch, the stride that is the shift between the learning windows, and the padding to keep or reduce the learned data size. This succession is repeated between 2 and 5 in our study to estimate the effects of all these parameters and to find the optimal ones without overfitting. The network begins with an input layer, then this presented succession, and end with a fully connected layer and a SoftMax calculation before the classification output. All the tested structures are presented in Supplementary figure 7.

The models were developed with 70% of the data in calibration and the remaining in the test set with a random selection for each class and sample. This ratio was applied to each sample for the class with the less effective to have a consistent number on each group. All the methods used independent voxel, except CNN that used a patch to consider the spatial dimension variations.

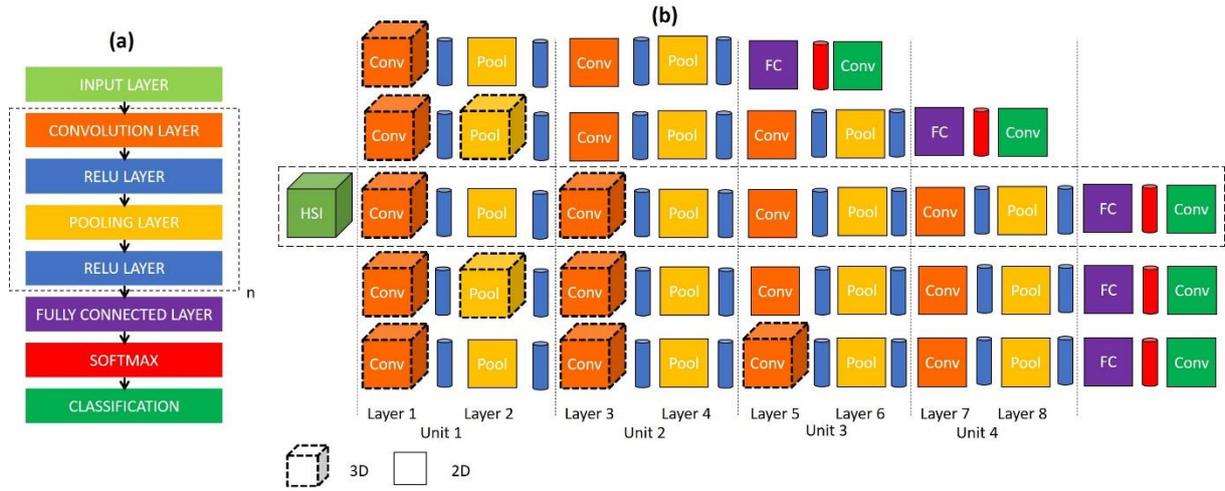


Figure 3: (a) Proposed CNN for a 3D learning approach, (b) structure of some CNN used in this study with 3D and 2D layers, the surrounded CNN was mainly used in the study and the others to test the effect of the structure and each layer.

2.3.3 Quantitative assessment of classifier performance

The quantitative performances of the classification models are estimated with two parameters:

$$\text{Precision} = \frac{\text{True positive}}{\text{False positive} + \text{True positive}} \quad (1)$$

$$\text{Recall} = \frac{\text{True positive}}{\text{False negative} + \text{True positive}} \quad (2)$$

with “true positive” corresponding to flood pixels classified in flood class, “false positive” corresponding to non-flood pixels classified in flood class, and “false negative” corresponding to flood pixels classified in non-flood class.

The precision corresponds to the fraction of flood pixels classified in this class that are pixels classified in flood class. The recall is the fraction of flood pixels that are successfully classified in this class.

2.3.4 Qualitative assessment of each pixel image classification

The created model must be visually assessed with the classification map because of possible overfitting. For that, the model was used on all the voxels of the HSI to estimate the classification map. Then, the user must assess it by looking at the salt and pepper characteristics of the image, with single pixels corresponding to potential miss-classification. Also, the user must check the flood predicted areas with the RGB image and with XRF profiles, or with other analyses. A value of 0 corresponds to a classification map with mainly a single value for each image pixel. Whereas a value of 5 present localized deposits across the image width and few single pixels.

3 Results and interpretations

3.1 CNN and comparison of the images

The CNN was used for the classification of the six image datasets (Table 1). The quantitative performances show that the hyperspectral images are the most relevant, and the reduce data do not have enough discriminant information for the modeling. The RGB images have higher quantitative performances than the HSV, but the classification maps are not relevant that can be due to overfitting. The SWIR and VNIR-SWIR datasets can predict the flood deposits (precision close to 1), but cannot separate it from the non-flood class (low recall values). The VNIR datasets are the optimal ones to create classification models based on quantitative and qualitative performances. The computation times are lower than 5 minutes, except for the SWIR datasets may be due to the complexity to model the classification. These times are relevant for their use in routine.

Table 1: Comparison of the six image datasets with quantitative and qualitative values for the four sediment cores and with the CNN modeling method

Pixel size (μm)			Data						
			50				200		
Set	Performance	Core	Grayscale	RGB	HSV	VNIR	SWIR	VNIR-SWIR	
Quantitative	Train	Precision	LDB09	0.5	0.89	0.78	0.94	0.86	0.96
			LDB17	0	0.99	0.99	0.99	0.93	1
			ALO09	0.5	0.97	0.99	0.99	0.99	0.99
			LEM10	0.5	0.63	0.97	0.97	0.96	0.99
		Recall	LDB09	1	0.85	0.74	0.93	0.71	0.69
			LDB17	0	0.99	0.95	0.99	0.81	0.76
			ALO09	1	0.97	0.96	0.99	0.65	0.65
			LEM10	1	0.98	0.82	0.99	0.89	0.99
	Test	Precision	LDB09	0.42	0.86	0.74	0.93	0.93	0.96
			LDB17	0	0.99	1	0.99	0.98	0.99
			ALO09	0.67	0.99	0.99	0.99	1	1
			LEM10	0.98	0.99	0.99	0.99	1	0.99
		Recall	LDB09	1	0.86	0.75	0.94	0.70	0.71
			LDB17	0	0.99	0.95	0.99	0.75	0.74
			ALO09	1	0.97	0.97	0.99	0.69	0.69
			LEM10	1	0.98	0.82	0.99	0.82	0.99
	Computation time (min)	LDB09	1	1.5	1.5	1.5	16	3	
		LDB17	0.5	1	1	1	17	1.8	
		ALO09	2	3	3	3	37	4.2	
		LEM10	1	2.3	2.3	2.3	23	3	
Qualitative (/5)	LDB09	0	1	0	3	1	1		
	LDB17	0	4	0	4	2	4		
	ALO09	0	0	0	4	3	3		
	LEM10	0	0	0	3	2	3		

The qualitative assessment, with the Figure 4 (and the supplementary figures 1, 2, 3), allows to find the optimal data for the CNN modeling, which is the VNIR images. The SWIR one is rejected with less relevant classification on the right of the image, and with the other cores.

The VNIR-SWIR datasets show similar classification maps, but with a lower resolution, so fine structures can be missed. The VNIR hyperspectral images were retained for the study with the upper classification performances, the highest relevance for the classification maps and the spatial resolution.

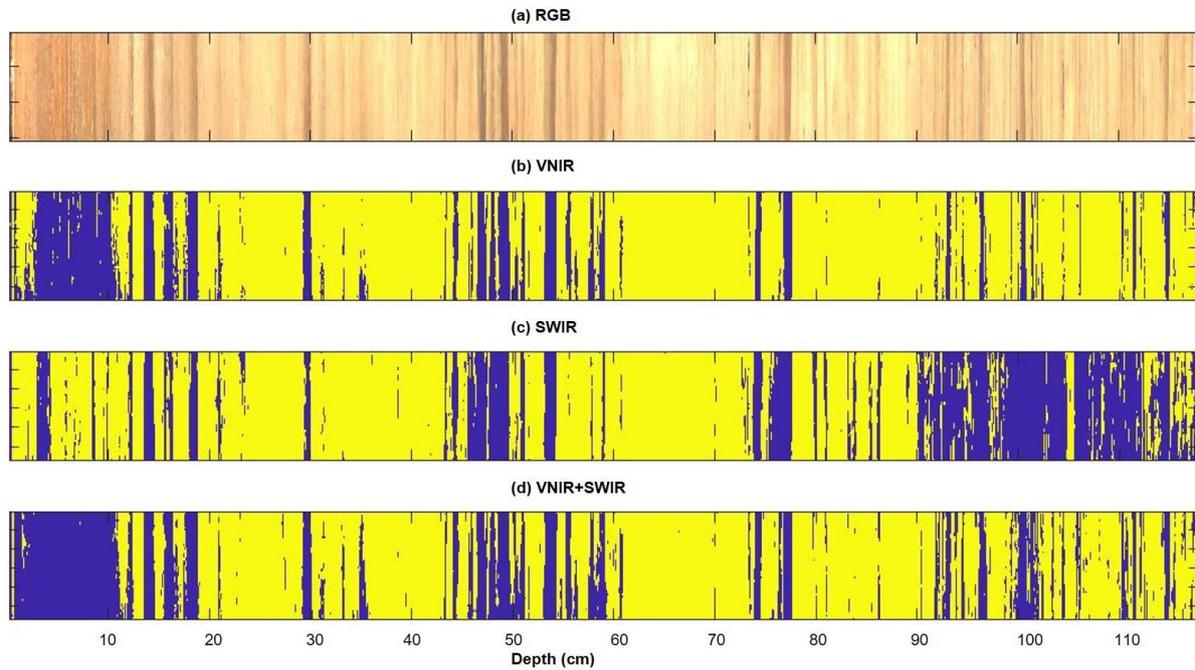
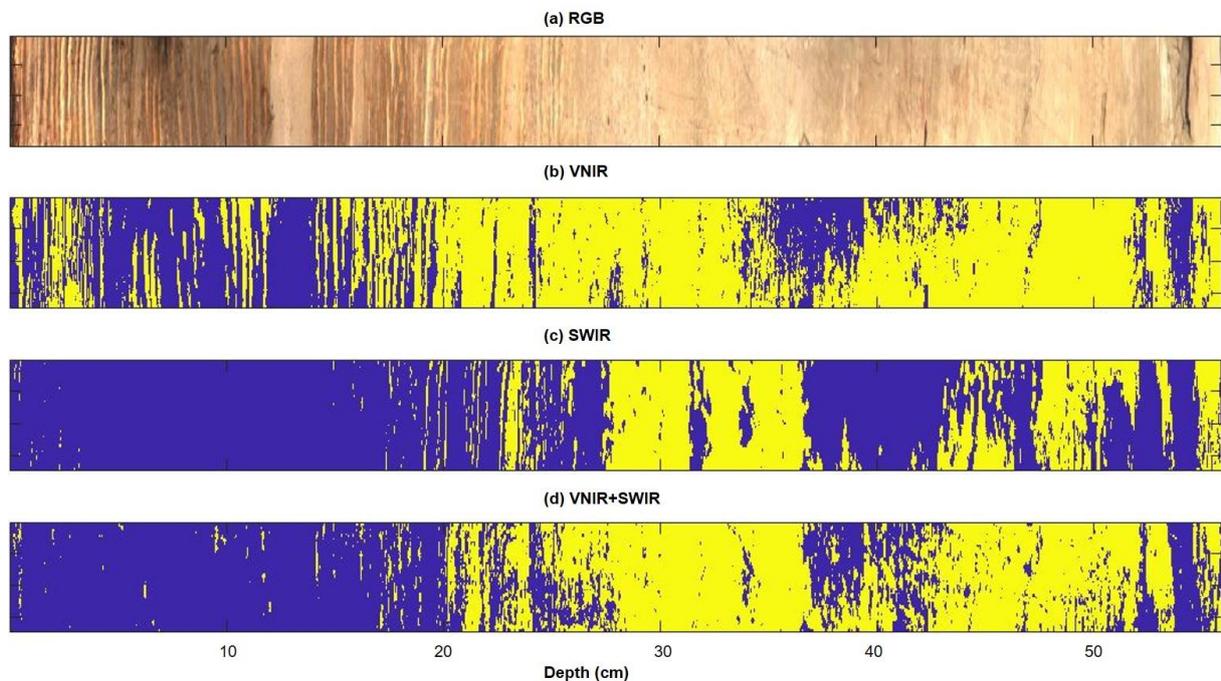
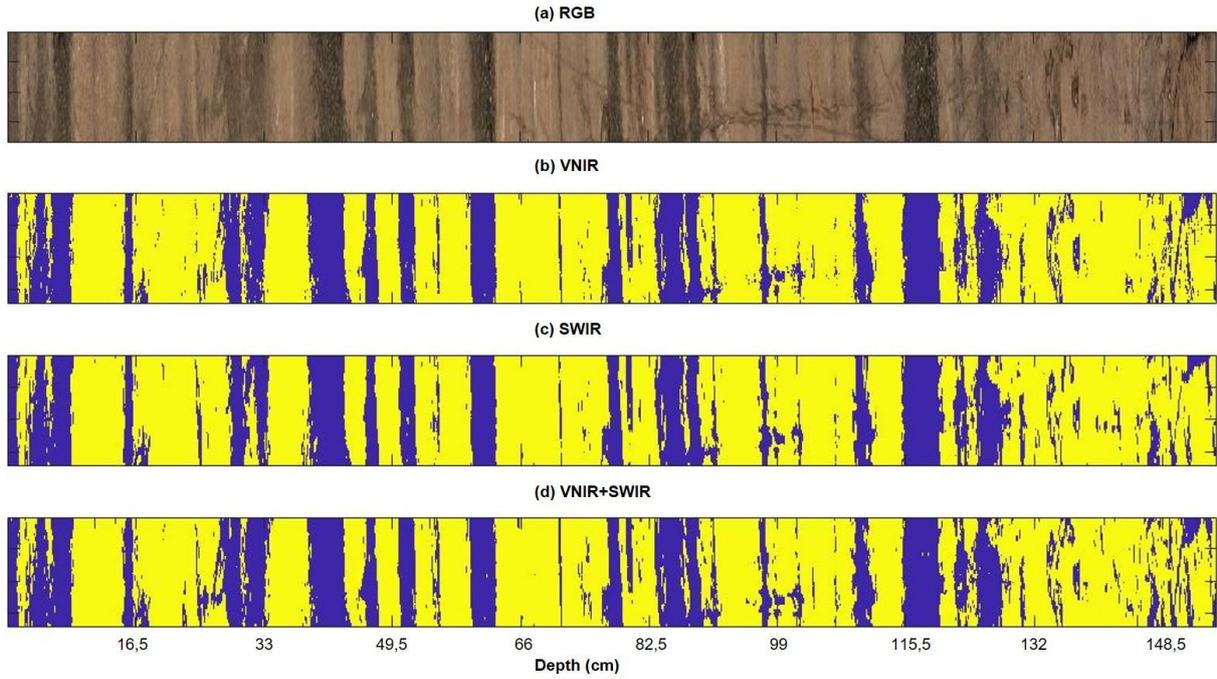


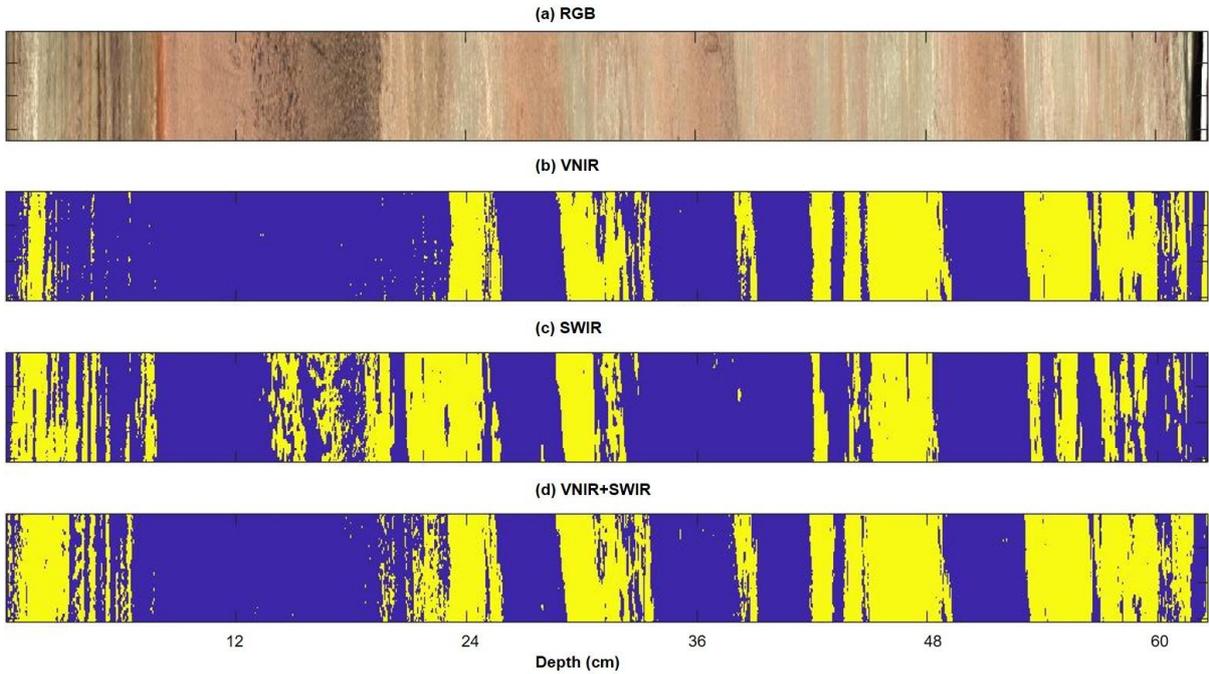
Figure 4: Classification maps of the LDB17 core with the CNN method and the three hyperspectral image datasets: (a) RGB image; (b) VNIR, (c) SWIR and (d) VNIR-SWIR classification maps (blue = flood, yellow = non-flood)



Supplementary figure 1: Classification maps of the LDB09 core with the CNN method and the three hyperspectral image datasets: (a) RGB image; (b) VNIR, (c) SWIR and (d) VNIR-SWIR classification maps (blue = flood, yellow = non-flood)



Supplementary figure 2: Classification maps of the ALO09 core with the CNN method and the three hyperspectral image datasets: (a) RGB image; (b) VNIR, (c) SWIR and (d) VNIR-SWIR classification maps (blue = flood, yellow = non-flood)



Supplementary figure 3: Classification maps of the LEM10 core with the CNN method and the three hyperspectral image datasets: (a) RGB image; (b) VNIR, (c) SWIR and (d) VNIR-SWIR classification maps (blue = flood, yellow = non-flood)

3.2 VNIR image and comparison of supervised classification methods

Four other classification methods were used and compared with CNN in Table 2. The naïve Bayesian classifier does not find classification rules with poor qualitative performances and for

some poor quantitative ones. The four other methods have similar quantitative performances, with upper calibration results for decision tree and upper test results of the artificial neural network. For the computation time, there is a significant difference between 6 seconds of the DT, 50 seconds for the ANN, 4 minutes for the RF, 15 minutes for the CNN, which depends on the amount of calibration data. The modeling of the cores is also different, with upper results for LDB17 and ALO09 that are characterized by dark flood deposits and continuous light sedimentation (Figure 5 and Supplementary figure 5). Whereas for LDB09 (Supplementary figure 4) and LEM10 (Supplementary figure 6), the flood deposits are light and red-dark respectively, and the continuous sedimentation is also light or dark in the laminated part for the LDB09 core and gray or dark in lamina for LEM10.

Table 2: Global comparison of five supervised classification algorithms with quantitative and qualitative values

Algorithm	Set	Performance	Quantitative				Qualitative (/5)			
			LDB 09	LDB 17	ALO 09	LEM 10	LDB 09	LDB 17	ALO 09	LEM 10
DT	Train	Precision	0.99	0.99	0.99	0.99	1	4	4	3
		Recall	0.99	0.99	0.99	0.99				
	Test	Precision	0.92	0.99	0.99	0.99				
		Recall	0.94	0.99	0.99	0.98				
	Computation time (min)	0.1	0.05	0.26	0.03					
RF	Train	Precision	0.94	0.99	0.99	0.99	3	4	4	3
		Recall	0.96	0.99	0.99	0.99				
	Test	Precision	0.93	0.99	0.99	0.99				
		Recall	0.96	0.99	0.99	0.98				
	Computation time (min)	4.21	2.83	13.76	1.95					
NB	Train	Precision	0.71	0.99	0.98	0.95	1	3	3	1
		Recall	0.75	0.98	0.98	0.71				
	Test	Precision	0.66	0.99	0.99	0.99				
		Recall	0.75	0.98	0.98	0.71				
	Computation time (min)	0.02	0.02	0.12	0.01					
ANN	Neurons		5	2	2	2				
	Train	Precision	0.96	0.99	0.99	0.98	4	4	4	4
		Recall	0.97	0.99	0.99	0.99				
	Test	Precision	0.95	0.99	0.99	0.99				
		Recall	0.97	0.99	0.99	0.99				
Computation time (min)	0.90	0.10	0.73	0.28						
CNN	Train	Precision	0.94	0.99	0.99	0.97	3	4	4	3
		Recall	0.93	0.99	0.99	0.99				
	Test	Precision	0.93	0.99	0.99	0.99				
		Recall	0.94	0.99	0.99	0.99				
	Computation time (min)	16	17	37	23					

The qualitative assessments of the LDB17 core, with Figure 5, show similar classification maps except in the laminated area above 12 cm, where NB estimates fewer flood pixels. For the other cores, NB has lower qualitative performances. The Mn profile shows the main floods that we can also see with the RGB, but it is complicated to conclude in the laminated area and for thin floods. As for the different image datasets, the qualitative assessments are helpful to find the optimal classification methods, and here it is the ANN, followed by CNN and RF. These

observations show that the discriminant information is mainly related to the spectral dimension of the data, the biological-physical-chemical composition of the samples thus carry more discriminating information than the spatial distribution of the particle deposition in a flood deposit.

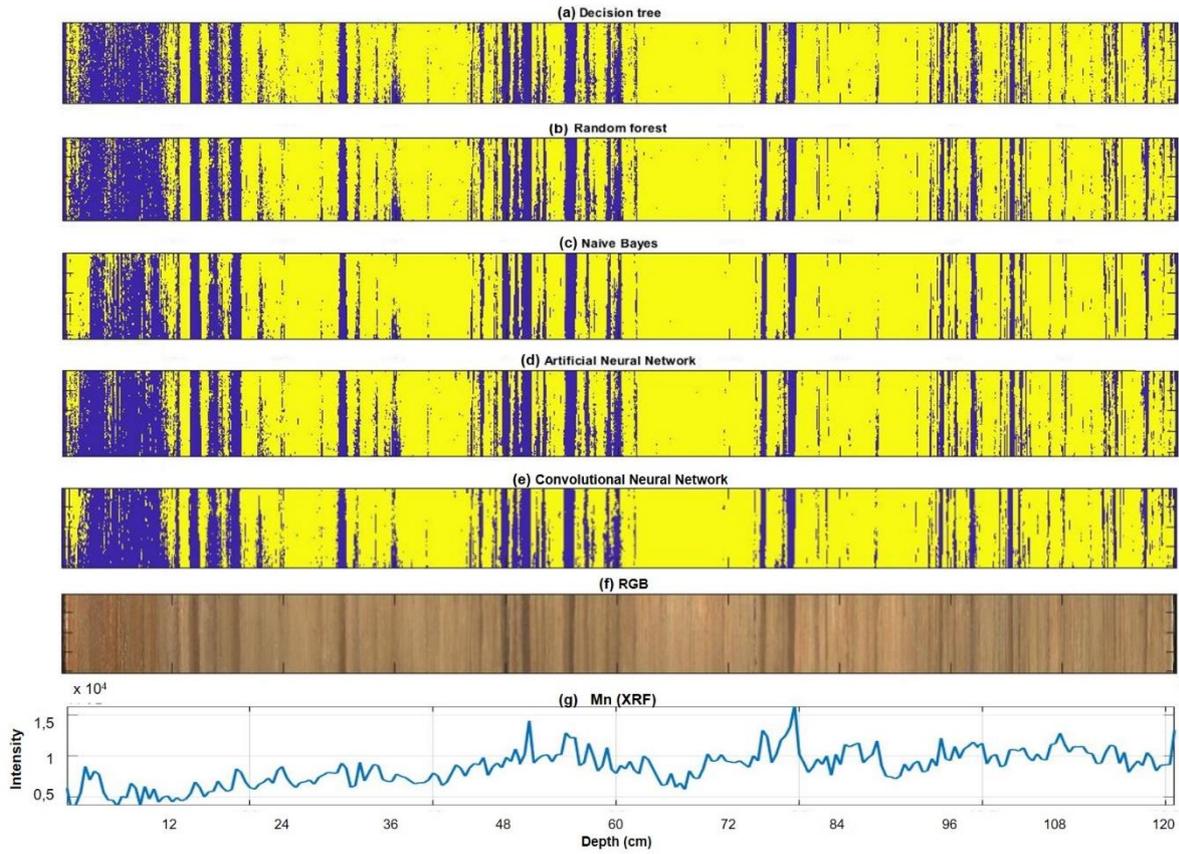
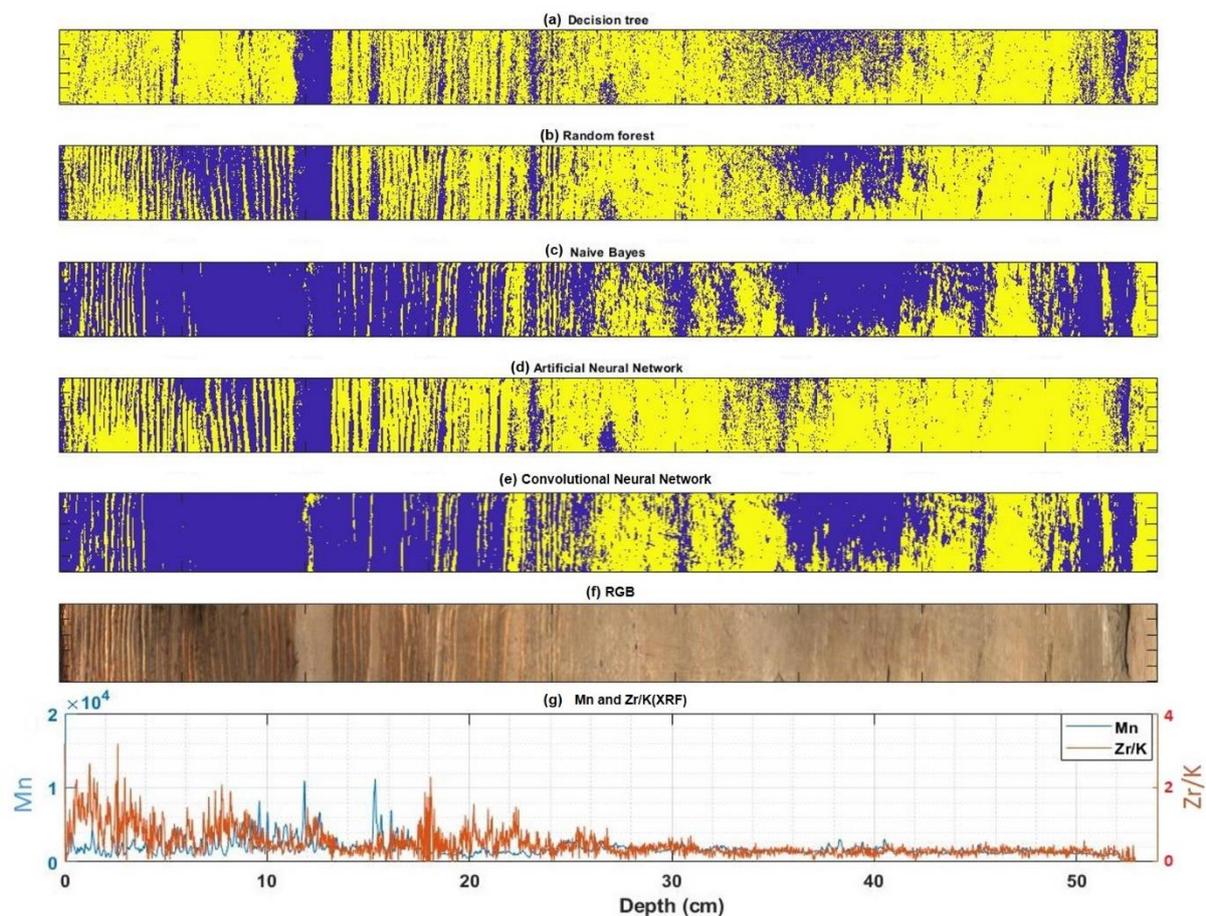
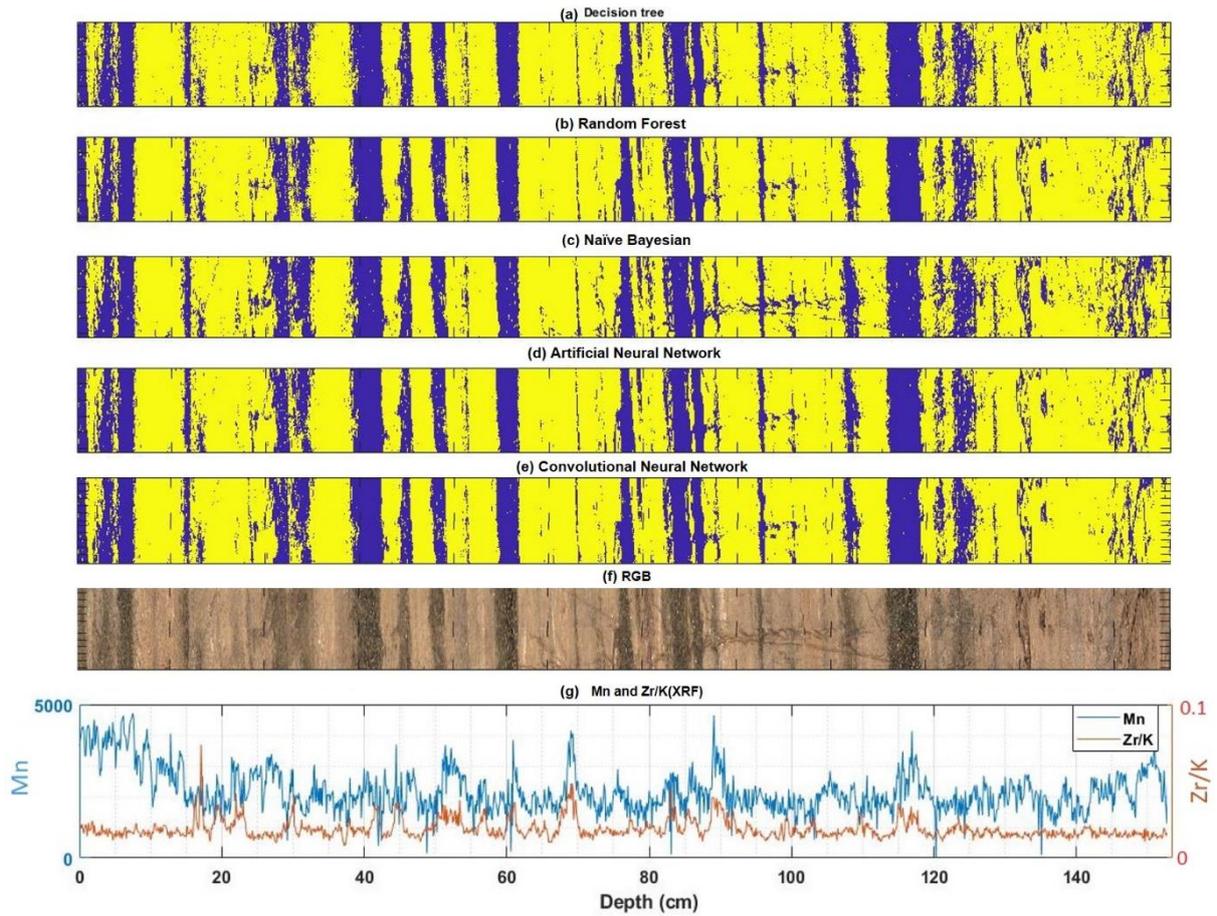


Figure 5: Classification maps of the LDB17 core for the five methods ((a) DT, (b) RF, (c) NB, (d) ANN, (f) CNN; blue = flood, yellow = non-flood, ROI in the blue square), (e) RGB image and (g) the Mn XRF profile

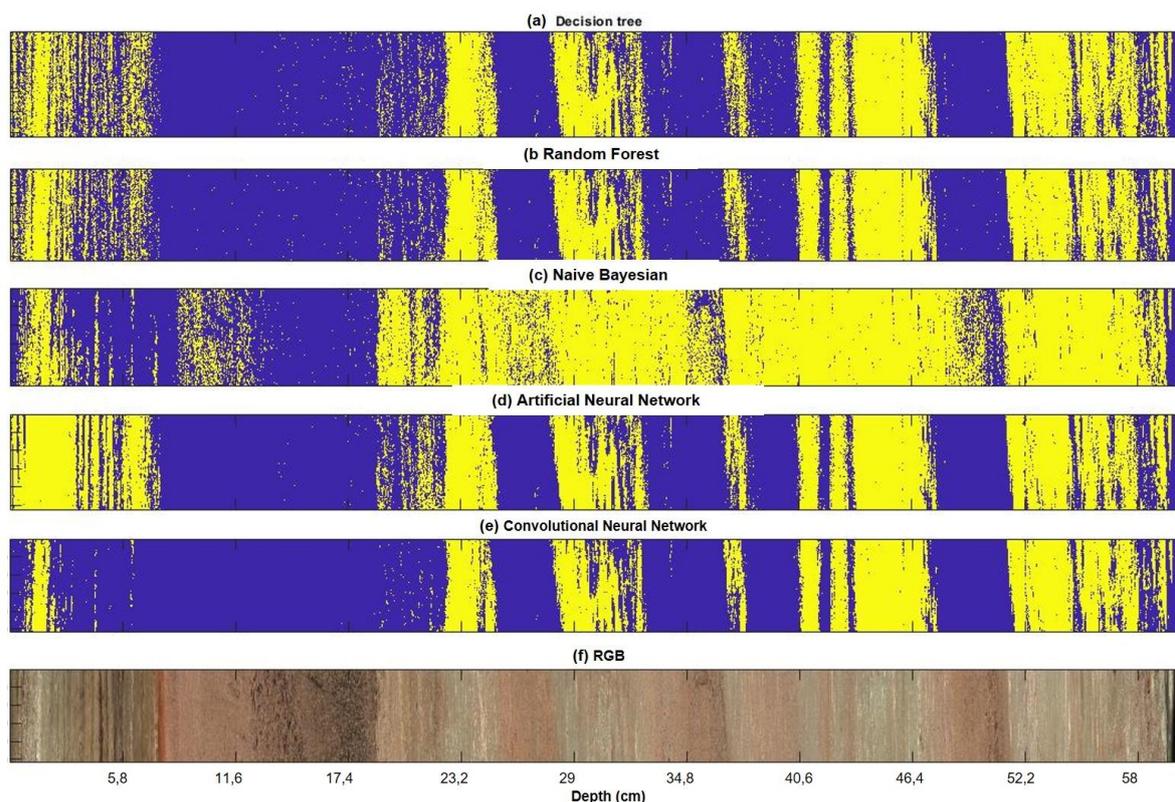


Supplementary figure 4: Classification map obtained with the (a) decision tree, (b) random forest, (c) naïve Bayesian, (d) artificial and (e) convolutional neural network methods (blue = flood, yellow = non-flood); (f) RGB image, (g) Mn and Zr/K XRF profiles of the LDB09 core

5.1. LA DÉTECTION D'ÉVÉNEMENTS INSTANTANÉS PAR COMPARAISON DE MULTIPLE MÉTHODES D'APPRENTISSAGE AUTOMATIQUE



Supplementary figure 5: Classification map obtained with the (a) decision tree, (b) random forest, (c) naïve Bayesian, (d) artificial and (e) convolutional neural network methods (blue = flood, yellow = non-flood); (f) RGB image, (g) Mn and Zr/K XRF profiles of the ALO09 core



Supplementary figure 6: Classification map obtained with the (a) decision tree, (b) random forest, (c) naïve Bayesian, (d) artificial and (e) convolutional neural network methods (blue = flood, yellow = non-flood); (f) RGB image of the LEM10 core

Figure 6 allows studying the classification map of a zoom area. Some areas are not classified in the same group between the methods, especially for the NB method. DT presents more single pixels that could be miss-classified. The three other approaches present very similar classification maps. The 5 mm Mn XRF profile validates some of the flood classifications with higher values for these deposits. The XRF validation, with Mn and Zr/K, also shows an increase in flood deposits for the ALO09 (Supplementary figure 5) and LDB09 cores (Supplementary figure 4).

