



**Vilnius  
universitetas**

**Vilnius  
universitetas**

---

**Algoritmų, leidžiančių  
nustatyti medžiagos  
cheminę sudėtį, iš hiper-  
spektrinių duomenų tyrimas**

Vytautas Paura

Darbo vadovas: Dr. Virginijus Marcinkevičius

Darbo konsultantas: Dr. Valdas Rapševičius

Doktorantūros pradžios ir pabaigos metai: 2020–2024

# Studijų planas

Studijų metai	Egzaminai		Dalyvavimas konferencijose		Publikacijos		
	Planas	Ivykdyta	Planas	Ivykdyta	Planas	Ivykdyta	Būklė
I (2020/2021)	2	2	1	1	1	1	
II (2021/2022)	2	0	1	0	1	0	
III (2022/2023)			1	0	1	0	
IV (2023/2024)			1	0	1	0	

# Pusmečio planas

Egzaminai		Dalyvavimas konferencijose		Publikacijos	
Planas	Ivykdyta	Planas	Ivykdyta	Planas	Ivykdyta
Informatikos ir informatikos inžinerijos tyrimo metodai ir metodika	Išlaikyta. Pažymys : 8				

# Disertacijos rengimo etapai

**Mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė (Lietuvoje ir užsienyje):**

1. Disertacijos tyrimo objekto detalizavimas.
2. Medžiagų cheminės sudėties nustatymo algoritmų apžvalga ir analizė.
3. Algoritmų naudojančių hiper-spektrinius duomenis medžiagų cheminei sudėčiai nustatyti apžvalga ir analizė.
4. Metodų analizės apibendrinimas ir mokslinių problemų susietų su tyrimo objektu identifikavimas, ir tyrimo tikslo ir uždavinių suformavimas.

# Tyrimo objektas

## **Tyrimo objektas:**

- Hiper-spektriniai vaizdai ir medžiagų cheminės sudėties iš hiper-spektrinių vaizdų nustatymo algoritmai.

## **Sprendžiamos problemos:**

- Grynujų pikselių skaičius nustatytas iš pateikto hiper-spektrinio vaizdo ar duomenų rinkinio.
- Randant grynujų medžiagų spektrines žymes (angl. signatures).
- Suskaičiuojant atrastų grynujų medžiagų sumaišymo proporcijas visame hiper-spektriniame vaizde.

# 2020/2021 m. m. darbo planas

Mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė (Lietuvoje ir užsienyje)

- Disertacijos tyrimo objekto detalizavimas
- Medžiagų cheminės sudėties nustatymo algoritmų apžvalga ir analizė.
- Algoritmų naudojančių hiper-spektrinius duomenis medžiagų cheminei sudėčiai nustatyti apžvalga ir analizė.
- Metodų analizės apibendrinimas ir mokslinių problemų susietų su tyrimo objektu identifikavimas, ir tyrimo tikslo ir uždavinių suformavimas.

Išlaikyti egzaminus:

- „Optimizavimo metodai ir jų taikymas“
- „Informatikos ir informatikos inžinerijos tyrimo metodai ir metodika“

Publikacijų rengimas:

- Mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga (konferencijos darbų medžiagoje)

# Cheminės sudėties nustatymas

Sudėties nustatymo algoritmų tipai:

1. Neneigiamų matricų faktorizavimas.
2. Autoenkoderių tinklai.
3. Retų duomenų regresija.

Metrikos:

1. Vidutinės kvadratinės paklaidos šaknis (Root mean squared error - RMSE)
2. S rekonstravimo paklaida (Signal reconstruction error SRE)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \hat{x}_i)^2}$$

$$SRE = 10 \log_{10} \left( \frac{E[\|x\|_2^2]}{E[\|x - \hat{x}\|_2^2]} \right)$$



# Cheminės sudėties nustatymo eksperimentas

Duomenų rinkiniai:

