

## 地物空间分布特性的高光谱遥感图像解混算法

汤毅\*, 万建伟, 许可, 王玲  
(国防科技大学 电子科学与工程学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:**在高光谱遥感图像中,地物的空间分布往往呈现两种特征:一是都有各自的主导区域;二是在地表空间上分布连续.利用这两种先验信息,分别引入了对丰度的正交约束与平滑约束,提出了一种基于丰度约束的非负矩阵分解算法.为进一步提高算法的性能,另外还提出了一种新的算法停止准则及权重因子调整策略,以适应信噪比以及像元混合程度的变化.在仿真数据和实测数据上的实验结果表明,该算法不仅能很好地表征地物的分布特征,提高解混精度,而且在信噪比较低,无纯像元的条件下,仍然能得到较好的解混结果.

**关键词:**高光谱遥感;光谱解混;非负矩阵分解;正交约束;平滑约束

**中图分类号:**TP394.1;TH691.9 **文献标识码:**A

## Hyperspectral unmixing based on material spatial distribution characteristic

TANG Yi\*, WAN Jian-Wei, XU Ke, WANG Ling

(College of Electronic Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** In hyperspectral remote sensing imagery, material usually present two spatial distribution characteristics: one is its dominance in some special areas, another is its consistency on the land surface. By utilizing this two prior information, we propose an algorithm named nonnegative matrix factorization (NMF) with abundance constraint, which introduces both orthogonality and smoothness into abundance. To further improve the algorithm performance, we also propose a new stop criterion and an adjusting method of adapting weight factor to the varying signal-to-noise (SNR) and mixing degree. Experimental results based on synthetic and real hyperspectral data show that our algorithm not only represents material distribution characteristics very well, but also increases the unmixing accuracy. Meanwhile, the algorithm can lead to satisfactory unmixing results under the conditions of low SNR and no pure pixels.

**Key words:** hyperspectral remote sensing, spectral unmixing, nonnegative matrix factorization, orthogonality constraint, smoothness constraint

**PACS:** 95.75.Mn

### 引言

高光谱遥感是遥感技术发展的一个新的阶段,其光谱波段数多达数十个甚至数百个,光谱分辨率高达 $10^{-2}\lambda$ 数量级,在地质勘探、军事侦察等领域得到了广泛的应用<sup>[1]</sup>.但由于传感器空间分辨率的限制,以及多样的地物混合形式,造成所拍摄的高光谱图像中存在大量的混合像元,它们不仅影响了地物分类和识别的精度,同时也是定量遥感发展的障碍.光谱解混的目的就是从存在混合像元的高光谱图像

中提取组成场景的基本成分(端元),并反演这些基本成分在场景中的分布(丰度).

当地物之间的混合方式属于“棋盘状(checkerboard)”混合时,光子只与场景中的一种地物发生相互作用,可以用线性混合模型(Linear Mixing Model, LMM)来描述混合像元的形成机理<sup>[2]</sup>.近十年来,国内外学者在LMM的基础上相继提出了多种基于几何学的光谱解混算法,具有代表性的有:纯像元指数(Pure pixel index, PPI)<sup>[3]</sup>,顶点成分分析算法(Vertex Component Analysis, VCA)<sup>[4]</sup>,N-FINDR<sup>[5]</sup>,

收稿日期:2013-09-24,修回日期:2013-12-23

基金项目:国家自然科学基金资助项目(41201363)

Foundation items: Supported by National Natural Science of China(41201363)

作者简介(Biography):汤毅(1983-),男,湖北荆州人,博士研究生,主要研究领域为高光谱遥感图像处理.

\*通讯作者(Corresponding author):E-mail:lantange@163.com

Received date: 2013-09-24, revised date: 2013-12-23

基于 P 范数的纯像元识别算法 (P-Norm Based Pure Pixel Identification, TRI-P)<sup>[6]</sup>, 最小体积单形体分析 (Minimum Volume Simplex Analysis, MVSA)<sup>[7]</sup>, 基于变量分裂增广拉格朗日算法的单形体识别 (Simplex Identification Via Split Augmented Lagrangian, SISAL)<sup>[8]</sup> 等, 其中, PPI、VCA、N-FINDR、TRI-P 类算法依赖于待处理的场景中存在每类地物的纯像元, 但是, 在真实的场景中一般不能满足这个条件. MVSA、SISAL 这类算法虽然不需要场景中存在纯像元, 但是受噪声影响较大.

为解决上述算法存在的不足, 近年来, 非负矩阵分解 (Nonnegative Matrix Factorization, NMF) 在高光谱解混中的应用受到了广泛的关注. 与上述算法相比, 以 NMF 为基础的光谱解混算法既不需要纯像元假设, 又具有较强的抗噪能力, 同时也不用进行降维预处理. 具有代表性的算法有: Miao 和 Qi 提出的最小体积约束 NMF (Minimum Volume Constrained NMF, MVCNMF) 算法<sup>[9]</sup>, 刘雪松等提出的丰度分离和平滑约束的 NMF (Abundance Separation and Smoothness Constrained NMF, ASSNMF) 算法<sup>[10]</sup>, Qian 等提出的  $q$  ( $0 < q < 1$ ) 范数稀疏 NMF ( $L_q$ -NMF)<sup>[11]</sup>, Lu 等提出的图正则化稀疏 NMF (Graph-Regularized L1/2 NMF, GLNMF)<sup>[12]</sup>. 这些算法所引入的正则化约束都从不同方面反映了对高光谱图像本质信息的认识, 或者是对解混结果的某种期望, 都取得了一定的效果. 但是它们也有自身的缺点, 端元之间的强相似性容易造成 MVCNMF 中的体积约束失效; ASSNMF 的平滑约束是采用固定的空间关系来描述复杂的空间结构, 而且分离约束受初始值影响较大;  $L_q$ -NMF 以及 GLNMF 的稀疏约束将所有像元作相同的处理, 事实上, 纯像元的稀疏性比混合像元的稀疏性要强, 不区别地对每个像元都加稀疏约束反而会导致解混精度降低<sup>[13]</sup>.

解混精度在很大程度上取决于正则化约束所引入的先验信息, 针对传统约束 NMF 算法存在的不足, 本文利用两种新的描述地物空间分布特征的方法, 分别称为正交约束与平滑约束, 并结合 NMF, 提出了一种基于丰度约束的 NMF (Abundance Orthogonality and Smoothness Constrained NMF, AOSNMF) 算法; 为提高算法对不同场景的适应能力, 根据噪声的估计值本文还提出了一种新的算法停止准则及权重因子调整方法. 实验结果表明, 该算法能够得到满意的结果.

## 1 问题描述

### 1.1 线性混合模型

在光谱线性混合模型中, 每个像元的光谱响应由各个端元的光谱响应按照其对应的丰度线性混合而成. 用  $\mathbf{x}[n] \in \mathbf{R}^{L \times 1}$  表示波段数为  $L$  的高光谱图像中某像元的观测光谱,  $\mathbf{x}[n]$  可以表示为:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}[n] &= \mathbf{E}_n \mathbf{s}[n] + \mathbf{w}[n] \\ &= \sum_{i=1}^M s_i[n] \mathbf{e}_{ni} + \mathbf{w}[n] \quad \forall n = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $M$  表示端元数量,  $N$  表示像元数量,  $\mathbf{E}_n = [\mathbf{e}_{n1}, \dots, \mathbf{e}_{nM}] \in \mathbf{R}^{L \times M}$  表示构成第  $n$  个像元的端元矩阵,  $\mathbf{e}_{ni}$  表示第  $i$  个端元,  $\mathbf{s}[n] = [s_1[n], \dots, s_M[n]]^T \in \mathbf{R}^{M \times 1}$  表示第  $n$  个像元的丰度向量,  $s_i[n]$  表示第  $i$  个端元在该像元中所占的比例,  $\mathbf{w}[n] \in \mathbf{R}^{L \times 1}$  为误差向量.