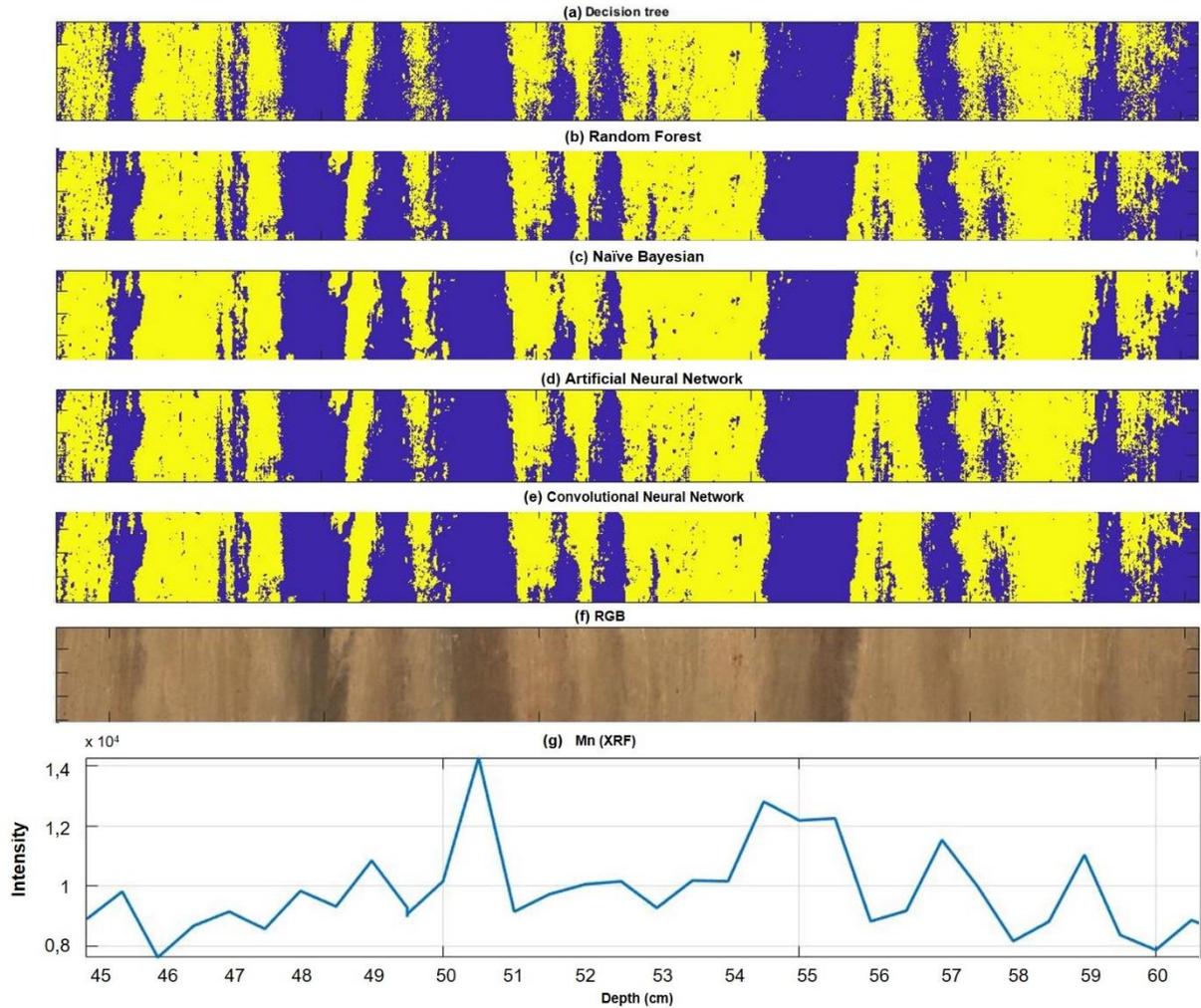


Figure 6: Classification map on an ROI of the LDB17 core for the five classification methods ((a) DT, (b) RF, (c) NB, (d) ANN, (f) CNN)) with highlights of some dissimilarity classification areas (blue = flood, yellow = non-flood), (e) RGB image and (g) the Mn XRF profile of the ROI

3.3 Spectral signatures

Based on ten classification models, one decision tree and nine artificial neural networks (2-10 neurons), a cumulative occurrence of the wavelengths can be estimated to find the discriminant ones (Figure 7). Five spectral areas with higher values of model selection occurrence can be seen and be associated with chemical compounds (Viscarra Rossel and Behrens (2010)). Organic materials can be associated with the spectral wavelengths around (1) 670 nm (chlorophyll pigments), (2) 800 nm, and (3) 1000 nm. The two others correspond to spectral ranges where the origin can overlap: (4) mineral compounds (oxides) and hydroxyl bonds (moisture, organic matter or mineral) around 900 nm, (5) mineral (oxides) and organic (carotenoids) compounds between 450-550 nm. The association of these spectral areas is based on the study of Viscarra Rossel on soil samples with different chemical compositions, so it can be different with a combination of mineral and organic matters on the same spectral ranges.

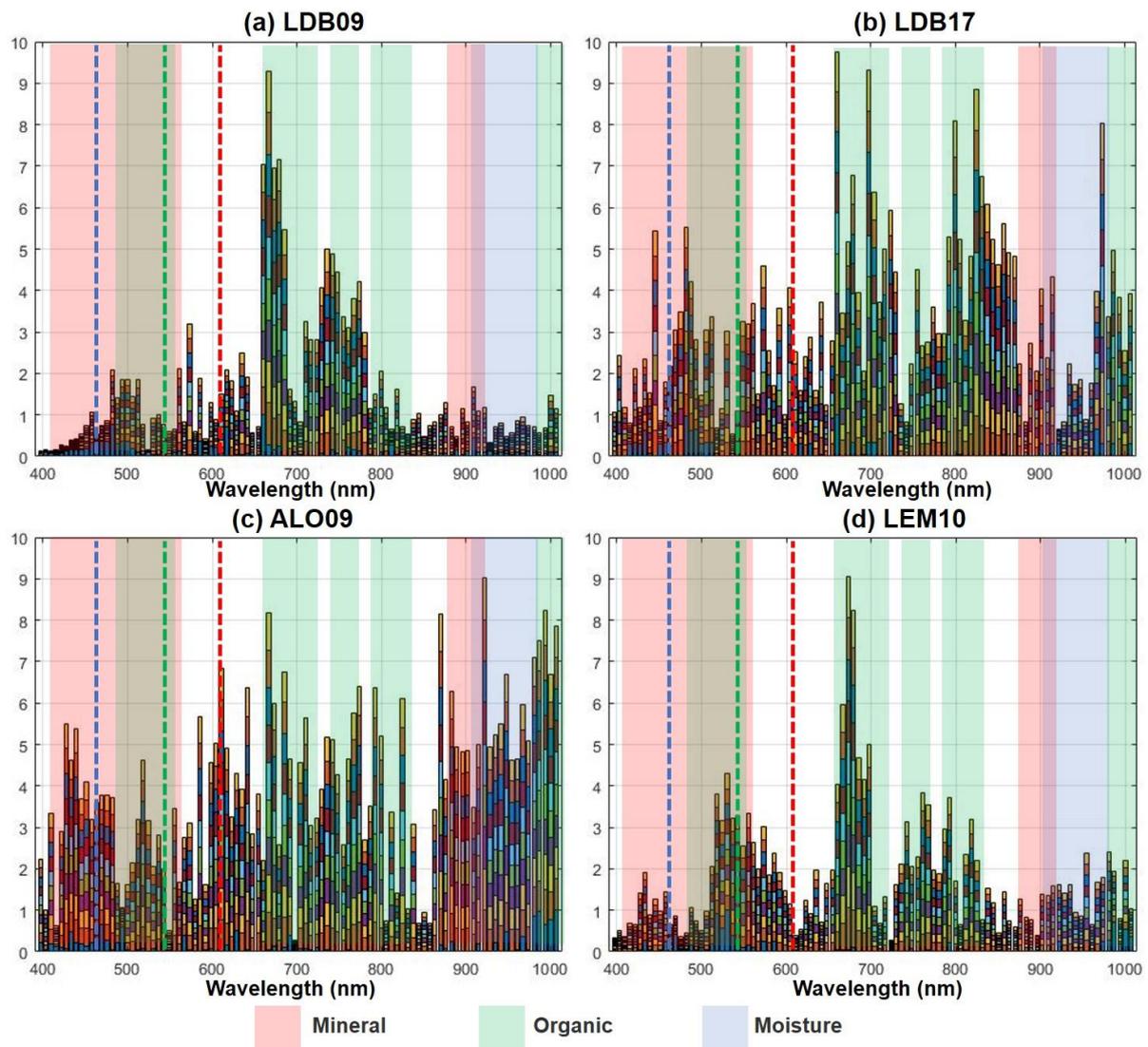


Figure 7: Frequency of the VNIR wavelengths for the classification models associated to the four lakes; for the DT (blue at the bottom) and ANN (2-10 neurons) methods associated with mineral, organic, and moisture content, and the three bands of the RGB channel (dashed lines)

The LDB17 and ALO09 core that have the upper classification performances (0.99 for the test precision and recall) show many discriminated wavelengths all along the spectral axis, which can be associated with the dark and light color differences between the two classes, and some localized corresponding to chemical compounds. Whereas for the LDB09, they are localized around 670 nm, 750-770 nm, may be linked to organic and mineral compounds, with less effect of the color. Also, for the LEM10, there is a discrimination spectral area around 550 nm, which can be associated with red oxidized minerals. These discriminant wavelengths are mostly associated with the sediment composition and not only the colors as we can see with the RGB bands in Figure 7, that explain the pool classification performances of it in Table 1.

4 Discussion

4.1 Model transfer

The ANN optimal models developed on each core were used to estimate the classification maps of the other one to see the capability of transfer of them. Table 3 shows the results of these classifications with the quantitative and qualitative indicators. Most of them are agree on the impossibility of transferring the model to other cores. Except for the two LDB cores that present some good prediction areas that can be linked with the similar biological-physical-chemical compositions. The LDB17 and ALO09 that have the optimal prediction parameters are those that have the lowest transferring capability. Whereas the two others show some possibilities. That indicates the need to use some localized spectral areas specific to the sediment compositions related to the watershed and not using all the wavelengths that are linked to light-dark colors. That can explain the possibility of discriminating the flood deposits with only the LDB17 RGB image (Table 1).

Table 3: Comparison of site-specific ANN models for the transferability on the other cores with normalization of the class effective

		Samples			
		LDB09	LDB17	ALO09	LEM10
LDB09	Precision		0.61	0.84	0.91
	Recall		0.66	0.35	0.46
	Qualitative		3	1	1
LDB17	Precision	0.52		1	0.99
	Recall	0.93		0.28	0.95
	Qualitative	2		0	0
ALO09	Precision	0	0		0.06
	Recall	0.98	1		0.74
	Qualitative	0	0		1
LEM10	Precision	0.85	0.99	0.76	
	Recall	0.98	0.47	0.23	
	Qualitative	1	0	1	

The database needs to be improved to enhance all the floods cases, we already see that light floods and laminated areas disturb the classification. Artificial and Convolutional Neural Network are the most effective methods to learn the flood deposit fingerprints. CNN has a bit less performance compared to ANN, but the CNN spatial-spectral approach is a way to stabilize the classification with the information contained in both dimensions.

The model develops in this model does not allow to predict directly on other cores. So, there are two strategies to predict new cores with CNN. The first one is to labeled flood and non-flood areas with a number of pixels similar to the other cores, it can be time-consuming to labeled and calculate the new model. The second is to label some pixels of each class and add them with the previous calibration pixels to adjust the pre-trained model with a transfer learning.

4.2 CNN optimization

The first hypothesis of this work was that the spatial-spectral information could improve the classification of the flood deposits. The sediment composition registered inside the spectra shows already discriminant information. The hypothesis on this work was that there is also discriminant spatial information, as a particle size gradient and mineralogical variations inside the deposit. The used CNN structure can be optimized with its numerous parameters to recover more of these spatial-spectral discriminant information (Supplementary figure 7). The number of neurons in the pooling layers was tested to see the impact of the compression. The patch size was also tested to see the impact of spatial information. And finally, the structure of the network with the number of layers and the succession of 2D or 3D steps. Ce travail est en cours de réalisation.



Supplementary figure 7: All the fourteen structures tested in the optimization step with 3D and 2D layers, and 4 to 10 layers

Even if the CNN approach is complicated to interpret, it is essential to try to understand how it can learn the data. The ANN can help to understand thanks to the weight associated with

the wavelengths of the first neurons. Also, it is essential to think about the discrimination information that exists before creating the network and define relevant parameters. For example, we know that the color, the grain size, and the mineralogy can separate the two classes, the ANN confirms that with the use of 2 neurons that can combine some of these sediment properties.

4.3 Flood prediction maps and comparison with usual flood characterization methods

The pixel classification of the flood deposits is possible with the hyperspectral images and the neural network methods (ANN, CNN). It was validated with the Mn XRF profile but with a different and lower resolution. The flood deposits can now be determined with its thickness and compare with flood time series. For that, the classification map was reduced to a single profile corresponding to its sum along with the depth. It was smoothed with a Savitzky-Golay method, with a second-order polynomial for the smoothing on a window size of seven bands (Savitzky and Golay (1964)). Then, a threshold was fixed to the half-width of the image to classify each column in the flood or non-flood class. Due to the deformations of some deposits, manual selection and assessment must be made. Finally, the thickness was estimated with the number of consecutive pixels corresponding to the flood class. The flood chronical was then estimated according to the depth in Figure 8 and can be compared with the ones created with dating and analytical methods. The LDB09 and ALO09 chronicles are published (Wilhelm *et al.* (2012); Jenny *et al.* (2014)), the other ones are not yet published. La validation de ces dépôts et de leurs épaisseurs est un travail en cours réalisation.

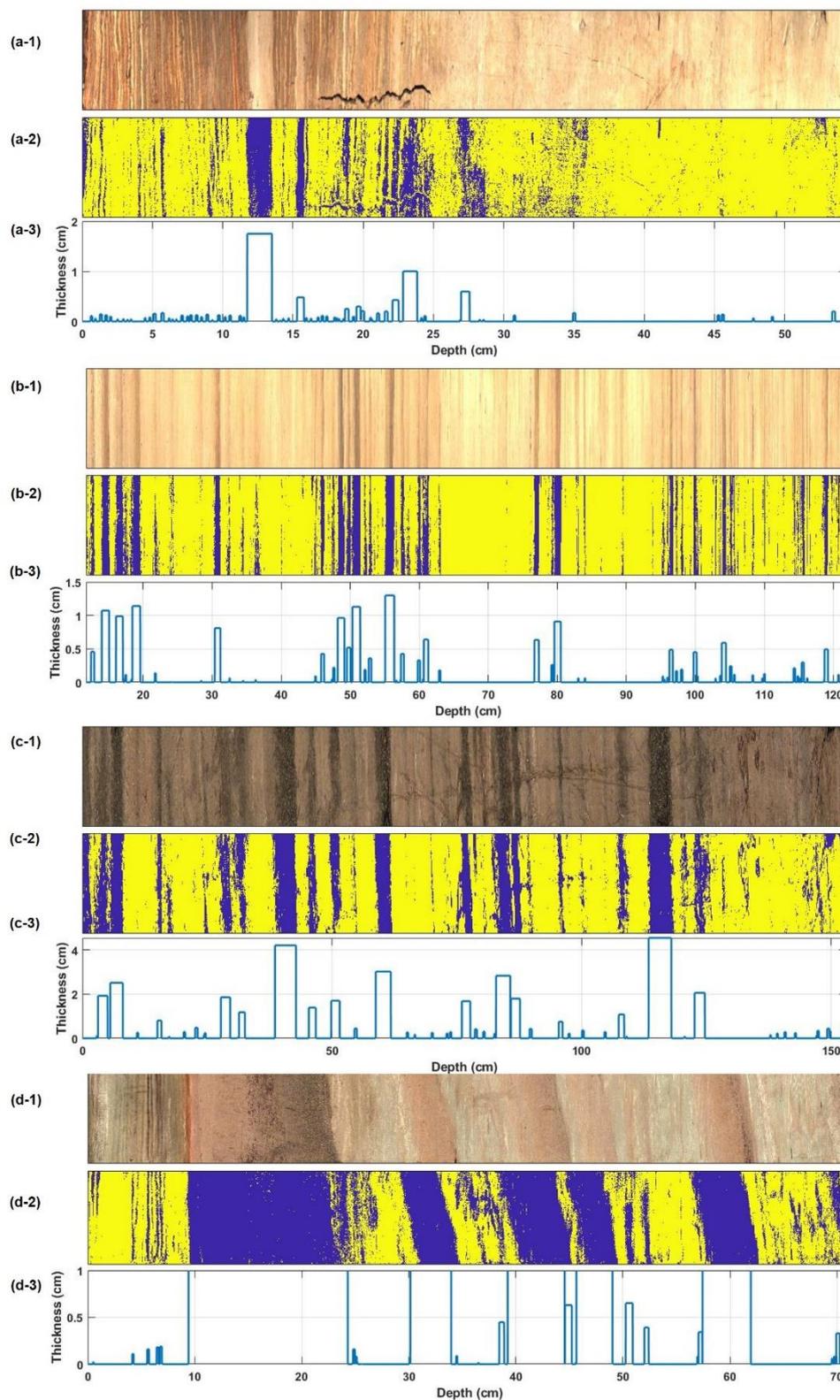


Figure 8: (1) RGB images, (2) Classification maps and (3) Estimation of the flood thickness with the ANN method for the four samples: (a) LDB09, (b) LDB17, (c) ALO09, (d) LEM10.

The distribution of the estimated thickness presented in Figure 9 shows that 48% is finer than one millimeter, and 79% than five millimeters, which is not easily characterizable with standard

analytical methods. So hyperspectral imaging seems to be a useful tool to estimate the instant events, even small size one.

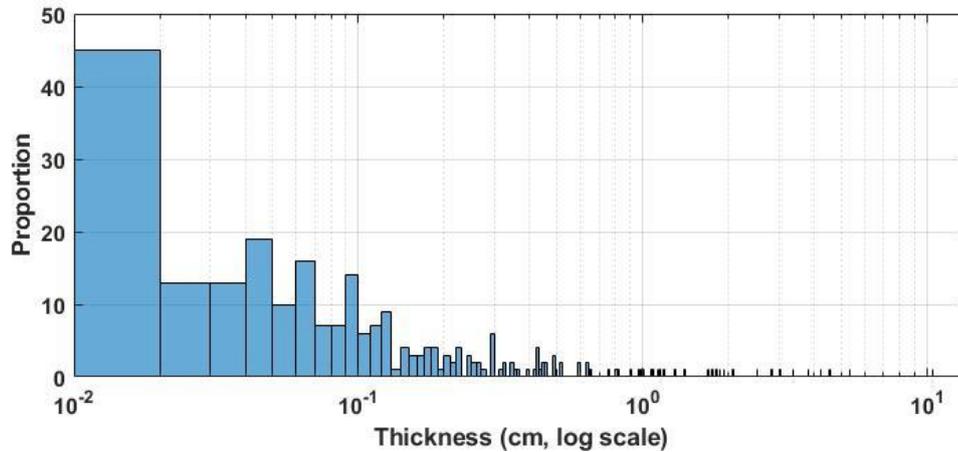


Figure 9: Repartition of the flood thickness estimated with the hyperspectral data (log scale).

4.4 Automatic detection of sediment deposits

This study has shown that flood deposits can be estimated at high-resolution with hyperspectral imaging for the cores used in calibration. A similar method has already been used for the detection of tephra layers (Aymerich *et al.* (2016)). So, the proposed method may be used for a case study for other types of events, like tsunamis, earthquakes, landslides, storms, or laminae. It can be very useful for the studies of paleoenvironment and paleoclimate, and will allow the creation of instantaneous event chronicle.

It is worth noting that we focus only on instantaneous event fingerprints, but it may be possible to find sub-fingerprints specific of some types of flood for each sample. The visible and the near-infrared spectrum register physical-chemical information that can discriminate the deposits with unsupervised methods, or supervised ones if knowledge is available. Even if the short-wave infrared is not used for flood detections, it can be used to differentiate them if the spatial registration was made, and obviously, other analytical methods can be combined with them.

5 Conclusions

In this study, we use three hyperspectral sensors (VNIR, SWIR, VNIR+SWIR) to image four sediment cores, that were used separately to create classification models with five classification methods. We found that the VNIR sensor allows creating the most robust models with an artificial neural network at a 60 μm spatial resolution. The convolutional neural networks have slightly lower performances and need to be improved to learn spectral-structural compositions of the deposits and spatial variations. The quantitative validation of the ANN model was assessed with a recall of 0.91 and a precision of 0.99. For the qualitative one, flood deposits present colors and textures that differ from the continuous sedimentation and can be seen with a naked-eye observation, XRF spectroscopy also seems in accordance but at a lower resolution.

The discriminant wavelengths are associated with organic matters and some mineral bands that are specific of the sample. The classification models created on a unique core cannot be transferred on the others, the transfer capability seems to be related to the sediment composition related to the watershed of the lake and not only on the light-dark color differences. After the creation of the classification maps, the instant event chronicles can be estimated with the depth and the thickness of each deposit.

6 Acknowledgements

Coring supports were provided by the French National Research Agency's with the IPER-RETRO program for lake Bourget (ANR-08-VUL 005), the Pygmalion project for lake Allos (ANR BLAN07-2_204489). Hyperspectral imaging was processed at the University of Normandie-Rouen and was funded by the Region Normandie, which supports the scientific consortium SCALE UMR CNRS 3730.

References

- Aymerich, I.F., Oliva, M., Giralt, S., Martín-Herrero, J. (2016) Detection of Tephra Layers in Antarctic Sediment Cores with Hyperspectral Imaging. Coles, J. A. (ed.) PLOS ONE 11: 1–24
- Ben Hamida, A., Benoit, A., Lambert, P., Ben Amar, C. (2018) 3-D Deep Learning Approach for Remote Sensing Image Classification. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing 56: 4420–4434
- Bora, D.J., Gupta, A.K., Khan, F.A. (2015) Comparing the Performance of L*A*B* and HSV Color Spaces with Respect to Color Image Segmentation. International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering 5: 192–203
- Bravard, J.-P. (1987) *Le Rhône, Du Léman à Lyon*, La Manufac.
- Breiman, L., Friedman, J.H., Olshen, R.A., Stone, C.J. (1984) *Classification And Regression Trees* Routledge
- Butz, C., Grosjean, M., Fischer, D., Wunderle, S., Tylmann, W., Rein, B. (2015) Hyperspectral imaging spectroscopy: a promising method for the biogeochemical analysis of lake sediments. Journal of Applied Remote Sensing 9: 1–20
- Ce Liu, Yuen, J., Torralba, A. (2011) SIFT Flow: Dense Correspondence across Scenes and Its Applications. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence 33: 978–994
- Cnudde, V., Boone, M. (2013) Earth-science reviews. Earth Science Reviews 1–17
- Croudace, I.W., Rothwell, R.G. (2015) *Micro-XRF Studies of Sediment Cores: Applications of a Non-Destructive Tool for the Environmental Sciences*
- Feng, J., Rogge, D., Rivard, B. (2018) Comparison of lithological mapping results from airborne hyperspectral VNIR-SWIR, LWIR and combined data. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation 64: 340–353
- Fouinat, L., Sabatier, P., Poulenard, J., Reyss, J.-L., Montet, X., Arnaud, F. (2017) A new CT scan methodology to characterize a small aggregation gravel clast contained in a soft sediment matrix. Earth Surface Dynamics 5: 199–209
- Gaume, E., Bain, V., et al. (2009) A compilation of data on European flash floods. Journal of Hydrology 367: 70–78
- Giguet-Covex, C., Arnaud, F., et al. (2012) Frequency and intensity of high-altitude floods over the last 3.5 ka in northwestern French Alps (Lake Anterne). Quaternary Research 77: 12–22
- Gilli, A., Anselmetti, F.S., Glur, L., Wirth, S.B. (2013) Lake Sediments as Archives of Recurrence Rates and Intensities of Past Flood Events. In: *Dating Torrential Processes on Fans and Cones: Methods and Their Application for Hazard and Risk Assessment* 225–242.

- Glur, L., Wirth, S.B., et al. (2013) Frequent floods in the European Alps coincide with cooler periods of the past 2500 years. *Scientific Reports* 3: 2770
- Hernández-Hernández, J.L., García-Mateos, G., González-Esquiva, J.M., Escarabajal-Henarejos, D., Ruiz-Canales, A., Molina-Martínez, J.M. (2016) Optimal color space selection method for plant/soil segmentation in agriculture. *Computers and Electronics in Agriculture* 122: 124–132
- Ivakhnenko, A., Lapa, V.G. (1965) *Cybernetic Predicting Devices* New York, CCM Information Corp.
- Jacq, K., Giguët-Covex, C., et al. (2019a) High-resolution grain size distribution of sediment core with hyperspectral imaging. *Sedimentary Geology*
- Jacq, K., Perrette, Y., et al. (2019b) High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core. *Science of the Total Environment* 663: 236–244
- Jacq, K., Coquin, D., Fanget, B., Perrette, Y., Debret, M. (2019c) Study of pansharpening methods applied to hyperspectral images of sediment cores. *In: 2019 22nd International Conference on Information Fusion (FUSION) (FUSION 2019)* Ottawa, Canada.
- Jenny, J.-P., Wilhelm, B., et al. (2014) A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps). *Journal of Paleolimnology* 51: 469–483
- Lorenz, S., Seidel, P., et al. (2019) Multi-Sensor Spectral Imaging of Geological Samples: A Data Fusion Approach Using Spatio-Spectral Feature Extraction. *Sensors* 19: 2787
- Maron, M.E., E., M. (1961) Automatic Indexing: An Experimental Inquiry. *Journal of the ACM* 8: 404–417
- McCulloch, W.S., Pitts, W. (1943) A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The Bulletin of Mathematical Biophysics* 5: 115–133
- Moreno, A., Giralt, S., et al. (2007) A 14 kyr record of the tropical Andes: The Lago Chungará sequence (18°S, northern Chilean Altiplano). *Quaternary International* 161: 4–21
- Noren, A.J., Bierman, P.R., Steig, E.J., Lini, A., Southon, J. (2002) Millennial-scale storminess variability in the northeastern United States during the Holocene epoch. *Nature* 419: 821–824
- Rapuc, W., Sabatier, P., et al. (2019) Holocene-long record of flood frequency in the Southern Alps (Lake Iseo, Italy) under human and climate forcing. *Global and Planetary Change* 175: 160–172
- Rosenblatt, F. (1958) The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in The Brain. *Psychological Review* 65: 386–408
- Savitzky, A., Golay, M.J.E. (1964) Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures. *Analytical Chemistry* 36: 1627–1639

- Schmidhuber, J. (2015) Deep Learning in Neural Networks: An Overview. *Neural Networks* 61: 85–117
- Schneider, T., Rimer, D., Butz, C., Grosjean, M. (2018) A high-resolution pigment and productivity record from the varved Ponte Tresa basin (Lake Lugano, Switzerland) since 1919: insight from an approach that combines hyperspectral imaging and high-performance liquid chromatography. *Journal of Paleolimnology* 1–18
- Sturm, M., Matter, A. (1978) Turbidites and Varves in Lake Brienz (Switzerland): Deposition of Clastic Detritus by Density Currents. *In: Modern and Ancient Lake Sediments* Oxford, UK, Blackwell Publishing Ltd., 147–168.
- Stutenbecker, L., Delunel, R., et al. (2018) Reduced sediment supply in a fast eroding landscape? A multi-proxy sediment budget of the upper Rhône basin, Central Alps. *Sedimentary Geology* 375: 105–119
- Tin Kam Ho (1995) Random decision forests. *In: Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition* IEEE Comput. Soc. Press, 278–282.
- Van Exem, A., Debret, M., et al. (2018) Hyperspectral core logging for fire reconstruction studies. *Journal of Paleolimnology* 59: 297–308
- Vannière, B., Magny, M., et al. (2013) Orbital changes, variation in solar activity and increased anthropogenic activities: controls on the Holocene flood frequency in the Lake Ledro area, Northern Italy. *Climate of the Past* 9: 1193–1209
- Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T. (2010) Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma* 158: 46–54
- Wilhelm, B., Arnaud, F., et al. (2012) 1400 years of extreme precipitation patterns over the Mediterranean French Alps and possible forcing mechanisms. *Quaternary Research* 78: 1–12
- Wirth, S.B., Gilli, A., et al. (2013) A 2000 year long seasonal record of floods in the southern European Alps. *Geophysical Research Letters* 40: 4025–4029

5.1.1 Des perspectives pour la détection automatique des crues

Comme pour les modèles quantitatifs, la réduction des données (ACP ou sélection de variables) et l'utilisation de prétraitements (spatiaux et spectraux) sont des étapes pouvant améliorer les modélisations. C'est pourquoi de futurs développements s'intéresseront à l'utilisation des méthodes de sélection de variables pour ne garder que celles discriminantes, importantes pour la classification et permettant d'améliorer l'interprétabilité du modèle. L'utilisation de prétraitements spectraux, spatiaux et spatio-spectraux pourront être utilisés pour mettre en avant ces informations discriminantes dans les trois dimensions des données hyperspectrales.

5.1.2 L'utilisation des informations granulométriques pour l'estimation des zones de crues

Comme on a pu le voir au chapitre 3.2, il est possible de quantifier la taille des particules pour la carotte sédimentaire du Bourget de 2009. De plus, une des bandes spectrales importante pour ce modèle est la longueur d'onde à 2200 nm connue pour caractériser les argiles minérales [6], or dans certains cas les argiles minérales peuvent être rapprochées aux argiles granulométriques [7]. On a donc plusieurs approches pour estimer la taille des particules. Celles-ci peuvent ainsi être utilisées pour conforter les résultats des discriminations des crues effectuées avec la caméra VNIR (60 μm), mais avec la caméra SWIR à plus basse résolution (200 μm). En effet, les dépôts de crues peuvent être représentés comme un gradient granulométrique avec des particules grossières à la base du dépôt et des particules fines sur le dessus, à ceci peut s'ajouter des changements minéralogiques avec des particules détritiques grossières à la base et des argiles minérales sur le dessus. On peut donc retrouver ces deux types d'argiles sur le dessus des crues grossières, ou un gradient pour les crues fines.

La figure 5.1 semble montrer, pour la carotte LDB09, des valeurs d'argiles minérales et granulométriques plus importantes dans les zones crues que non crues dans la partie eutrophisée (profondeur inférieure à 25cm). Pour la partie non eutrophisée, ils semblent y avoir quelques dépôts avec des valeurs plus importantes, notamment vers 28-29-32-35-42-43-47 cm, mais ils ne sont pas aussi nets que précédemment. Certaines de ces profondeurs semblent en accord avec des crues rapportées dans de précédentes études [3], alors que la classification ne détermine que celles à 28 et 35 cm.

La figure 5.2 avec la carotte sédimentaire du lac Léman montre bien la différence entre les deux types d'argile. En effet, les dépôts de crue noirs correspondent à des particules grossières où il y a peu d'argiles minérales, et les dépôts de crue rougeâtres semblent composés d'argiles minérales. Le large dépôt de crue entre 9 et 19 cm de profondeur montre cette succession (noir-rougeâtre de la base à la fin du dépôt) avec un gradient d'abondance des argiles minérales qui peuvent donc potentiellement être liées aux argiles granulométriques à partir d'un certain seuil. Les deux cartes semblent donc en accord, sauf aux deux extrémités, dans la partie laminée où il peut y avoir des crues mais où les argiles minérales sont faibles, et dans la partie la plus profonde où les dépôts sont davantage visibles avec les argiles minérales.

Comme pour la carotte sédimentaire du Léman, celle d'Allos avec la figure 5.3, montre la présence de peu d'argiles minérales et de grosses particules dans les dépôts de crues sombres et la présence de gradients à partir d'un certain seuil comme avec le dépôt de crue entre 14 et 16 cm de profondeur, ce dernier n'étant pas classifié en tant que crue sur toute sa largeur. Un autre dépôt entre 11 et 11.5 cm de profondeur présente un gradient des argiles minérales mais n'est pas classé en tant que crue. Le modèle s'appuie pour cet échantillon davantage sur la couleur que sur la chimie comme on a pu le dire dans l'article précédent, ce qui peut

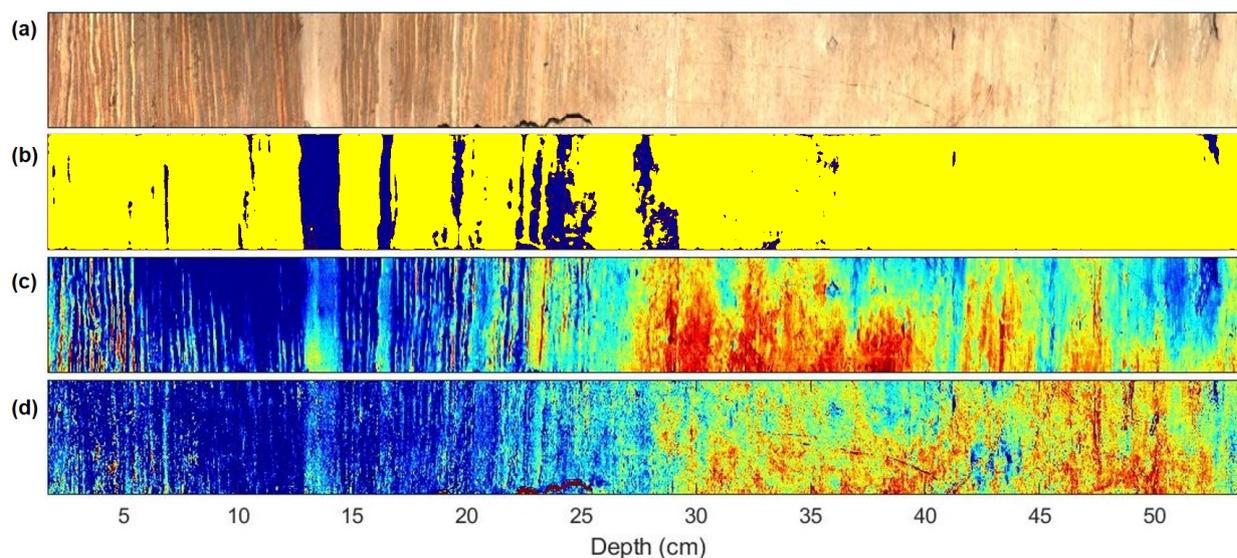


FIGURE 5.1 : (a) Image RGB de la carotte LDB09, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur), (d) carte quantitative des argiles granulométriques (modèle PLS)

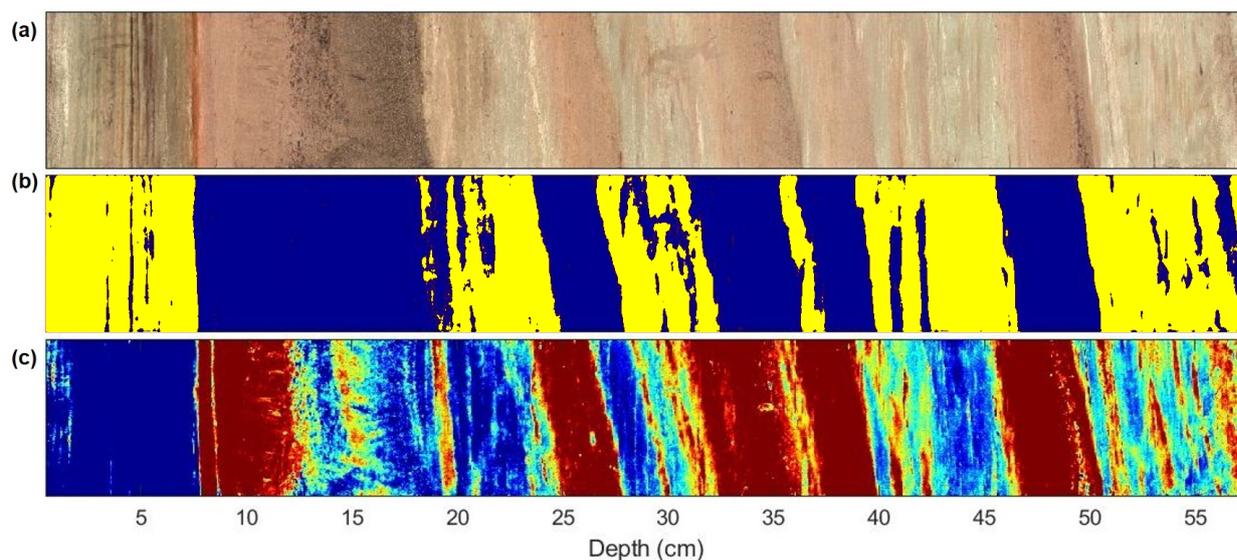


FIGURE 5.2 : (a) Image RGB de la carotte LEM10, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur)

conduire à des non-détections de dépôts de crues.

L'échantillon du Bourget de 2017 est aussi en accord avec les observations précédentes (figure 5.4). Il montre aussi que des dépôts clairs peuvent contenir peu d'argiles minérales et pourtant être composés de particules fines (argiles granulométriques), ici il s'agit de composés carbonatés. Ceci ne permet pas de détecter des dépôts de crues entre 102 et 105 cm de profondeur à partir des argiles minérales.