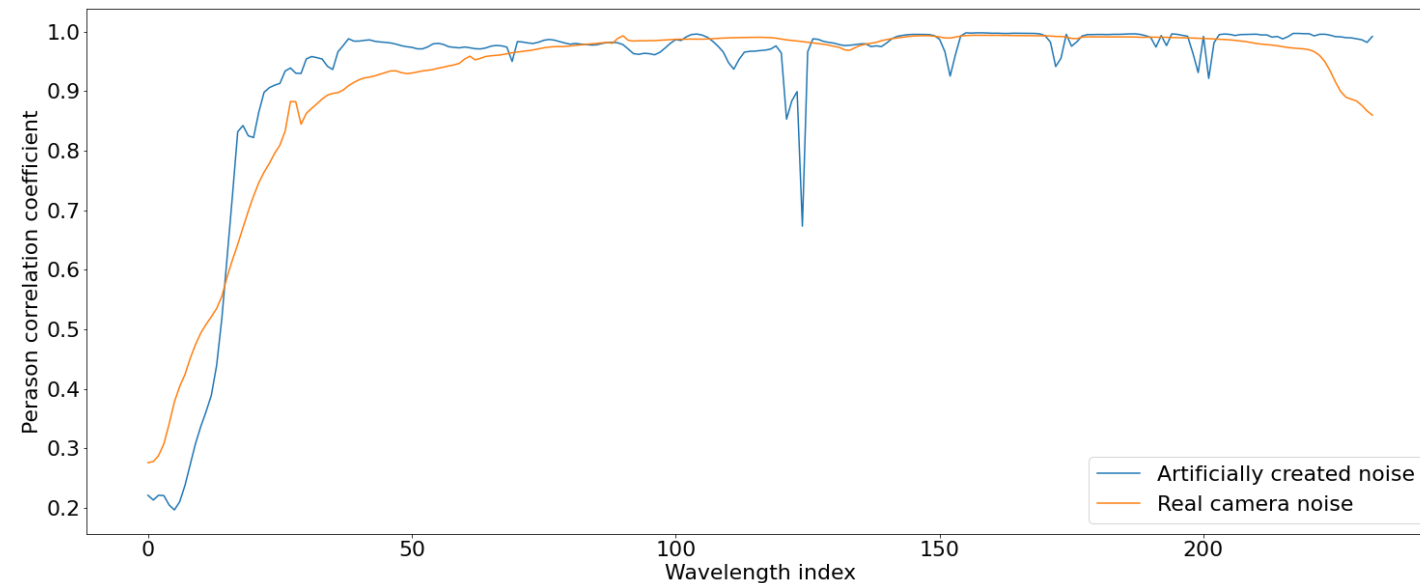
- Dirbtiniai duomenų kubai sudaryti iš USGS spektrinės bibliotekos duomenų (Raymond F. Kokaly et al., 2017)

Etaloninis eksperimentas:

1. Algoritmų atsparumas medžiagų kiekio pasikeitimams.
2. Algoritmų atsparumas triukšmui.
3. Algoritmų gebėjimas atskirti medžiagas priklausomai nuo hiper-spektrinio vaizdo dydžio.

# Algoritmų triukšmo atsparumo eksperimentas

- Sugeneruotas dirbtinis Gauso triukšmas skirtingais SNR kiekiais.
- Panaudoti realios kameros triukšmo parametrai.
- Skaičiuojama Pearson koreliacija tarp gretimų ruožų triukšmo kiekiui nustatyti.
- Atliekama optimizacija dirbtiniam triukšmui generuoti.



# Algoritmai naudoti eksperimente

## Retų duomenų regresija:

- Sparse unmixing by variable splitting and augmented Lagrangian (SUnSAL) [J. M. Bioucas-Dias and M. A. T. Figueiredo, 2010]
- SUnSAL and total variation (SUnSAL\_TV) [J. M. Bioucas-Dias and M. A. T. Figueiredo, 2012]
- Spectral–spatial weighted sparse unmixing (S2WSU) [S. Zhang et al. 2018]
- Augmented linear mixing model (ALMM) [D. Hong et al., 2019]

