

文章编号: 1001-9014(2010)06-0471-05

从端元选择到光谱解混的距离测算方法

王立国, 张晶, 刘丹凤, 王群明

(哈尔滨工程大学信息与通信工程学院, 黑龙江 哈尔滨 150001)

摘要:提出了基于支持向量机(SVM)的单纯形增长算法(SGA)新实现方法,该方法无需降维预处理,且采用低复杂度的距离尺度代替复杂的体积尺度;证明了线性SVM与传统线性光谱混合模型(LSMM)在光谱解混中的等效性,并探索了前者在信息的扩展利用和模型的非线性推广两方面的优势.实验结果表明,基于SVM的SGA实现方法在保证选择结果不变的前提下复杂度大大降低,SVM模型下解混精度明显提高.

关键词:高光谱图像;端元选择;支持向量机;单纯形增长算法;光谱解混
中图分类号:TP75 **文献标识码:**A

DISTANCE MEASUREMENT BASED METHODS FROM ENDMEMBER SELECTION TO SPECTRAL UNMIXING

WANG Li-Guo, ZHANG Jing, LIU Dan-Feng, WANG Qun-Ming

(College of Information and Communications Engineering, Harbin Engineering University, Harbin 150001, China)

Abstract: A new implementation method of simplex growing algorithm (SGA) is proposed based on support vector machine (SVM), which is free of dimensional reduction and makes use of distance measure instead of volume one. The unmixing equality of linear SVM and linear spectral mixing modeling (LSMM) is proved. The superiorities of linear SVM based spectral unmixing in two extended applications, combined use of endmember informations and nonlinearity use of the model, are explored. Experiments show that the computational complexity of the SVM based implementation method of SGA is decreased greatly, while the unmixing accuracy is obviously improved.

Key words: hyperspectral imagery; endmember selection; support vector machine; simplex growing algorithm; spectral unmixing

引言

高光谱图像的空间分辨率一般较低,这种情况导致了混合像素的广泛存在,即一个像素可能是几种类别的混合.对于这类像素,将其按照一般分类方法归属为任何一类都是不准确的.分析各类别成分在混合像素内所占的比例的技术称为光谱解混^[1](简称解混),是高光谱数据分析的最基本、最重要内容之一.从实质上讲,它是一种更为精确的分类技术.

光谱解混实施的必要前提是要知道高光谱数据中包含哪些地物类别,相应的技术称为光谱端元选择(简称端元选择,也称端元提取).近十多年,多种高光谱图像光谱端元选择方法相继发展起来,目前

主要有 N-FINDR 算法^[2],SGA 算法^[3],PPI 算法^[4],自动形态光谱端元选择(Automated Morphological Endmember Extraction, AMEE)^[5]等. ORASIS 通过学习和矢量量化(LVQ)来进行光谱端元的选择,该方法对于阈值参数极其敏感. AMEE 利用形态学,选择光谱端元的过程中同时利用了空间和光谱信息,其不足之处在于运算量较大. PPI、N-FINDR 和 SGA 是基于 N 维空间凸多面体搜索光谱端元的经典例子. N-FINDR 和 SGA 是全自动的方法, PPI 是半自动化的方法. 相比之下,SGA 算法因其具有全自动、运行速度较快、选择效果较可靠等优点而受到广泛欢迎. 但该算法包含大量的体积计算,复杂度较高. 并且体积计算(主要为行列式的计算)的复杂度将随着所选择的光谱端元数目的增大而呈现立方增长,从而

收稿日期:2009-08-14,修回日期:2010-05-26

Received date: 2009-08-14, revised date: 2010-05-26

基金项目:国家自然科学基金(60802059,61077079),教育部博士点新教师基金(200802171003)

作者简介:王立国(1974-),男,教授,博士生导师,研究方向为遥感图像处理技术、模式识别与机器学习理论,E-mail:wangliguo@hrbeu.edu.cn.

导致算法运算速度大大降低.