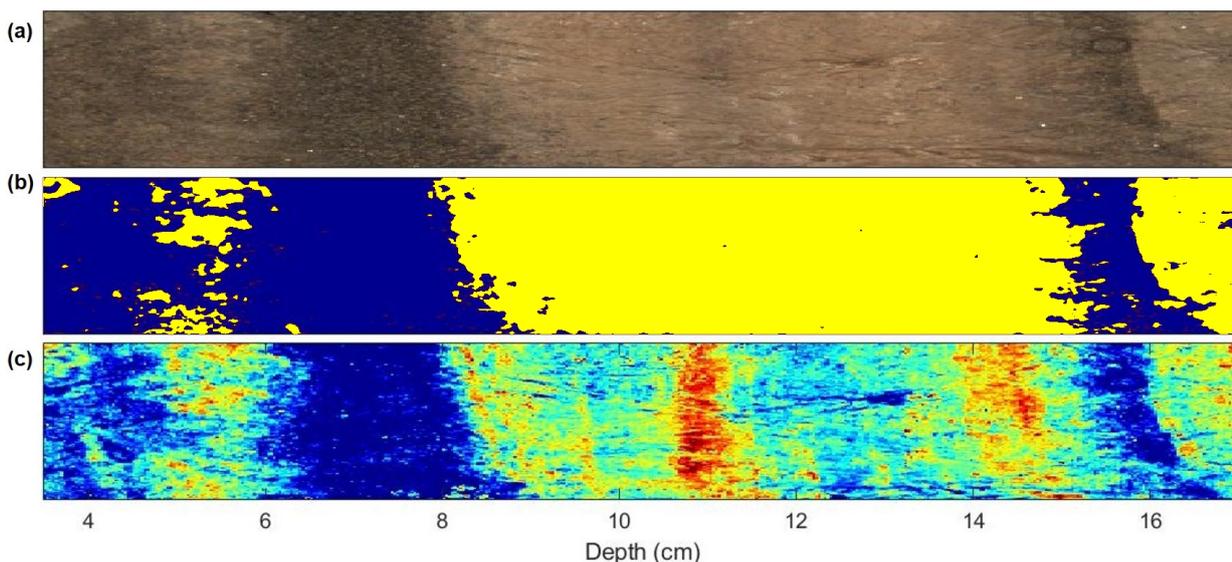


FIGURE 5.3 : (a) Image RGB d'une région d'intérêt de la carotte ALO09, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur)

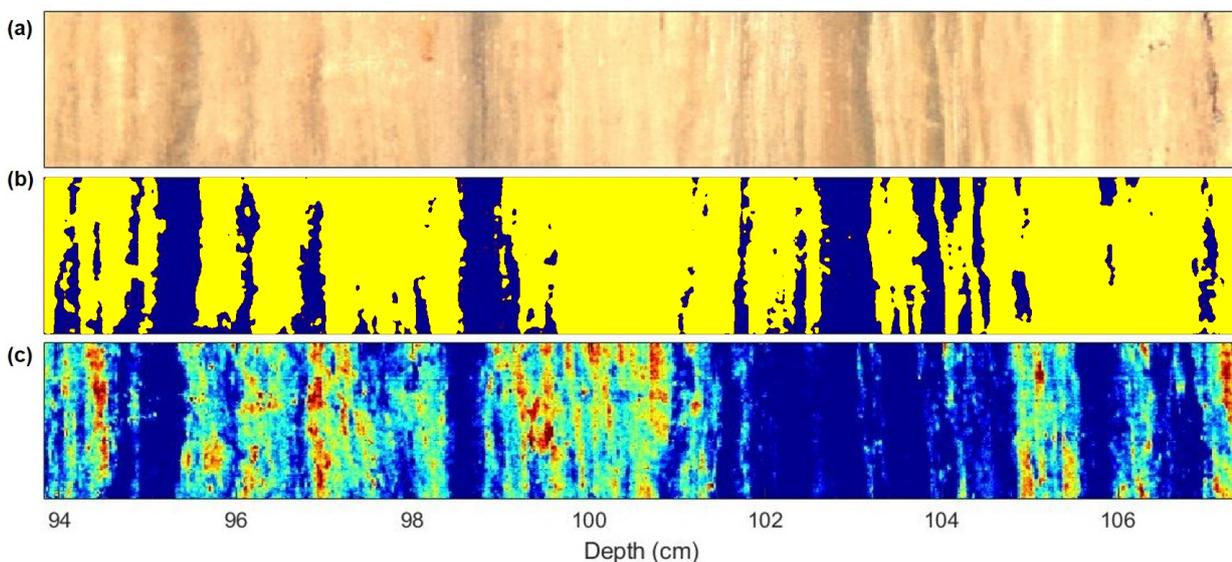


FIGURE 5.4 : (a) Image RGB d'une région d'intérêt de la carotte LDB17, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur)

Ces observations sur l'utilisation des données granulométriques quantitatives ou les argiles minérales semi-quantitatives montrent qu'il est possible d'avoir une première validation des classifications à partir de données d'un autre capteur. Il peut donc être envisageable d'utiliser ces deux approches pour conforter les cartes de classifications des dépôts de crues. Mais pour cela, il faut connaître son échantillon notamment sur la question de la minéralogie des argiles.

Il est intéressant de noter que cet indice des argiles minérales provient du capteur SWIR qui montrait de faibles performances qualitatives de classification (2/5), ceci peut impliquer

que des longueurs d'onde ou du bruits peuvent perturber la modélisation, d'où la nécessité comme on a pu le dire précédemment de réduire et prétraiter les données.

5.1.3 La combinaison de ces données pour estimer l'empreinte des crues

Afin d'estimer l'empreinte spécifique des crues, on a combiné l'ensemble des jeux de données des quatre échantillons, afin de créer un modèle global. On a utilisé la même démarche que celle qui est appliquée dans l'article en préparation précédent : comparaison des types d'images, des méthodes et une optimisation de la méthode CNN. A ceci s'ajoute une comparaison des prédictions des modèles optimaux pour la prédiction des quatre sites.

Pixel size (μm)			Data					
			50			200		
Set	Performance	Grayscale	RGB	HSV	VNIR	SWIR	VNIR-SWIR	
Quantitative	Train	Precision	0.500	0.500	0.500	0.971	0.991	0.991
		Recall	1.000	1.000	1.000	0.889	0.966	0.940
	Test	Precision	0.986	0.986	0	0.999	0.999	0.999
		Recall	1.000	1.000	0	0.887	0.946	0.924
Computation time (min)		87	57	62	604	68		
Qualitative (/5)		0	0	0	4	1	3	

TABLE 5.1 : Comparaison des 6 types d'images avec une modélisation CNN pour le jeux de données combinés

Les résultats montrent que les données réduites (RGB, HSV et niveau de gris) ne possèdent pas suffisamment d'informations discriminantes pour estimer les pixels de crues (tableau 5.1), alors que les données hyperspectrales le peuvent. Les résultats quantitatifs et qualitatifs sont en opposition pour les données SWIR et VNIR-SWIR, ce qui peut être induit par un bruit existant dans les données SWIR qui perturbent les modélisations ou par la résolution plus faible. Les cartes de classifications pour ces images montrent avec la figure 5.5 des effets de bords importants, ainsi qu'un caractère poivre et sel (pixels voisins avec des classes différentes). Les images VNIR sont donc retenues pour la suite, ce qui est le plus intéressant du fait de leurs plus hautes résolutions ($60 \mu\text{m}$).

Quant aux méthodes de classification, la méthode NB ne permet pas d'effectuer une discrimination pertinente. Les méthodes DT, ANN et CNN semblent les plus performantes pour prédire les deux classes tant avec la validation quantitative que celle qualitative (tableau 5.2). De plus, le nombre de neurones utilisé pour l'ANN est plus important dû à la complexité apportée par les compositions et variations des crues des différents échantillons.

L'étude de la prédiction de chacun des échantillons montre avec le tableau 5.3 que l'ANN est la méthode optimale. On voit aussi que les carottes LDB09 et LEM10 sont les plus complexes à modéliser du fait de leur composition différente que l'on peut simplement observer avec la couleur des dépôts de crues, claires et rougeâtres respectivement, alors que pour les deux autres échantillons, ils sont foncés.

Comme dans l'article précédent, on retrouve les mêmes zones spectrales discriminantes pouvant être associées à des composés organiques (500-550 / 670 / 800 / 1000 nm) ou minéraux (450-550 / 900 nm), ou encore aux liaisons hydroxyles O-H présentent dans l'eau, les minéraux et la MO (900 nm). Ces associations de bandes sont basées sur une étude de Viscarra Rossel pour un sol [8], elles peuvent donc dans le cas des sédiments, correspondre à des combinaisons entre les matières minérales et organiques et non pas à ces composés spécifiques.

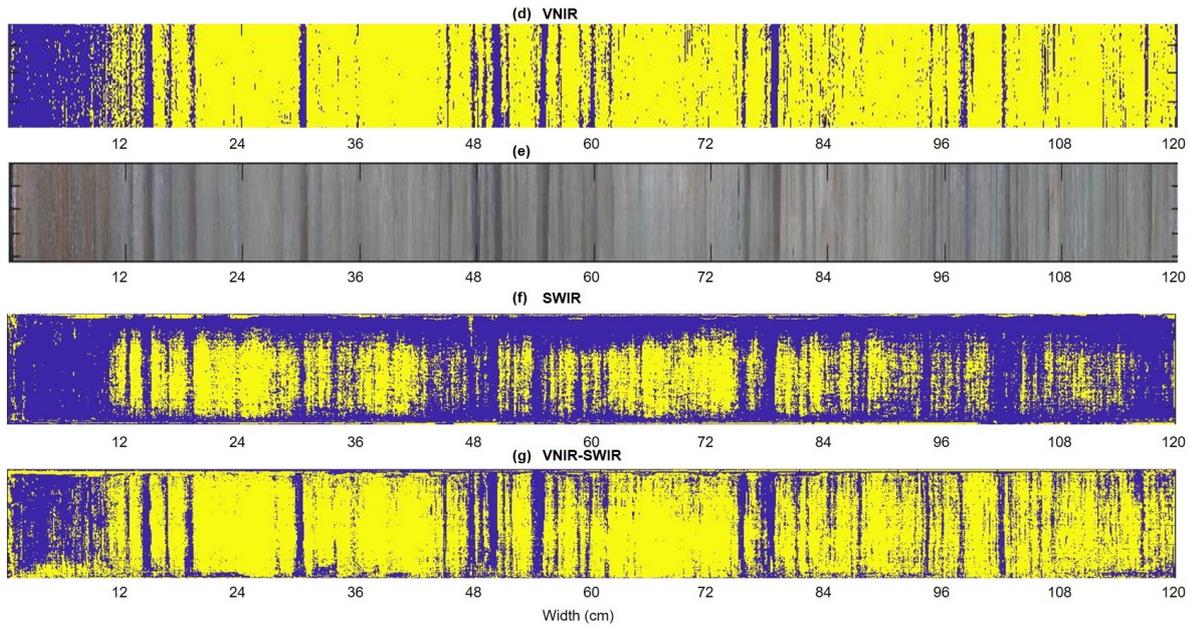


FIGURE 5.5 : Cartes de classification obtenues avec la méthode CNN des 3 types d'images hyperspectrales

Algorithm	Set	Performance	Quantitative	Qualitative (/5)
DT	Train	Precision	0.993	3
		Recall	0.994	
	Test	Precision	0.995	
		Recall	0.879	
	Computation time (min)	0.55		
RF	Train	Precision	0.961	3
		Recall	0.949	
	Test	Precision	0.994	
		Recall	0.802	
	Computation time (min)	19		
NB	Train	Precision	0.632	1
		Recall	0.565	
	Test	Precision	0.920	
		Recall	0.357	
	Computation time (min)	0.25		
ANN (7 neurons)	Train	Precision	0.974	4
		Recall	0.971	
	Test	Precision	0.997	
		Recall	0.915	
	Computation time (min)	8.067		
CNN	Train	Precision	0.939	4
		Recall	0.940	
	Test	Precision	0.993	
		Recall	0.895	
	Computation time (min)	242.7		

TABLE 5.2 : Comparaison des 5 méthodes de classification pour le jeux de données combinés

Comme notre hypothèse de travail était d'utiliser les informations spatio-spectrales contenues dans l'image hyperspectrale pour estimer un signal "crue", nous avons cherché à optimiser les modèles CNN qui utilisent les 3 dimensions (tableau 5.4). On a donc choisi trois paramètres que l'on jugeait les plus importants : le nombre de neurones dans la couche de

	Set	Training		Test	
	Performance	Precision	Recall	Precision	Recall
Allos (2009)	DT	0.994	0.999	0.980	0.994
	ANN	0.986	0.995	0.993	0.995
	CNN	0.949	0.996	0.976	0.996
Bourget (2018)	DT	0.995	0.996	0.990	0.971
	ANN	0.971	0.969	0.990	0.968
	CNN	0.959	0.858	0.985	0.854
Bourget (2009)	DT	0.989	0.991	0.917	0.930
	ANN	0.945	0.945	0.929	0.944
	CNN	0.879	0.885	0.848	0.890
Geneva (2010)	DT	0.996	0.977	0.999	0.860
	ANN	0.971	0.916	0.999	0.917
	CNN	0.974	0.885	0.999	0.886

TABLE 5.3 : Comparaison des 3 méthodes optimales pour la prédiction des quatre échantillon

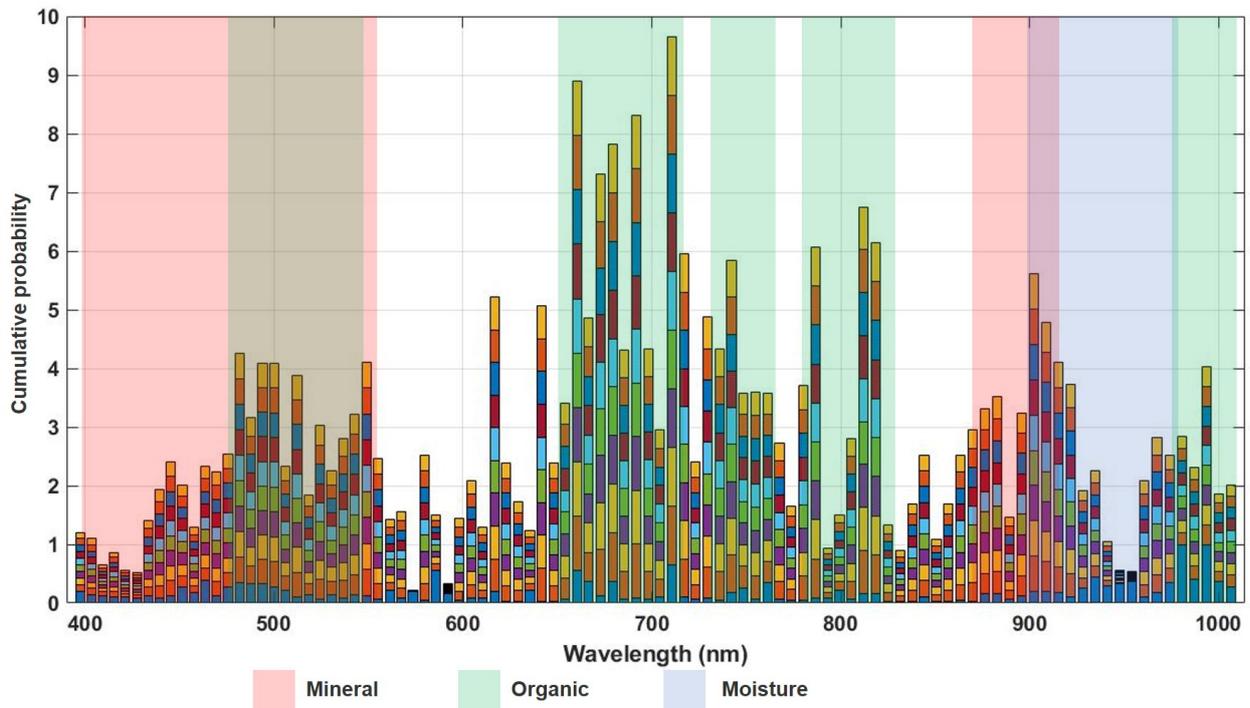


FIGURE 5.6 : Longueurs d'onde discriminantes pour les modèles DT (bleu au-dessous) et ANN (avec un nombre de neurones croissant entre 2-10)

pooling (compression des données), la taille du patch (information spatiale), les structures du réseau (apprentissage et compression 2D ou 3D).

Le modèle optimal est composé d'un patch 5*5 (large fenêtre spatiale d'apprentissage), 5 neurones dans les couches de pooling (compression intermédiaire due aux redondances et colinéarités spectrales) et une structure à 10 couches avec les trois premières pouvant travailler en 3D. Ceci va donc dans le sens de crues larges (5 pixels \approx 300 microns), de la colinéarité des données VNIR entre bandes voisines, et que les 3 dimensions sont importantes. L'utilisation d'une approche de type plan d'expérience linéaire montre que les effets principaux sont un patch 5*5, 2 neurones dans la couche de pooling (faible compression) et une structure à 10 couches alternant un apprentissage 3D et une compression 2D.

Patch size	5*5			3*3		Number of layer	Struture
	10	5	2	10	5		
1	0,76			0,77		4	3-2
2						6	3-2
3	0,83	0,8	0,74	0,78	0,77	6	3-3-2
4	0,79	0,8	0,82	0,78	0,75	6	3-2-3-2
5	0,81	0,74	0,55			8	3-2
6	0,79	0,82	0,33	0,8	0,6	8	3-3-2
7	0,83	0,82	0,81	0,78	0,77	8*	3-2-3-2
8	0,73	0,65	0,84			8	3-3-3-2
9	0,77	0,74	0,74	0,79	0,87	8	3-2-3-2-3-2
10	0,83	0,76	0,29			10	3-2
11	0,85	0,78	0,23	0,85	0,8	10	3-3-2
12	0,77	0,8	0,79	0,83	0,73	10	3-2-3-2
13	0,85	0,87	0,29			10	3-3-3-2
14	0,84	0,86	0,75			10	3-2-3-2-3-2

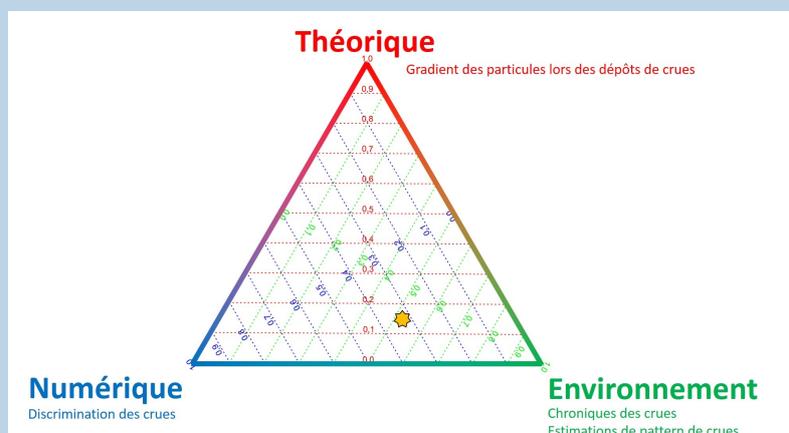
TABLE 5.4 : Optimisation du réseau de neurones profond sur la base du rappel avec les paramètres liés aux nombres de neurones dans la couche de pooling (compression), le taille du patch et sa structure (noirs : modèles non estimés, rouges : résultats non significatifs)

5.1.4 La création de base de données d'apprentissage pour des modèles de classifications

Une base de données d'apprentissage correctement labellisée est l'outil indispensable pour créer des modèles de classification performants. Il faut aussi avoir des données variables pour apprendre les différents cas de figure. C'est pourquoi comme tout problème de modélisation, une réflexion sur la base de données est importante et il faut chercher à l'enrichir avec de nouvelles données. Comme on a pu le voir dans notre article et dans celui de Aymerich pour la détection des téphras [2], il faut une grande base de données pour que les modèles estimés puissent être transférables à des données sans connaissances préalables. Plusieurs études récentes vont dans ce sens, comme pour le comptage des cernes d'arbre à partir de la méthode CNN et des 2500 labellisations de contours à partir d'images RGB [9]. Une autre initiative pour le comptage des lamines est en cours avec la labellisation des contours à partir d'images RGB. Ce type d'image classique peut déjà être très informatif pour la discrimination de ce type de dépôt. Les méthodes analytiques avancées comme l'IHS ont un atout pour la précision des caractérisations. Ces méthodes pourront aussi discriminer plusieurs groupes de dépôts au sein d'un même échantillon grâce à des différences de compositions bio-physico-chimiques. La base de données hyperspectrale actuelle doit donc être approfondie et agrandie pour créer des modèles, afin de pouvoir les transférer sur des échantillons inconnus.

Une contrainte importante est le recours à la labellisation par un expert ou un utilisateur lambda. Cette étape requiert que ces données soient définies avec certitude ce qui est dépendant de la vision et de l'appréciation de la personne. Il faut donc définir avant la création de cette base de données un référentiel pour standardiser les zones labellisées. Chacune d'elles peut ensuite être validées par un autre utilisateur, ou une intercomparaison de labellisation par plusieurs utilisateurs peut être réalisée. Une autre possibilité serait d'avoir une validation automatique des données sélectionnées à partir de méthodes statistiques.

Résumé :



Ce chapitre a montré que les méthodes d'apprentissage automatique sont des approches performantes pour la caractérisation de structures dans les archives naturelles. La détection de dépôts spécifiques comme les crues, permet d'étudier des phénomènes destructeurs et rapides, afin de s'y préparer et de réduire leurs impacts. Il est ainsi possible de créer une chronique de ces événements en fonction de la profondeur.

Comme pour les modèles quantitatifs, les classifications sont dépendantes des variations internes des structures (couleurs, oxydation) et principalement de la matrice sédimentaire qui ne permet pas d'utiliser un modèle sur un autre échantillon que celui ayant servi à la calibration. Ces observations sont liées aux fonctionnements du bassin versant qui induit une forte variabilité dans la composition des échantillons sédimentaires. De plus, elles peuvent être impactées par la certitude qu'un utilisateur a eu lors de la labellisation des zones d'apprentissage.

Il serait maintenant intéressant de détecter et compter les lamines pour créer un modèle d'âge fonction de la profondeur qui pourra être corrigé de ces dépôts pour ne garder que la sédimentation continue qui rendra ainsi compte des apports annuels réels.

5.2 La détection des dépôts laminés pour l'ajout d'une dimension temporelle

La détection des lamines est une grande question pour l'étude des échantillons présentant des dépôts périodiques. Malheureusement, due à la complexité de leur caractérisation (variations de couleurs, défauts de surface, pixels sur- ou sous-exposés), les principales approches semi- ou automatiques proposées sont souvent site-spécifiques et ne peuvent être exploitées par d'autres échantillons. Parmi ces approches on trouve des méthodes géométriques pour détecter les contours [10, 11], des méthodes statistiques se basant sur des transformées de Fourier ou des ondelettes [12, 13], ou encore des méthodes de classification [14, 15]. Celles-ci sont comparées à un comptage manuel à l'oeil qui reste une méthode fiable mais chronophage.

Une approche pour la détection et le comptage des lamines est proposée dans cette partie, sur la base d'une information chimique liée à la chlorophylle qui permet de séparer les doublets de lamines. Ce composé chimique a permis dans plusieurs études d'étudier la réponse des lacs aux stress (contaminations, apports de matières artificiels ou naturelles), ainsi que pour les changements climatiques [16]. Une étude de Van Exem et al. compare la pertinence de 14 indices spectroscopiques pour la caractérisation de la chlorophylle dans le domaine UV-Visible [17]. Il montre qu'un de ces indices, $Area_{650-700}$, est plus pertinent que les autres pour son utilisation à d'autres échantillons sédimentaires [18]. Nous utiliserons par la suite ce même indice pour le développement de notre approche avec la carotte d'Aiguebelette (figure 5.7), d'abord sur une section de 60 cm, qui pourra ensuite être appliquée sur les 7 m.

Il est important de noter que le terme "chlorophylle" regroupent en réalité les pigments chlorophylliens (chlorophylles a, b, c, d) et ses dérivés ou métabolites qui ont une structure chimique proche, et il peut aussi y avoir d'autres composés absorbant minoritairement dans ces zones spectrales. Dans la suite nous utiliserons tout de même le terme chlorophylle pour caractériser ces différents composés.

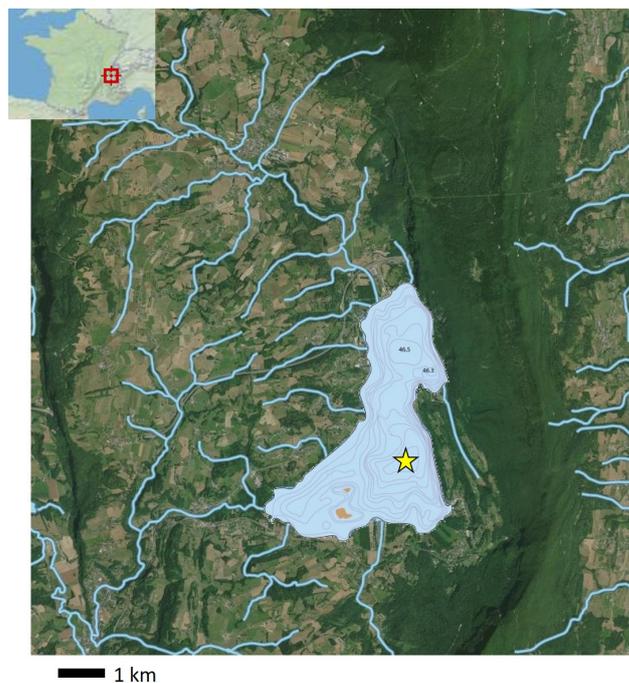


FIGURE 5.7 : Localisation et emplacement du carottage, bathymétrie, affluents et effluents du lac d'Aiguebelette

5.2.1 Le développement de la méthode sur une section courte

Nous proposons donc de nous appuyer sur la combinaison de deux méthodes pour ajuster la détection des lamines (figure 5.8). D'une part, les lamines seront alignées en utilisant la méthode SIFT flow [19], par conséquent elles seront toutes parallèles et pourront être détectées, comptées et caractérisées (épaisseurs) sur un signal 1D. Ainsi, cela permettra de créer deux cartes, une représentant la succession des types de lamines, une autre pour le modèle d'âge, et en inversant le modèle de déformation estimé pour rendre les lamines parallèles, il est possible de revenir dans la configuration initiale de l'échantillon. D'autre part, on propose d'utiliser une méthode de segmentation reposant sur le seuillage d'une image dont l'histogramme aura été égalisé localement dans des zones de 3*3 pixels pour ajuster les contrastes en utilisant la méthode CLAHE [20].

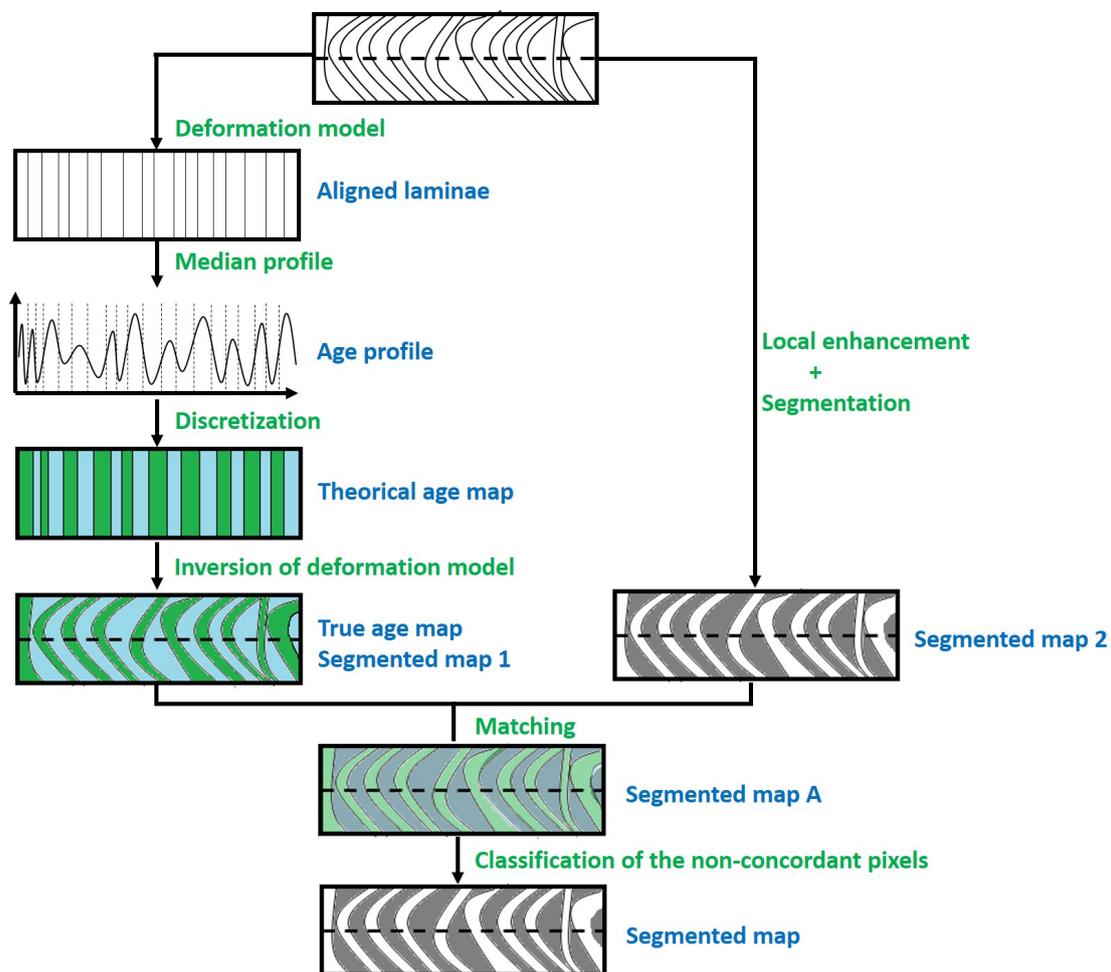


FIGURE 5.8 : Méthodologie proposée se basant sur deux branches parallèles, la première permettant d'aligner les lamines, la seconde segmentant ces dépôts

Cette carotte du lac d'Aiguebelette présente de nombreuses lamines très fines sur toute sa longueur, et une année est représentée par un triplet (printemps/été/hiver) [21, 22], malheureusement la résolution ne permet de voir qu'un doublet (printemps+été/hiver). Le capteur VNIR (gamme spectrale : 400-1000 nm, taille du pixel : 60 μm) est utilisé dans cette étude, et permet l'estimation d'une carte semi-quantitative représentative de la chlorophylle avec l'indice $Area_{650-700}$ [18]. Celle-ci pouvant caractériser spécifiquement un type de lamines (printemps+été) et ainsi séparer le doublet (figures 5.9 et 5.10).

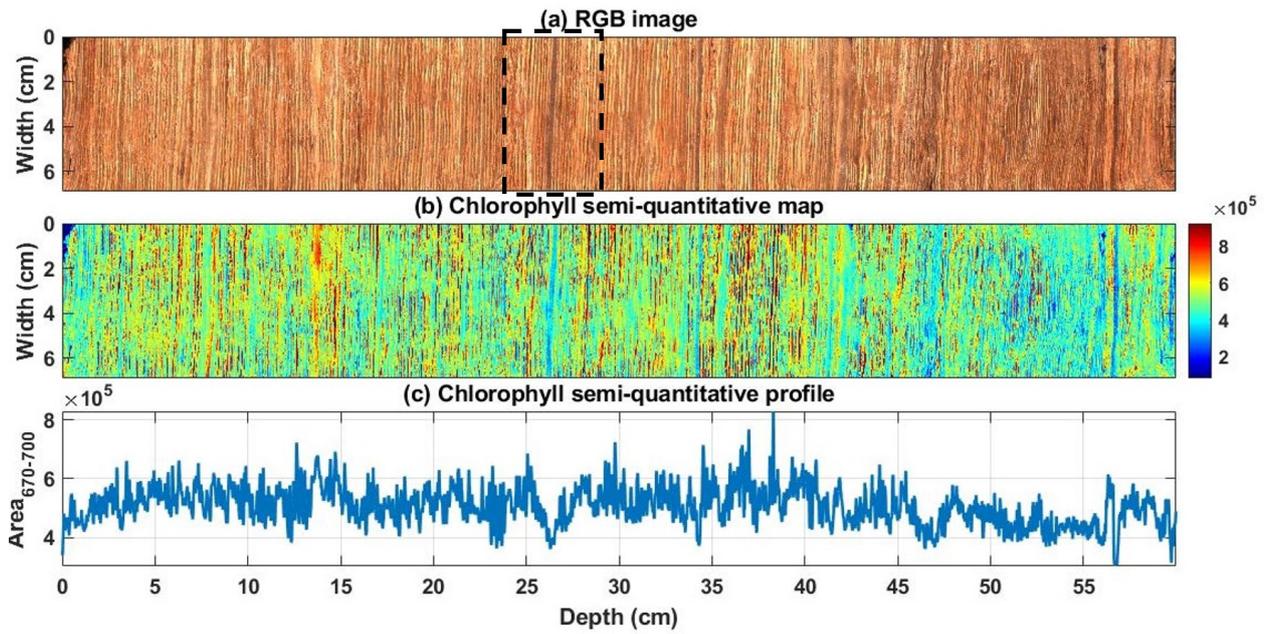


FIGURE 5.9 : (a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte semi-quantitative et (c) profil médian de la chlorophylle à partir de l'indice $Area_{650-700}$; zone d'intérêt sélectionnée pour l'image suivante en encadré

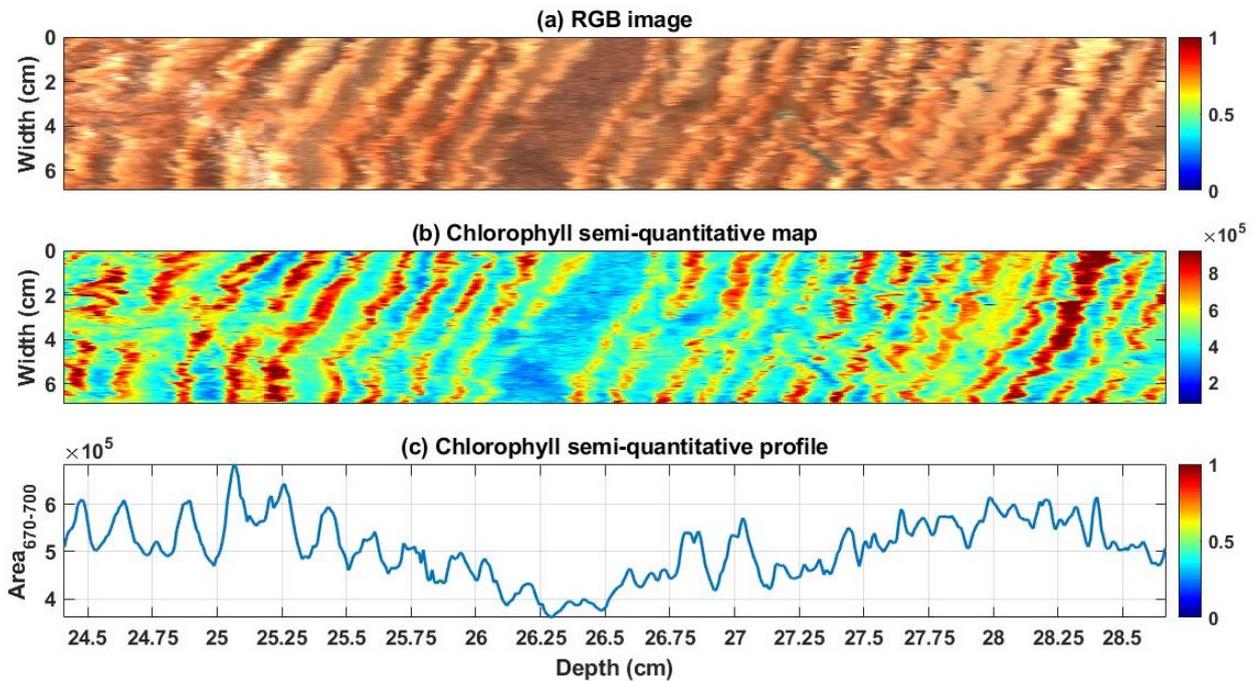


FIGURE 5.10 : (a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte semi-quantitative et (c) profil médian de la chlorophylle sur la à partir de l'indice $Area_{650-700}$ dans la zone d'intérêt

Nous allons maintenant utiliser les deux méthodes proposées pour la détection de ces deux groupes de lamines. La figure 5.11 montrent qu'elles sont complémentaires, avec la segmentation qui n'estime pas bien les lamines fines, mais qui détecte bien les larges dépôts,

et l'alignement qui a le comportement inverse. Ainsi la mise en correspondance des deux méthodes, permet de voir des zones en accord et d'autre en désaccord. Une étape supplémentaire reste à développer pour associer ces dernières à une des deux classes. Une fois que la carte de lamination fiable sera estimée, on pourra effectuer des études statistiques sur la variabilité des épaisseurs et des profondeurs grâce à l'image 2D.