分别将所有像元的观测光谱、丰度向量、误差向量按一定顺序排列成观测矩阵  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}[1], \dots, \mathbf{x}[N]]$ , 丰度矩阵  $\mathbf{S} = [\mathbf{s}[1], \dots, \mathbf{s}[N]]$ , 误差矩阵  $\mathbf{W} = [\mathbf{w}[1], \dots, \mathbf{w}[N]]$ , 在不考虑光谱变异性的情况下, 认为构成每个像元的端元矩阵都相同<sup>[9]</sup>, 也即  $\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_2 = \dots = \mathbf{E}_N = \mathbf{E}$ , (1) 式可转化为:

$$\mathbf{X} = \mathbf{E} \mathbf{S} + \mathbf{W} \quad (2)$$

根据丰度的物理含义, 丰度应该满足非负约束 (Abundance Non-negative Constraint, ANC) 及和为一约束 (Abundance Sum-to-one Constraint, ASC), 可以表示为:

$$s_i[n] \geq 0 \quad \forall i, \forall n \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^M s_i[n] = 1 \quad \forall n \quad (4)$$

### 1.2 非负矩阵分解

NMF 是由 Lee 和 Seung 等<sup>[14, 15]</sup> 提出的一种新的矩阵分解方法, 可描述为: 给定非负矩阵  $\mathbf{Y} \in \mathbf{R}^{l \times c}$ , 找到两个非负矩阵  $\mathbf{W} \in \mathbf{R}^{l \times r}$  和  $\mathbf{H} \in \mathbf{R}^{r \times c}$ , 使得

$$\mathbf{Y} \approx \mathbf{W} \mathbf{H} \quad (5)$$

其中  $l, c$  分别为  $\mathbf{Y}$  的行数与列数,  $r$  为  $\mathbf{W}$  的阶数. 比较式 (2) 与式 (5) 的数学结构及对应的含义, 可以发现, 非负矩阵分解与光谱线性混合模型非常相似: 其中  $\mathbf{Y}$  与  $\mathbf{X}$  对应, 表示观测数据;  $\mathbf{W}$  与  $\mathbf{E}$  对应, 表示数据的潜在结构, 在高光谱图像中, 这种潜在结构可认为是端元;  $\mathbf{H}$  与  $\mathbf{S}$  对应, 表示每种结构在观测数据中所占的分量. 由此可以看出, 非负矩阵分解非常适合处理线性混合条件下的光谱解混问题, 通常利用最小化欧式距离函数 (6) 来求解  $\mathbf{E}$  与  $\mathbf{S}$ ,

$$J_0(\mathbf{E}, \mathbf{S}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{E}\mathbf{S}\|^2, \quad (6)$$

其中  $\|\cdot\|$  表示矩阵的 Frobenius 范数. 但是, 由于目标函数的特点, 该问题存在大量的局部解. 例如, 存在非负可逆矩阵  $\mathbf{D}$ , 使得  $\mathbf{X} = \mathbf{E}\mathbf{S} = \mathbf{E}\mathbf{D}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{S}$ , 因此, 问题的最终解受初始值影响较大. 关于  $\mathbf{NMF}$  存在唯一全局最优解条件的理论探讨可以参考文献<sup>[16]</sup>. 为了减轻初始值对结果的影响, 除了非负约束以外, 应结合具体的应用场景, 引入额外的对  $\mathbf{E}$  与  $\mathbf{S}$  的约束条件, 使最终解收敛到有意义的解. 在本文中, 有意义的解被认为是符合高光谱遥感图像地物分布特征的解混结果.

## 2 算法描述

主导区域是文献<sup>[10]</sup>提出的一种地物分布特征, 这种特征符合绝大多数真实场景. 在高光谱遥感图像中, 每种地物都有各自的主导区域, 地物在其主导区域中的比例占绝对优势, 而其它地物在这个区域中所占比例很小. 主导区域与稀疏性是有区别的, 稀疏性强调的是地物种类的数目要少, 而主导区域的特点是突出地物所占比例要大, 可看作是像元丰度的不对称性及地物丰度分离性的结合. 地物除了有主导区域之外, 它在整个地表空间上分布连续, 较大的变化一般只会出现在地物的边缘, 这种特征可转化为相邻像元丰度之间的一致性. 本文分别用正交约束及平滑约束来描述这两种地物分布特征.

### 2.1 正交约束

令  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$  分别表示两个非负  $M$  维列向量,  $\mathbf{a}$  与  $\mathbf{b}$  的内积为  $\mathbf{a}^T\mathbf{b}$ , 当  $\mathbf{a}^T\mathbf{b}$  为 0 时表示  $\mathbf{a}$  与  $\mathbf{b}$  正交. 在本文中, 将正交性定义为两个向量之间内积, 该值越小, 正交性越强; 反之, 正交性越弱. 为了清楚地阐述本文提出的正交约束的含义, 下面结合图 1 来说明这个问题:

其中图 1(a) 表示一个由三种地物组成的场景数据在二维特征空间中的散点图, 图 1(b) 表示该场景的丰度在三维空间中的散点图.  $\mathbf{A}_1$ 、 $\mathbf{A}_2$ 、 $\mathbf{A}_3$  分别为三种地物的主导区域,  $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  对应着这三个主导区域中的丰度向量, 由 1(b) 可以看出, 它们相互之间的正交性很强, 此时  $\mathbf{a}_1^T\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_1^T\mathbf{a}_3$ 、 $\mathbf{a}_2^T\mathbf{a}_3$  三者之和接近于 0. 根据上面丰度向量之间的特点, 引入主导约束  $J_1(\mathbf{S})$

$$J_1(\mathbf{S}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i)^T s(j) v_{ij} = \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbf{S}\mathbf{V}\mathbf{S}^T), \quad (7)$$

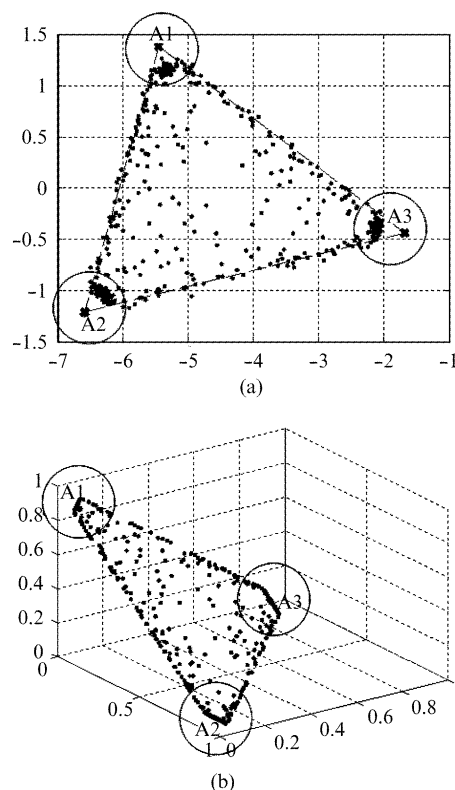


图 1 丰度正交性示意图 (a) 数据在二维特征空间的散点图 (b) 丰度在三维空间中的散点图  
Fig. 1 The schematic plan of abundance orthogonality (a) 2D scatter points of data in feature space and (b) 3D scatter points of abundance