# Algoritmai naudoti eksperimente

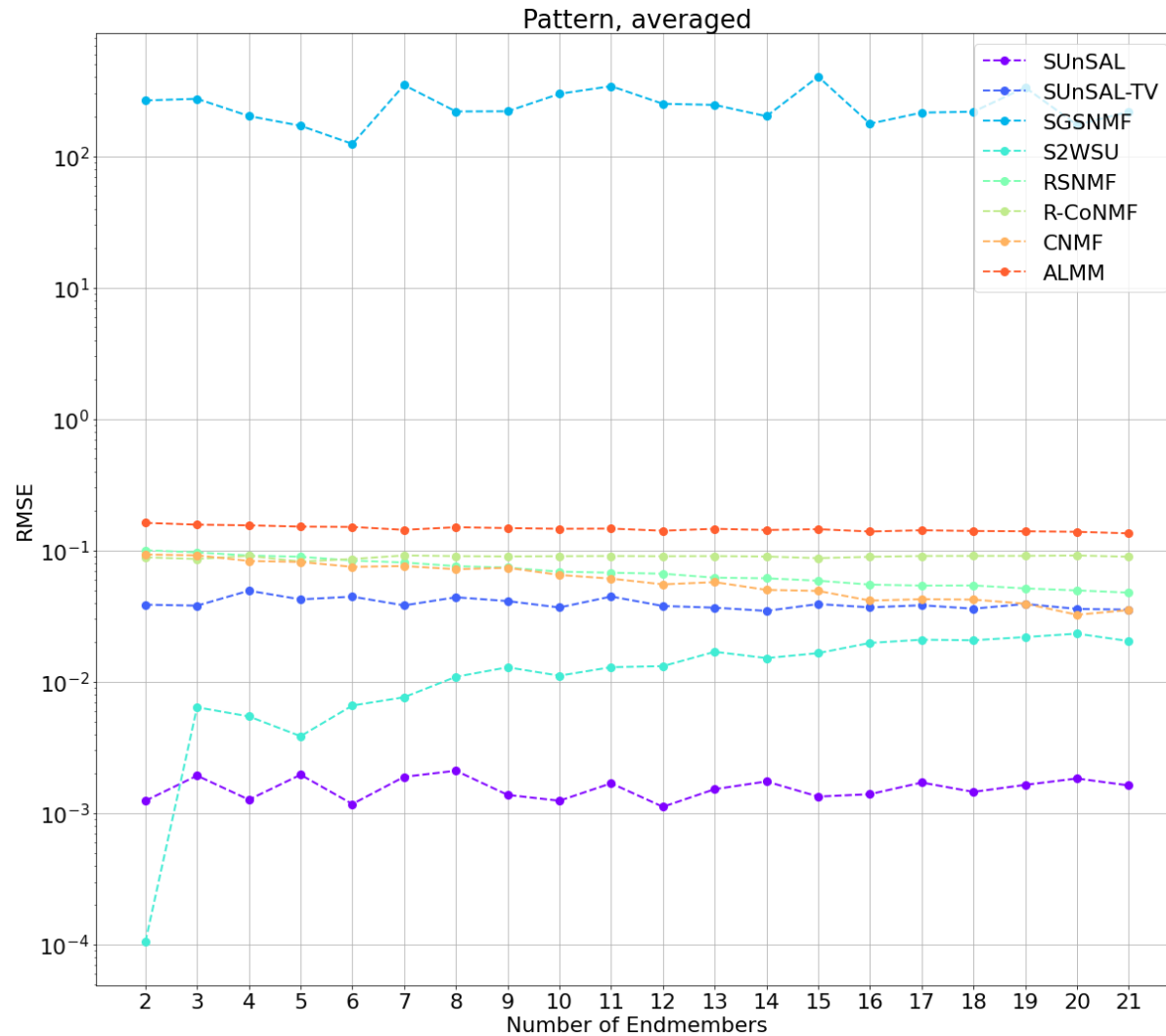
## **Neneigiamų matricių faktorizavimas:**

- Spatial group sparsity regularized NMF (SGSNMF) [X. Wang et al., 2017]
- Coupled nonnegative matrix factorization (CNMF) [N. Yokoya et al., 2012]
- Robust collaborative nonnegative matrix factorization (R-CoNMF) [J. Li et al., 2016]
- Total variation regularized reweighted sparse NMF (RSNMF) [W. He et al., 2017]

## **Autoenkoderių tinklai:**

- Autoencoder network with adaptive abundance smoothing (AAS) [Z. Hua et al., 2020]

# Rezultatai



- Algoritmo veiksmingumas priklausomai nuo sumaišytų medžiagų skaičiaus.
- Generuota iš atsitiktinai atrinktų medžiagų spektrų iš USGS bibliotekos
- Duomenų rinkiniai sugeneruoti 10 kartų ir gauti rezultatai suvidurkinti.

# Išvados

- Tarp tirtų algoritmų nebuvo sukurta vieninga metodika šių algoritmų testavimui.
- SGSNMF algoritmas gavo prasčiausius rezultatus.
- SUnSAL algoritmas beveik visų atliktų eksperimentų metu gaudavo geriausius rezultatus.
- Iš gautų eksperimentų rezultatų artimiausiu metu planuojama teikti ISI straipsnį.

# Kito pusmečio planas

Egzaminai		Dalyvavimas konferencijose		Publikacijos	
Planas	Ivykdyta	Planas	Ivykdyta	Planas	Ivykdyta
Fundamentalieji informatikos ir informatikos inžinerijos metodai		Dalyvavimas konferencijoje Lietuvoje		Algoritmų palyginimo tyrimo rezultatų publikavimas (recenzuojamame leidinyje, CA WoS su Impact Factor).	



**Vilniaus  
universitetas**

# Kontaktai

Akademijos g. 4

LT-08663 Vilnius

+370 6 256 79560

[vytautas.paura@mif.stud.vu.lt](mailto:vytautas.paura@mif.stud.vu.lt)