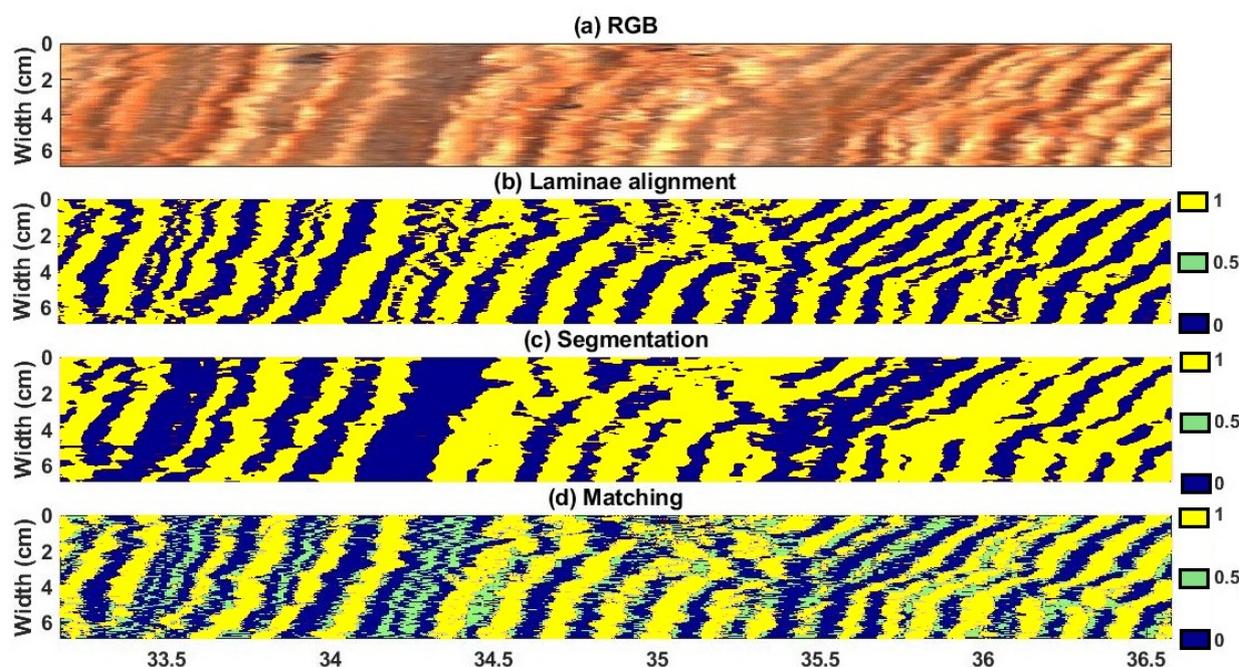


FIGURE 5.11 : Quatre étapes de la méthode proposée pour la détection des lamines. (a) Image RGB de la région d'intérêt, (b) alignement et (c) segmentation des lamines, (d) comparaison des deux cartes de classification (jaune = lamines claires - printemps / été, bleu = lamines foncées - hiver, vert = incertitudes)

Nous allons maintenant développer la suite des résultats avec l'hypothèse que la méthode d'alignement des lamines se suffit à elle-même, ce qui n'est pas le cas, mais qui permettra d'avoir de premières tendances pour la suite de la caractérisation de ces dépôts. Nous avons choisi de nous focaliser sur cette méthode car elle a un comportement de sur-détections qui permet donc de déterminer toutes les lamines plus des fausses détections, alors que la segmentation a un comportement de sous-détections.

Grâce à l'alignement des lamines, il est possible de les compter et d'estimer leurs profondeurs pour créer un modèle d'âge qui sera prochainement comparé à celui effectué à partir des méthodes de datation. Il est aussi possible d'estimer l'épaisseur des deux types de lamines qui nous donne des informations sur la production de matière organique réalisée par les organismes présent dans le lac (productivité primaire) et potentiellement sur les précipitations hivernales. L'épaisseur médiane de ces deux lamines est de 0.51 mm, avec un écart-type de 0.43 mm et 0.40 mm respectivement pour les lamines de printemps-été et d'hiver. La corrélation entre leurs épaisseurs annuelles est de 0.62 ($p < 0.05$), ce qui montre une faible correspondance entre les deux groupes de saison. Leurs variations dans le temps montrent, avec la figure 5.12, des cycles périodiques variant entre 10 ans et 13 ans, ce qui peut correspondre à des cycles solaires de périodes moyennes de 11,2 ans. Une fois le modèle d'âge fixé temporellement, il sera possible de les comparer au cycle solaire connu.

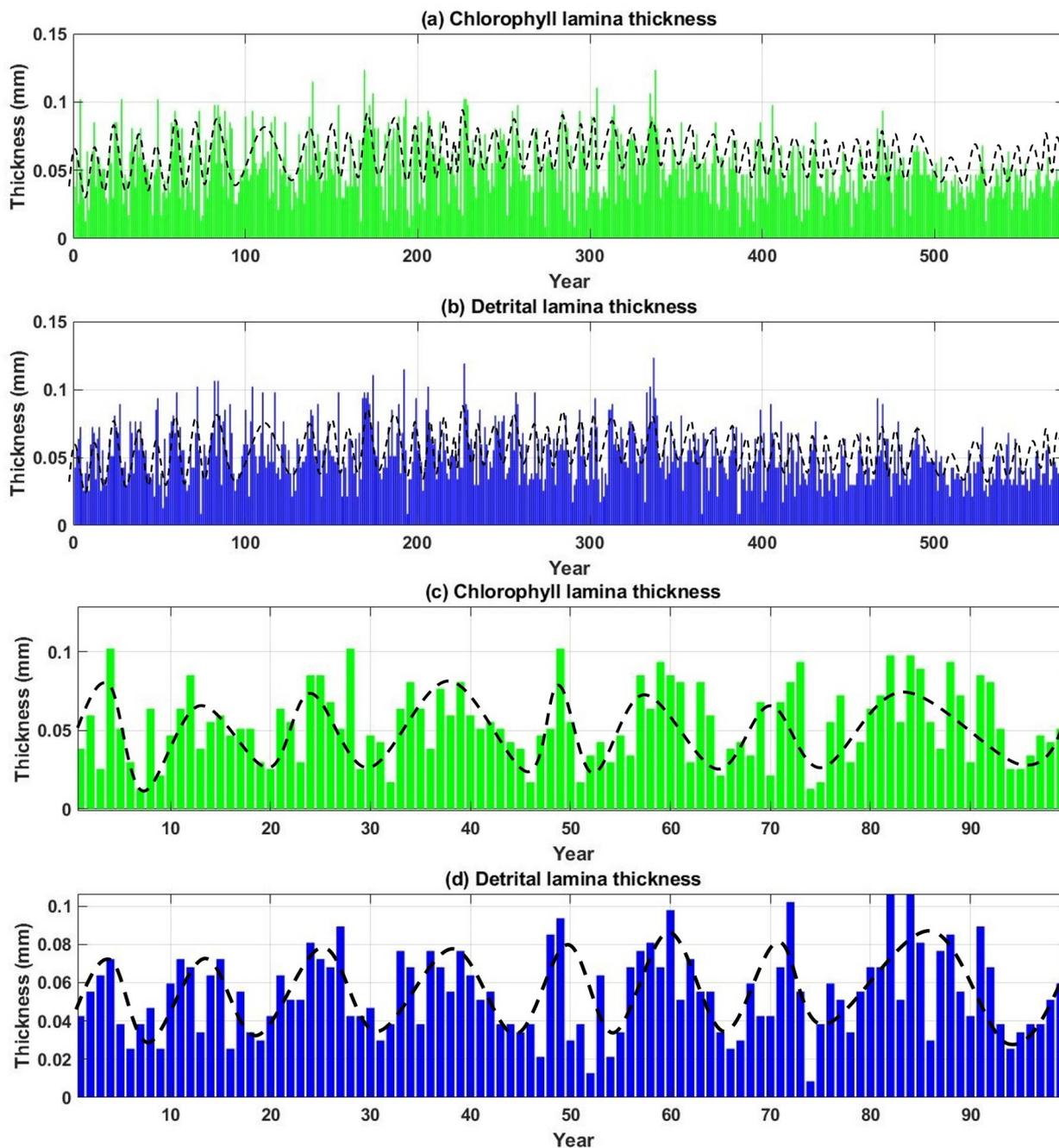


FIGURE 5.12 : Épaisseurs (a-c) des lamines de printemps et d'été, (b-d) des lamines d'hiver sur tout l'échantillon et sur une zone d'intérêt. A courbe de tendance a été ajoutée pour estimer des cycles

Un modèle de prédiction PLSR de la MO a aussi été réalisé sur la carotte d'Aiguebelette avec la caméra SWIR (gamme spectrale : 1000-2500 nm, taille du pixel : 200 μm). Celui-ci présente un coefficient de corrélation de prédiction de 0.82 ($p < 0.05$), une incertitude de 1.94%. On a donc recalée les deux capteurs sur les bandes des liaisons hydroxyles et ainsi pu mettre en correspondance les cartes d'abondance de la MO et semi-quantitative de la chlorophylle (figures 5.13 et 5.14). Les deux cartes sont anti-corrélées (-0.60 , $p < 0.05$) ce qui va dans le sens des connaissances sur l'échantillon, avec la chlorophylle présente dans les lamines de printemps et d'été, alors que la MO est majoritairement présente dans les lamines hivernales.

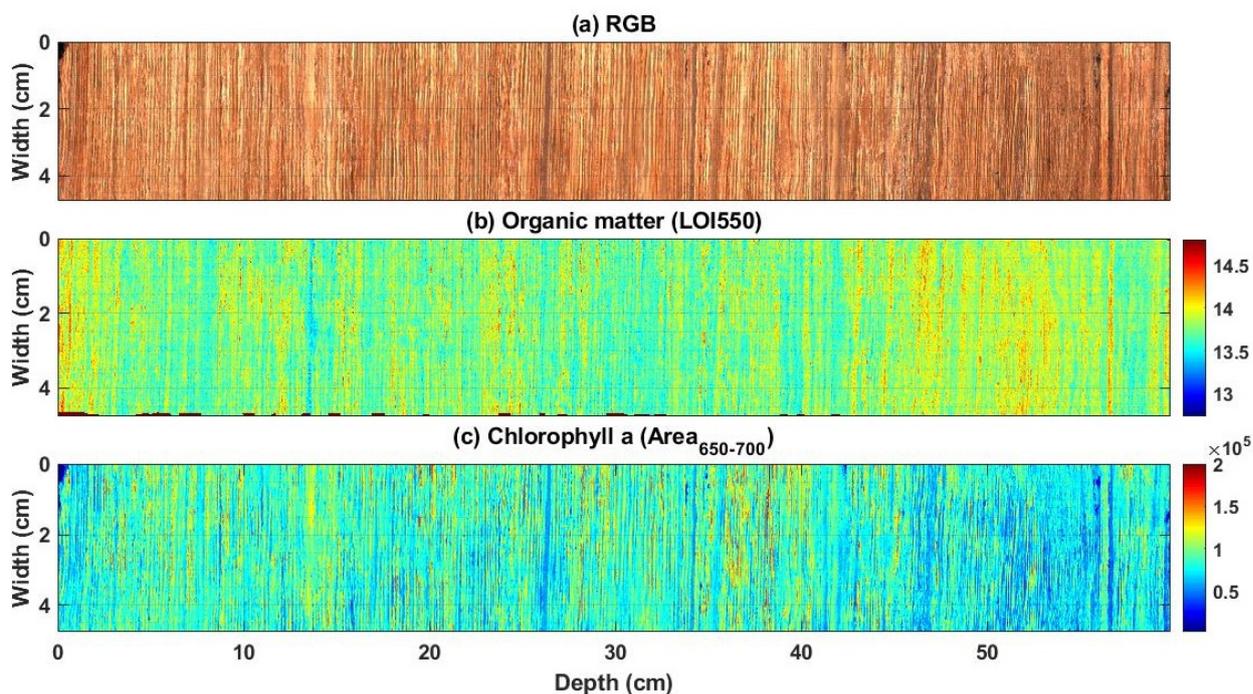


FIGURE 5.13 : (a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte d'abondance quantitative de la MO, (c) carte semi-quantitative de la chlorophylle

L'ajout d'un modèle d'âge fiable permettra de comparer ces deux indicateurs avec d'autres. Il serait aussi possible de s'intéresser aux deux types de MO, celles produites dans le lac et celles provenant de l'extérieur du lac, qui sont présentes à différentes abondances dans les trois types de lamines.

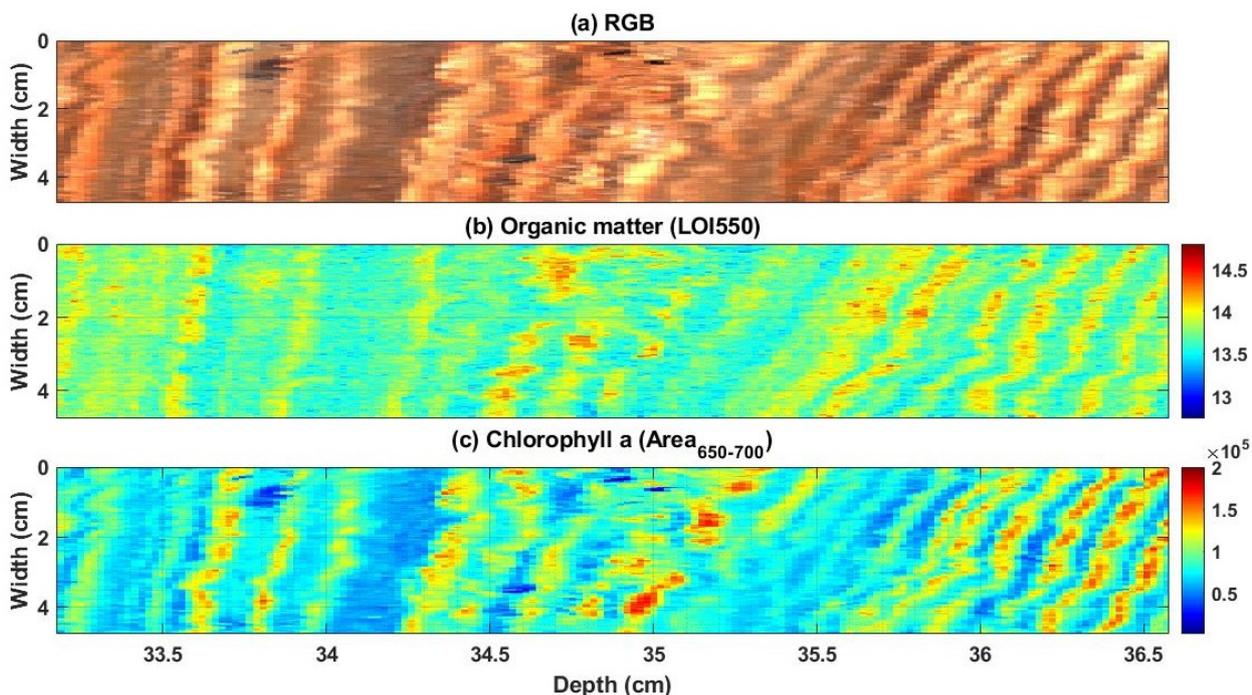


FIGURE 5.14 : (a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte d'abondance quantitative de la MO, (c) carte semi-quantitative de la chlorophylle sur une région d'intérêt

5.2.2 Des observations sur une section longue

Comme on a pu le dire, un modèle PLSR pour la prédiction de la LOI550 a été calculé à partir des données de la caméra hyperspectrale SWIR et a permis d'estimer une carte d'abondance quantitative pour les 7 m de la carotte d'Aiguebelette (figure 5.15). De la même façon l'indice $Area_{650-700}$, a permis d'estimer une carte d'abondance semi-quantitative de la chlorophylle. Un signal médian de l'image permet d'obtenir leurs profils correspondants qui présentent une corrélation de -0.41 ($p < 0.05$).

Les travaux de Durain [21] ont défini quatre unités stratigraphiques à partir de la couleur et d'une estimation de la granulométrie visuelle. Avec les cartes d'abondances de chlorophylle et de LOI550, ainsi que l'image RGB, on a pu reprendre ces limites d'unités. Celles estimées par Durain [21] sont en accord avec nos observations. On propose d'ajouter trois nouvelles limites. Les caractéristiques de ces unités sont présentées dans le tableau 5.5. On peut voir que les unités E et G sont très semblables, tout comme D et F.

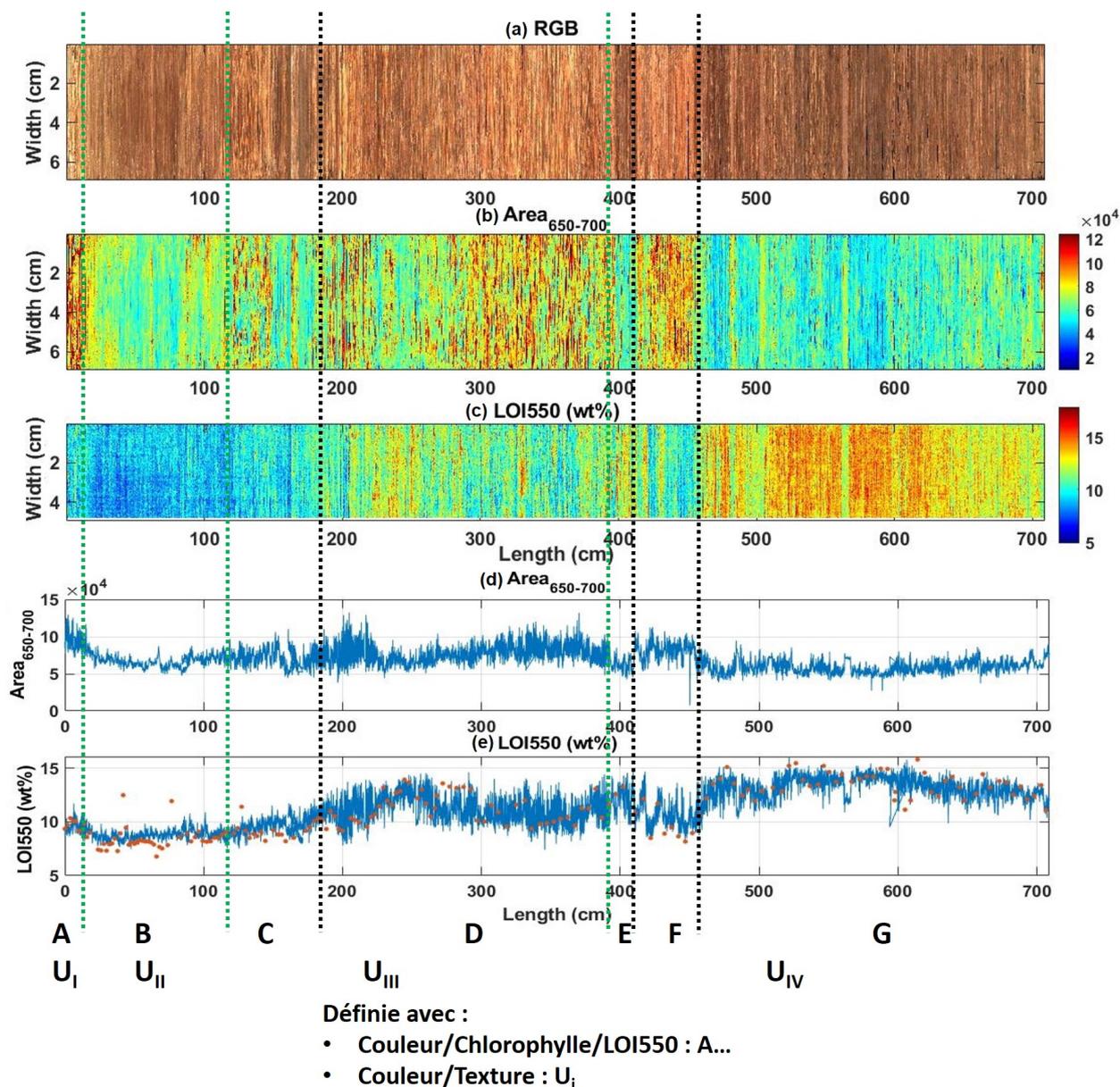
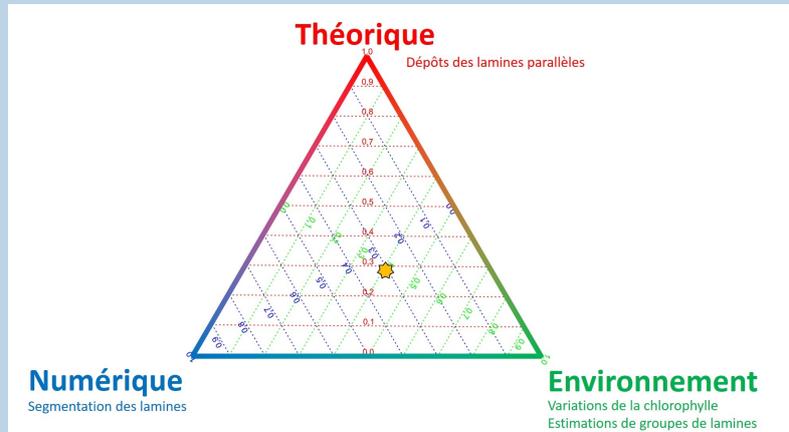


FIGURE 5.15 : (a) Image RGB de la carotte d'Aiguebelette (7 m), Cartes et profils (b-d) semi-quantitatifs de la chlorophylle et (c-e) quantitative de la LOI550 (courbe bleue : prédiction de l'IHS, points oranges : points de calibration destructifs) ; limites d'unités stratigraphiques avec des lignes en pointillées (vertes : travaux de Durain [21] qui sont en accord avec nos observations, noires : propositions de nouvelles unités)

Profondeur (cm)	Nom	Couleurs / Textures	Chlorophylle (Arbitraire)	LOI550 (wt%)
0-16	A, U_I	Argile brun olive clair	10-12***	10-12**
16-120	B, U_{II}	Argile brun jaunâtre clair	5-8**	6-10*
120-180	C, U_{III}	Couches argileuses à finement silteuses	6-10**	8-12**
180-390	D, U_{III}		8-12***	7-14***
390-410	E, U_{IV}	Dépôts argileux à silteux fins, brun olive	5-8**	13-14**
410-450	F, U_{IV}		8-12***	8-13***
450-700	G, U_{IV}		5-8**	13-16***

TABLE 5.5 : Unités stratigraphiques proposées et leurs caractéristiques (* niveau d'abondance)

Une fois que la méthode de détection des lamines sera validée, il sera possible de la même façon d'estimer des chroniques saisonnières de ces deux propriétés. Cet échantillon est intéressant puisqu'il possède une lamination très importante sur une période de temps variant entre 6.000 ans et 8.000 ans (validation du modèle d'âge en cours avec les méthodes de datation), contrairement aux sections courtes qui ne possèdent qu'une lamination peu profonde (LDB09 : 80 ans, LEM10 : 70 ans).

Résumé :

Ce chapitre a montré que les méthodes d'analyse d'image et d'apprentissage automatique sont des approches performantes pour la caractérisation de structures dans les archives naturelles. Celles-ci permettent d'ajouter une dimension temporelle aux échantillons à moindre coût, avec une haute précision spatiale et de manière automatique. De plus, la détection de dépôts spécifiques comme les crues, permet d'étudier des phénomènes destructeurs et rapides, afin de tenter de s'y préparer et de réduire leurs impacts. La détection des dépôts laminés (sédimentation continue) et des événements instantanés rend maintenant possible de créer des modèles d'âges corrigés de ces derniers, afin d'estimer des variations saisonnières et annuelles de la composition des échantillons sédimentaires. Comme par exemple avec l'épaisseur des lamines liées à la chlorophylle, il est possible d'estimer la productivité primaire du lac. Les différentes méthodes proposées pour détecter les dépôts sédimentaires ont des limites, comme on vient de le voir, mais leurs combinaisons peuvent permettre d'ajuster et d'améliorer leurs caractérisations. Par exemple, les méthodes de segmentation sont dépendantes des variations internes des structures (couleurs, oxydation) qui induisent un biais dans la détection. L'alignement des dépôts est impacté par leurs courbures qui induit de mauvaises associations des points de calage. Quant aux méthodes de classification, elles peuvent être impactées par les effets de matrices majoritaires dans le signal, qui peuvent masquer les informations discriminantes.

Bibliographie

- [1] B. VANNIÈRE et al. « Orbital changes, variation in solar activity and increased anthropogenic activities : controls on the Holocene flood frequency in the Lake Ledro area, Northern Italy ». In : *Climate of the Past* 9.3 (2013), p. 1193-1209.
- [2] I. F. AYMERICH et al. « Detection of Tephra Layers in Antarctic Sediment Cores with Hyperspectral Imaging ». In : *PLOS ONE* 11.1 (2016). Sous la dir. de J. A. COLES, p. 1-24.
- [3] J.-P. JENNY et al. « A 4D sedimentological approach to reconstructing the flood frequency and intensity of the Rhône River (Lake Bourget, NW European Alps) ». In : *Journal of Paleolimnology* 51.4 (2014), p. 469-483.
- [4] B. WILHELM et al. « 1400 years of extreme precipitation patterns over the Mediterranean French Alps and possible forcing mechanisms ». In : *Quaternary Research* 78.1 (2012), p. 1-12.
- [5] A. BEN HAMIDA et al. « 3-D Deep Learning Approach for Remote Sensing Image Classification ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 56.8 (2018), p. 4420-4434.
- [6] N. LEVIN, G. J. KIDRON et E. BEN-DOR. « Surface properties of stabilizing coastal dunes : combining spectral and field analyses ». In : *Sedimentology* 54.4 (2007), p. 771-788.
- [7] S. GUGGENHEIM et R. T. MARTIN. « Definition of clay and clay mineral : joint report of the AIPEA and CMS Nomenclature Committees ». In : *Clays and Clay Minerals* 43.2 (1995), p. 255-256.
- [8] R. VISCARRA ROSSEL et T. BEHRENS. « Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra ». In : *Geoderma* 158.1-2 (2010), p. 46-54.
- [9] A. FABIJANŃSKA et M. DANEK. « DeepDendro – A tree rings detector based on a deep convolutional neural network ». In : *Computers and Electronics in Agriculture* 150 (2018), p. 353-363.
- [10] M. C. MEYER, R. FABER et C. SPÖ TL. « The WinGeol Lamination Tool : new software for rapid, semi - automated analysis of laminated climate archives ». In : *The Holocene* 16 (2006), p. 753-761.
- [11] T. QUINIOU et al. « Calculation of Bedding Angles Inclination from Drill Core Digital Images. » In : *MVA2007 IAPR Conference on Machine Vision Applications* (2007), p. 252-255.
- [12] I. RUPF et G. RADONS. « New approaches for automated data processing of annually laminated sediments ». In : *Nonlinear Processes in Geophysics* 11.56 (2004), p. 599-607.
- [13] N. SELMAOUI et al. « Image analysis for core geological descriptions : strata and granulometry detection ». In : *Proceedings of the 17th International Conference on Pattern Recognition*. T. 4. IEEE, 2004, 305-310 Vol.4.
- [14] M. NDIAYE et al. « A Semi Automated Method for Laminated Sediments Analysis ». In : *International Journal of Geosciences* 3 (2012), p. 206-210.
- [15] T. EBERT et M. H. TRAUTH. « Semi-automated detection of annual laminae (varves) in lake sediments using a fuzzy logic algorithm ». In : *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology* 435 (2015), p. 272-282.

- [16] N. MICHELUTTI et J. P. SMOL. « Visible spectroscopy reliably tracks trends in paleo-production ». In : *Journal of Paleolimnology* (2016).
- [17] A. VAN EXEM et al. « Hyperspectral core logging for fire reconstruction studies ». In : *Journal of Paleolimnology* 59.3 (2018), p. 297-308.
- [18] A. P. WOLFE et al. « Experimental calibration of lake-sediment spectral reflectance to chlorophyll a concentrations : methodology and paleolimnological validation ». In : *Journal of Paleolimnology* 36.1 (2006), p. 91-100.
- [19] CE LIU, J. YUEN et A. TORRALBA. « SIFT Flow : Dense Correspondence across Scenes and Its Applications ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33.5 (2011), p. 978-994.
- [20] K. ZUIDERVELD. « Contrast Limited Adaptive Histogram Equalization ». In : *Graphics Gems IV*. Academic Press, 1994, p. 474-485.
- [21] A. DURAIN. *Etude multiproxy de la sédimentation du lac d'Aiguebelette : reconstitution paléoclimatique et paléosismicité à l'Holocène*. Rapp. tech. USMB, 2018.
- [22] S. WEPIERRE. *Changements environnementaux dans l'Avant-Pays Savoyard depuis 2000 ans : Etude sédimentologique du Lac d'Aiguebelette*. Rapp. tech. USMB, 2017.

Conclusions générales et perspectives

La figure 1 récapitule l'ensemble des approches développées au cours de la thèse suivant trois pôles de développement. On peut voir que nos travaux ont permis des avancées principalement dans le pôle "numérique", puis dans le pôle "environnement". Car nous avons pris le parti d'étudier des variables environnementales spécifiques et de développer des méthodes pour les caractériser. La première partie de cette conclusion récapitule ces approches, ainsi que les verrous et limites qu'elles ont permis de lever. On présentera aussi les outils numériques développés et l'on discutera de l'ensemble des résultats obtenus sur deux échantillons. Les travaux réalisés durant cette thèse ont permis d'atteindre les objectifs de développement des premiers outils pour l'utilisation de l'imagerie hyperspectrale pour la communauté des géosciences.

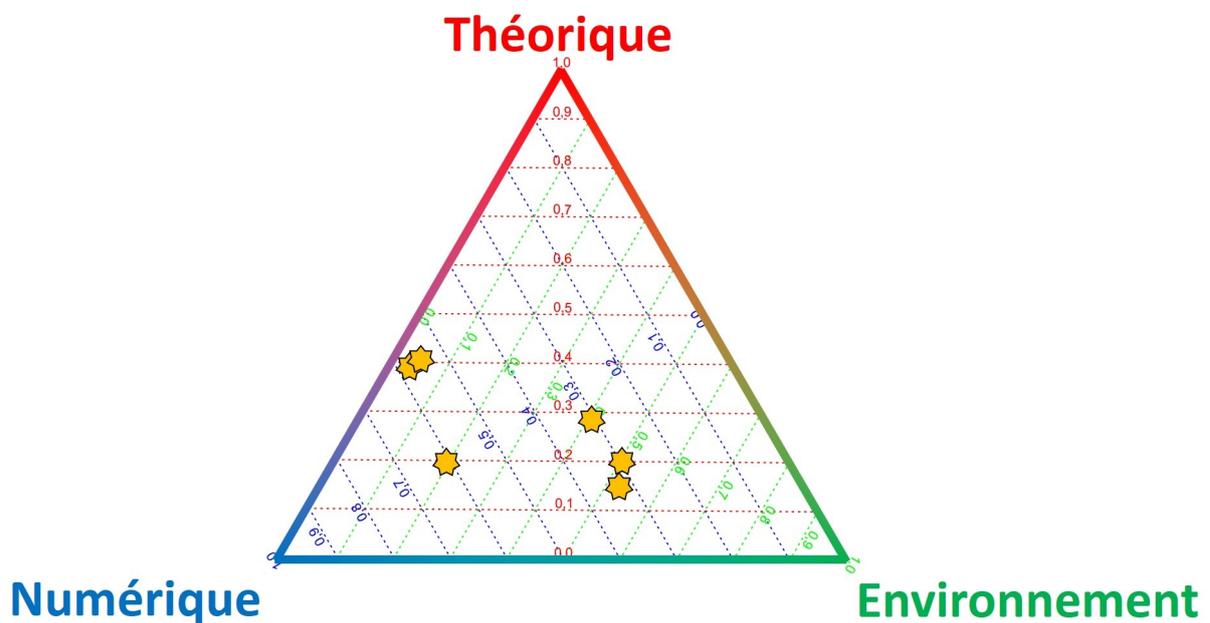


FIGURE 1 : Diagramme ternaire des différentes approches méthodologiques développées dans nos travaux

La seconde partie de la conclusion montrera les perspectives de développement pour optimiser nos approches à travers différents points. Les verrous et limites restant à résoudre discutés dans la première partie, notamment pour le pôle "théorique", demanderont davantage d'approfondissement dans de futurs travaux.

1 L'imagerie hyperspectrale, un outil novateur pour l'analyse des archives environnementales

1.1 Les approches développées au cours de nos travaux

Les matières organiques et la taille des particules sont des composants importants dans les sédiments et permettent de reconstituer des changements dans le bassin versant du lac étudié. Dans nos travaux, nous nous sommes focalisés sur la matière organique avec la perte au feu à 550 °C, le carbone organique total (RockEval), et des composés spécifiques avec les chlorophylles, ainsi que la distribution des particules. La matière organique globale est enregistrée dans de nombreuses bandes spectrales dans le domaine proche-infrarouge, quant à la chlorophylle, il existe de nombreux indices dans le domaine visible. La taille des particules a une incidence sur les spectres dans certains domaines spectraux et peut être corrélée à des informations comme la minéralogie et donc à des bandes spectrales spécifiques. Grâce aux deux capteurs hyperspectraux mis à notre disposition (VNIR et SWIR), on a pu estimer ces quatre propriétés et créer des cartes d'abondances à des résolutions micrométriques (60 μm et 200 μm) permettant une analyse fine des échantillons et ainsi estimer des variations saisonnières.

Afin de créer ces cartes d'abondances quantitatives, nous avons développé, au **chapitre 2**, une méthode pour rééchantillonner les images hyperspectrales afin de déterminer les pixels correspondant aux zones spatiales échantillonnées. Puis ces données sont utilisées pour créer un modèle prédictif quantitatif avec la méthode de régression des moindres carrés partiels (PLSR) très utilisée dans le domaine. Elle est couplée à une sélection des longueurs d'onde pour ne garder que celles discriminantes ce qui permet d'améliorer les performances des modèles. Cette méthode a permis de modéliser la matière organique (LOI550, TOC) et les classes granulométriques pour plusieurs lacs, ainsi que la distribution des particules (PSD) pour un lac. Un récapitulatif de certains modèles estimés avec la caméra SWIR pour trois lacs est présenté dans la figure 2.7.

Les deux capteurs d'imageries hyperspectrales portent des informations spectroscopiques différentes et donc bio-physico-chimiques. Ils peuvent donc être spécifiques de certains composés, comme la MO pour la gamme proche-infrarouge, ou les pigments pour la gamme visible. Mais le second capteur peut posséder des informations minoritaires complémentaires pouvant aider à la modélisation de ces propriétés. C'est pourquoi dans le **chapitre 3**, nous avons proposé une méthode permettant de recalibrer spatialement les images à la plus basse des résolutions. Pour cela, nous nous sommes basés sur des descripteurs SIFT qui estiment des pixels invariants dans les deux images, puis une mise en correspondance précise de ces pixels permet de créer un modèle de déformation. La méthode utilisée se nomme SIFT flow et utilise des images 2D. Il faut donc définir les longueurs d'onde à utiliser et celles-ci correspondent à des bandes spectrales possédant des propriétés bio-physico-chimiques similaires, dans notre cas il s'agissait des liaisons chimiques hydroxyles O-H pouvant être liées à l'humidité, la MO ou aux minéraux. De la même manière, les carottes sédimentaires sont très souvent analysées avec un capteur de fluorescence des rayons X qui permet d'avoir une ligne continue le long de l'échantillon. Il est donc possible de le combiner avec une ligne des images hyperspectrales recalées. Pour cela, on a adapté la méthode SIFT flow, et estimé les bandes spectrales portant des informations similaires, ici il s'agissait de composés minérales. Les modèles de déformation estimés avec ces couples de bandes spectrales sont ensuite appliqués aux autres plans spectraux pour recalibrer ou aligner la totalité du jeu de données. Ceci a permis de montrer que la combinaison des capteurs permettait d'améliorer les performances des

modèles PLSR pour la LOI550 et la classe granulométrique des argiles. La distribution des particules a aussi été estimée à partir de la combinaison des deux capteurs hyperspectraux, car l'utilisation d'un seul capteur ne le permettait pas, ce qui montre bien l'intérêt de cette méthode.

Les méthodes de recalage d'images permettent ce que l'on peut définir comme une fusion à la plus basse des résolutions, dans notre cas elle est de $200 \mu m$ ce qui est déjà très intéressant pour l'étude de ces archives. Mais effectuer une fusion à la plus haute des résolutions ($60 \mu m$) pourrait apporter davantage d'informations intéressantes sur les échantillons. C'est pourquoi nous avons testé des méthodes de fusion d'images développées pour les capteurs de télédétection et médicaux dans le **chapitre 4**. Elles permettent d'extraire des informations manquantes dans l'image à basse résolution à partir de celles à haute résolution. On a pu montrer que l'interpolation bicubique permettait d'obtenir des résultats optimaux, mais celle-ci ne prend pas en compte les informations apportées par l'image à haute résolution. Les méthodes d'analyse multi-résolution obtiennent des résultats légèrement inférieurs, elles se basent sur la modélisation des liens entre les deux capteurs à différentes résolutions pour estimer les informations manquantes. Ces méthodes peuvent donc ne pas être adaptées à notre type de données hyperspectrales de laboratoire.