其中  $v_{ij}$  为像元  $i$  与像元  $j$  的丰度之间正交性的强度, 该值可以由这两个像元之间的光谱特征差异来计算, 在本文中用欧式距离来衡量光谱特征的差异, 具体表达式为:

$$v_{ij} = v_{ji} = \begin{cases} \|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}(j)\|^2 & j \in O(i) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (8)$$

其中  $O(i)$  表示像元  $i$  的参考正交像元集合,  $O(i)$  中的元素个数为  $M-1$ . 参考正交像元的获取可以通过将像元  $i$  作为第一个已提取的端元输入 TRI-P ( $p=2$ ) 算法<sup>[6]</sup> 而得到. 式的梯度为:

$$\frac{\partial J_1(\mathbf{S})}{\partial \mathbf{S}} = \mathbf{S}\mathbf{V} \quad (9)$$

虽然每种地物都有各自的主导区域, 并不意味着场景中所有区域都对应着某种地物的主导区域, 仍然存在部分高度混合区域. 对  $\mathbf{V}$  的计算实质上是利用像元之间的特征差异来预估计像元对正交约束的影响. 根据 TRI-P 的特点, 如果像元  $i$  位于主导区域, 如图 1(a) 所示, 其参考正交像元同样也位于主导区域, 此时该像元与其参考正交像元的距离较远,  $v_{ij}$  比较大, 正交性也较强, 对  $J_1(\mathbf{S})$  的影响也

较大. 如果像元  $i$  不属于主导区域, 如图 1(a) 所示, 该像元位于单形体内部, 此时该点与其参考正交像元的距离就比较近,  $v_{ij}$  相对比较小, 正交性相应也较弱, 对  $J_1(S)$  的影响也较小, 这样可以降低高度混合区域对  $J_1(S)$  的影响.

文献<sup>[9]</sup>解释了最小体积约束对解混结果的作用, 它将体积约束看作是一种与失真最小作用相反约束力, 迫使端元朝内部收紧. 而正交约束与体积约束的作用较为相似, 它也是一种与失真最小作用相反约束力. 如图 2 所示,  $S_1$ 、 $S_2$ 、 $S_3$  表示三种丰度分布, 记它们所对应的端元构成的单形体体积为  $V(S_1)$ 、 $V(S_2)$ 、 $V(S_3)$ , 很明显,  $V(S_1)$  最小, 而此时  $J_1(S)$  也最小, 无论当前的丰度是处于  $S_2$  还是  $S_3$ , 为了使正交约束减小, 它们都会朝  $S_1$  方向移动, 也就是单形体体积减小的方向.

但正交约束与最小体积约束不同, 它是通过对丰度的作用来间接约束单形体的体积, 它不仅能提高解混结果中端元的精度, 而且同时也能提高丰度反演的精度. 虽然传统的稀疏解混算法也具有与最小体积约束类似的作用<sup>[11]</sup>, 但在高光谱图像中, 完全稀疏(所有像元均为纯像元)的场景几乎不存在, 绝大多数像元为混合像元, 只是混合的程度不同, 解混结果越稀疏并不意味着解混精度就越高, 所以, 本文利用丰度的区域主导性代替稀疏性来描述地物的分布.

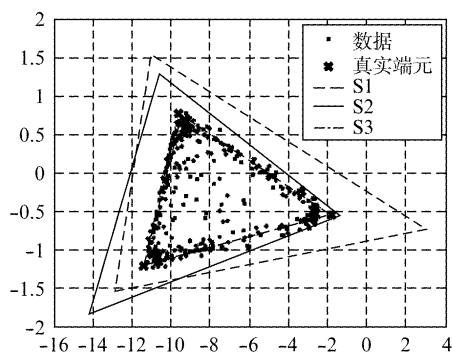


图2 单形体体积与正交约束的关系  
Fig. 2 The relationship between simplex volume and orthogonality constraint

## 2.2 平滑约束

平滑约束考虑的是地物本身在空间中分布的连续性. 它不仅可以使解混结果中丰度更加平滑, 同时也能在正交约束的基础上, 增加地物在局部空间上的主导地位. 本文用相邻像元丰度向量之间的一致性来描述这种空间结构, 具体为:

$$\begin{aligned} J_2(S) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in N(i)} \|s(i) - s(j)\|^2 \bar{u}_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N s(i)^T s(i) q_{ii} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in N(i)} s(i)^T s(j) \bar{u}_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}(SQS^T) - \frac{1}{2} \text{Tr}(SUS^T) \end{aligned} \quad (10)$$

其中  $\text{Tr}(\cdot)$  表示求矩阵的迹,  $N(i)$  表示像元  $i$  的空间邻域,  $\bar{u}_{ij}$  为像元  $i$  与像元  $j$  的相似度,  $U$ 、 $Q$  为  $R^{N \times N}$  的矩阵, 与  $\bar{u}_{ij}$  的关系为:

$$\begin{aligned} u_{ij} &= \begin{cases} \bar{u}_{ij} & j \in N(i) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \\ q_{ij} &= \begin{cases} \sum_{j \in N(i)} \bar{u}_{ij} & i = j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned} \quad (11)$$

将对  $U$  的计算看作是对空间连续性的预处理过程. 与文献<sup>[10]</sup>采用固定的空间关系结构不同, 本文用  $\bar{u}_{ij}$  来表示像元丰度之间的接近程度, 相邻像元在数据特征空间中的越相似, 它们之间的丰度也就越接近. 在本文中  $N(i)$  选择 8 邻域的结构, 且利用高斯核函数计算  $\bar{u}_{ij}$

$$\bar{u}_{ij} = e^{-\|x^{(i)} - x^{(j)}\|^2} \quad (12)$$

文献[12]中也用到了类似的约束方式, 但该文是在整个场景中寻找相似像元, 而在本文中认为这种相似只是连续性在局部的体现. 进一步对式的约束条件求梯度可得:

$$\frac{\partial J_2(S)}{\partial S} = SQ - SU \quad (13)$$

## 2.3 AOSNMF 算法

综合失真最小  $J_0$ , 正交约束  $J_1$ 、平滑约束  $J_2$ , 光谱解混问题可描述为:

$$\begin{aligned} \min_{E, S} J(E, S) &= \frac{1}{2} J_0 + \frac{1}{2} \lambda_1 J_1(S) + \frac{1}{2} \lambda_2 J_2(S) \\ \text{s.t. } E &\geq 0 \quad S \geq 0 \quad I_M^T S = I_N^T \end{aligned} \quad (14)$$

其中  $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$  分别为正交约束与平滑约束的权重. 对求梯度

$$\frac{\partial J}{\partial E} = ESS^T - XS^T \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial S} &= (E^T E S + \lambda_2 S Q + \lambda_1 S V) - \\ &\quad (E^T X + \lambda_2 S U) \end{aligned} \quad (16)$$

根据文献[14], 得到  $E$ 、 $S$  的更新迭代公式如下:

$$E = E \cdot (XS^T) ./ (ESS^T), \quad (17)$$

$$S = S \cdot (E^T X + \lambda_2 S U) ./ \quad (18)$$

$$(E^T E S + \lambda_2 S Q + \lambda_1 S V),$$

其中“ $\cdot$ ”、“ $./$ ”分别表示矩阵对应元素的相乘与

相除. 对于 ANC 约束, 可以在 NMF 求解过程中满足, 而对于 ASC 约束, 本文采用文献<sup>[17]</sup>的做法, 在更新  $S$  之前, 对  $E, X$  进行如下扩展:

$$E_{\delta} = \begin{bmatrix} E \\ \delta I^T \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} X \\ \delta I^T \end{bmatrix}, \quad (19)$$

其中  $I^T$  为全为 1 的行向量,  $\delta$  用来控制 ASC 约束的影响程度. 在每次更新  $S$  之后, 重新归一化  $S$  使之严格满足 ASC 约束.

#### 2.4 算法停止准则

算法停止需要同时满足 3 个条件:

1) 算法局部收敛. 本文采用相邻迭代之间的相对误差来判断, 当该误差小于门限  $tol$  时代表算法局部收敛, 可表示为:

$$tol \geq \left| \frac{J(E^{k+1}, S^{k+1}) - J(E^k, S^k)}{J(E^k, S^k)} \right|. \quad (20)$$

2)  $\|X - ES\|^2$  小于总体噪声方差.

$$\|X - ES\|^2 \leq \sum_{n=1}^N w[n]^T w[n]. \quad (21)$$

如果  $E, S$  为真实的光谱解混结果,  $\|X - ES\|^2$  应该与总体噪声水平相当. 但在事实上,  $\|X - ES\|^2$  要比真实的总体噪声方差小. 如图 1(a) 所示, 受噪声影响, 位于单形体表面上的数据或朝单形体内部移动, 或朝单形体外部移动, 由于各端元之间存在一定的相关性, 对朝单形体内部移动的数据的误差估计不是无偏估计, 它小于噪声的方差. 所以, 这个条件只是算法停止的必要条件, 不足以判断算法是否应该停止, 需要下面的条件作为辅助.

3) 超过一定比例的像元误差在一定的范围之内, 可表示为

$$F\{x[n] \mid \|x[n] - Es[n]\|^2 \leq nlevel, \forall n\} \geq N * plevel, \quad (22)$$

其中  $F\{\cdot\}$  表示求集合中元素的数量,  $nlevel$  为误差门限,  $plevel$  为百分比门限. 式(21)是根据整体误差来判定算法是否停止的条件, 式(22)是由个体像元误差来判定算法是否停止的条件, 并且剔除了异常像元的影响. 通常可以假定噪声为零均值加性高斯噪声,  $w[n] \sim N(0, \text{diag}(\sigma_j^2))$ , 其中  $\text{diag}(\sigma_j^2)$  为  $L \times L$  的对角矩阵,  $\sigma_j^2 (j = 1, \dots, L)$  为各波段的噪声方差, 并且本文采用 Hysime<sup>[18]</sup> 来估计噪声. 定义随机变量  $r$ :

$$r = w[n]^T (\text{diag}(\sigma_j^2))^{-1} w[n], \quad (23)$$

则  $r$  为自由度为  $L$  的 chi 平方分布, 此时, 各像元的误差要满足:

$$\Pr(\|x[n] - Es[n]\|^2 \leq r) \geq Pa, \quad (24)$$

$\Pr(\cdot)$  表示概率,  $Pa$  表示像元误差小于  $r$  的概率, 为设计值. 那么  $nlevel$  可由  $\chi_L^2$  分布及  $Pa$  查表确定, 当观测数据的量很大时, 由概率论知识, 此时可令  $plevel$  等于  $1 - Pa$ .

#### 2.5 权重因子的自适应调整

权重因子  $\lambda_1, \lambda_2$  表示的是正交约束与平滑约束的影响程度, 很明显, 在端元相同的情况下, 噪声越大,  $\lambda_1, \lambda_2$  应该越大, 反之,  $\lambda_1, \lambda_2$  就越小; 各地物丰度之间的对比度越大,  $\lambda_1$  应该越大, 反之,  $\lambda_1$  就越小. 首先, 初始化  $\lambda_1, \lambda_2$  为较大的值, 当算法局部收敛时, 根据算法停止准则(21)、(22)判断是否需要减小  $\lambda_1, \lambda_2$  的值. 本文采取以下交替更新策略来调整  $\lambda_1, \lambda_2$ , 先减小平滑约束权重因子  $\lambda_2$ , 当  $\lambda_2$  的变化很小时, 再减小正交约束权重因子  $\lambda_1$ , 并重新初始化  $\lambda_2$ .

综上所述, AOSNMF 算法的流程图如表 1 所示:

表 1 AOSNMF 算法的伪代码

Table 1 Pseudocode for AOSNMF algorithm

输入: 观测矩阵 $X$ , 端元数量 $M$ , 迭代误差偏差 $tol$ , 概率门限 $Pa$ , 正交权重因子 $\lambda_1$ , 平滑权重因子 $\lambda_2 = \lambda_2^0$ , ASC 影响因子 $\delta$
Step1: 初始化, 根据式(11)计算 $U, Q$ , 根据式(8)及 TRI-P 计算 $V$ ; 利用 Hysime 估计噪声 $w[n]$ , 并根据(23)、(24)式计算 $nlevel, plevel$ ; 用 VCA 提取初始端元 $E^0$ , 利用 FCLS 计算初始丰度 $S^0$
Step2: 根据(17)、(18)式分别对 $E, S$ 分别进行迭代
Step3: 根据(20)判断算法是否局部收敛, 是, 转 Step4; 否则, 转 Step2
Step4: 根据(21)、(22)式判断算法是否停止, 如果停止, 转输出; 否则, 转 Step5
Step5: 如果 $\Delta\lambda_2 \leq 10^{-3}$ , 令 $\lambda_1 = 0.8\lambda_1, \lambda_2 = \lambda_2^0$ , 转 Step2; 否则 $\lambda_2 = 0.5\lambda_2$ , 转 Step2
输出: 端元矩阵 $E$ , 丰度矩阵 $S$

#### 2.6 算法的计算复杂度

假设算法迭代  $t$  次后达到停止条件. 每次迭代, 标准 NMF 乘子迭代的计算复杂度为  $O(MLN)$ ;  $V, U$  矩阵中每行非零元素的平均个数分别为  $M-1$  与  $8$ , 正交约束与平滑约束的计算复杂度分别为  $O(M^2N)$ 、 $O(MN)$ ; 进而得出更新  $E, S$  的计算复杂度为  $O(tMLN)$ . 除此之外, 对  $V, U$  的计算也需要一定的计算量, 它们的计算复杂度分别为  $O(MLN^2)$ 、 $O(LN)$ . 所以, AOSNMF 算法的计算复杂度为  $O(tMLN + MLN^2)$ .

### 3 实验结果与讨论

分别在仿真数据及真实数据上测试算法的性能. 在仿真数据上的实验包含三个部分: 一是分析约束条件对解混结果的影响; 二是将 AOSNMF 与同类解混算法的进行性能比较; 三是算法的收敛性分

析. 在实验中,所有实验的参数设置为:  $tol = 10^{-6}$ ,  $Pa = 0.003$ ,  $\lambda_1 = 0.01$ ,  $\lambda_2^0 = 1$ ,  $\delta = 0.02 \times L$ .