Les images hyperspectrales possèdent une dimension spectrale qui nous a permis d'estimer des abondances de certaines propriétés bio-physico-chimiques. Mais elles possèdent aussi deux dimensions spatiales qu'il ne faut pas oublier, car elles permettent de caractériser les dépôts sédimentaires successifs qui ajoutent une dimension temporelle aux données. Dans le **chapitre 5**, nous avons proposé deux méthodes pour les étudier, (1) la première sur une modélisation qualitative avec des méthodes de classification, (2) la seconde se basant sur une approche image avec la segmentation et l'alignement de signaux. (1) Les modèles d'âge sont habituellement corrigés des événements instantanés pour ne garder uniquement que la sédimentation continue. C'est pourquoi nous avons proposé une approche pour la détection des événements de crues. Pour cela, nous nous sommes basés sur des méthodes de classifications supervisées avec une labellisation par un expert des zones correspondant à la sédimentation continue et aux événements instantanés. Ensuite, par l'estimation des épaisseurs, une chronologie de ces événements en fonction de la profondeur a pu être réalisée. (2) Ainsi, nous avons pu détecter les lamines qui ont deux niveaux de couleurs principaux dans nos échantillons, grâce à la segmentation de l'image en utilisant une méthode de seuillage. De plus, d'un point de vue 1D, les lamines sont des signaux périodiques, on s'est donc basé sur cette hypothèse en utilisant une nouvelle fois la méthode SIFT flow pour recalibrer les différentes lignes de l'image entre elles et ainsi obtenir des lamines parallèles. Ensuite, la largeur à mi-hauteur permet de déterminer leurs épaisseurs, ainsi que leurs profondeurs. Le comptage des lamines permet ainsi de créer un modèle d'âge en fonction de la profondeur de manière automatique.

1.2 Les verrous et limites levés et restant à lever

Dans le chapitre 1, nous avons discutés des verrous et limites liés à nos trois sources de données (Échantillons, Analyses usuelles, Capteurs hyperspectraux). Nos travaux ont permis d'en lever certains comme le montre la figure 2 et de proposer de potentielles solutions pour d'autres .

L'échantillon présentait un verrou avec son caractère déformable qui est partiellement levé grâce au recalage des images qui permet de corriger ses éventuelles déformations [1], mais les variations biochimiques à la surface de celui-ci ne peuvent être corrigées sans une connaissance des processus mis en jeu. Quant à l'exigence de sa conservation dans son état d'origine, il est possible d'y répondre totalement avec des approches qualitatives et semi-quantitatives,

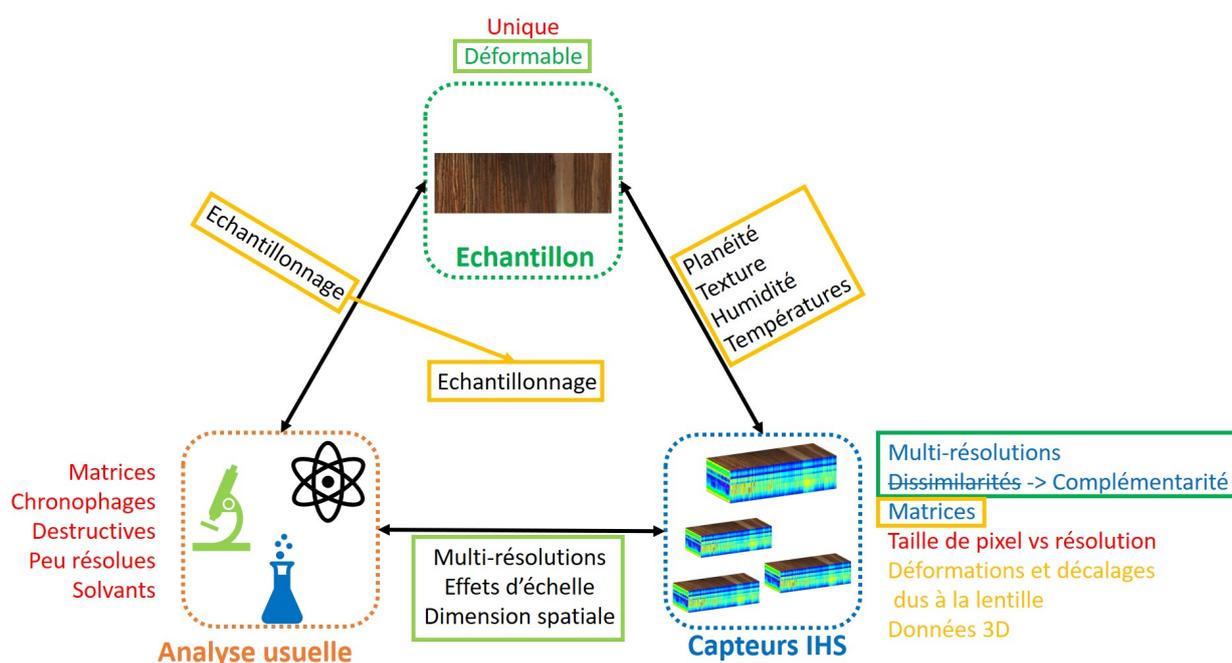


FIGURE 2 : Verrous identifiés au début des travaux, certains ont été levés (vert) et d'autres ont de possibles solutions à tester (orange)

ou partiellement en ayant une réflexion sur l'échantillonnage grâce aux informations précédentes.

Les capteurs spectroscopiques possèdent trois limites, deux ont été levées et une peut potentiellement l'être. Les deux limites de multi-résolutions et de dissimilarités des informations enregistrées dans les capteurs ont été levées grâce au recalage des images [1] qui a permis de les combiner à la plus basse des résolutions et d'autres approches pourront permettre de le faire à la plus haute des résolutions. Ceci a aussi permis de modifier cette caractéristique de dissimilarités en complémentarités des données par leurs associations.

Les limites liées aux **analyses usuelles** n'ont pas été au centre de nos travaux, elles n'ont donc pas été discutées. Mais ces analyses usuelles étant utilisées pour leur robustesse et précision, ces limites sont connues et acceptées. Mais à terme le souhait de la communauté des archives naturelles serait de garder intact les échantillons, ces limites disparaîtront si les méthodes non destructives s'imposent pour leurs analyses.

On a pu discuter des limites entre **les analyses usuelles et les capteurs spectroscopiques**. En effet, grâce au bootstrapping, échantillonnage aléatoire itératif, on a créé un lien entre les différentes résolutions. La corrélation surface-volume semble montrer que les informations enregistrées par les capteurs et par les méthodes usuelles sont similaires pour la MO et les paramètres texturaux, et donc que les effets d'échelle et de dimensions spatiales sont négligeables pour ces propriétés.

La limite liée **aux méthodes analytiques usuelles et aux échantillons** concernant un échantillonnage efficace et fiable peut être levée **grâce aux capteurs spectroscopiques**. Pour cela, on propose d'utiliser les informations semi-quantitatives présentes dans les spectres (chlorophylles, argiles minérales...), afin de déterminer un minimum de zones de l'échantillon à prélever pour créer une gamme de concentration pertinente, tout en englobant les variabilités sédimentaires qui peuvent perturber les modélisations.

Des propositions de solution pour les verrous entre **les capteurs spectroscopiques et les échantillons** ont été proposées. Comme l'ajout d'un capteur pour créer un modèle numérique de surface par lasergrammétrie ou photogrammétrie [2], afin d'estimer la distance capteurs-échantillons. Ceci permettra de retirer les pixels pouvant porter des informations incorrectes car n'étant pas à une distance correspondant à la profondeur de champ (intervalle de distances où les pixels sont pertinents) et d'estimer un modèle d'ajustement des intensités pour les normaliser en fonction de la distance. Un autre capteur comme une caméra thermique permettrait d'avoir une estimation de la température de surface pour corriger les données spectrales ou pour extraire des informations sur la composition de l'échantillon. Ensuite, deux contraintes physico-chimiques liés à la texture et à l'humidité peuvent potentiellement être modélisées directement à partir des données hyperspectrales et ainsi pouvoir ajuster les données spectrales ou les prédictions.

La contrainte entre **les deux méthodes analytiques et les échantillons** peut être levée en estimant précisément les coordonnées des zones d'échantillonnages. Pour cela, deux images doivent être prises avant et après ces manipulations à une résolution supérieure ou similaire à nos capteurs. Puis elles seront recalées spatialement avec les capteurs d'IHS, par exemple avec la méthode SIFT flow [1].

De nouvelles contraintes sont apparues au cours de nos travaux, avec notamment des **difficultés intrinsèques aux capteurs et les dimensions des données hyperspectrales**. La première contrainte est liée à la différence entre taille de pixel et résolution réelle qui induit une perte de qualité de la donnée spectrale et des estimations qui en découlent. Deux autres contraintes liées à la lentille induisent des déformations spatiales et des décalages de longueurs d'onde. Ces deux contraintes peuvent être corrigées par l'estimation des déformations avec une calibration spatiale de la caméra, et par une estimation des décalages des longueurs d'onde par l'acquisition d'un standard. Une autre contrainte est liée aux trois dimensions des données et les approches utilisées pour les analyser. En effet, nous avons principalement exploités les dimensions spatiales et spectrales séparément en deux étapes, alors que leurs utilisations conjointes en une étape peuvent permettre d'obtenir des résultats plus précis et rapides, comme pour le recalage des capteurs (SIFT 3D [3]) et les modélisations quantitatives et qualitatives (réseaux d'apprentissage profond, N-PLSR).

1.3 Les outils numériques développés

Au cours de nos travaux, de nombreuses routines ont été développées principalement avec le logiciel de programmation scientifique Matlab. Celles-ci ont soit été créées depuis zéro, soit elles utilisent des codes existants :

- Pour la création de modèles prédictifs quantitatifs à partir de données hyperspectrales et de données analytiques usuelles, celle-ci comprend des méthodes de rééchantillonnage, l'analyse en composantes principales pour la gestion des données aberrantes, des prétraitements spectraux pour corriger certains biais ou mettre en avant des informations discriminantes, la régression des moindres carrés partiels pour l'estimation du modèle, des algorithmes de sélection de variables pour ne garder que des longueurs d'onde discriminantes.
- Pour le recalage des images hyperspectrales à partir de l'algorithme SIFT flow [1]. Deux routines sont disponibles, une pour tester l'ensemble des longueurs d'onde et estimer le couple optimal, une autre qui effectue le recalage sur ces bandes optimales.

- Pour le test des méthodes de pansharpening appliquées aux données hyperspectrales. Un code a été adapté à partir de celui de Vivone regroupant 14 méthodes [4], et de Yokoya avec 8 méthodes [5]. Ceux-ci sont disponibles sur <http://openremotesensing.net>.
- Pour la création de modèles de classifications, une routine a été développée pour combiner les méthodes implémentées dans Matlab (DT, RF, NB, ANN), et adapter une méthode d'apprentissage profond proposé par Ben Hamida [6].
- Pour la détermination et le comptage des lamines à partir du recalage des lamines (SIFT flow) et de la segmentation implémentée dans Matlab. Des routines pour extraire des propriétés comme les profondeurs, le comptage, les épaisseurs a aussi été développée.
- Enfin, une routine utilisant Python et Photoscan, elle est discutée dans l'annexe B pour la création d'une image RGB orthorectifiée à haute résolution des carottes sédimentaires.

Toutes ces routines sont disponibles en ligne sur github.com/JacqKevin et ont été discutées dans leurs articles respectifs.

1.4 La reconstruction des paléo-environnements et paléo-climats

La problématique initiale de cette thèse était "comment le développement des méthodes d'analyses et de traitements peut permettre d'améliorer la résolution temporelle et la qualité des informations extraites des archives naturelles dans le but d'atteindre une compréhension des phénomènes d'occurrences annuelles voire sub-annuelles". Lors du chapitre 1, nous avons pris du recul sur celle-ci pour se focaliser sur le développement de méthodes pour l'analyse des images hyperspectrales pouvant servir à la problématique initiale. Mais comme on vient de le voir dans le récapitulatif des résultats de nos travaux, nos approches sont aptes à répondre à celle-ci.

On a pu estimer les matières organiques, la chlorophylle, les classes granulométriques, la distribution des particules, ainsi que la détermination des dépôts de la sédimentation continue et des évènements instantanés. Il est donc possible de combiner l'ensemble de ces résultats, comme le montre les figures 3 et 4. Les approches spatio-spectrales permettent avec ce type de capteurs de créer des profils temporels saisonniers de variables d'intérêt avec une gamme de variabilité estimée grâce à la variabilité interne des dépôts. De plus, l'utilisation combinée des différents proxies peut permettre d'estimer des informations supplémentaires. Par exemple la distribution des particules a permis d'estimer des sources d'apports sédimentaires et reconstituer la contribution de chacune d'elles dans les différentes lamines. L'imagerie hyperspectrale est donc une méthode analytique possédant de nombreux avantages en comparaison des méthodes usuelles, elle peut permettre de reconstruire l'environnement et le climat passés grâce aux informations spatio-spectrales qu'elle enregistre.

1. L'IMAGERIE HYPERSPECTRALE, UN OUTIL NOVATEUR POUR L'ANALYSE DES ARCHIVES ENVIRONNEMENTALES

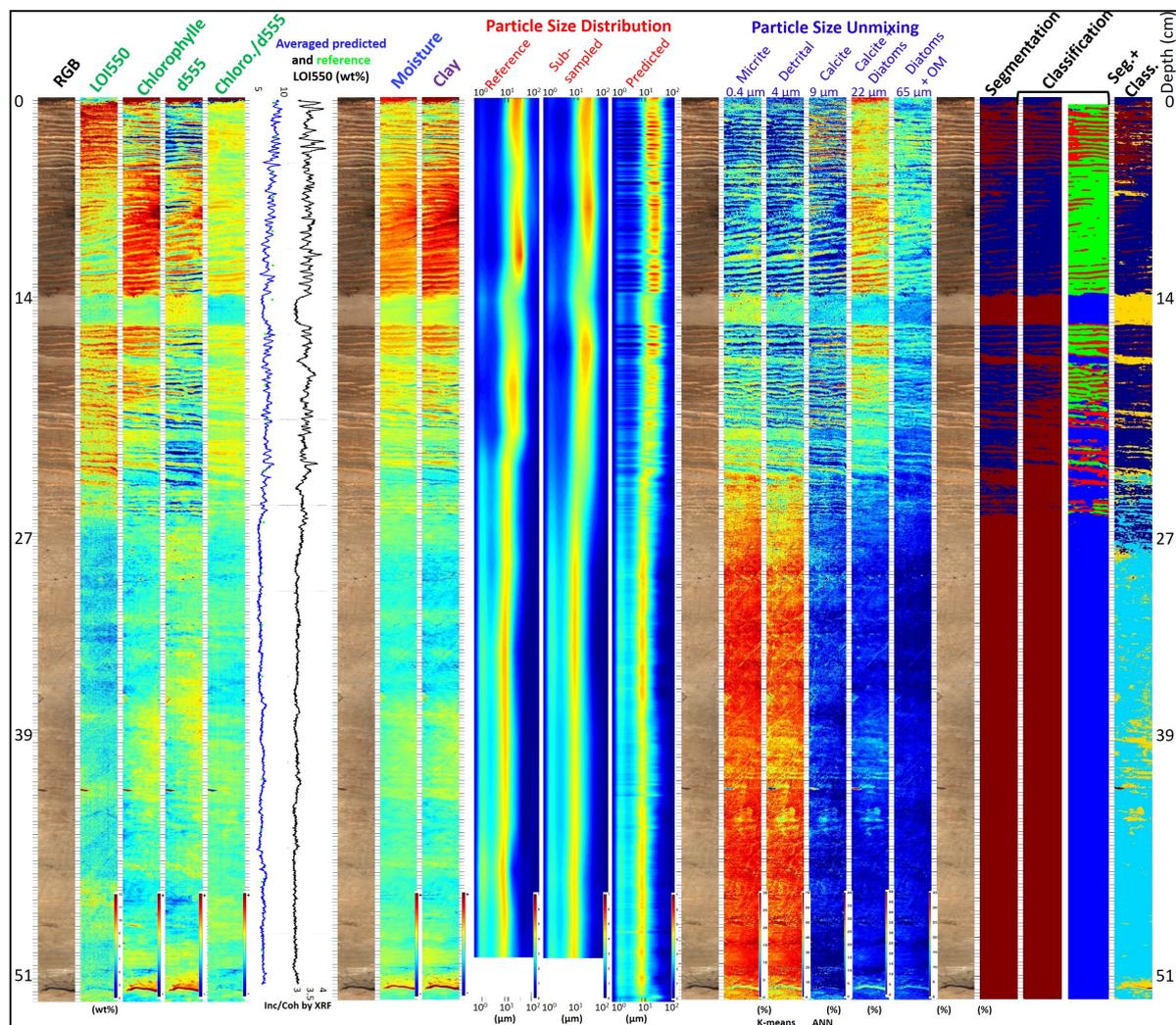


FIGURE 3 : Récapitulatif des résultats obtenus sur la carotte du Bourget (LDB09), extrait de mon poster présenté à l'EGU2019

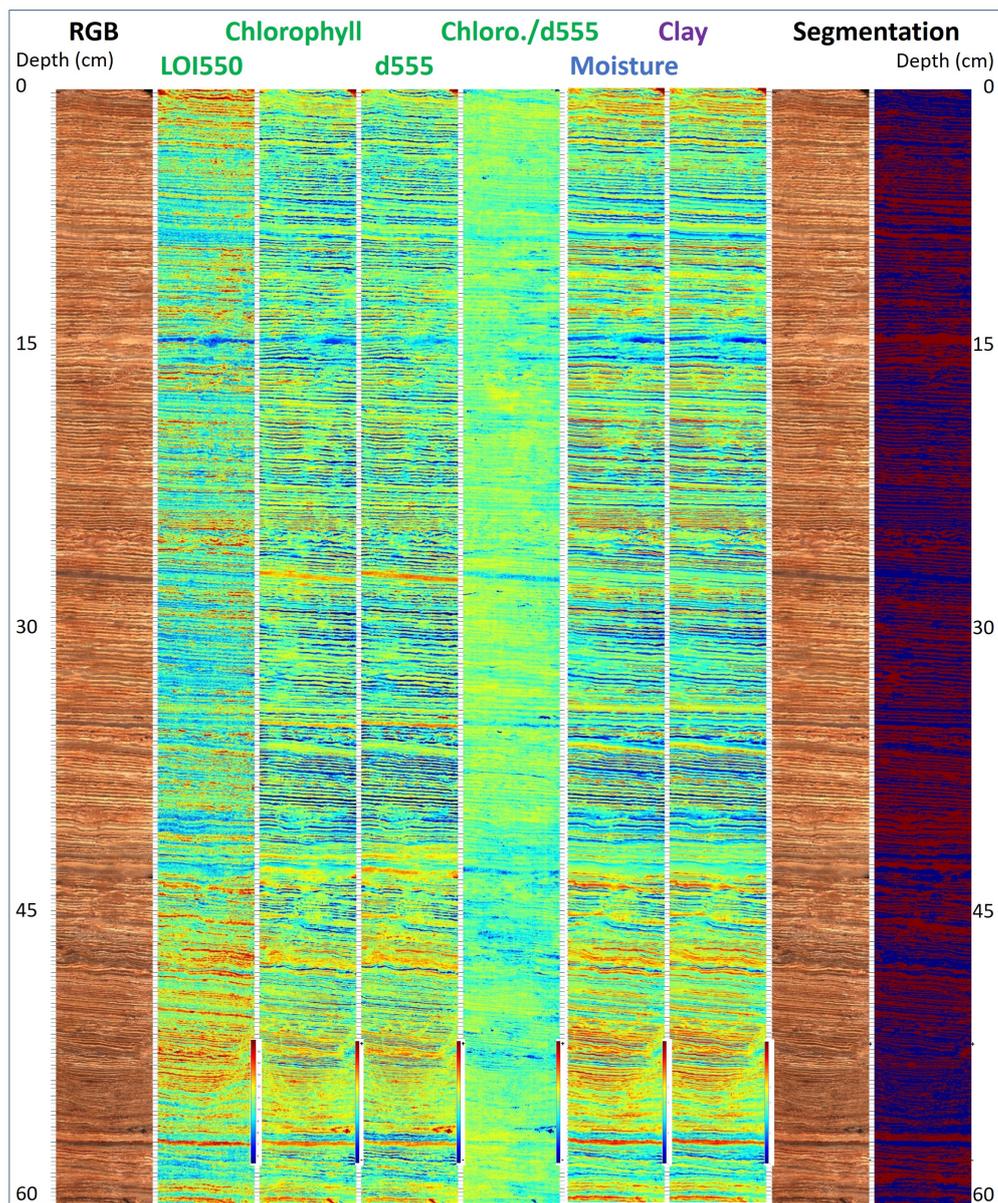


FIGURE 4 : Récapitulatif des résultats obtenus sur une section de la carotte d'Aiguebelette (AIG)

2 Des perspectives de développements des technologies et méthodes pour l'analyse à haute résolution

2.1 La transférabilité

Les méthodes développées pendant la thèse sont utilisables pour des études "site-spécifique". Mais les modèles calibrés avec un échantillon spécifique ne sont pas transférables à un autre site à cause des effets de matrice comme on a pu le voir avec dans les paragraphes 2.3 et 5.1. Pour autant dans la littérature, on trouve de nombreuses études sur les sols qui utilisent des échantillons prélevés à travers le monde et donc avec des effets de matrice importants, et ils utilisent les mêmes méthodes d'analyse des données que dans nos travaux [7, 8, 9]. Deux principales différences existent. D'une part, nos jeux de calibration site-spécifique sont relativement faibles pour certaines carottes sédimentaires ($n < 50$) et peuvent donc ne pas permettre d'apprendre les variabilités induites par la matrice sédimentaire. D'autre part, leur nombre d'échantillons est beaucoup plus important, ce qui permet d'ajouter et d'apprendre les variabilités induites par chacun d'eux. Il faudrait donc utiliser des échantillons provenant de différents lacs afin d'enregistrer et d'apprendre ces variabilités [10, 8]. Ainsi que normaliser différentes étapes pour pouvoir comparer les données entre elles, comme les protocoles d'analyse usuelle, les paramètres d'acquisition des hyperspectrales, identifier certaines propriétés des échantillons. Les travaux réalisés pour développer la base de données pour la caractérisation des sols par spectroscopie Vis-PIR [8] pourra nous servir de base. Une fois cette base de données créée, la PLSR semble pertinente pour modéliser les propriétés d'intérêt [7], mais on peut aussi se tourner vers les méthodes non linéaires pour modéliser les relations complexes présentes dans cette base de données, comme les réseaux de neurones, ou des méthodes basées sur des règles de similarités avant une étape de régression, comme avec la méthode MARS [9].

2.2 Les capteurs hyperspectraux pour l'analyse semi-quantitative et qualitative des échantillons naturels

Tant que les modèles de prédictions ne seront pas transférables, il faudra toujours échantillonner et donc détruire une large partie de ces archives naturelles uniques. Il sera aussi nécessaire de faire quelques prélèvements pour vérifier qu'il n'y a pas de dérives dans les prédictions lorsque les modèles seront transférables. Les méthodes supervisées quantitatives induisent donc une contrainte d'échantillonnage. Alors que les images hyperspectrales peuvent permettre d'extraire des informations semi-quantitatives et qualitatives qui conserveraient les échantillons dans leurs états d'origine. Les méthodes qui peuvent extraire des informations pertinentes sans l'utilisation de méthodes analytiques destructives sont les approches univariées, l'estimation de signaux purs et les méthodes de classification que nous avons très peu utilisées dans nos travaux, mais elles ont été citées à travers les paragraphes 1.1.1.2, 1.1.1.4 et 1.1.3.

Les indices univariés sont de bons indicateurs de certaines propriétés des échantillons, comme les chlorophylles ont pu le montrer pour la caractérisation de la productivité primaire du lac. D'autres pigments peuvent aussi être estimés de la même manière et ainsi induire des propriétés environnementales. Certains minéraux sont aussi actifs dans les gammes spectrales étudiées et peuvent donc nous en apprendre davantage sur les apports sédimentaires. Mais ces indices peuvent être impactés par des combinaisons d'absorption spectrale, c'est pourquoi un indice peut difficilement être spécifique d'un composé mais regroupe un panel d'information,

il faut donc prendre des précautions avec les conclusions qui pourront être tirées. Certains de ces indices (chlorophylle, d555 : oxydes, humidité et argiles minéralogiques) sont d'ailleurs utilisés dans les figures 3 et 4.

L'estimation des signaux purs prend quant à elle en compte la totalité du signal spectroscopique et donc les influences bio-physico-chimiques. Ils sont donc caractéristiques de chacun des échantillons étudiés, ainsi que des pôles de composés les constituant, d'où des interprétations parfois complexes. Pour cela, on peut se baser sur certaines absorptions caractéristiques, les comparer à des bibliothèques existantes tout en restant critique sur l'influence de la matrice sédimentaire sur le signal, ou encore les associer à des connaissances a priori sur l'échantillon, comme par exemple la présence localisée dans un dépôt spécifique. C'est ce type de méthodes que l'on retrouve principalement pour l'analyse des images hyperspectrales dans les communautés des archives naturelles.

Les méthodes de classification non-supervisées peuvent aussi détecter des groupes de spectres similaires, et comme les méthodes des signaux purs, être associées à des groupes de composés bio-physico-chimiques. En effet, ces méthodes se basent principalement sur des distances entre signaux, puis des critères de variances inter- et intra-groupes permettent d'optimiser leurs séparations, et les signaux moyens de chacun des groupes peuvent donc être rapprochés à des signaux purs. On peut aussi forcer l'association des groupes avec des connaissances a priori, comme visuellement avec les dépôts sédimentaires. Puis labelliser ces zones pour en apprendre les propriétés spectroscopiques avec des méthodes de classifications supervisées, puis les pixels non-labellisés sont rapprochés des classes apprises.

Toutes ces méthodes pour extraire des informations sans avoir recours à un échantillonnage destructif sont très intéressantes pour avoir de premières tendances sur les échantillons avant de les caractériser. Ces méthodes peuvent par ailleurs servir à aiguiller les expérimentateurs, afin de sélectionner d'éventuelles zones de prélèvements pour calibrer les variables semi-quantitatives, ou pour créer un modèle prédictif et avoir une gamme d'abondance large et variable d'une propriété d'intérêt donnée tout en limitant le nombre d'échantillons.

2.3 L'utilisation d'approches spatio-spectrales pour une analyse fine et complète des images hyperspectrales

Une grande majorité de nos travaux concernent l'exploitation de la dimension spectrale (1D) ou spatiales (2D), alors que les données hyperspectrales sont 3D. On a tout de même proposé quelques pistes pour une analyse en deux temps de ces données, d'abord sur une dimension, puis sur les deux autres, ou inversement. Mais il pourrait être judicieux à l'avenir de traiter les trois dimensions en une seule étape pour obtenir des résultats plus précis (spatialement et spectralement), directs et rapides. Toutes nos approches 1-2D peuvent donc servir de bases pour des développements 3D tant avec des modélisations quantitatives, des classifications, ou encore le recalage des images et leurs fusions.

L'approche 1-2D demande aussi à être approfondie, en effet, nous ne l'avons pas exploitée à son maximum. Comme l'a montré la figure 3, nous avons effectué différents types d'extraction d'information mais elles n'ont pas été employées simultanément pour reconstruire l'environnement et le climat passés. De plus, elles n'ont pas été comparées avec d'autres données environnementales à haute résolution, comme les informations météorologiques ou encore la qualité des eaux des lacs, ce qui permettrait d'ajouter une nouvelle dimension temporelle 1-2D-1t (1 spectrale, 2 spatiales, 1 temporelle).

2.4 L'estimation de données à haute résolution à partir de la fusion des données

Les méthodes employées dans nos travaux n'ont permis de combiner nos capteurs hyperspectraux qu'à la plus basse des résolutions. De nouveaux algorithmes peuvent potentiellement nous aider à les estimer à la plus haute des résolutions, ce qui permettrait d'étudier nos échantillons à une échelle très fine pouvant correspondre à des effets internes à une saison. Mais l'approche en deux temps peut aussi conduire à des estimations biaisées. Il faut donc avoir des critères de qualité pour l'étape de recalage des images comme l'UIQI et l'ERGAS, et comme dit précédemment utiliser des descripteurs SIFT 3D spatio-spectral. Ensuite, ces mêmes critères pourront être appliqués pour l'étape de fusion.

De plus, il pourrait être possible de modéliser avec des statistiques ou des probabilités, un lien entre des pixels correspondant aux mêmes zones sur différent capteurs, afin d'estimer les zones où la donnée n'existe pas pour un des capteurs. Ainsi, si l'on exploite cette hypothèse à son maximum, il serait possible d'estimer des images hyperspectrales pour les capteurs de type spectroscopiques linéaires ou ponctuelles, comme le montre la figure 5. Mais cette création de données implique de grosses incertitudes, car les capteurs n'enregistrent pas les mêmes informations bio-physico-chimiques et le bruit contenu dans chacun d'eux peut déstabiliser la modélisation et conduire à des estimations aberrantes. Cependant cette approche pourrait s'avérer intéressante pour gagner du temps lors des acquisitions, il faudrait comme pour la fusion d'image, des indicateurs pour estimer la qualité des estimations.

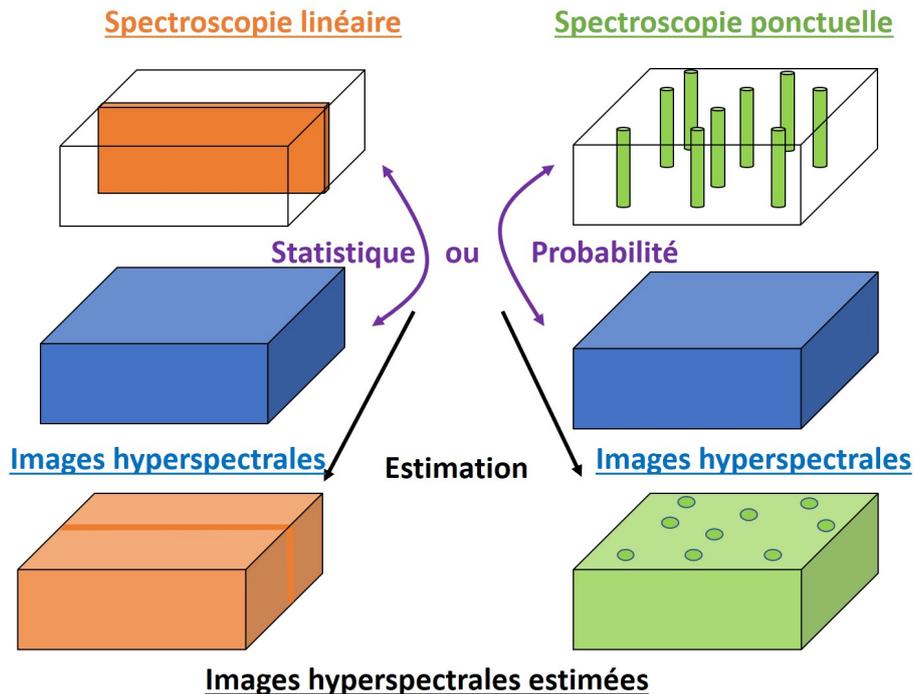


FIGURE 5 : Création d'images hyperspectrales à partir d'analyses spectroscopiques linéaires ou ponctuelles

2.5 Vers une automatisation des analyses des carottes

Comme on a pu le voir les approches multicapteurs sont très intéressantes pour obtenir un vaste panel d'information, c'est pourquoi il faut les coupler à des approches multi-méthodes d'analyse pour en extraire le maximum. Que ce soient des données spatiales avec les lamines

et les événements instantanés, qui permettent d'avoir une première idée de la temporalité de l'échantillon, ou que ce soient des données spectrales pour estimer des propriétés qualitatives, semi-quantitatives ou quantitatives. Et bien évidemment, on peut coupler les deux, pour avoir des tendances temporelles et non plus spatiales de certaines propriétés pour reconstruire le climat et l'environnement passés. Une fois les informations spatiales caractérisées, par exemple "lamine type A", on pourra étudier les variations de ces entités, et détecter par exemple des doubles blooms de diatomées certaines années, ou la période des crues, si elles sont printanières ou automnales. Toutes ces informations extraites peuvent aussi permettre de déterminer où effectuer des prélèvements pour des analyses destructives et ainsi calibrer des modèles prédictifs.

Plusieurs bancs multi-capteurs existent ou sont en cours de développement à notre connaissance :

- EDYTEM avec le projet PAMM (Plateformes d'Analyse Multi-Modules) : Appareils photos (RGB), Cartographie de fluorescences induites par laser (LIF), caméras hyperspectrales Visible-Proche (VNIR) et Moyen infrarouge (MIR) et Raman, Tomographie, fluorescence (XRF) des rayons X.
- Le Multi-Sensor Core Logger (MSCL) de Geotek (Angleterre) : Vitesse des ondes P, Densité gamma, susceptibilité magnétique, résistivité, appareil photo (RGB), spectrométrie gamma, caméras visible-proche infrarouge (VNIR), rayons X.
- Le projet européen SOLSA (Sonic Drilling Coupled With Automated Mineralogy and Chemistry) : caméras hyperspectrales Visible-Proche infrarouge (VNIR), ondes courtes (SWIR) et longues infrarouges (LWIR), fluorescence (XRF) des rayons X.
- Le HyLogger core logger développé par le Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation (CSIRO, Australie) qui est constitué de trois gammes spectrales visible (VNIR), proche-infrarouge (SWIR) et lointain infrarouge (LWIR). Il a été développé pour la caractérisation des minéraux des carottes de roches sédimentaires.
- Specim (entreprise finlandaise) a également développé une plateforme pour l'analyse des minéraux des carottes sédimentaires avec les gammes VNIR-SWIR-LSWIR appelé Sisurock.

Mais le plus souvent les capteurs sont analysés indépendamment des autres, du fait des difficultés de résolution et de la dimension des données (2D, 3D). Les années à venir promettent des avancées dans ces domaines.

L'engouement autour de ces bancs d'analyse multicapteurs montre bien l'intérêt de l'étude des archives naturelles à haute résolution, de manière non destructive et automatique. Leurs associations avec des méthodes d'analyse de données performantes, robustes et semi- ou automatiques promet la reconstruction du climat et de l'environnement passés à une résolution saisonnière et pour une durée d'analyse très réduite par rapport aux analyses actuelles.

Bibliographie

- [1] CE LIU, J. YUEN et A. TORRALBA. « SIFT Flow : Dense Correspondence across Scenes and Its Applications ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33.5 (2011), p. 978-994.
- [2] S. JAILLET, E. PLOYON et T. VILLEMEN. « Images et modèles 3D en milieux naturels ». In : *Collection EDYTEM* 12 (2011).
- [3] Y. LI et al. « A spatial-spectral SIFT for hyperspectral image matching and classification ». In : *Pattern Recognition Letters* 127 (2019), p. 18-26.
- [4] G. VIVONE et al. « A Critical Comparison Among Pansharpening Algorithms ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 53.5 (2015), p. 2565-2586.
- [5] N. YOKOYA, C. GROHNFELDT et J. CHANUSSOT. « Hyperspectral and Multispectral Data Fusion : A comparative review of the recent literature ». In : *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 5.2 (2017), p. 29-56.
- [6] A. BEN HAMIDA et al. « 3-D Deep Learning Approach for Remote Sensing Image Classification ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 56.8 (2018), p. 4420-4434.
- [7] N. K. WIJewardane et al. « Prediction of Soil Carbon in the Conterminous United States : Visible and Near Infrared Reflectance Spectroscopy Analysis of the Rapid Carbon Assessment Project ». In : *Soil Science Society of America Journal* 80.4 (2016), p. 973-982.
- [8] R. A. VISCARRA ROSSEL et al. « A global spectral library to characterize the world's soil ». In : *Earth-Science Reviews* 155 (2016), p. 198-230.
- [9] S. NAWAR et A. M. MOUAZEN. « Predictive performance of mobile vis-near infrared spectroscopy for key soil properties at different geographical scales by using spiking and data mining techniques ». In : *Catena* 151 (2017), p. 118-129.
- [10] B. STENBERG et al. « Visible and near infrared spectroscopy in soil science ». In : *Advances in Agronomy* 107 (2010), p. 163-215.