### 3.1 仿真数据实验

从美国地质调查局(USGS)光谱库中任意选择5种地物的光谱作为仿真数据的端元,该光谱库中地物光谱的波长范围是  $0.38 \sim 2.5 \mu\text{m}$ ,光谱分辨率为  $10 \text{ nm}$ ,共有224个波段.丰度生成的方法是:先将  $100 \times 100$  大小的图像分割为互不重叠的大小为  $10 \times 10$  的块,并将这些块随机分给不同的地物以形成只含纯地物的丰度分布;然后,用窗口大小为  $11 \times 11$  的高斯滤波器对不同地物的丰度分布进行滤波,以形成包含混合像元的丰度分布;最后,将端元与丰度相乘即得到高光谱图像的仿真数据.以其中一组实验数据为例,地物的光谱与丰度分布如图3所示:

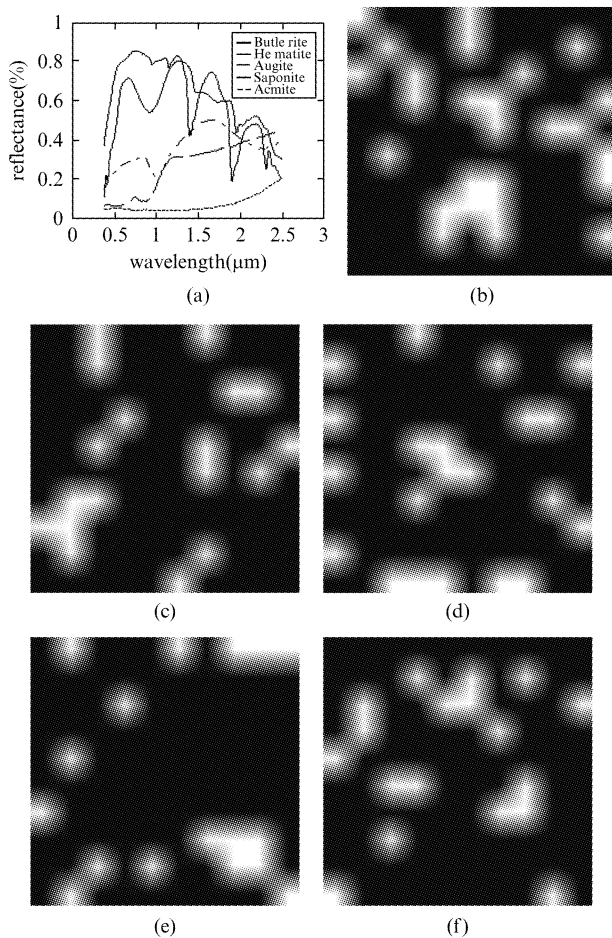


图3 仿真数据(a)5种地物的光谱(b)地物1的丰度(c)地物2的丰度(d)地物3的丰度(e)地物4的丰度(f)地物5的丰度

Fig. 3 Simulation data for (a) spectra of five materials, (b) abundance of material 1, (c) abundance of material 2, (d) abundance of material 3, (e) abundance of material 4, and (f) abundance of material 5

#### 3.1.1 约束对解混结果的影响

从两个方面来测试约束条件对解混结果的影响,一是在端元已知的条件下,与无约束条件下进行对比,分析各约束条件对丰度反演结果的影响.二是在端元未知的情况下,分析 AOSNMF 对初始值的依赖程度.

实验1:测试 AOSNMF 中的各约束条件对丰度反演结果的影响.在端元已知的条件下,固定像元纯度为1,信噪比为20 dB,分别测试在无约束、正交约束、平滑约束、以及正交约束与平滑约束共同作用下(双约束)对丰度的影响,以第三种地物为例,其丰度反演结果如图4所示:

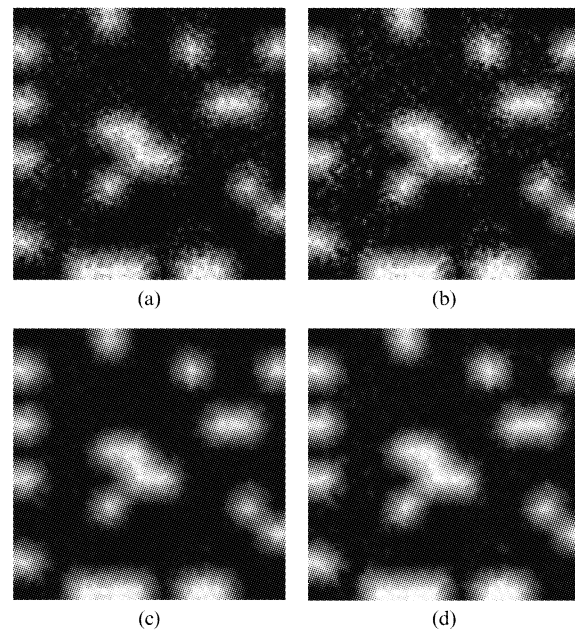


图4 不同约束条件对丰度的影响(a)无约束(b)正交约束(c)平滑约束(d)正交约束+平滑约束

Fig. 4 The influence of different constraints on abundance. (a) no constraint, (b) orthogonality constraint, (c) smoothness constraints, and (d) orthogonality and smoothness constraints

从图4可以直观看出,平滑约束的引入增强了地物分布的连续性,去除了大量的孤立点,而正交约束的作用则不太明显,反而增加了少数孤立点.正交约束的作用主要在于迫使地物丰度分布具有主导区域这一特征,它既要增强地物丰度之间的对比度,又要提高各像元丰度向量的不对称性.为了验证正交性约束的这一特点,下面分别以地物丰度之间 K-L 散度之和(称为对比度),以及所有像元丰度向量的不对称性之和作为指标来衡量各约束条件的作用.其中不对称性的计算采用文献<sup>[19]</sup>中稀疏度计算的

方法,与以  $\|l\|_0$  范数作为稀疏度不同,它实质上计算的是丰度向量非对称性.

表 2 不同约束条件对丰度的对比度及非对称性的影响  
Table 2 The influence of different constraints on abundance contrast and asymmetry

	对比度( $10^3$ )	不对称性( $10^3$ )
真实丰度	2.205 1	6.948 5
无约束	1.547 6	6.585 7
正交约束	1.830 9	6.939 5
平滑约束	1.037 0	6.631 4
双约束	1.604 5	6.926 6

从表 2 可以看出,与无约束条件相比,正交约束、平滑约束都能增加丰度向量的不对称性,但是正交约束的作用较为明显.而且正交约束能增强各地物丰度之间的对比度,反之平滑约束却降低了地物丰度之间的对比度.进一步结合图 3-(d)、以及表 2 中双约束的实验结果可以得出,同时引入正交约束与平滑约束能够使解混结果较好地反映地物的空间分布特征.

实验 2: 测试 AOSNMF 对初始化的依赖关系.如 2.2 小节中所述,无约束 NMF 算法的收敛结果受初始值影响较大,加上一定的约束条件后,可以减轻受初始解影响的程度,但它仍然有无穷多个局部解.选择合适的初始值,既有利于提高算法的收敛速度,也有利于提高解得质量.本实验中以像元纯度为 0.9,信噪比为 20 dB 的仿真数据为例,分别采用 VCA 初始化和随机从图像中选择像元作为初始端元,在 50 次 Monte Carlo 实验中的 SAD、RMSE 的分布如图 5 所示.

在图 5 中,实线的两个端点表示仿真过程中 SAD、RMSE 的最大值与最小值,柱状图与实线的交点为 SAD、RMSE 的均值,由图 5 可以看出,本文提出的算法很大程度上减轻了初始化对最终结果的影响,虽然随机初始化所产生的的最优值要略优于 VCA 初始化所产生的的结果,但是后者的均值、方差都优于前者,所以 VCA 初始化的整体效果明显优于随机初始化.

综合实验 1 与实验 2 可以得出,约束条件的引入提高了各地物丰度的对比度及各像元丰度的非对称性,并减轻了解混结果受初始化影响的程度,增强了算法的稳健性.