Table des abréviations

- ACP : Analyse en Composantes Principales
- AIG : lac d'Aigubelette
- ALO : lac d'Allos
- ANN : Artificial Neural Network - Réseau de Neurones Artificiels
- BR : Basse Résolution
- BT : Brovey transform
- CAH : Classification Ascendante Hiérarchique
- CART : Classification And Regression Tree - Arbre de Classification et de Regression
- CBPDN : Constrained Basis Pursuit DeNoising
- CLS : Constrained Least Squares - moindres carrés sous contraintes
- COW : Correlation Optimized Warping
- CNN : Convolutionnal Neural Network - Réseau de neurones profond par convolution
- CS : Component Substitution - Substitution de Composantes
- DRX : Diffraction des Rayons X
- DTW : Dynamic Time Warping - Déformation Temporelle Dynamique
- EM : EndMembers - Empreintes chimiques / Signaux Purs
- ERGAS : Erreur Relative Globale Adimensionnelle de Synthèse
- FCM : Fuzzy C-means - C-moyennes floues
- GS : Gram-Schmidt
- HAP : Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques
- HR : Haute résolution
- ICA : Independent Component Analysis - Analyse en Composantes Indépendantes

- IHS : Imagerie HyperSpectrale ou Intensity-Hue-Saturation - Intensité-Teinte-Saturation
- IR : InfraRouge
- KNN : K-Nearest Neighbor - K-plus proche voisins
- LDA : Lac d'Annecy ou Linear Discriminant Analysis - Analyse Discriminante Linéaire
- LDB : Lac Du Bourget
- LEM : Lac Léman
- LIF : Laser Induced Fluorescence - Fluorescence Induite par Laser
- LIR : Lointain InfraRouge (FIR Far Infrared)
- LOI : Loss On Ignition - Perte au feu
- LWIR : Long Wave Infrared - Infrarouge à longues ondes
- MARS : Multivariate Adaptive Regression Splines - Régression Multivariée par Spline Adaptative
- MIR : Moyen InfraRouge
- MO : Matière Organique
- MRA : Multi-Resolution Analysis - Analyse Multi-Résolution
- MWIR : Mid Wave Infrared - Ondes Moyennes Infrarouge
- PCR : Principal Component Regression - Régression sur Composantes Principales
- PIR : Proche InfraRouge (NIR Near Infrared)
- PLSR : Partial Least Squares Regression - Régression des moindres carrés partiels
- PPI : Pixel Purity Index - Indice de Pureté du Pixel
- RAFFT : Recursive Peak Alignment by FFT
- RLM : Régression Linéaire Multiple
- RLS : Régression Linéaire Simple
- RMN : Résonance Magnétique Nucléaire
- RSE : Résonance de Spin Électronique
- RSPA : Recursive Segmentwise Peak Alignment
- SAM : Spectral Angle Mapper
- SIFT : Scale-Invariant Feature Transform
- SURF : Speeded Up Robust Features

- SVM : Support Vector Machine - Machines à Vecteurs de Support
- SWIR : Short Wave Infrared - Infrarouge à courtes ondes
- TOC : Total Organic Carbon - Carbone Organique Total
- TPH : Total petroleum Hydrocarbon - Hydrocarbures pétroliers totaux
- TRES : Time Resolved Emission Spectroscopy - Spectroscopie d'Émission en Temps Résolu
- UIQI : Universal Image Quality Index - Index universel de qualité des images
- UV : Ultra-Violet
- VNIR : Visible Near InfraRed - Visible et Proche Infrarouge
- XRF : X-Ray Fluorescence - Fluorescence des rayons X

Table des matières

Résumé	ii
Abstract	iii
Remerciements	iv
Introduction et contexte général	1
1 État de l’art et méthodologies proposées	7
1.1 La spectroscopie et l’imagerie, des outils performants pour l’analyse des échantillons naturels	7
1.1.1 L’analyse spectrale pour mettre en lumière la composition des échantillons	8
Le spectre électromagnétique	8
Les méthodes univariées	10
Les régressions multivariées	11
L’estimation de signaux purs	16
1.1.2 La segmentation des images pour révéler les structures des archives sédimentaires	23
1.1.3 L’apprentissage automatique pour l’étude des échantillons naturels	26
1.1.4 La fusion de données pour combiner des données multi-capteurs	29
Le recalage des images	29
La fusion d’image	30
L’alignement de signaux	32
1.1.5 Conclusion	38
1.2 Objectifs des travaux et méthodologies proposées	40
1.2.1 Les matériels utilisés	40
Les capteurs d’imageries et spectroscopiques	40
Les échantillons étudiés	41
Les analyses quantitatives usuelles	42
Résumé	43
1.2.2 Les verrous et limites existants pour l’analyse des archives naturelles	44
1.2.3 Les méthodologies proposées	46
2 L’analyse spectrale mono-capteur des carottes sédimentaires	51
2.1 Les biais et incertitudes de l’analyse hyperspectrale	73
2.2 Les différences d’échelle spatiale	74
2.3 La transférabilité entre échantillons	75

3	Le recalage des images pour l'analyse spectrale multi-capteurs des carottes sédimentaires	81
3.1	La méthode de recalage des données pour une fusion "basse résolution"	82
3.1.1	Quelques remarques	105
3.1.2	Les recalages et alignements locaux en utilisant les dimensions spatio-spectrales	105
3.1.3	Les co-évolutions entre les capteurs	105
3.2	La fusion "basse résolution" pour l'analyse des archives sédimentaires	107
3.2.1	La comparaison de la prédiction avec les données VNIR, SWIR et VNIR - SWIR	131
3.2.2	Les argiles granulométriques et les argiles minérales	132
3.2.3	L'estimation de la granulométrie avec les dimensions spectrale et spatiales	132
3.2.4	L'évolution temporelle des modes purs et apparitions de modes locaux	133
4	La combinaison ou fusion des capteurs à la plus haute résolution	139
4.1	Les méthodes de fusion utilisées en télédétection	140
4.1.1	Des résultats supplémentaires	155
	La corrélation inter-capteur	155
	Les performances des méthodes de fusion pour chaque longueur d'onde	156
4.2	Des perspectives pour une fusion à haute résolution de capteurs de laboratoire	159
5	La dimension spatiale, une dimension informative pour l'analyse spatio-spectrale des archives naturelles	163
5.1	La détection d'événements instantanés par l'utilisation de méthodes d'apprentissage automatique	165
5.1.1	Des perspectives pour la détection automatique des crues	194
5.1.2	L'utilisation des informations granulométriques pour l'estimation des zones de crues	194
5.1.3	La combinaison de ces données pour estimer l'empreinte des crues . .	197
5.1.4	La création de base de données d'apprentissage pour des modèles de classifications	200
5.2	La détection des dépôts laminés pour l'ajout d'une dimension temporelle . .	202
5.2.1	Le développement de la méthode sur une section courte	203
5.2.2	Des observations sur une section longue	208
	Conclusions générales et perspectives	215
1	L'imagerie hyperspectrale, un outil novateur pour l'analyse des archives environnementales	216
1.1	Les approches développées au cours de nos travaux	216
1.2	Les verrous et limites levés et restant à lever	217
1.3	Les outils numériques développés	219
1.4	La reconstruction des paléo-environnements et paléo-climats	220
2	Des perspectives de développements des technologies et méthodes pour l'analyse à haute résolution	223
2.1	La transférabilité	223
2.2	Les capteurs hyperspectraux pour l'analyse semi-quantitative et qualitative des échantillons naturels	223

2.3	L'utilisation d'approches spatio-spectrales pour une analyse fine et complète des images hyperspectrales	224
2.4	L'estimation de données à haute résolution à partir de la fusion des données	225
2.5	Vers une automatisation des analyses des carottes	225
Table des abréviation		229
Table des matières		231
Table des figures		235
Liste des tableaux		239
Annexe		243
A	Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique	244
A.1	Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes multivariées	244
A.2	Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes pour l'estimation des signaux purs	252
A.3	Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes d'analyse d'image pour la détection des lamines et l'estimation de la granulométrie	255
A.4	Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes d'apprentissage automatique pour la classification des données	259
B	Les images RGB, une donnée simple à ne pas sous-estimer	262
C	Une méthode semi-automatique pour le comptage des lamines à partir d'images RGB d'archives solides naturelles	276

Table des figures

1	Six sphères représentant la Terre	1
2	Base de données de PAGES2k en 2017 [8]. Répartitions des différents échantillons en fonction (a) du type d'archives naturelles, (b) de la résolution temporelle, (c) de la capacité d'enregistrement	3
3	Cycle du carbone qui montre les sources d'apport sédimentaire potentiel pour l'océan, qui sont similaires pour un lac [22]	4
1.1	Spectre électromagnétique divisé en gammes spectroscopiques courantes avec une représentation schématique du mode d'excitation [1]	9
1.2	Représentation schématique des méthodes de régression	13
1.3	Zones spectrales discriminantes de la matière organique, de l'humidité, de l'argile et du sable. (Spectre USGS du minéral Illite [50])	15
1.4	Représentation des données dans un espace 2D par un simplexe correspondant à un triangle	17
1.5	Détection des lamines utilisant les opérations morphologiques [5]	23
1.6	Représentation schématique des méthodes d'apprentissage automatique	27
1.7	Niveau de fusion, (a) Bas, (b) Moyen, (c) Haut (schéma adapté de [14])	30
1.8	Schéma des principales méthodologies de fusion au niveau pixel	32
1.9	Méthodes d'analyse spatiales et spectrales, ainsi que les informations pouvant en être extraites	38
1.10	Diagramme récapitulatif des méthodes à utiliser en fonction de la question étudiée et du/des capteur(s)	39
1.11	Analyse spatiale de l'échantillon et de l'image hyperspectrale à plusieurs niveaux	39
1.12	Matériels et données utilisés pendant la thèse	43
1.13	Situation de la thèse dans les études paléo-climatiques et paléo-environnementales, approche locale et non globale	44
1.14	Principaux verrous identifiés avec les matériels utilisés	45
1.15	Plan du manuscrit	47
1.16	Diagramme ternaire résumant les résultats de chaque chapitre	48
2.1	Approches proposées pour sous échantillonner les données hyperspectrales pour correspondre aux analyses usuelles	52
2.2	Validations quantitatives d'un modèle PLS (a) lors de l'étape d'estimation du modèle en fonction du type de sous-échantillonnage, (b) lors de son utilisation	53
2.3	Effet de (a) l'humidité et de (b) la taille des particules sur les spectres Vis-PIR de sédiment (images de [8])	73

TABLE DES FIGURES

2.4	Enchainements des étapes pour prédire l'abondance ou la classe d'un pixel avec des données destructrices (a) héritées ou (b) définies avec l'IHS	74
2.5	Proposition d'une méthode pour le choix des zones d'échantillonnage avant l'utilisation des analyses destructrices usuelles	75
2.6	Changement d'échelle en laboratoire et en télédétection entre un pixel (carré) et un échantillonnage (cercle)	76
2.7	Récapitulatif de quelques modèles estimés avec la caméra SWIR	76
2.8	Longueurs d'onde sélectionnées pour les trois modèles LOI550	77
2.9	Modèles développés pour la propriété LOI550 (matière organique) avec les corrélations entre prédits (dispersion vert) et observés (points oranges), en ligne les trois échantillons (LDB, LDA, LEM), en colonne les trois modèles créés pour chaque lac et transférés sur les autres (LDB, LDA, LEM)	77
3.1	(a) Image RGB et cartes d'abondance estimés avec chacun des capteurs hyperspectraux : (b) VNIR, (c) SWIR, (d) VNIR-SWIR pour la carotte A . . .	131
3.2	(a) Image RGB et cartes d'abondance estimées sur une région d'intérêt avec chacun des capteurs hyperspectraux : (b) VNIR, (c) SWIR, (d) VNIR-SWIR pour la carotte A	132
3.3	Comparaison des profils de la classe granulométrique des argiles (bleu) et des argiles minérales (orange, bande 2200 nm)	133
3.4	Utilisation des approches d'estimation de la granulométrie avec les deux dimensions spatiales et spectrale	133
3.5	Étude des résidus du démelange granulométrique (rouge : résidu positif, bleu : résidu négatif; en %)	134
4.1	Corrélation intercapteurs (VNIR-SWIR) avec la bande la plus corrélée (optimale) ou par régression linéaire (synthétisée)	155
4.2	(a) Corrélation entre les longueurs d'onde des deux capteurs déterminer la longueur d'onde VNIR optimale et les (b) coefficients de la combinaison linéaire des longueurs d'onde VNIR liée à chaque plan SWIR	156
4.3	UIQI calculés pour les différentes longueurs d'onde SWIR estimées à HR puis dégradé à BR	157
4.4	ERGAS calculées pour les différentes longueurs d'onde SWIR estimées à HR puis dégradé à BR	157
4.5	Fonctionnement de l'interpolation et des méthodes de fusion	158
5.1	(a) Image RGB de la carotte LDB09, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur), (d) carte quantitative des argiles granulométriques (modèle PLS)	195
5.2	(a) Image RGB de la carotte LEM10, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur)	195
5.3	(a) Image RGB d'une région d'intérêt de la carotte ALO09, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur) . . .	196
5.4	(a) Image RGB d'une région d'intérêt de la carotte LDB17, (b) carte de classification (bleu = crue, jaune = non crue), (c) carte semi-quantitative des argiles minérales (2200 nm, bleu = faible valeur, rouge = haute valeur) . . .	196

TABLE DES FIGURES

5.5	Cartes de classification obtenues avec la méthode CNN des 3 types d'images hyperspectrales	198
5.6	Longueurs d'onde discriminantes pour les modèles DT (bleu au-dessous) et ANN (avec un nombre de neurones croissant entre 2-10)	199
5.7	Localisation et emplacement du carottage, bathymétrie, affluents et effluents du lac d'Aiguebelette	202
5.8	Méthodologie proposée se basant sur deux branches parallèles, la première permettant d'aligner les lamines, la seconde segmentant ces dépôts	203
5.9	(a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte semi-quantitative et (c) profil médian de la chlorophylle à partir de l'indice $Area_{650-700}$; zone d'intérêt sélectionnée pour l'image suivante en encadré	204
5.10	(a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte semi-quantitative et (c) profil médian de la chlorophylle sur la à partir de l'indice $Area_{650-700}$ dans la zone d'intérêt	204
5.11	Quatre étapes de la méthode proposée pour la détection des lamines. (a) Image RGB de la région d'intérêt, (b) alignement et (c) segmentation des lamines, (d) comparaison des deux cartes de classification (jaune = lamines claires - printemps / été, bleu = lamines foncées - hiver, vert = incertitudes)	205
5.12	Épaisseurs (a-c) des lamines de printemps et d'été, (b-d) des lamines d'hiver sur tout l'échantillon et sur une zone d'intérêt. A courbe de tendance a été ajoutée pour estimer des cycles	206
5.13	(a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte d'abondance quantitative de la MO, (c) carte semi-quantitative de la chlorophylle	207
5.14	(a) Image RGB de l'échantillon, (b) carte d'abondance quantitative de la MO, (c) carte semi-quantitative de la chlorophylle sur une région d'intérêt	208
5.15	(a) Image RGB de la carotte d'Aiguebelette (7 m), Cartes et profils (b-d) semi-quantitatifs de la chlorophylle et (c-e) quantitative de la LOI550 (courbe bleue : prédiction de l'IHS, points oranges : points de calibration destructifs); limites d'unités stratigraphiques avec des lignes en pointillées (vertes : travaux de Durain [21] qui sont en accord avec nos observations, noires : propositions de nouvelles unités)	209
1	Diagramme ternaire des différentes approches méthodologiques développées dans nos travaux	215
2	Verrous identifiés au début des travaux, certains ont été levés (vert) et d'autres ont de possibles solutions à tester (orange)	218
3	Récapitulatif des résultats obtenus sur la carotte du Bourget (LDB09), extrait de mon poster présenté à l'EGU2019	221
4	Récapitulatif des résultats obtenus sur une section de la carotte d'Aiguebelette (AIG)	222
5	Création d'images hyperspectrales à partir d'analyses spectroscopiques linéaires ou ponctuelles	225

Liste des tableaux

1.1	Découpages de la gamme infrarouge suivant la norme ISO 20473 et ceux utilisés usuellement	8
1.2	Capteurs utilisés (2 XRF différentes, (a) Avaatech, (i) Itrax) et paramètres d'acquisition (en analyse usuelle * ou pour nos problématiques **). A noter : les pixels sont considérés carrés d'où une unique valeur pour la résolution spatiale, sauf pour le capteur XRF ou il s'agit d'un rectangle	41
1.3	Carottes sédimentaires utilisées dans ces travaux et capteurs les ayant analysées	42
1.4	Analyses destructives réalisées et dépôts caractérisés	42
3.1	Comparaison de notre étude avec deux autres sur le même site d'étude . . .	135
4.1	Zones spectrales corrélées entre les deux capteurs VNIR et SWIR	156
5.1	Comparaison des 6 types d'images avec une modélisation CNN pour le jeu de données combinés	197
5.2	Comparaison des 5 méthodes de classification pour le jeux de données combinés	198
5.3	Comparaison des 3 méthodes optimales pour la prédiction des quatre échantillon	199
5.4	Optimisation du réseau de neurones profond sur la base du rappel avec les paramètres liés aux nombres de neurones dans la couche de pooling (compression), le taille du patch et sa structure (noirs : modèles non estimés, rouges : résultats non significatifs)	200
5.5	Unités stratigraphiques proposées et leurs caractéristiques (* niveau d'abondance)	210
A.1	Récapitulatif des modèles proposés pour estimer la matière organique	244
A.2	Récapitulatif des modèles proposés pour estimer la matière organique	245
A.3	Récapitulatif des modèles proposés pour estimer les propriétés structurales des échantillons	246
A.4	Récapitulatif des modèles proposés pour estimer les nutriments disponibles .	247
A.5	Récapitulatif des modèles proposés pour estimer les pollutions organiques . .	248
A.6	Récapitulatif des modèles proposés avec la combinaison de capteurs dans la littérature)	249
A.7	Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes de démelange pour des données de laboratoire	252
A.8	Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes de démelange pour des données aéroportées	253

LISTE DES TABLEAUX

A.9	Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'analyse d'image pour la détection des lamines	255
A.10	Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'analyse d'image pour l'estimation de la granulométrie	256
A.11	Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'apprentissage automatique pour la classification des données	259
A.12	Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'apprentissage automatique pour la classification des données	260

Annexe

A Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique

A.1 Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes multivariées

Les tableaux ci-dessous récapitulent les différentes références utilisées pendant la thèse. Ils montrent les performances de prédictions pour la création de modèles prédictifs multivariés avec différents types de données spectroscopiques, ainsi que méthodes d'analyse.

Variable	Échantillon	Domaine	Capteur	Régression	Prétraitement	Performances		Remarques	Réf.
						R^2_{cal}	R^2_{val}		
SOC	Sol (3793)	Vis-PIR	Spectro	CNN	Aucun	0.84	?		[1]
				SVM	SNV	0.82	?		
				PCA-ANN	SNV	0.83	?		
				PLSR	SNV	0.82	?		
MO	Sédiment (20)	PIR	IHS	PLSR (6)	Autoscale	0.96	0.90	Sélection des zones vers 1200 nm, 1600 nm, 1800 nm, 2100-2300 nm. Humidité perturbe la modélisation.	[2]
				PLSR	?	0.92	0.78		
SOM	Sol (585)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (6)	?	0.86	0.85		[4]
				PCR (4)	?	0.83	0.81		
				SVM (32)	?	0.90	0.88		
MO	Sol (>20000)	Vis-NIR	Spectro	CNN	?	0.756		[5]	
SOC	Sol (595)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	CR	?	0.81		[6]
				PCR	CR	?	0.80		
				RLM	SNV	?	0.79		
				SVM	SVG	?	0.80		
				ANN	SNV	?	0.79		
TOC	Sol (46)	PIR	Spectro	PLSR (2)	SNV+D2	0.99	0.83	Échantillons humides ou secs peuvent être combinés.	[7]

TABLE A.1 : Récapitulatif des modèles proposés pour estimer la matière organique

Variable	Échantillon	Domaine	Capteur	Régression	Prétraitement	Performances		Remarques	Réf.
						R^2_{cal}	R^2_{val}		
OC	Sol (127)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (6)	D2	0.90	0.92	Sélections des zones vers 700 nm, 1400 nm, 2200-2300 nm.	[8]
			Spectro	PLSR (9)	?	0.94	?		
OC	Sol (42)	Vis-PIR HyMap	IHS	PLSR (10)	?	0.85	?	Sélection des zones vers 500 nm, 1400 nm, 1700 nm, 2200 nm.	[9]
			Spectro	PLSR	SNV	?	0.71		
SOC	Sol (434)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	CR	?	0.90		[10]
						SVM	CR		
SOC	Sol (299)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (6)	D2	0.77	?		[11]
				SVM (80)	D2	0.79	?		
TC	Sol (529)	Vis-PIR	Spectro	MARS (25)	D2	0.88	?		[12]

TABLE A.2 : Récapitulatif des modèles proposés pour estimer la matière organique

Variable	Échantillon	Domaine	Capteur	Régression	Prétraitement	Performances		Remarques	Réf.
						R_{cal}^2	R_{val}^2		
Argile	Sol (96)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	?	0.89	0.89		[3]
Argile	Sol (>20000)	Vis-PIR	Spectro	CNN	?	0.836	?		[5]
Argile	Sol (128)	VNIR-SWIR	IHS	PLSR (4)	?	0.77	0.77		[13]
Argile	Sol (127)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (3)	D2	0.92	0.96	Sélections des zones vers 1900 nm, 2200-2300 nm	[8]
Argile	Sol (434)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	D2	?	0.78	Zones influentes : 500-610, 760-850, 1370-1430, 1870-1900, 2130-2220 nm.	[10]
Silt	Sol (96)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	?	0.92	0.85		[3]
Silt	Sol (127)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (4)	D2	0.86	0.87	Sélections des zones vers 500 nm, 1900 nm, 2100-2400 nm.	[8]
Silt	Sol (434)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	SNV	?	0.36		[10]
Sable	Sol (96)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	?	0.92	0.86		[3]
Sable	Sol (127)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (4)	D2	0.92	0.93	Sélections des zones vers 1900 nm, 2200-2300 nm.	[8]
Sable	Sol (434)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	Savgol	?	0.62	Zones influentes : 400-830, 1890-1980, 2110-2240, 2330-2470 nm.	[10]

TABLE A.3 : Récapitulatif des modèles proposés pour estimer les propriétés structurales des échantillons

Variable	Échantillon	Domaine	Capteur	Régression	Prétraitement	Performances		Remarques	Réf.								
						R^2_{cal}	R^2_{val}										
HAP (Phe, Pyr)	Sol artificiel	LIF	Spectro	PLSR		0.99	?	Laser 266 nm. Zones importantes : 377-460 nm.	[14]								
										TN	Sol (585)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (6)	?	0.85	0.82
														PCR (5)	?	0.82	0.78
				SVM (38)	?	0.89	0.86										
TN	Sol (529)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (6)	D2	0.74	?		[12]								
				SVM (81)	D2	0.76	?										
				MARS (30)	D2	0.87	?										
TP	Sol (585)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (7)	?	0.77	0.72		[4]								
				PCR (5)	?	0.73	0.69										
				SVM (45)	?	0.86	0.76										

TABLE A.4 : Récapitulatif des modèles proposés pour estimer les nutriments disponibles

Variable	Échantillon	Domaine	Capteur	Régression	Prétraitement	Performances		Remarques	Réf.
						R_{cal}^2	R_{val}^2		
TPH	Sol (72)	MIR	Spectro	RLS	?	?	0.38	Zones importantes : 3000-2800 cm^{-1} (MIR), 2300 nm. (NIR)	[15]
				RLM			?		
				PLSR (9)			?		
				RLS			?		
				PLSR (9)			?		
TPH	Sol (85)	Vis-PIR	Spectro	PLSR	D1	0.63	0.54	Zones discriminantes : 1400 nm et 1900 nm (eau), 1650-1800 nm (liaisons C-H), 2100-2300 nm (minéraux et organiques)	[16]
TPH	Sol dopé	Vis-PIR	Spectro	PLSR (6)	D1	0.92	0.83	Zones discriminantes : 1450 nm et 1950 nm (eau), 2150-2300 nm (minéraux et organiques)	[17]
HAP	Sol (150)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (6)	D1	0.86	0.89		[18]
HAP (Phe)	Sol (150)	Vis-PIR	Spectro	PLSR (10)	D1	0.65	0.83	Zones discriminantes : 950 nm et 1950 nm associés aux liaisons O-H (eau), 700 nm et 1700 nm associés à des liaisons organiques, 2200 nm (argiles minérales)	[18]
HAP (Phe, Pyr)	Sol artificiel	LIF	Spectro	PLSR	?	0.99	?	Laser 266 nm. Zones importantes : 377-460 nm.	[14]

TABLE A.5 : Récapitulatif des modèles proposés pour estimer les pollutions organiques

Variable	Échantillon	Domaine	Capteur	Régression	Prétraitement	Performances		Remarques	Réf.
						R^2_{cal}	R^2_{val}		
TOC	Sol (89)	Vis	Spectro	PLSR (6)	?	0.77	?	Sélections des zones vers 400-550 nm, 1400 nm, 1800 nm, 2100-2300 nm.	[19]
		PIR		PLSR (6)		0.72	?		
		SWIR		PLSR (4)		0.78	?		
		VIS+PIR+SWIR		PLSR (7)		0.78	?		
OC	Sol (89)	Vis	Spectro	PLSR (5)	?	0.85	?	Sélections des zones vers 400-550 nm, 700 nm, 1000 nm, 1400 nm, 1800 nm, 2100-2300 nm.	[20]
		PIR		PLSR (11)		0.82	?		
		SWIR		PLSR (4)		0.84	?		
		VIS+PIR+SWIR		PLSR (9)		0.88	?		
TPH	Sol	Vis-PIR	Spectro	PSR	D1	?	0.70		[20]
		Vis-PIR + XRF				?	0.78		

TABLE A.6 : Récapitulatif des modèles proposés avec la combinaison de capteurs dans la littérature)

Bibliographie

- [1] X. ZHANG et al. « DeepSpectra : An end-to-end deep learning approach for quantitative spectral analysis ». In : *Analytica Chimica Acta* 1058 (2019), p. 48-57.
- [2] K. JACQ et al. « High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core ». In : *Science of the Total Environment* 663 (2019), p. 236-244.
- [3] J. A. M. DEMATTÊ et al. « Soil analytical quality control by traditional and spectroscopy techniques : Constructing the future of a hybrid laboratory for low environmental impact ». In : *Geoderma* 337 (2019), p. 111-121.
- [4] S. XU et al. « Comparison of multivariate methods for estimating selected soil properties from intact soil cores of paddy fields by Vis-NIR spectroscopy ». In : *Geoderma* 310 (2018), p. 29-43.
- [5] L. LIU, M. JI et M. BUCHROITHNER. « Transfer learning for soil spectroscopy based on convolutional neural networks and its application in soil clay content mapping using hyperspectral imagery ». In : *Sensors* 18.9 (2018), p. 1-18.
- [6] A. C. DOTTO et al. « A systematic study on the application of scatter-corrective and spectral-derivative preprocessing for multivariate prediction of soil organic carbon by Vis-NIR spectra ». In : *Geoderma* 314 (2018), p. 262-274.
- [7] E. TAMBURINI et al. « Effects of moisture and particle size on quantitative determination of total organic carbon (TOC) in soils using near-infrared spectroscopy ». In : *Sensors* 17.10 (2017), p. 1-15.
- [8] S. KATUWAL et al. « Combining X-ray Computed Tomography and Visible Near-Infrared Spectroscopy for Prediction of Soil Structural Properties ». In : *Vadose Zone Journal* (2017), p. 1-13.
- [9] M. VOHLAND et al. « Quantification of soil properties with hyperspectral data : Selecting spectral variables with different methods to improve accuracies and analyze prediction mechanisms ». In : *Remote Sensing* 9.11 (2017), p. 1-24.
- [10] É. PINHEIRO et al. « Prediction of Soil Physical and Chemical Properties by Visible and Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy in the Central Amazon ». In : *Remote Sensing* 9.4 (2017).
- [11] A. C. DOTTO et al. « Two preprocessing techniques to reduce model covariables in soil property predictions by Vis-NIR spectroscopy ». In : *Soil and Tillage Research* 172 (2017), p. 59-68.
- [12] S. NAWAR et A. M. MOUAZEN. « Predictive performance of mobile vis-near infrared spectroscopy for key soil properties at different geographical scales by using spiking and data mining techniques ». In : *Catena* 151 (2017), p. 118-129.
- [13] C. GOMEZ et al. « Sensitivity of clay content prediction to spectral configuration of VNIR/SWIR imaging data, from multispectral to hyperspectral scenarios ». In : *Remote Sensing of Environment* 204 (2018), p. 18-30.
- [14] C. K. LEE et al. « Partial Least Square Regression Method for the Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Soil Environment Using Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy ». In : *Water, Air, & Soil Pollution* 158.1 (2004), p. 261-275.

- [15] N. WARTINI, P. BRENDAN et M. BUDIMAN. « Rapid assessment of petroleum-contaminated soils with infrared spectroscopy ». In : *Geoderma* 289 (2017), p. 150-160.
- [16] R. K. DOUGLAS et al. « Rapid prediction of total petroleum hydrocarbons concentration in contaminated soil using vis-NIR spectroscopy and regression techniques ». In : *Science of the Total Environment* 616-617 (2018), p. 147-155.
- [17] R. K. DOUGLAS et al. « Evaluation of vis-NIR reflectance spectroscopy sensitivity to weathering for enhanced assessment of oil contaminated soils ». In : *Science of the Total Environment* 626 (2018), p. 1108-1120.
- [18] R. N. OKPARANMA et A. M. MOUAZEN. « Visible and Near-Infrared Spectroscopy Analysis of a Polycyclic Aromatic Hydrocarbon in Soils ». In : *The Scientific World Journal* 2013 (2013), p. 1-9.
- [19] J. PEÓN et al. « Evaluation of the spectral characteristics of five hyperspectral and multispectral sensors for soil organic carbon estimation in burned areas ». In : *International Journal of Wildland Fire* 26.3 (2017), p. 230-239.
- [20] S. CHAKRABORTY et al. « Development of a hybrid proximal sensing method for rapid identification of petroleum contaminated soils ». In : *Science of The Total Environment* 514 (2015), p. 399-408.

A.2 Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes pour l'estimation des signaux purs

Les tableaux ci-dessous récapitulent les différentes références utilisées pendant la thèse. Ils montrent les possibilités de caractérisation des empreintes structurales avec différent types de données spectroscopiques, ainsi que méthodes d'analyse.

Buts	Échantillon	Domaine	Capteur	Méthode	Remarques	Réf.
Comparaison de signaux d'échantillons du bassin versant avec des EMs extraient de données IHS	Sédiment lacustre	VNIR	IHS (lab.)	PPI+SAM	Attribution des EMs extraient grâce aux signaux de terrain	[1]
Comparaison de signaux d'échantillons purs avec les spectres d'IHS	Roche	VNIR+SWIR	IHS (lab.)	CMIM+SVM	CMIM permet de réduire le nombre d'EMs extraient sur la base de leur similarité	[2]
Extraction d'EM de roche pour la création d'une librairie	Roche sédimentaire	SWIR	IHS (lab.)	FCLS / SUnSAL / CLSunSAL	Vérification de la minéralogie avec de la XRD	[3]
Estimer les composants au sol	Sol	ASTER	IHS (lab.)	ICA		[4]
Estimer la minéralogie au sol	Sol	AVIRIS	IHS (lab.)	RCMF, VCA, CLUnSAL	Les méthodes RCMF et VCA donnent des meilleurs résultats que la méthode sparse CLUnSAL qui utilise une librairie. Ceci montre que les méthodes sparse peuvent ne pas être pertinentes si les librairies ne sont pas en accords avec les données acquises.	[5]
Estimation de la minéralogie du sol avec l'extraction d'EMs puis comparatif avec la librairie de l'USGS	Sol	VNIR+SWIR	IHS (lab.)	Mica	Validation avec des données XRD cohérentes	[6]

TABLE A.7 : Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes de démixage pour des données de laboratoire

Buts	Échantillon	Domaine	Capteur	Méthode	Remarques	Réf.
Déterminer la lithologie des échantillons de manière automatique	Sol bitumineux	MIR + SWIR + LWIR	Spectro et IHS (lab.)		Créer une librairie avec le MIR pour classer les pixels LWIR et SWIR par co-enregistrement. Pixels indéterminés peuvent correspondre à d'autres composés.	[7]
Estimation de la minéralogie du sol à partir de drone et d'une librairie	Sol	AVIRIS	IHS (drone)	SAM+ANN		[8]
Estimation de la minéralogie du sol avec l'extraction d'EMs avec deux capteurs pris séparément ou ensemble	Sol	SWIR+LWIR	IHS (drone)	ISMA	Attribution avec des données XRD de laboratoire. La fusion des deux cartes de classification permet d'obtenir d'avantage d'informations minérales.	[9]
Comparatif de méthodes d'extraction d'EMs pour caractériser la minéralogie du sol	Sol	AVIRIS	IHS (drone)	VCA / MVSA / MCR-ALS		[10]
Comparatif de méthodes d'extraction d'EMs pour caractériser la minéralogie du sol	Sol	AVIRIS	IHS (drone)	VCA / N-FINDR / DFA		[11]
Description de la scène à partir de l'estimation d'EMs	Sol	AVIRIS	IHS (drone)	Local Rank + MCR-ALS	Extraction d'EM en tenant compte de l'environnement spatial avec l'approche rank local. Cela améliore les prédictions qu'une MCR-ALS standard.	[12]
Détermination de zones spectrales discriminantes	Sol	LIR	IHS (drone)			[13]

TABLE A.8 : Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes de démixage pour des données aéroportées

Bibliographie

- [1] A. VAN EXEM et al. « New source-to-sink approach in an arctic catchment based on hyperspectral core-logging (Lake Linné, Svalbard) ». In : *Quaternary Science Reviews* 203 (2019), p. 128-140.
- [2] F. J. GALDAMES et al. « Rock lithological classification by hyperspectral, range 3D and color images ». In : *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 189 (2019), p. 138-148.
- [3] T. BUI et al. « Building a Hyperspectral Library and its Incorporation into Sparse Unmixing for Mineral Identification ». In : *IGARSS 2018 - 2018 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. IEEE, 2018, p. 4261-4264.
- [4] Z. BEN RABAH et al. « A New Spectral Unmixing Approach based on ICA and Spectral Angle Measure for Hyperspectral Images ». In : *5th International Conference : Sciences of Electronic, Technologies of Information and Telecommunications* (2009), p. 8.
- [5] N. AKHTAR et A. MIAN. « RCMF : Robust Constrained Matrix Factorization for Hyperspectral Unmixing ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 55.6 (2017), p. 3354-3366.
- [6] F. KOERTING et al. « Drill core mineral analysis by means of the hyperspectral imaging spectrometer Hypspec, XRD and ASD in proximity of the Mýtina Maar, Czech Republic ». In : *ISPRS - International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences* XL-1-W5 (2015), p. 417-424.
- [7] M. A. SPETA. « Hyperspectral imaging for the characterization of Athabasca oil sands core ». Thèse de doct. Alberta, 2016.
- [8] R. N. ADEP, S. AMBA et H. RAMESH. « EXhype : A tool for mineral classification using hyperspectral data ». In : *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing* 124 (2017), p. 106-118.
- [9] J. FENG, D. ROGGE et B. RIVARD. « Comparison of lithological mapping results from airborne hyperspectral VNIR-SWIR, LWIR and combined data ». In : *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation* 64 (2018), p. 340-353.
- [10] X. ZHANG et R. TAULER. « Application of Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares (MCR-ALS) to remote sensing hyperspectral imaging ». In : *Analytica Chimica Acta* 762 (2013), p. 25-38.
- [11] C. ZHANG et al. « Endmember extraction from hyperspectral image based on discrete firefly algorithm (EE-DFA) ». In : *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing* 126 (2017), p. 108-119.
- [12] X. ZHANG, A. de JUAN et R. TAULER. « Local rank-based spatial information for improvement of remote sensing hyperspectral imaging resolution ». In : *Talanta* 146 (2016), p. 1-9.
- [13] C. HECKER et al. « Mapping the wavelength position of mineral features in hyperspectral thermal infrared data ». In : *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation* 79 (2019), p. 133-140.

A.3 Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes d'analyse d'image pour la détection des lamines et l'estimation de la granulométrie

Les tableaux ci-dessous récapitulent les différentes références utilisées pendant la thèse. Ils montrent les possibilités avec des méthodes d'analyse d'image pour la détection des lamines et l'estimation de la granulométrie.