### 3.1.2 与同类算法的性能比较

本文算法的比较对象为 VCA<sup>[4]</sup>、MVCNMF<sup>[9]</sup>以及 ASSNMF<sup>[10]</sup>.由于 VCA 只能提取端元,我们在它结果基础上用 FCLS<sup>[17]</sup>进行丰度反演,并将它记为

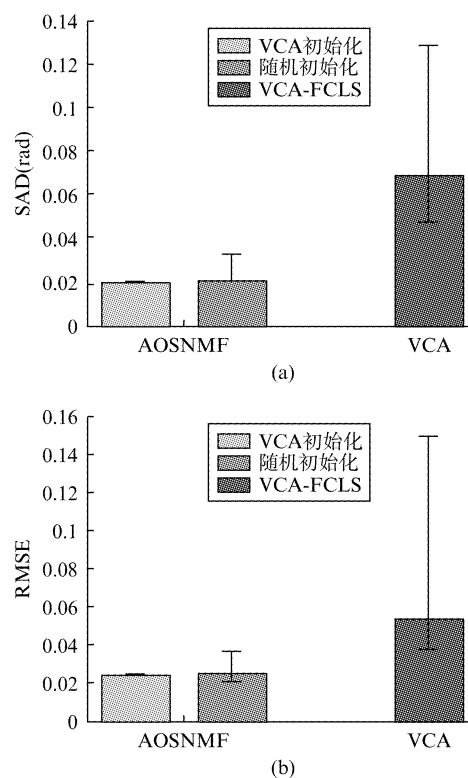


图 5 AOSNMF 分别采用 VCA 和随机初始化时的运行结果比较 (a) SAD (b) RMSE

Fig. 5 Results comparison when AOSNMF take VCA and random initializations, (a) SAD and (b) RMSE

VCA-FCLS. MVCNMF、ASSNMF 的参数设置与原文相同,初始化方式与 AOSNMF 相同.采用平均端元光谱角距离和平均丰度均方根误差这两个广泛使用的评价指标来衡量算法的性能,表达式为:

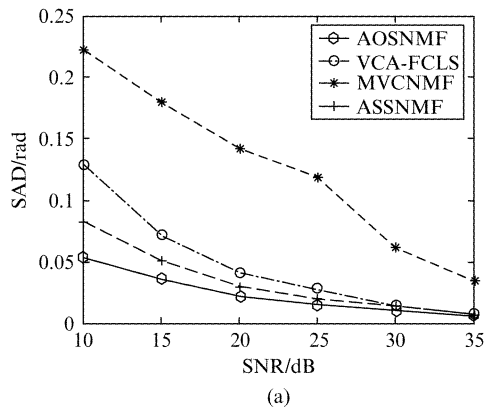
$$SAD = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \cos^{-1} \frac{\langle \mathbf{e}_i, \hat{\mathbf{e}}_i \rangle}{\|\mathbf{e}_i\| \|\hat{\mathbf{e}}_i\|}, \quad (25)$$

$$RMSE = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (s_i[n] - \hat{s}_i[n])^2}, \quad (26)$$

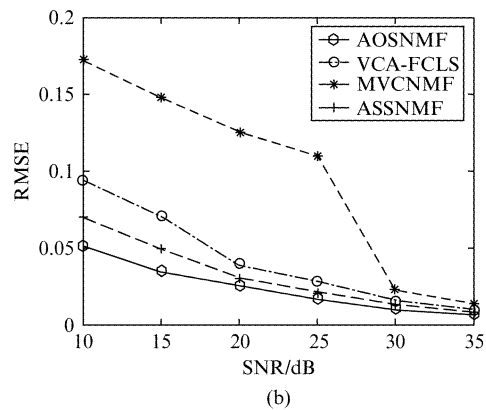
其中  $\mathbf{e}_i$ 、 $\hat{s}_i[n]$  分别为真实端元与真实丰度的参考值.分别用两组实验测试算法的抗噪能力以及算法对像元纯度变化的适应能力.

实验 1: 测试算法抗噪能力.在像元纯度相同的条件下(固定为 1),在仿真数据中加入加性零均值高斯白噪声,并逐渐改变信噪比(SNR)的大小,由 10 dB 逐渐增加到 35 dB,步长为 5 dB,以形成不同信噪比的仿真数据.每种信噪比条件下分别进行 50 次 Monte Carlo 实验,取 50 次实验的均值作为最终结果.仿真结果如图 6 所示:

从图 6 可以看出,随着信噪比的降低,各算法的抗噪性能的差距增加.其中,AOSNMF 随信噪比变化的起伏最小,而且在各种信噪比条件下的解混精度



(a)



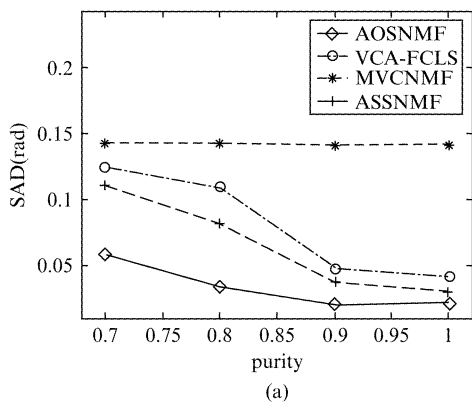
(b)

图6 算法在不同信噪比条件下的性能比较 (a) SAD (b) RMSE

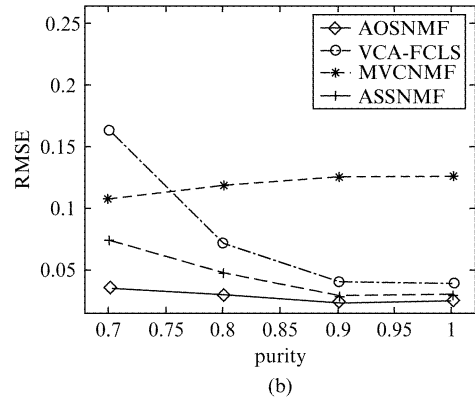
Fig. 6 Performance comparison of the algorithms with different noise level, (a) SAD and (b) RMSE

最高,所以它的抗噪性能最好,ASSNMF次之,MVCNMF最差。

实验2:测试算法对像元纯度变化的适应能力。在信噪比相同的条件下(固定为20 dB),像元纯度的改变采用文献<sup>[9]</sup>中方法,将所有地物的丰度的最大值都由1逐渐减小至0.7,步长为0.1,以形成不同像元纯度的仿真数据。每种像元纯度条件下分别进行50次Monte Carlo实验,取50次实验的均值作为最终结果。仿真结果如图7所示:



(a)



(b)

图7 算法在不同像元纯度下的性能比较 (a) SAD (b) RMSE

Fig. 7 Performance comparison of the algorithms with different pixel purity degrees, (a) SAD and (b) RMSE

从图7可以看出,VCA-FCLS受像元纯度影响最大,ASSNMF次之。虽然MVCNMF受像元纯度影响最小,但是它的解混结果并不理想。AOSNMF综合表现性能最好,它不仅受像元纯度影响较小,而且同时能取得较好的解混精度。

### 3.1.3 算法收敛性分析

下面以以像元纯度为0.9,信噪比为20 dB的条件下的一组数据为例,图8所示分别给出了 $J(\mathbf{E}, \mathbf{S})$ 的变化及权重因子 $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ 的调整过程。

由图8可以看出,在 $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ 不变的过程中, $J(\mathbf{E}, \mathbf{S})$ 单调下降直至局部收敛。为适应像元纯度及信噪比的变化, $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ 按照权重因子调整策略自适应改变直至达到算法停止条件,整个迭代过程虽然不是单调下降,但是最终的 $J(\mathbf{E}, \mathbf{S})$ 值要比前面的都小,进一步验证了权重因子调整策略的合理性。

### 3.2 真实数据实验

实验中采用了位于美国Nevada州南部沙漠地区的Cuprite数据(可以从[http://aviris.jpl.nasa.gov/html/aviris\\_freedata.html](http://aviris.jpl.nasa.gov/html/aviris_freedata.html)下载),该地区主要分布为裸露的矿物,它是由机载可见光及红外成像光谱仪(Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer, AVIRIS)于1997年拍摄而成,该数据共有224个波段,波长范围为0.37~2.50  $\mu\text{m}$ ,光谱分辨率约为10 nm。选择该数据的原因有以下几点:一是该地区典型地物的光谱及其分布有实地勘测参考<sup>[20]</sup>;二是该数据的空间分辨率较低,约为20 m,而且矿物之间的混合现象比较严重,非常适合检验算法对混合像元的处理能力。

在进行处理之前,由于信噪比太低或者水吸收



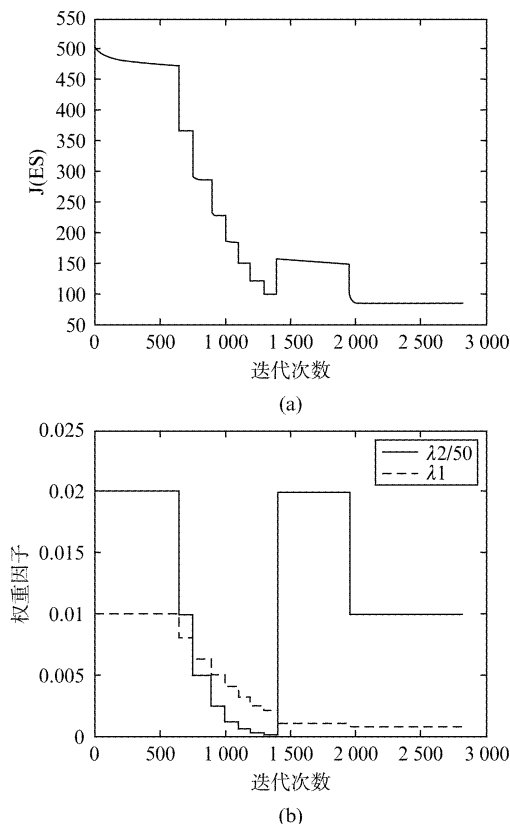


图 8 AOSNMF 的收敛性分析 (a) 目标函数值的变化过程 (b) 权重因子的自适应调整过程  
Fig. 8 The convergence analysis of AOSNMF. (a) The changing procedure of the objective function value. (b) The adaptive adjusting procedure of weight factor

的原因,其中共有 36 个波段被移除(波段号为 1 ~ 2, 104 ~ 113, 148 ~ 167, 221 ~ 224),仅保留 188 个波

段用于数据处理. 根据对该数据已有的研究<sup>[21]</sup>,本文中端元数设置为  $M = 14$ . 利用 AOSNMF 得到的各端元的丰度如图 9 所示,将丰度与实地勘测的地物分布相比较,即可得到各端元对应的地物. 为进一步衡量算法的性能,将 AOSNMF 得到的端元与 USGS 光谱库中对应矿物的光谱进行比较. 由于 AVIRIS 采集数据的条件与光谱库中矿物光谱采集的条件不同,在对不同算法进行比较之前,先去均值,然后再求平均端元光谱角距离,其表达式为:

$$SAD = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \cos^{-1} \frac{\langle \mathbf{e}_i - m(\mathbf{e}_i), \hat{\mathbf{e}}_i - m(\hat{\mathbf{e}}_i) \rangle}{\|\mathbf{e}_i - m(\mathbf{e}_i)\| \|\hat{\mathbf{e}}_i - m(\hat{\mathbf{e}}_i)\|}, \quad (27)$$

$$m(\mathbf{e}_i) = \frac{1}{M} \mathbf{I}^T \mathbf{e}_i \quad (28)$$

表 3 给出了不同算法的运行结果,黑色的粗体表示不同算法相比较取得的最好结果. 可以看出, AOSNMF 整体上给出了最好的结果.

#### 4 结论

通过引入对丰度的平滑约束和正交约束的方式来表征地物分布的空间特性,提出了一种基于丰度约束的非负矩阵分解算法;并根据解混结果的误差与噪声总体方差的关系提出了算法停止所满足的条件及相应的权重因子的调整策略. 其中,平滑约束是为了增强地物本身在空间上分布的连续性,而正交约束则是为了提高不同地物在空间上分布的对比度,权重因子的调整是为了适应信噪比及混合程度的变化. 在与其他几种典型算法的对比实验中,本文算法表现最好,验证了该算法的有效性.

表 3 不同算法在 Cuprite 数据上的端元提取结果与光谱库中参考光谱的均值去除光谱角比较(粗体的数字表示最好的结果)  
Table 3 Mean-removed SAD comparison between library spectra and endmembers extracted by different algorithms of Cuprite data sets (the bold numbers represent the best performance)

	AOSNMF	VCA-FCLS	MVCNMF	ASSNMF
明矾石 Alunite	0.183 8	0.315 9	<b>0.16</b>	0.185 2
钙铁榴石 Andradite	0.233 5	0.268 1	<b>0.15</b>	0.253 6
铍长石 Buddingtonite	<b>0.377 7</b>	0.396 4	0.70	0.382 4
玉髓 Chalcedony	0.595 0	0.645 6	0.80	<b>0.580 8</b>
黄钾铁矾 Jarosite	<b>0.402 5</b>	0.429 4	0.410 0	0.473 6
高岭石 Kaolinite#1	0.384 7	0.418 0	<b>0.32</b>	0.409 5
高岭石 Kaolinite#2	0.199 5	<b>0.187 6</b>	0.20	0.216 5
高岭石 Kaolinite#3	0.271 2	0.251 7(0.314 9)	0.34	<b>0.242 2</b>
锂云母 Lepidolite	<b>0.371 6</b>	---	0.51	0.403 2
蒙脱石 Montmorillonite	0.310 3	<b>0.271 9</b>	0.40	0.305 6
白云母 Muscovite	0.575 3	<b>0.555 7</b>	0.61	0.570 1
绿脱石 Nontronite#1	0.297 6	0.202 3	0.38	<b>0.191 7</b>
绿脱石 Nontronite#2	---	0.403 5	---	<b>0.386 6</b>
石英 Quartz	<b>0.144 0</b>	---	0.170 0	---
纳板石 Rectorite	<b>0.379 4</b>	---	0.48	---
沙漠地表 Desert Varnish	---	0.300 0	---	<b>0.192 2</b>
平均值	<b>0.337 6</b>	0.357 4	0.402 1	0.342 4