Échantillon	Image	Méthode	Remarques	Réf.
Carotte sédimentaire	Rayons-X	Détection des maxima et des minima	Détection à partir de 3 pixels minimum. Compte sur toute l'image, mais estime un variation moyenne.	[1]
Carotte sédimentaire	RGB	Détection des maxima (année) ou les passages à 0 (saison) du niveau de gris	Moyenne une ligne avec quelques voisins, puis passage en niveau de gris. Calcul aussi l'épaisseur des lamines.	[2]
Roche sédimentaire	Niveau de gris	Transformée en ondelette, détection des contours par gradient, transformée de Hough.	Segmenter les lamines et estimer leur déformation.	[3]
Échantillons laminés	RGB	Détection des minima et maxima	L'utilisateur définit la ou les zone(s) de calcul.	[4]
Roche sédimentaire	RGB	Transformée de Fourier ou en Ondelettes		[5]
	RGB	Transformée de Hilbert pour détecter les maxima et minima des niveaux de gris		[6]

TABLE A.9 : Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'analyse d'image pour la détection des lamines

Échantillon	Image	Méthode	Remarques	Réf.
Sédiments composites	RGB	Autocorrélation sur image en niveau de gris		[7]
Sédiments	RGB	Transformée en ondelettes et sa densité spectrale		[8]
Sédiments	RGB	Gradient et seuillage	Normalisation et égalisation des niveaux de gris.	[9]
Sédiments	RGB	Ligne de partage des eaux		[10]
Sédiments	RGB	Autocorrélation		[11]
Sédiments	RGB	Autocorrélation		[12]
Sédiments	RGB	Autocorrélation		[13]
Roches fragmentées	RGB	Gradient + Ligne de partage des eaux		[14]
Sédiments	RGB	Chapeau haut de forme + Ligne de partage des eaux	Sur image en niveau de gris.	[15]
Sédiments	RGB	Autocorrélation		[16]
Sédiments	RGB	H-maxima	Sur images en niveaux de gris.	[17]
Sédiments, Roches	RGB sur microscope	Seuillage puis détection		[18]

TABLE A.10 : Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'analyse d'image pour l'estimation de la granulométrie

Bibliographie

- [1] E. DAMCI et M. N. ÇAĞATAY. « An automated algorithm for dating annually laminated sediments using X-ray radiographic images, with applications to Lake Van (Turkey), Lake Nautajarvi (Finland) and Byfjorden (Sweden) ». In : *Quaternary International* 401 (2016), p. 174-183.
- [2] M. E. WEBER et al. « BMPix and PEAK tools : New methods for automated laminae recognition and counting-Application to glacial varves from Antarctic marine sediment ». In : *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 11.3 (2010).
- [3] T. QUINIOU et al. « Calculation of Bedding Angles Inclination from Drill Core Digital Images. » In : *MVA2007 IAPR Conference on Machine Vision Applications* (2007), p. 252-255.
- [4] M. C. MEYER, R. FABER et C. SPÖ TL. « The WinGeol Lamination Tool : new software for rapid, semi - automated analysis of laminated climate archives ». In : *The Holocene* 16 (2006), p. 753-761.
- [5] N. SELMAOUI et al. « Image analysis for core geological descriptions : strata and granulometry detection ». In : *Proceedings of the 17th International Conference on Pattern Recognition*. T. 4. IEEE, 2004, 305-310 Vol.4.
- [6] I. RUPF et G. RADONS. « New approaches for automated data processing of annually laminated sediments ». In : *Nonlinear Processes in Geophysics* 11.56 (2004), p. 599-607.
- [7] Z. CHENG et H. LIU. « Digital grain - size analysis based on autocorrelation algorithm ». In : *Sedimentary Geology* 327 (2015), p. 21-31.
- [8] D. BUSCOMBE. « Transferable wavelet method for grain-size distribution from images of sediment surfaces and thin sections, and other natural granular patterns ». In : *International Association of Sedimentologists* (2013).
- [9] P. BAPTISTA et al. « A new and practical method to obtain grain size measurements in sandy shores based on digital image acquisition and processing ». In : *Sedimentary Geology* (2012).
- [10] T. LEWIS et al. « An automated system for the statistical analysis of sediment texture and structure at the micro scale ». 2010.
- [11] J. A. WARRICK et al. « Cobble cam : grain-size measurements of sand to boulder from digital photographs and autocorrelation analyses ». In : *Earth Surface Processes and Landforms* 34.13 (2009), p. 1811-1821.
- [12] D. BUSCOMBE. « Estimation of grain-size distributions and associated parameters from digital images of sediment ». In : *Sedimentary Geology* 210.1-2 (2008), p. 1-10.
- [13] P. L. BARNARD et al. « Field test comparison of an autocorrelation technique for determining grain size using a digital ' beachball ' camera versus traditional methods ». In : *Sedimentary Geology* 201 (2007), p. 180-195.
- [14] S. OUTAL. « Quantification par analyse d'images de la granulométrie des roches fragmentées : amélioration de l'extraction morphologique des surfaces, amélioration de la reconstruction stéréologique ». Thèse de doct. 2006.
- [15] GRAHAM, D. J. RICE et I. REID. « Automated sizing of coarse-grained sediments : image-processing procedures ». In : *Mathematical Geology* 37.1 (2005), p. 1-28.

- [16] D. M. RUBIN. « A simple autocorrelation algorithm for determining grain size from digital images of sediment ». In : *Journal of Sedimentary Research* 74.1 (2004), p. 160-165.
- [17] N. SELMAOUI et al. « Coupled strata and granulometry detection on indurated cores by gray-level image analysis ». In : *Geo-Marine Letters* 24.4 (2004), p. 241-251.
- [18] P. FRANCUS. « An image-analysis technique to measure grain-size variation in thin sections of soft clastic sediments ». In : *Sedimentary Geology* 121.3 (1998), p. 289-298.

A.4 Tableaux récapitulatifs de la synthèse bibliographique des méthodes d'apprentissage automatique pour la classification des données

Les tableaux ci-dessous récapitulent les différentes références utilisées pendant la thèse. Ils montrent les possibilités d'apprentissage automatique tant avec des données spectrales que spatiales.

Buts	Échantillon	Domaine	Capteur	Dimension	Remarques	Réf.
Classifier chaque pixel au sol pour caractériser la scène	Sol	ROSI, AISA	IHS (drone)	Spectral	Labellisation, puis réduction par démélange (VCA et ICA) et classification (K-means et SVM)	[1]
Classifier chaque pixel au sol pour caractériser la scène	Sol	AVIRIS	IHS (drone)	Spatio-Spectral	Extraction de caractéristique spatiale, réduction spectrale par démélange, classification en utilisant les deux types de données.	[2]
Classifier chaque pixel au sol pour caractériser les types de sol d'une parcelle	Sol	VNIR+SWIR	IHS (drone)	Spectral	Réduction des données avec SAM et un gradient par rapport à une spectre pur, puis classification avec K-means dans cet espace 2D SAM-Gradient.	[3]
Classifier chaque pixel au sol pour caractériser la scène	Sol	AVIRIS	IHS (drone)	Spatio-Spectral	Création d'un réseau de neurones profond convolutif (CNN) pour apprendre la classe du pixel avec son environnement.	[4]

TABLE A.11 : Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'apprentissage automatique pour la classification des données

Buts	Échantillon	Domaine	Capteur	Dimension	Remarques	Réf.
Classifier chaque pixel de la carotte sédimentaire pour retrouver des dépôts volcaniques	Sédiment	VNIR	IHS (lab.)	Spectral	Création d'un réseau de neurones (ANN) pour apprendre la signature des dépôts volcaniques.	[5]
Discriminer les lamines pour les compter	Sédiment	RGB	Image (lab.)	Spectral	Création d'un modèle neuro-fuzzy pour apprendre les types de lamines (à partir du niveau de gris et de sa dispersion).	[6]
Discriminer les lamines pour les compter	Sédiment	RGB	Image (lab.)	Spectral	Création d'un modèle KNN pour apprendre les types de lamines (dans un espace RGB ou $L^*a^*b^*$).	[7]

TABLE A.12 : Récapitulatif de résultats utilisant des méthodes d'apprentissage automatique pour la classification des données

Bibliographie

- [1] A. VILLA. « Advanced spectral unmixing and classification methods for hyperspectral remote sensing data ». Thèse de doct. 2012.
- [2] M. HAN et C. ZHANG. « Spectral-spatial classification of hyperspectral image based on discriminant sparsity preserving embedding ». In : *Neurocomputing* 243 (2017), p. 133-141.
- [3] Y. OGEN, N. GOLDSHLEGER et E. BEN-DOR. « 3D spectral analysis in the VNIR–SWIR spectral region as a tool for soil classification ». In : *Geoderma* 302 (2017), p. 100-110.
- [4] A. BEN HAMIDA et al. « 3-D Deep Learning Approach for Remote Sensing Image Classification ». In : *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 56.8 (2018), p. 4420-4434.
- [5] I. F. AYMERICH et al. « Detection of Tephra Layers in Antarctic Sediment Cores with Hyperspectral Imaging ». In : *PLOS ONE* 11.1 (2016). Sous la dir. de J. A. COLES, p. 1-24.
- [6] T. EBERT et M. H. TRAUTH. « Semi-automated detection of annual laminae (varves) in lake sediments using a fuzzy logic algorithm ». In : *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology* 435 (2015), p. 272-282.
- [7] M. NDIAYE et al. « A Semi Automated Method for Laminated Sediments Analysis ». In : *International Journal of Geosciences* 3 (2012), p. 206-210.

B Les images RGB, une donnée simple à ne pas sous-estimer

Même si les données spectroscopiques sont très informatives, les images RGB standards ne doivent pas être oubliées. C'est pourquoi une méthode a été développée au sein du laboratoire pour créer une image à haute résolution des carottes sédimentaires (article en cours d'écriture). La taille maximale standard de ces échantillons est d'1,5m. Une image unique de cela correspondrait à une taille de pixel supérieure à 0.5 mm, soit peu résolu. C'est pourquoi de multiples images de sous-zones sont acquises avec une surface de recouvrement. Ensuite le recalage des images est réalisé grâce à des marqueurs uniques calibrés et le logiciel Agisoft Photoscan, récemment renommé Agisoft Metashape. Ces marqueurs ont des formes circulaires qui sont uniques, afin que le logiciel les repère et leur attribue un code spécifique qui est ensuite associé à une position géométrique définie par un repère 3D. Il est défini grâce aux réglets ajustés sur les côtés de l'échantillon, afin d'avoir des coordonnées métriques en x (longueur), y (largeur), z (hauteur, fixée à 0 pour forcer l'échantillon à être plan). Ensuite quatre étapes sont effectuées :

- Un alignement à basse résolution pour vérifier la qualité de la modélisation.
- Un alignement à haute résolution ou nuage dense, pour recalibrer plus précisément les images.
- L'estimation d'un modèle 3D ou maillage, pour déterminer les possibles variations en z comme les trous, les aspérités de surface, les grains, les macro-restes.
- L'estimation de l'image orthorectifiée, grâce au nuage dense et au maillage, permet d'obtenir une image finale la moins déformée par les variations de surface et la plus homogène avec l'ajustement des couleurs et contrastes.

Cette méthode de laboratoire peut aussi être utilisée sur le terrain, par la création d'un repère manuel avec des points de contrôles. Ainsi la méthode a été testée avec des images de smartphone et le repère fixé comme en laboratoire sur des réglets.

Cette image orthorectifiée peut ensuite ouvrir des possibilités :

- La création de log stratigraphiques avec une vraie métrique pour mesurer les différents dépôts et unités sédimentaires. Ainsi que pour référencer des zones à prélever par la suite.
- Avec les méthodes d'analyse d'image, il est possible de caractériser chaque structure sédimentaire (lamines, dépôts instantanés, grains). Par exemple, avec un réseau de neurones simples et des zones déterminées par un utilisateur pour apprendre ces structures. Ensuite par reconnaissance de forme, il est possible de créer un modèle de discrimination et le propager sur la totalité de l'image. Enfin, la délimitation de chaque structure permet de les caractériser (épaisseur, direction, variations internes).
- Cette image peut aussi servir pour la fusion avec des données hyperspectrales et ainsi augmenter la résolution spatiale de ces dernières. Avec les capteurs utilisés pendant la thèse, il n'y a pas de recouvrement spectral strict. Dans le cas d'une image orthorectifiée et d'un capteur VNIR, il y a un recouvrement pour ces 3 bandes, ce qui devrait aider lors des calculs de fusion.

An automatic method to create a high-resolution metrically calibrated image of large environmental sample: application to sediment cores

Kévin Jacq^{1,2}, Claire Blanchet¹, William Rapuc¹, Cécile Pignol¹, Estelle Ployon³, Didier Coquin², Bernard Fanget¹

1 Univ. Grenoble Alpes, Univ. Savoie Mont Blanc, CNRS, EDYTEM, 73000 Chambéry, France

2 Laboratoire d'Informatique, Systèmes, Traitement de l'Information et de la Connaissance (LISTIC), Université Savoie Mont-Blanc, 74944 Annecy Le Vieux Cedex, France

3 UMR-PACTE-CNRS, Grenoble Alpes University, Grenoble, France

Corresponding Author:

Kévin Jacq

UMR CNRS 5204 Environnements, Dynamiques et Territoires de la Montagne (EDYTEM)

Université Savoie Mont Blanc, Campus scientifique,

73376 Le Bourget du Lac cedex, France

kevin.jacq@univ-smb.fr

Abstract

Image acquisition for environmental samples is the first step realized to save the primary colors information before disturbing it with other analysis. Despite this, in many cases, no post processing of this image is made to extract information. Whereas image processing can describe structures inside the sample and measure them. The improvement of RGB cameras allows to obtain a high-resolution metrically calibrated picture and that shows great possibilities. The way to obtain this image need to process several raw images. We propose a method that uses metrically calibrated targets for an automatic assembly with Agisoft Photoscan software and a Python script. The method was used for sediment cores that can be 1.5 m long and it shows less distortion than images assembled without markers. The images taken without the calibrated targets can also be used by manually positioning points that can be then metrically calibrated, this can be very useful for smartphone images taken in the field. Many applications can follow with this image for sediment cores, as a metric stratigraphic log to describe the sample by unit, using image processing to study and measure structures, or using data fusion to add other dimensions (volume, spectral, temporal) to this image to study structural variations.

Keywords: High resolution, Automatic image assembly, Orthorectification, Sediment cores, PhotoScan, Python

Introduction

The study of environmental process needs samples that degrade once taken. Image processing in RGB have many advantages (fast, cheap, simple) to extract their primary information (colors, shapes, edges). Some other analysis methods can be as fast and more informative, but they have drawbacks if the spatial resolution is not enough. Even if images are often made, they are not always exploited later to extract information. Nevertheless, many methods of image processing now allow to do so, and these images can be important for other data processing. The improvement of the camera technologies allows to obtain high resolution images with micrometric pixels that can improve the knowledge of the sample.

Some samples have pseudo-periodic structures associated with natural cycles (seasons, annual or even multi-annual cycles) or with instantaneous events (floods, avalanches, eruptions). Several studies have tried to identify and count these annual structures (Meyer *et al.* (2006); Weber *et al.* (2010); Ndiaye *et al.* (2012); Ebert and Trauth (2015); Zolitschka *et al.* (2015)). The main difficulty encountered by these studies is the resolution of the image to have enough pixel thick to differentiate the structures. There are also the structural and spatial variations that induce lamina discontinuities, changing shapes, inhomogeneous colors. The determination of the texture of the sample can also be made by the detection of the edges of the particles on the microscope image (Francus *et al.* (2002); Lewis *et al.* (2010)) or with standard image (Rubin (2004); Baptista *et al.* (2012)). As for the detection of structures, the main difficulty for the detection of particle is the resolution.

The high-resolution image has also a great interest for data fusion of laboratory sensors. In remote sensing, studies were made to improve the spatial resolution of multispectral sensors (nD with $n < 100$) with a high resolution 2D image. These methods are called pansharpening, they estimate the similar high frequency (details of the image as edges, corners) inside the two image sensors to increase the spatial resolution of the lower resolution sensor from the high resolution one (Alparone *et al.* (2007); Vivone *et al.* (2015)). In the medical domain, the combination of several 2D image sensors (Magnetic resonance imaging, X-ray imaging, Computer Tomography) is an important field of study to improve knowledge of a patient's pathology (Pappachen James and Dasarathy (2014); Du *et al.* (2016)). Recently in remote sensing with the new hyperspectral sensors (nD with $n > 100$), pansharpening methods were improved to fused panchromatic, multi- and hyper-spectral images with new methods called hypersharpening (Selva *et al.* (2014); Yokoya *et al.* (2017)). Based on these studies, the high-resolution image of an environmental sample can be the base for a fusion with other laboratory sensors.

The high-resolution images obtain with recent camera allow to have micrometric pixels for a small sample. For a larger sample, the simpler way is to raise the camera and therefore decrease the resolution. The other way is to make several images of it and then to assemble them. This method needs several processes which can be manually long and add metric uncertainties. We propose a semi-automatic method to create a high-resolution metrically calibrated image. This method is essentially based on markers metrically calibrated. It also uses

the software Agisoft Photoscan and a Python script, but it can be afterwards easily transposed with free and open source software. The method was used in this study for sediment core sample images. The proposed methodology was discussed for a use in the field with smartphone images. Finally, image processing and data fusion applications with these images are realized.

1 Materials and methods

1.1 Image acquisitions

The acquisition of the cores was made with a 2.5 meters manual translation bench and a Nikon D80 camera with a AF Nikkor 35 mm lens (figure 1). The camera has 10.2 megapixels and was commercialized since 2006. An image covers a sediment length of 16 cm (pixel size of 35 μm), a translation of 4 cm was fixed to have enough recovery (each area is present in four images). The camera acquisition parameters were fixed to have the same conditions for all the images. Two halogen tubes (GE Polylux XL, F18W/860) were used to illuminate the sample and all other light sources are stopped. They were fixed at 20 cm height and calibrated to have the maximum of light in the center and the same dispersion across the two sides of the core. The camera was fixed at a height of 32 cm to have his lens parallel to the sample. Under these conditions, the depth of field was 3 cm. The camera calibration was made to estimate geometric corrections (square pixels). The white balance is also made to have true colors. Rulers were added on both sides of the core to estimate depth of sediment structures.

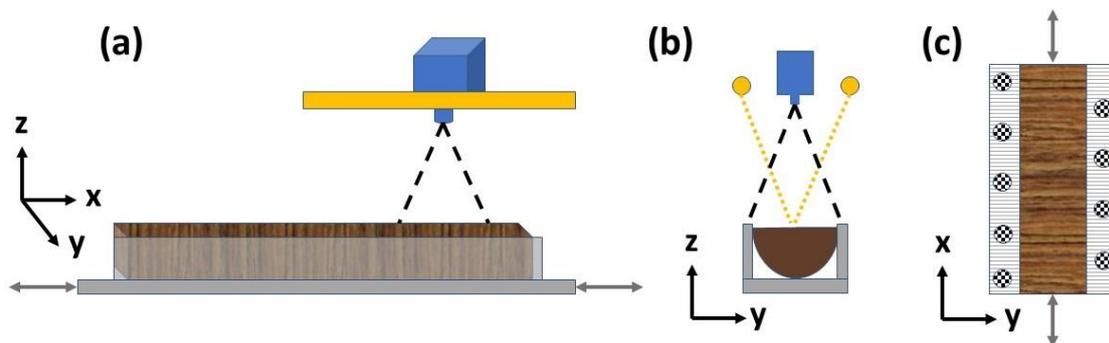


Figure 1: Schemas of the sediment core image acquisition bench: (a) Side view; (b) Cutting view; (c) Top view

1.2 Referenced markers

The coded targets are printed markers from the software that are placed on the rulers (figure 1.c). Each of them is different and must be depth calibrated. We assumed that the sediment cores are horizontal to create a plane coordinate system ($z = 0$).

The coded targets must be printed on a material which does not damage and stay clean due to the sediment and water. It also must not reflect light because the algorithm can be disturbed. For these reasons, an adhesive matte paper was chosen.

The targets must be at a size comparable to the sample, the image must see the entire marker and mainly the central black circle, our markers have a diameter of 1cm. These targets need to be square cut keeping in mind that the targets are circles on a white background. They must be placed flat and with at least three markers by raw image (5 cm distance in our bench).

1.3 Automatic assembly and orthorectification

The images with the markers were then corrected, aligned, 3D modelled and orthorectified with Agisoft Photoscan (Agisoft LLC (2018)), recently renamed Metashape, and Python scripts in less than 15 minutes. The figure 2 present the four steps of the method that are described below.

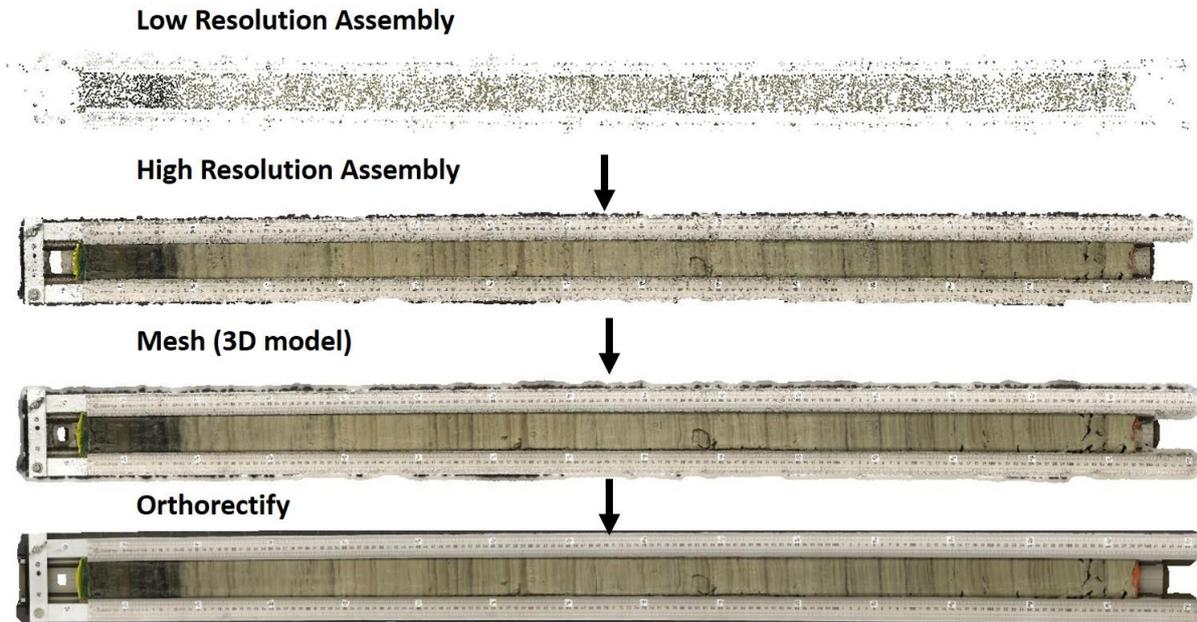


Figure 2: The four steps of the proposed method to obtain a high metrically calibrated image

1.3.1 Image corrections

The images present geometric aberrations that induce non-truly square pixels, these were due to the lens distortions. This can be seen in the curved shape of the image (figure 3). The camera calibration was used to correct them with the estimation of the distortions. For that, a checkerboard was imaged under different angles and the software Agisoft Lens use all the corner of the squares to estimate the distortions.

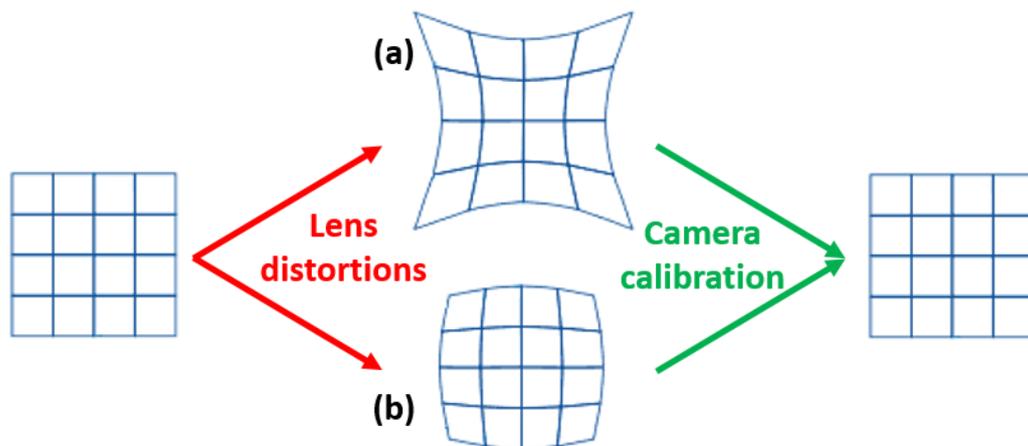


Figure 3: Lens distortions may cause (a) Barrel or (b) Pincushion distortions that can be corrected with a camera calibration

1.3.2 Registration and assembly

Each image was registered with the next ones thanks to the metrically calibrated markers. The Photoscan algorithm also searches other points that were recovered between images, but these were not metrically calibrated. The assembly was made first at low resolution and then at high resolution (dense cloud) thanks to these points and the markers. The low one was faster to calculate and allows to see if the assembly was correctly planned as the sample. If the proposed method does not use markers, a curved shape can appear due to cumulative errors of pixel positions in x, y and z that can be seen with the background axis of the figure 4.a. If the user was not satisfied by the model, points can be manually added to help the algorithm in some areas. When it was optimized, the high-resolution model can be calculated (dense cloud).

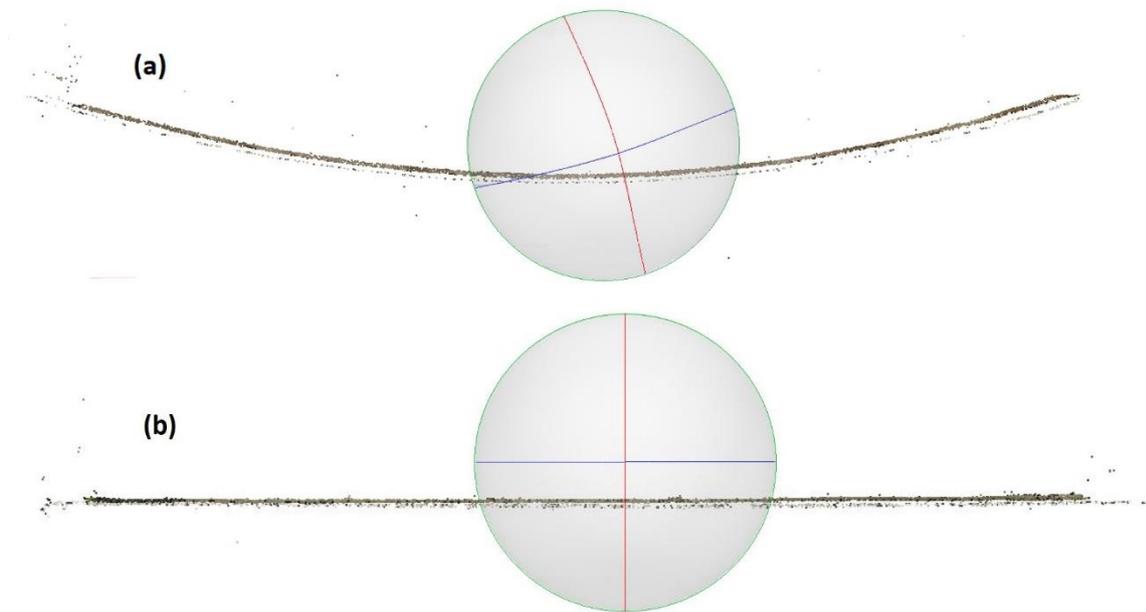


Figure 4: Results of the low-resolution assembly, (a) without and (b) with markers registration. The background trackball represents the axis of the image (blue=x=length, green=y=width, red=z=height).

1.3.3 Mesh and orthorectification

The surface variations were estimated with a mesh to obtain 3d shapes. The algorithm uses the recovery between the images to estimate the variations in z, like grains, holes, agglomerates, bumps. Finally, the orthorectified image was estimated from the mesh (z variations) and the dense cloud (x and y variations), that allow to correct from every variation. A homogenization of the saturation of the colors and the contrasts was also made to have a continuous and homogeneous image.

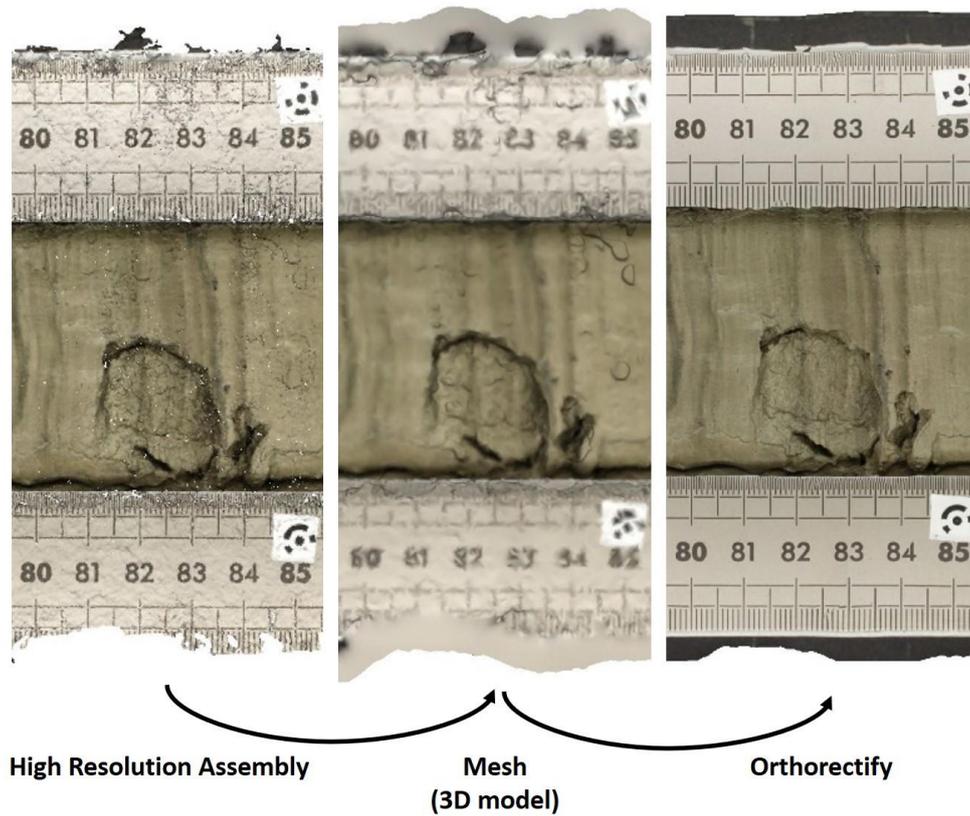


Figure 5: Three main steps of the orthorectification on a zoom area

2 Discussion

2.1 Using this method with manual targets and other type of image acquisition
 This method can also be used for all types of image acquisition like smartphone images. Obviously, the depth calibrated markers are not available, so the user must add them manually for all raw images and calibrate their depths. Then the methodology follows the same steps as presented before.

The depth must be estimated in the center of the raw images, because of the distortions that are more important in the edges. The assembly corrects these distortions and allows to reveal surface variations that were not seen in a single image thanks to the mesh step. This can be seen between figure 6.a and figure 6.c on the right, in the raw image it seems to be smooth, but in the assembled one there are variations. Another effect can be the correction of reflections like between figure 6.d and figure 6.e thanks to equalization of the histograms.

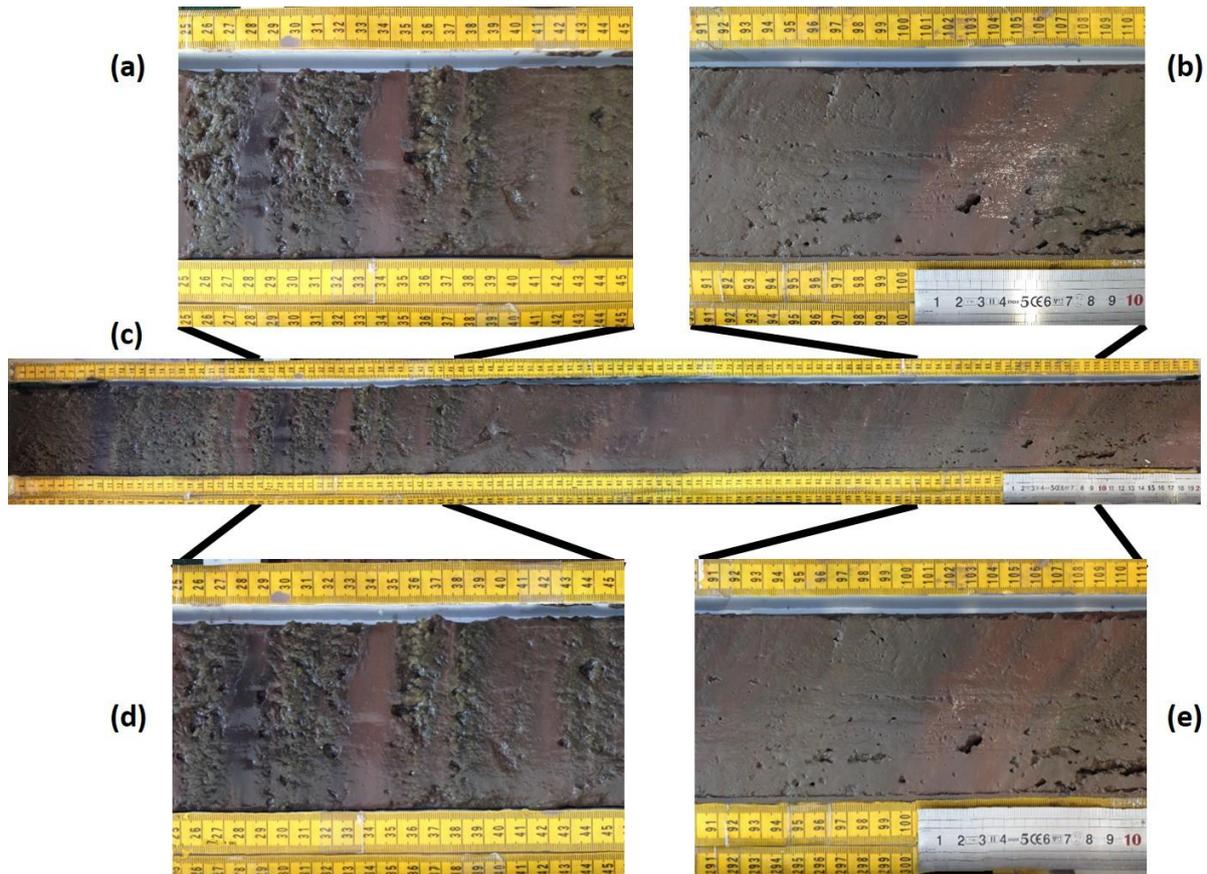


Figure 6: Smartphone images assembly with manual metrically calibrated markers; (a) and (b) correspond to images taken by the smartphone; (c) the assembled image; (d) and (e) zooms in the assembled image

2.2 Free Open function

Photoscan can use Python script that allows to make automatic processes. For example, to calibrate the markers, a calibration excel sheet is open to find the depths and the associated marker codes, Photoscan algorithm finds the markers with their code on each image, finally a comparison of both is made to find the depth associated to the markers on the raw images. Another script can be used to make all the proposed steps automatic (low and high assembly, mesh and orthorectify). All these scripts can be found in https://github.com/JacqKevin/RGB_PhotoScanOrthorectification.

All this method can be made with other software or programming language that may be free for using by many users.

2.3 Markers recommendations

This is the most important tool of the automatic method. If they are not printed on an adequate material, some steps can be disturbed (detection of the markers, assembly). A standard paper is the worst solution because it will damage and dirty easily. Adding Sellotape is also a bad idea because of reflect that disturb the assembly model. A metal sticker can be used, but they can be damaged with scratches. Some ideas have not been tested: 3d plastic printed markers, print a whole plastic ruler with markers...

It is also important to note that if some markers are damaged, the method can still be performed. So, it is important to check the first low resolution assembly, to see if there are some that do not work and disturb the model, to replace them.

2.4 Applications with these images

The orthorectified image can then be used for many applications. The metrically calibrated property and the high resolution are great advantages compared to the standard images.

2.4.1 Stratigraphic Log with true metric

The metrically calibrated image can be used in applications intended for initial core description. The following example, presented in the Figure 7, was made with the PSICAT open source application (<https://csdco.umn.edu/resources/software/psicat>). The image was imported into the application, then the top and the length were defined to fix the metric, and it was the same as the rulers as expected. Then, the user can manually select the main units, stratigraphic lithology with the textural information and some specific localized areas. It can also made description, remarks for future samplings. Finally, all these structures are characterized by their true depth thanks to the metrically calibrated image. All these schemas and depth information can be saved in several data formats to be processed by other software.

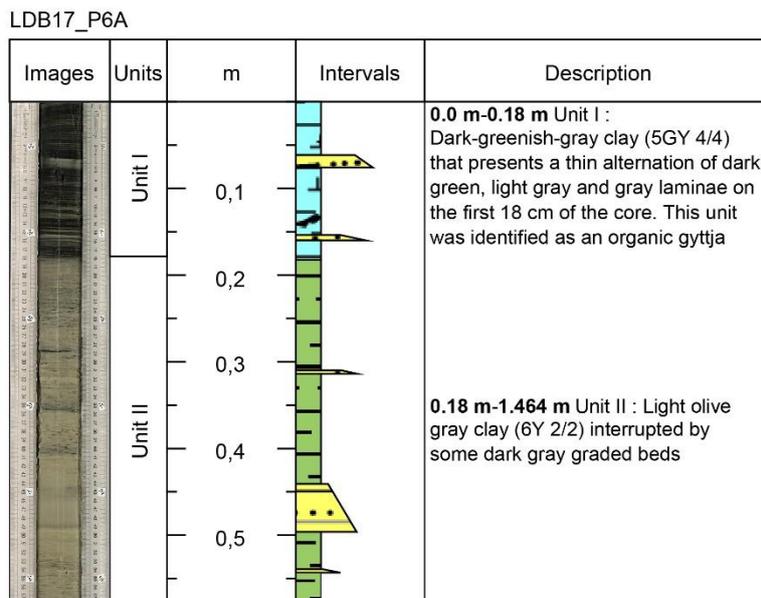


Figure 7: Log-stratigraphic realized with PSICAT on a Bourget lacustrine sediment core image metrically calibrated. It was divided in two main units and some intervals like instant events in yellow, or continuous depositions in light blue and green. A description of the two units was made the depth and the sediment color.

2.4.2 Image processing

The depth calibration is very useful to quantify the true length of some structures (floods, lamina) with image processing. For example, with classification it is possible to discriminate lamina and then estimate a mean length thanks to pixel metric size or study their variations across time. If the particle is coarse, it may be possible to estimate the particle size distribution along the core (Lewis *et al.* (2010)).

The Figure 8 shows an example of a laminated sediment core image of 1 cm by 9 cm. The used camera is not the most recent one, but allows to have a pixel size of 59 micrometers. If a single image was made to analyze the same sample, the pixel size will be 590 micrometers, that will not be enough to discriminate the sedimentary structures.