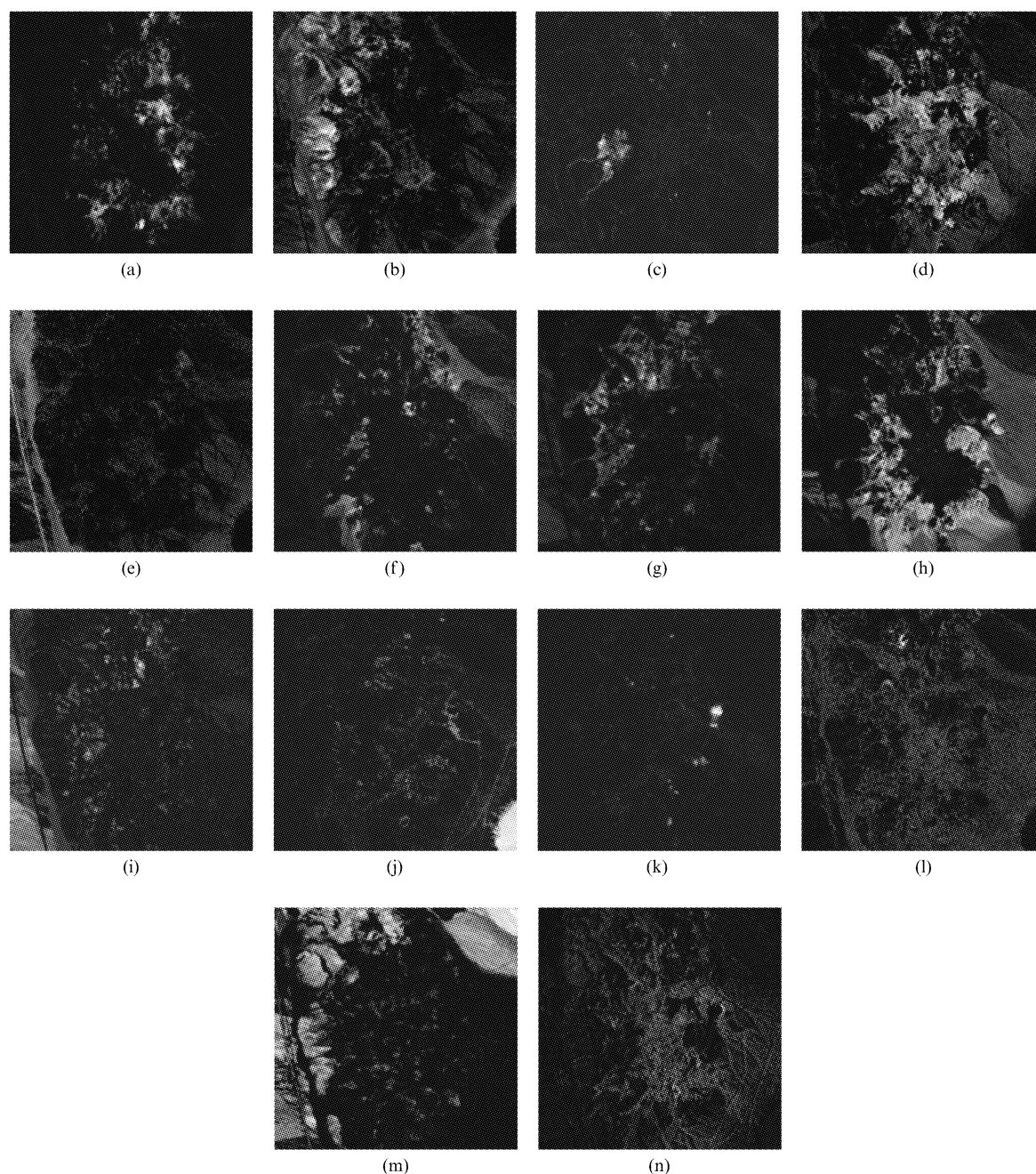


图9 AOSNMF在Cuprite数据上得到的丰度图(a)明矾石(b)钙铁榴石(c)铍长石(d)玉髓(e)黄钾铁矾(f)高岭石1(g)高岭石2(h)高岭石3(i)锂云母(j)蒙脱石(k)白云母(l)绿脱石(m)石英(n)纳板石  
 Fig.9 Abundance results obtained by AOSNMF algorithm for Cuprite data sets. (a) Alunite, (b) Andradite, (c) Buddingtonite, (d) Chalcedony, (e) Jarosite, (f) Kaolinite 1, (g) Kaolinite 2, (h) Kaolinite 3, (i) Lepidolite, (j) Montmorillonite, (k)Muscovite, (l) Nontronite 1, (m) Quartz, and (n) Rectorite

## References

- [1] Chang C. HYPERSPECTRAL DATA EXPLOITATION: THEORY AND APPLICATIONS [M]. Hoboken, New Jersey: A JOHN WILEY & SONS, INC., 2007.
- [2] Keshava N, Mustard J F. Spectral unmixing[J]. *IEEE Signal Process. Mag.* 2002, **19**(1): 44-57.
- [3] Chang C, Plaza A. A Fast Iterative Algorithm for Implementation of Pixel Purity Index[J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.* 2006, **3**(1): 63-67.
- [4] Nascimento J M P, Bioucas-Dias J M. Vertex Component Analysis A Fast Algorithm to Unmix Hyperspectral Data [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2004, **43**(8): 898-910.
- [5] Winter M E. N-FINDR: An algorithm for fast autonomous spectral endmember determination in hyperspectral data [C]. International Society for Optics and Photonics, 1999.
- [6] Ambikapathi A, Chan T, Chi C, *et al.* Hyperspectral Data Geometry Based Estimation of Number of Endmembers U-

- ing p-norm Based Pure Pixel Identification Algorithm[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2013, **51**(5): 2753 – 2769.
- [7] Li J, Bioucas-Dias J E M. MINIMUM VOLUME SIMPLEX ANALYSIS A FAST ALGORITHM TO UNMIX HYPER-SPECTRAL DATA[C]. Boston; 2008.
- [8] Bioucas-Dias J M. A VARIABLE SPLITTING AUGMENTED LAGRANGIAN APPROACH TO LINEAR SPECTRAL UNMIXING; Proceedings of the First IEEE GRSS Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing[Z]. Grenoble, France; 2009.
- [9] Miao L, Qi H. Endmember Extraction From Highly Mixed Data Using Minimum Volume Constrained Nonnegative Matrix Factorization[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2007, **45**(3): 765 – 777.
- [10] LIU Xue-Song, WANG Bin, ZHANG Li-Ming. Hyperspectral unmixing based on nonnegative matrix factorization[J]. *J. Infrared Millim. Waves* (刘雪松, 王斌, 张立明. 基于非负矩阵分解的阵分解的高光谱遥感图像混合像元分解. *红外与毫米波学报*), 2011, **30**(1): 27 – 32, 54.
- [11] Qian Y, Jia S, Zhou J, *et al.* Hyperspectral Unmixing via L12 Sparsity-Constrained Nonnegative Matrix Factorization [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2011, **49**(11): 4282 – 4297.
- [12] Lu X, Wu H, Yuan Y, *et al.* Manifold Regularized Sparse NMF for Hyperspectral Unmixing[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2013, **51**(5): 2815 – 2826.
- [13] Greer J B. Sparse demixing of HyperSpectral Images [J]. *IEEE Trans. Image Process.* 2012, **21**(1): 219 – 228.
- [14] Lee D D, Seung H S. Algorithms for Non-negative Matrix Factorization[C]. Cambridge: MIT Press, 2000.
- [15] Lee D D, Seung H S. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization [J]. *NATURE.* 1999, **401**(21): 788 – 791.
- [16] Donoho D L, Stodden V C. When does non-negative matrix factorization give a correct decomposition into parts [C]. MIT Press, 2004.
- [17] Heinz D C, Chang C. Fully Constrained Least Squares Linear Spectral Mixture Analysis Method for Material Quantification in Hyperspectral Imagery[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2001, **39**(3): 529 – 545.
- [18] Bioucas-Dias J M, Nascimento J M P. Hyperspectral Subspace Identification [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2008, **46**(8): 2435 – 2445.
- [19] Hoyer P O. Non-negative matrix factorization with sparseness Constraints [J]. *Journal of Machine Learning Research.* 2004, **5**: 1457 – 1469.
- [20] Clark R N, Swayze G A. Evolution in imaging spectroscopy analysis and sensor signal-to-noise: An examination of how far we have come[C]. The 6th Annual JPL Airborne Earth Science Workshop, 1996.
- [21] Ambikapathi A, Chan T, Ma W, *et al.* Chance Constrained Robust Minimum-Volume Enclosing Simplex Algorithm for Hyperspectral Unmixing[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2011, **49**(11): 4194 – 4209.