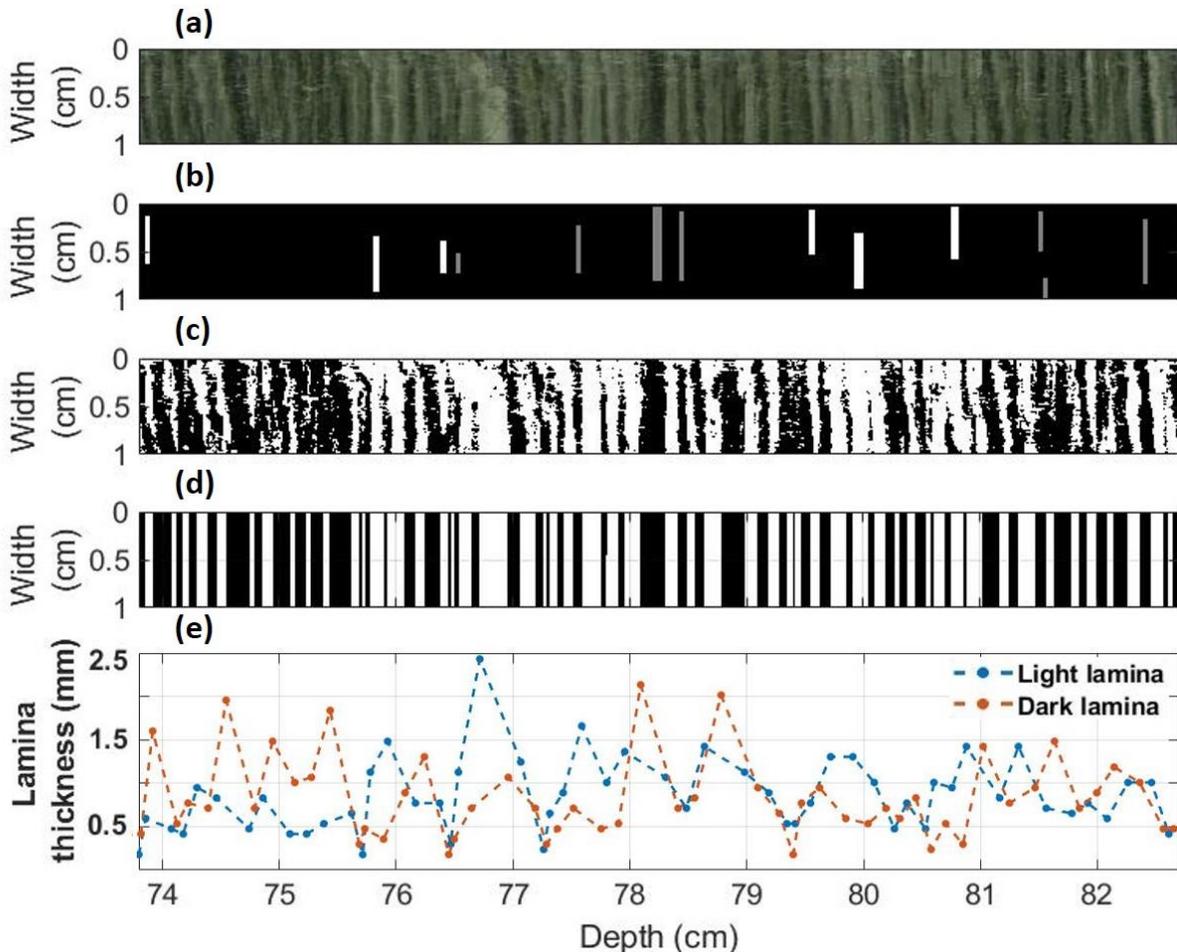


Figure 8: Neural network pattern recognition for the determination of two lamina. (a) Raw image, (b) labeled areas for the classification (white = light lamina, gray = dark lamina, dark = not labeled), (c) classification of all the pixels, (d) reconstructed image with the most present class on an averaged profile, (e) estimation of thickness of the two lamina.

The creation of a classification model was made by the selection of few areas and their association to one of the two classes of laminae, this step is called labeling (Figure 8.b). Then, a pattern recognition with an artificial neural network was used to estimate a discrimination model between the two classes. 70 % of the labeled pixels were used in calibration and 30 % in validation to test the accuracy of discrimination (percentage of good classification). One hidden layer was used for the neural network with two neurons. The accuracy of the model validation is 97.8 %. Then, the model was used to classify each pixel of the image (Figure 8.c). We assumed that the lamina were verticals and parallels to create a composite image (Figure 8.d). The sum of each column was calculated, and a threshold was fixed at the half width. If the value is higher than the half width, the column corresponds to a light lamina, and inversely for the dark lamina. Finally, it was possible to estimate the true lamina thickness in pixel and in

millimeter thanks to the metric calibration of the image (Figure 8.e). If the image is not calibrated, the pixels will be distorted as well as the lamina, and the thickness will not be representative of the reality. Advanced image processing methods can be used to find the real direction of the lamina, with the discretization of it and the estimation of an angle for each of them, then real thickness variations can be estimated.

2.4.3 Data fusion

The development of new sensors makes possible to study a sample under many aspects. For example, the RGB and the hyperspectral images are surface analysis that can tell us about spatial and structural information, the tomography is a volume analysis that can estimate the size and shape of the particles. All these information can be fused to improve the knowledge of the sample. The RGB image can hold an important place in this fusion process with its high spatial resolution and despite its low contribution of information.

The orthorectified image can be used to register other images, like the hyperspectral images that are characterized by a low spatial resolution and a high spectral resolution (figure 9). The pixel level data fusion allows to increase the hyperspectral spatial resolution thanks to the RGB one, and spectral information is gained for RGB image. These methods are mainly used in remote sensing and need to be studied for laboratory sensors (Selva *et al.* (2015); Li *et al.* (2017); Yokoya *et al.* (2017)). This increase in spectral resolution allows to study structural variations at a new high spatial resolution with data mining and chemometrics methods (Butz *et al.* (2015); Jacq *et al.* (2019)).

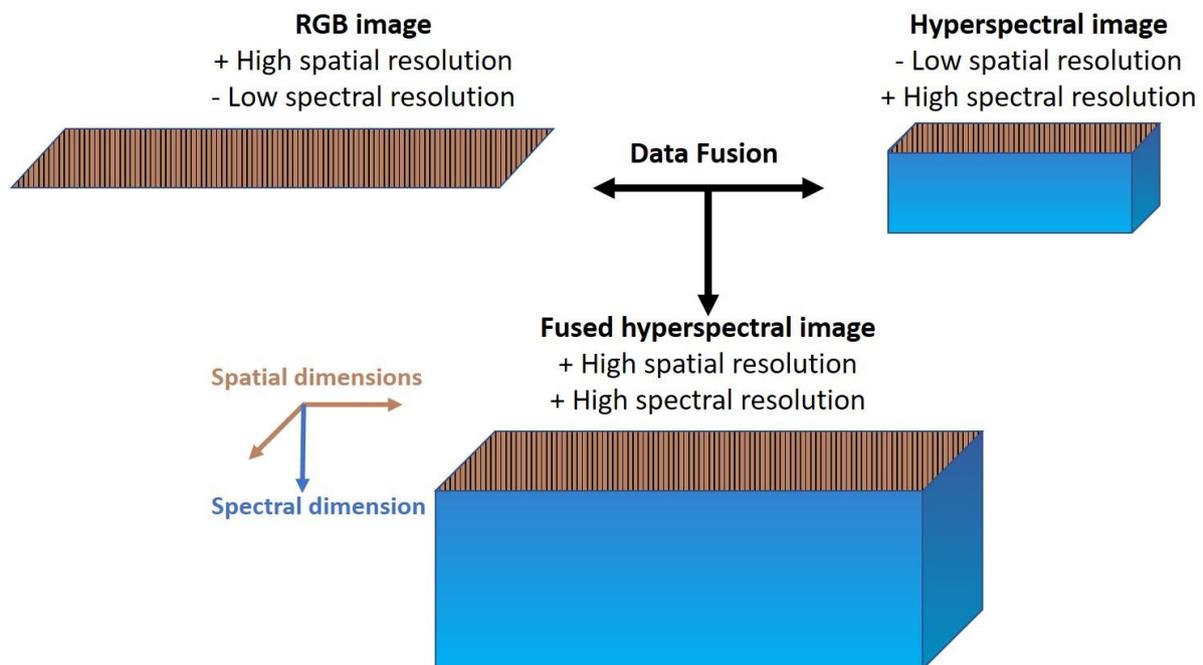


Figure 9: Fusion of RGB and Hyperspectral images to have a fused hyperspectral image with high spatial-spectral resolution

Conclusions

Create a high-resolution image for environmental sample is important to keep primary information (colors, surface, grain...). It is the main first step after the sampling and the image must be processed further to characterize better the sample. The proposed method allows to create it rapidly from several images and without difficulties with an automatic process. It requires only metrically calibrated markers that are recognized by Agisoft Photoscan software. A Python script can be used to automatize all the steps to obtain the orthorectified image. Smartphone images can also be used by the proposed method. It may be possible to use this method with open-free tools or with a standalone executable.

The orthorectified image shows great possibilities with data processing. Image processing allows to classify patterns inside the sample, coarse ones as lamina or floods, fine ones as grain. This new image can also be fused with other sensors to add other dimensions (volume, spectral, temporal) to study structural variations in the sample.

Acknowledgements

The cores used in this study were sampled and are stored in the EDYTEM laboratory. The authors are grateful to Charline Giguët-Covex and Stéphane Guédron for the smartphone images of the Huacacarpay lake core. Also, thanks to Pierre Sabatier, Fabien Arnaud and Erwan Messenger for the Bourget (method steps) and Aiguebelette (lamination application) lake cores.

References

- Agisoft LLC (2018) Agisoft PhotoScan User Manual. Professional Edition, Version 1.4
- Alparone, L., Wald, L., Chanussot, J., Thomas, C., Gamba, P., Bruce, L.M. (2007) Comparison of Pansharpening Algorithms: Outcome of the 2006 GRS-S Data-Fusion Contest. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 45: 3012–3021
- Baptista, P., Cunha, T.R., Gama, C., Bernardes, C. (2012) A new and practical method to obtain grain size measurements in sandy shores based on digital image acquisition and processing. *Sedimentary Geology*
- Butz, C., Grosjean, M., Fischer, D., Wunderle, S., Tylmann, W., Rein, B. (2015) Hyperspectral imaging spectroscopy: a promising method for the biogeochemical analysis of lake sediments. *Journal of Applied Remote Sensing* 9: 1–20
- Du, J., Li, W., Xiao, B. (2016) An overview of multi-modal medical image fusion. *Neurocomputing* 215: 3–20
- Ebert, T., Trauth, M.H. (2015) Semi-automated detection of annual laminae (varves) in lake sediments using a fuzzy logic algorithm. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology* 435: 272–282
- Francus, P., Keimig, F., Besonen, M. (2002) An algorithm to aid varve counting and measurement from thin-sections. *Journal of Paleolimnology* 28: 283–286
- Jacq, K., Perrette, Y., et al. (2019) High-resolution prediction of organic matter concentration with hyperspectral imaging on a sediment core. *Science of the Total Environment* 663: 236–244
- Lewis, T., Francus, P., Bradley, R.S., Kanamaru, K. (2010) *An Automated System for the Statistical Analysis of Sediment Texture and Structure at the Micro Scale*
- Li, S., Kang, X., Fang, L., Hu, J., Yin, H. (2017) Pixel-level image fusion: A survey of the state of the art. *Information Fusion* 33: 100–112
- Meyer, M.C., Faber, R., Spö TI, C. (2006) The WinGeol Lamination Tool: new software for rapid, semi - automated analysis of laminated climate archives. *The Holocene* 16: 753–761
- Ndiaye, M., Davaud, E., Ariztegui, D., Fall, M. (2012) A Semi Automated Method for Laminated Sediments Analysis. *International Journal of Geosciences* 3: 206–210
- Pappachen James, A., Dasarathy, B. V. (2014) Medical image fusion: A survey of the state of the art. *Information Fusion* 19: 4–19
- Rubin, D.M. (2004) A simple autocorrelation algorithm for determining grain size from digital images of sediment. *JOURNAL OF SEDIMENTARY RESEARCH JANUARY* 74: 160–165
- Selva, M., Aiazzi, B., Butera, F., Chiarantini, L., Baronti, S. (2014) Hyper-sharpening of

- hyperspectral data: A first approach. *In: 6th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS) IEEE*, 1–4.
- Selva, M., Aiazzi, B., Butera, F., Chiarantini, L., Baronti, S. (2015) Hyper-Sharpener: A First Approach on SIM-GA Data. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 8: 3008–3024
- Vivone, G., Alparone, L., et al. (2015) A Critical Comparison Among Pansharpening Algorithms. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 53: 2565–2586
- Weber, M.E., Reichelt, L., Kuhn, G., Pfeiffer, M., Korff, B., Thurow, J., Ricken, W. (2010) BMPix and PEAK tools: New methods for automated laminae recognition and counting- Application to glacial varves from Antarctic marine sediment. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 11:
- Yokoya, N., Grohnfeldt, C., Chanussot, J. (2017) Hyperspectral and Multispectral Data Fusion: A comparative review of the recent literature. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 5: 29–56
- Zolitschka, B., Francus, P., Ojala, A.E.K., Schimmelmann, A. (2015) Varves in lake sediments, a review. *Quaternary Science Reviews* 117: 1–41

C Une méthode semi-automatique pour le comptage des lamines à partir d'images RGB d'archives solides naturelles

Au cours des six premiers mois de thèse, avant l'acquisition des premières données hyperspectrales, je me suis intéressé à l'analyse d'image pour la détection des lamines. Une méthode a été développée et proposée au congrès français GretsI 2017. Elle n'a malheureusement pas été acceptée, car jugée plutôt simple, spécifique à un domaine et donc non exploitable pour d'autres problématiques.

Cette méthode est composée de quatre étapes :

1. L'utilisation de prétraitements spatiaux pour corriger d'éventuels défauts (reflets) et mettre en avant les structures laminées.
2. Une détermination des zones homogènes de l'échantillon est réalisée par fenêtres glissantes, avec un recouvrement d'un tiers dans les deux directions, pour créer une sédimentation composite avec les lamines les plus nettes et parallèles. Pour cela, on utilise des critères de moyennes des variances dans les deux directions. Elle est à maximiser dans le sens de la lamination pour avoir un maximum de lamines, et à minimiser dans l'autre sens pour avoir des lamines parallèles.
3. Cette zone composite est ensuite réduite par une moyenne du niveau de gris, afin de détecter les limites des lamines avec une dérivée première sur un signal 1D.
4. Certaines de ces lamines peuvent ne pas en être (sur-détection), c'est pourquoi il faut les valider une par une. On propose donc d'effectuer une validation automatique partielle avec deux critères : l'intensité et la variance entre deux lamines consécutives. Des seuils sont fixés et permettent de classer les lamines en trois classes : "Validée", "Incertaine", "Refusée". Ainsi l'utilisateur ne doit plus que valider une partie des lamines.

Cette méthode est réalisée de manière itérative avec des tailles de fenêtres glissantes variables. La taille optimale est celle représentant le meilleur compromis entre détection et validation.

Cette approche est comparée avec une autre méthode de la littérature nécessitant une validation complète des détections par l'utilisateur. Les performances de classifications sont meilleures avec notre approche (précision et rappel de 100%, contre 87% pour l'autre méthode), à ceci s'ajoute les temps de validation manuelle de 20 min et 45 min respectivement. Cette méthode est donc prometteuse, mais demande davantage d'approfondissement pour l'automatisation des règles et la réduction du nombre de lamines à valider manuellement.

Une méthode semi-automatique pour le comptage des lamines à partir d'images d'archives solides naturelles

Kévin JACQ^{1,2}, Didier COQUIN¹, Bernard FANGET², Yves PERRETTE²

¹LISTIC - Laboratoire d'Informatique, Systèmes, Traitement de l'Information et de la Connaissance
BP 80439, 74944 Annecy Cedex, France

²EDYTEM - Laboratoire Environnements, DYnamiques et TERRitoires de la Montagne
Bâtiment « Pôle Montagne », 5 bd de la mer Caspienne, F-73376 Le Bourget du Lac cedex, France
kevin.jacq, didier.coquin, bernard.fanget, yves.perrette@univ-smb.fr

Résumé – Les archives naturelles, géologiques ou biologiques, sont parfois constituées de dépôts rythmés, de succession de couches appelées lamines. Celles-ci s'accumulent au cours du temps et sont caractérisées par des changements de composition qui peuvent s'accompagner de changements de teintes. Du fait des multiples variabilités des archives (internes et entre archives) la création d'un algorithme automatique « universel » pour leur dénombrement par analyse d'images est peu envisageable. Pourtant, afin d'augmenter la qualité des comptages, qui sont réalisés par des méthodes manuelles, tant au niveau de leur répétabilité que pour la rapidité du comptage, nous présentons ici un programme semi-automatique. La méthode proposée est basée sur la variance intra-classe de lamines voisines afin de proposer une validation automatique de certaines lamines. Nous appliquons cette méthode à des sédiments de lac, ainsi qu'à des cernes d'arbres.

Abstract – Geological and biological natural archives are sometimes composed by the succession of small strata called laminae. During their accumulation through time, their chemical composition can change and induce a change in colorimetry. Because of the variability of this type of samples, it is very difficult to create an “universal” automatic algorithm for their enumeration by image analysis. But, in order to improve the robustness of manual laminae counting (efficiency, repetability), we propose here a semi-automatic program. The proposed method takes into account the gray level and the intra-class variance of the neighboring laminae to automatically validate some. This method is applied on lake sediments, and on tree rings.

1 Introduction

Les sédiments sont utilisés comme des enregistreurs naturels de l'environnement. En effet, les processus de la sédimentation permettent à la fois d'enregistrer des paramètres liés à l'environnement et au climat, mais également de les chronométrer. On parle donc d'archives naturelles. Parmi ces archives, certaines présentent des structures pseudo-périodiques associées à des cycles naturels (saisons, cycles annuels voire pluri-annuels) ou à des successions d'événements (crues, avalanches). Pour des sédiments, quand on peut démontrer l'annualité de ces cycles par des méthodes de datations indépendantes généralement de géochimie isotopique, on parle de varves et leur comptage donne accès à une référence chronologique de résolution annuelle [1]. Mais au-delà du cas particulier des varves, ces dépôts rythmés sont utilisés comme marqueurs de rythmes de croissance et de conditions environnementales particulières. On parlera notamment par la suite de lamines pour les sédiments et de cernes pour les arbres.

La forme des lamines et leur origine varient selon les types de sédiments, il peut s'agir de variations de texture liées à la granulométrie, de variations de compositions avec par exemple des calcites bioprécipitées, ou de la variation d'un élément chi-

mique particulier associé par exemple à la variation de conditions d'oxydo-réduction lors de la sédimentation. Les limites de ces lamines sont donc parfois progressives, parfois brutales, et leur succession peut être symétrique ou non. De même, la dimension des lamines successives peut varier posant parfois le problème de l'imbrication d'infralamines au sein des lamines.

Basé sur les techniques qui ont été publiées pour le comptage des lamines [2, 3], l'objectif de cet article est de proposer une nouvelle méthode pour la détection et le comptage des lamines à partir d'images. Après la description de la procédure intégrant la méthode d'acquisition et de traitement de ces images de sédiment, cette méthode est appliquée à deux exemples démontrant ainsi sa robustesse.

2 Problématique des méthodes automatiques et semi-automatiques

Dans la littérature, il est possible de regrouper les différentes méthodes proposées pour le comptage des lamines dans les sédiments en deux catégories :

(1) Les méthodes de comptage semi-automatique : les lamines sont détectées automatiquement, mais l'utilisateur doit

procéder à une validation manuelle. Par exemple, dans les travaux de Weber [2] et Meyer [3], la détection des lamines se fait en étudiant la variation des niveaux de gris avec deux techniques. La première méthode, basée sur les maxima est adaptée à l'identification de laminations de formes sinusoïdales pour lesquelles le maximum est déterminable de manière univoque. La seconde méthode qui est basée sur le passage à l'origine des dérivées premières, est plus adaptée aux laminations non-sinusoïdales (de type créneaux, événements) ; dans ce cas, l'identification univoque est celle du bord.

(2) Les méthodes de comptage automatique pour lesquelles l'utilisateur doit tout de même sélectionner les zones discriminantes (claires / foncées), afin que l'algorithme puisse s'adapter aux couleurs des lamines. Par exemple, les travaux de Ebert [4] utilisent des algorithmes neuro-flous. Cette méthode présente l'avantage de pouvoir créer une image segmentée qui montre la succession des lamines. Dans les travaux de Ndiaye [5], une fois les zones sélectionnées, l'image est segmentée en une succession de lamines à l'aide de la méthode des K plus proches voisins (KNN).

Aucune de ces méthodes ne permet d'effectuer un comptage automatique précis et de détecter l'ensemble des lamines, car les couleurs et formes de celles-ci ne sont pas homogènes et les images ont de nombreux défauts et irrégularités. C'est pourquoi une méthode semi-automatique est préférée. Mais sur une image de 1 m avec des lamines d'épaisseur submillimétrique, il est possible de retrouver plus de 1 000 lamines. Une vérification manuelle une par une de celles-ci est chronophage et non répétable. Une nouvelle méthode est proposée s'adaptant localement aux couleurs des lamines, permettant leur comptage et une validation automatique partielle.

3 Système d'acquisition

Les échantillons ont été photographiés avec un Nikon D80 (f=35 mm) sur un banc de translation éclairé par 2 × 2 tubes fluorescents de 60 cm. L'ensemble des composants de ce banc sont fixes pour faciliter la création d'une image globale. Chacune d'elles représentent environ 15 cm de sédiments, a une résolution de 300 ppp ce qui correspond à 3 872 par 2 592 pixels. Un pas de translation est fixé à 5 cm afin d'avoir un recouvrement de 2/3 pour la création de l'image finale. Une orthorectification est réalisée avec le logiciel Agisoft PhotoScan, avec une calibration préalable de l'appareil. Pour cela des points de contrôle référencés sont positionnés tous les 10 cm sur les deux règles entourant l'échantillon et ils sont automatiquement détectés. L'image finale pour un échantillon de 1 m représente 24 700 par 2 400 pixels, les lamines les plus fines représentent 8 pixels soit une épaisseur inférieure au millimètre.

4 Méthode proposée

La méthode proposée (LaCPAV : Lamination Counting with Partial Automatic Validation) est appliquée à des images à bonne

résolution acquises pour les différents échantillons. Elle travaille sur les niveaux de gris issus de l'espace couleur RGB et est constituée de 5 étapes présentées dans la figure 1. La première étape est (1) la détermination des dimensions optimales de la fenêtre de calcul obtenues de manière itérative des étapes suivantes (2-5). La dimension optimale est celle représentant le meilleur compromis entre détection et validation. La méthode poursuit avec (2) le prétraitement de l'image, (3) la recherche des zones homogènes, (4) la détection automatique des lamines et (5) la validation automatique partielle.

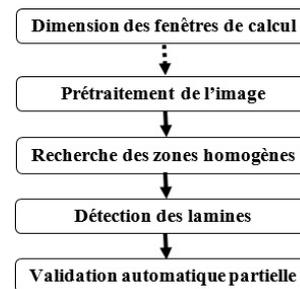


FIGURE 1 – Différentes étapes de la méthode

4.1 Prétraitement de l'image

Dans la littérature différents filtres sont utilisés : médian [3, 4], chapeau haut de forme [4], gaussien [2]. La méthode LaCPAV utilise un filtre chapeau haut de forme suivi d'un rehaussement de contraste en utilisant la luminance L^* normée (espace couleur CIE $L^*a^*b^*$).

4.2 Recherche des zones homogènes

Les sédiments peuvent présenter des régions avec des trous, des lamines masquées, être perturbés par des événements géologiques et/ou lors de l'échantillonnage par des effets de pistonnage (courbures). A ceci s'ajoute des artefacts lors de l'acquisition de la photographie (reflets).

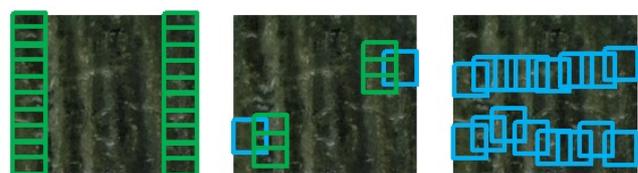


FIGURE 2 – Représentation des étapes pour la détermination des zones homogènes (fenêtres possibles en vert et optimales en bleu)

La recherche de zones homogènes est une étape préalable et doit être réalisée par fenêtres glissantes pour « éviter » ces zones pouvant provoquer des erreurs dans le comptage. La méthode LaCPAV se base sur la moyenne des variances horizon-

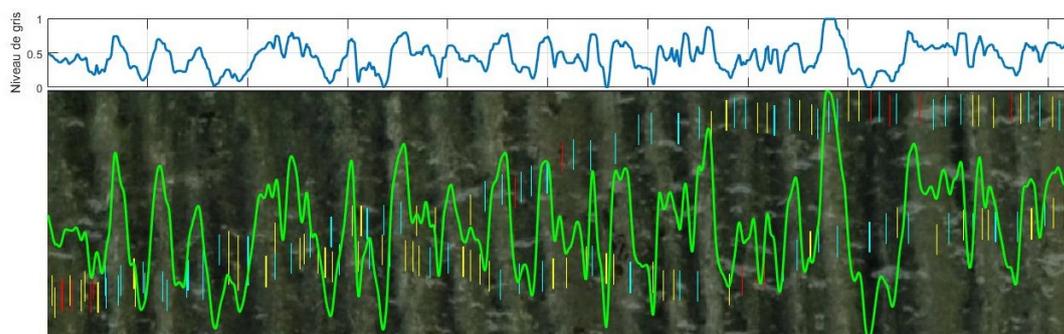


FIGURE 3 – Résultats pour une image de sédiment (niveaux de gris de la ligne centrale en haut ; courbe lissée par Savitzky-Golay en vert ; lamine validée en bleu, refusée en rouge, incertaine en jaune)

tales et verticales de l'image en niveaux de gris dans des fenêtres de taille constante. Par exemple pour la figure 3, la variance horizontale est à maximiser pour avoir un maximum de lamines et la variance verticale est à minimiser pour avoir des lamines les plus homogènes et verticales.

La figure 2 présente les différentes étapes de la recherche de zones homogènes en commençant aux deux extrémités de l'image. Les moyennes des variances horizontales et verticales sont calculées pour toutes les fenêtres situées aux extrémités (zones vertes), puis la zone homogène est sélectionnée (zone bleue). Les fenêtres suivantes (zones vertes) doivent se superposer d'un tiers pour pouvoir être dans la continuité des lamines, les critères sont calculés et la zone homogène est sélectionnée (zone bleue), et ainsi de suite.

4.3 Détection des lamines

En haut de la figure 3 est représenté une courbe de niveaux de gris d'une ligne au centre de la lamine, de même à droite de la figure 5. La variation moyenne est calculée dans les fenêtres homogènes. Ensuite l'algorithme de Savitzky-Golay [6] est utilisé. Il fonctionne par fenêtres glissantes dans lesquelles le signal est lissé par un polynôme qui est ensuite dérivé. Les paramètres choisis sont un polynôme de lissage d'ordre 2 et une fenêtre de 9 pixels, il s'agit d'un compromis pour augmenter le rapport signal sur bruit. Le lissage préalable permet de diminuer le bruit comme le montre la courbe verte des figures 3 et 5. Après la dérivée première, les passages par l'origine sont caractéristiques d'un changement du niveau de gris, et potentiellement de la présence d'une lamine.

4.4 Validation automatique partielle

Pour pallier au comptage manuel de milliers de lamines, l'originalité de cette méthode est une validation automatique partielle. L'algorithme se base sur la différence de niveaux de gris ($|L_i - L_{i+1}|$), ainsi que sur la variance intra-classe (V) de deux lamines consécutives. L'expert fournit un jeu de règles nettes qui permet de valider automatiquement 3 cas de lamines, 3 cas pour des lamines incertaines devant être vérifiées par un

utilisateur, et 6 cas pour un refus automatique des lamines détectées à tort (figure 4).

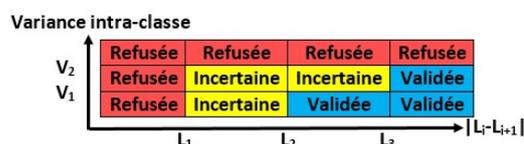


FIGURE 4 – Représentation du principe de validation automatique partielle par des règles nettes

Des expérimentations ont montré que les seuils pour la différence $|L_i - L_{i+1}|$ sont constants quel que soit l'image et les dimensions de la fenêtre de calcul. Les seuils de variance intra-classe (V_1 et V_2) sont à ajuster manuellement car dépendant de deux facteurs précédents. Pour une amélioration future, on peut proposer une partition floue décrivant la différence entre niveaux de gris $|L_i - L_{i+1}|$ et la variance intra-classes.

5 Résultats expérimentaux

La méthode LaCPAV est applicable pour différents types d'échantillons : les sédiments, les cernes d'arbres, les stalagmites et stalactites (spéléothèmes), les coquilles de bivalves.

5.1 Résultats sur des sédiments

La figure 3 montre que la validation automatique partielle PAV est cohérente avec la réalité avec une précision de 96 % (table 1). PAV a classé 52 % des lamines détectées (validées et refusées) correspondant à 76 % des lamines véritables de l'image, il reste donc 24 % à retrouver par l'utilisateur à partir des 48 % incertaines.

5.2 Résultats sur des cernes d'arbre

Ce type d'échantillons est étudié depuis longtemps avec la dendrochronologie pour le comptage des cernes pour détermi-

ner l'âge de l'arbre [7]. La figure 5 et la table 1 montrent que la validation automatique permet de trouver 63 % des cernes, l'utilisateur grâce à la validation semi-automatique des lamines restantes (37 %) détectera l'ensemble des cernes.

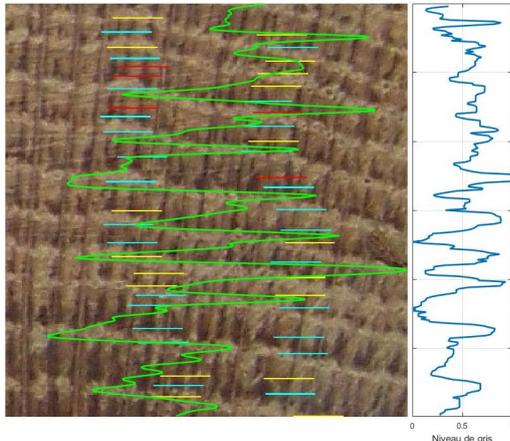


FIGURE 5 – Résultats pour une image de cernes d'arbres

5.3 Comparaison avec la méthode BMPix

La méthode proposée (LaCPAV) est comparée avec le programme BMPix de Weber [2]. La table 1 récapitule les résultats pour le comptage des lamines et des cernes sur les images précédentes. La méthode proposée grâce à ses deux étapes (validation automatique partielle PAV, et semi-automatique par l'utilisateur LaCPAV) détecte l'ensemble des lamines et des cernes contrairement à BMPix. L'étape PAV est précise et permet la validation de 76 % des lamines pour les sédiments. L'utilisateur doit valider et refuser environ 40 % des lamines jugées incertaines pour obtenir un comptage représentatif de la réalité.

TABLE 1 – Comparaison entre la méthode proposée (PAV et LaCPAV) et le programme BMPix

		Précision	Rappel	F-mesure
Figure 3	PAV	96 %	76 %	84 %
	LaCPAV	100 %	100 %	100 %
	BMPix	87 %	87 %	87 %
Figure 5	PAV	100 %	63 %	77 %
	LaCPAV	100 %	100 %	100 %
	BMPix	77 %	70 %	73 %

En terme de temps de traitements et de calculs, les méthodes PAV et BMPix durent 4 minutes pour une image d'une carotte sédimentaire de 1 m et la validation par l'utilisateur prend environ 20 min (LaCPAV), 45 min (BMPix), alors que le comptage manuel prend 2 heures sans compter la préparation des échantillons (6 heures). La méthode LaCPAV montre donc bien l'intérêt d'un programme semi-automatique avec validation auto-

matique partielle pour un gain de temps, mais aussi pour la précision et la reproductibilité dans le référencement des lamines.

6 Conclusion

Cette nouvelle méthode semi-automatique reposant sur des techniques qui ont fait leurs preuves dans différents programmes peut être utilisée pour des problématiques et des échantillons variés. Son originalité est de valider automatiquement une partie des lamines en comparant les niveaux de gris et la variance intra-classe de celles qui se suivent, ainsi que de travailler avec des fenêtres glissantes pour s'adapter à l'image. Après la détermination des lamines, il est possible de calculer des paramètres, comme leurs épaisseurs, leurs teintes. Certains points restent à automatiser et à optimiser pour que la validation par l'utilisateur soit la plus rapide possible pour un rendu cohérent avec l'échantillon. Dans les travaux futurs, nous proposerons une description floue des deux entrées du système (différence entre niveaux de gris des lamines, et variance intra-classes). Ainsi, on pourra définir des fonctions d'appartenance pour les zones valides, incertaines ou à refuser.

Références

- [1] Bernd Zolitschka, Pierre Francus, Antti E.K. Ojala, and Arndt Schimmelmann. Varves in lake sediments, a review. *Quaternary Science Reviews*, 117 :1–41, 2015.
- [2] M. E. Weber, L. Reichelt, G. Kuhn, M. Pfeiffer, B. Korff, J. Thurow, and W. Ricken. BMPix and PEAK tools : New methods for automated laminae recognition and counting-Application to glacial varves from Antarctic marine sediment. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 11(3), 2010.
- [3] Michael C Meyer, Robert Faber, and Christoph Spö Tl. The WinGeol Lamination Tool : new software for rapid, semi - automated analysis of laminated climate archives. *The Holocene*, 16 :753–761, 2006.
- [4] Thomas Ebert and Martin H. Trauth. Semi-automated detection of annual laminae (varves) in lake sediments using a fuzzy logic algorithm. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, 435 :272–282, 2015.
- [5] Mapathe Ndiaye, Eric Davaud, Daniel Ariztegui, and Meissa Fall. A Semi Automated Method for Laminated Sediments Analysis. *International Journal of Geosciences*, 3 :206–210, 2012.
- [6] Abraham. Savitzky and M. J. E. Golay. Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures. *Analytical Chemistry*, 36(8) :1627–1639, 1964.
- [7] André Valentin Munaut. La dendrochronologie. *Bulletin de l'Association française pour l'Etude du Quaternaire*, 16 :65–74, 1979.

Résumé

L'évolution de l'environnement et le climat sont, actuellement, au centre de toutes les attentions. Les impacts de l'activité des sociétés actuelles et passées sur l'environnement sont notamment questionnés pour mieux anticiper les implications de nos activités sur le futur. Mieux décrire les environnements passés et leurs évolutions sont possibles grâce à l'étude de nombreux « enregistreurs » naturels (sédiments, spéléothèmes, cernes, coraux). Grâce à eux, il est possible de caractériser des évolutions bio-physico-chimiques à différentes résolutions temporelles et pour différentes périodes. La haute résolution entendue ici comme la résolution suffisante pour l'étude de l'environnement en lien avec l'évolution des sociétés constitue le principal verrou de l'étude de ces archives naturelles notamment en raison de la capacité analytique des appareils qui ne peuvent que rarement voir des structures fines inframillimétriques. Ce travail est bâti autour de l'hypothèse que l'utilisation de caméras hyperspectrales (VNIR, SWIR, LIF) couplée à des méthodes statistiques pertinentes doivent permettre d'accéder aux informations spectrales et donc bio-physico-chimiques contenues dans ces archives naturelles à une résolution spatiale de quelques dizaines de micromètres et, donc, de proposer des méthodes pour atteindre la haute résolution temporelle (saisonnière). De plus, afin d'avoir des estimations fiables, plusieurs capteurs d'imageries et de spectroscopies linéaires (XRF, TRES) sont utilisés avec leurs propres caractéristiques (résolutions, gammes spectrales, interactions atomiques/moléculaires). Ces méthodes analytiques sont utilisées pour la caractérisation de la surface des carottes sédimentaires. Ces analyses spectrales micrométriques sont mises en correspondance avec des analyses géochimiques millimétriques usuelles. Optimiser la complémentarité de toutes ces données, implique de développer des méthodes permettant de dépasser la difficulté inhérente au couplage de données considérées par essence dissimilaire (résolutions, décalages spatiaux, non-recouvrement spectral). Ainsi, quatre méthodes ont été développées. La première consiste à associer les méthodes hyperspectrales et usuelles pour la création de modèles prédictifs quantitatifs. La seconde permet le recalage spatial des différentes images hyperspectrales à la plus basse des résolutions. La troisième s'intéresse à la fusion de ces dernières à la plus haute des résolutions. Enfin, la dernière s'intéresse aux dépôts présents dans les sédiments (lamines, crues, tephtras) pour ajouter une dimension temporelle à nos études. Grâce à l'ensemble de ces informations et méthodes, des modèles prédictifs multivariés ont été estimés pour l'étude de la matière organique, des paramètres texturaux et de la distribution granulométrique. Les dépôts laminés et instantanés au sein des échantillons ont été caractérisés. Ceci a permis d'estimer des chroniques de crues, ainsi que des variations bio-physico-chimiques à l'échelle de la saison. L'imagerie hyperspectrale couplée à des méthodes d'analyse des données sont donc des outils performants pour l'étude des archives naturelles à des résolutions temporelles fines. L'approfondissement des approches proposées dans ces travaux permettra d'étudier de multiples archives pour caractériser des évolutions à l'échelle d'un ou de plusieurs bassin(s) versant(s).

Mots clés : Sédimentologie, Spectroscopie, Imagerie, Chimie, Fusion de Données, Matière Organique, Granulométrie.