另一方面,光谱解混技术研究虽然已有十年以上的历史,但直到现在其方法仍然以基于线性光谱混合模型(LSMM)^[1,6]的解混方式为主.在此模型中,每个类别由一个具有代表性的纯光谱来表征,这个代表性的纯光谱称为该类别的光谱端元.可是,高光谱图像的空间跨度大,导致类内光谱变化也很大,一个端元很难准确地描述一个类别.由于解混模型本身的不足,传统的LSMM解混方法在解混效果上不令人满意.

在深入分析线性最小二乘支持向量机(linear least square support vector machine, LLSSVM)^[7]模型的基础上,提出在原始空间实施、免于体积计算的SGA改进算法,并对支持向量机(support vector machine, SVM)应用于光谱解混的可行性和独特优势进行重点阐释.

1 原始SGA算法

高光谱图像全部像素在高光谱数据空间中形成一个凸多面体,每个光谱端元则对应于凸多面体的一个顶点^[2].在这种情况下,光谱端元选择的任务就变为选择数据空间所形成的凸多面体的顶点.由于全部光谱端元作为顶点的凸多面体具有最大的体积,因此该任务又转为寻求指定数目的像素,使得由它们作为顶点的凸多面体具有最大的体积.需要强调的是,算法的实施并没有在原始数据空间中进行,而是在降维后的变换空间中进行的,这种降维处理的主要目的是为了凸多面体的体积计算能够得以实施.SGA算法的具体过程读者可参阅文献[3].该算法通过单纯形增长过程来顺次寻找端元.这种顺次寻找的方式和一些传统迭代搜索的端元选择方式(如N-FINDR算法)相比,计算复杂度显著降低.但是,在寻找每一端元的过程中,SGA仍然需要进行大量复杂的行列式计算,并且随着寻找过程的继续,行列式的维数逐渐增大.这一情况导致SGA算法运行速度依然较慢.

2 基于LLSSVM的SGA实现方法

2.1 LLSSVM模型及其显性求解方法

LLSSVM的数学模型是一个仅带有等式约束的误差代价函数平方和的优化问题,其求解可在线性系统中进行.LLSSVM可通过解矩阵方程来获得显性求解公式,具体过程请参阅文献[7],训练样本数目越少效率越高,适合本文使用.相应的判别函数式

为

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, x) + b = \langle w^*, x \rangle + b^* \quad (1)$$

其中, $x_i \in R^d$ 为样本数据, K 为训练样本的核函数矩阵, $K_{i,j} = K(x_i, x_j) = \langle x_i, x_j \rangle$.

基本的SVM分类理论是用来处理两类分类问题的.对于多类分类问题,往往需要将其转化为多个两类分类问题来加以解决.文中所采用的1-a-r型分类器是去构造 N 个两类目标子分类器,第 k 个子分类器用第 k 类中的训练样本作为一类训练样本,其余的作为另一类训练样本.有关更多SVM的理论读者可参阅文献[8].

2.2 LLSSVM的距离测算功能

以一个3类分类问题为例,在LLSSVM的3个子分类器之一中,规定图1中的光谱端元 A 为一类, B 和 C 为另一类:

$$f(A) = 1, f(B) = f(C) = 0 \quad (2)$$

令 P 为不同于 A, B, C 的任意一点, D 表示线段 L_{BC} 和线段 L_{AP} 的延长线的交点.不妨设 $P = \lambda A + (1 - \lambda)D$, 这里 $0 < \lambda < 1$.由式(1)知下面的关系式成立:

$$\begin{aligned} f(P) &= f[\lambda A + (1 - \lambda)D] = \lambda f(A) + (1 - \lambda)f(D) - b \\ &= [\lambda f(A) + (1 - \lambda)b] + [(1 - \lambda)f(D) + \lambda b] - b \\ &= \lambda f(A) + (1 - \lambda)f(D) = \lambda \quad (3) \end{aligned}$$

由式(3)可以推知,判别函数 $f(\cdot)$ 定义了一种由点 \cdot 到直线 BC 的正比于欧氏距离的有向距离.同样地,3类LLSSVM的另外2个子分类器也分别定义了点 \cdot 到直线 AB 和直线 AC 的有向距离.推而广之,对于 N 类分类问题,LLSSVM的 N 个子分类器定义了 N 种方向的有向距离函数.事实上,以上关于LLSSVM的距离测算功能对于其他线性支持向量机(LSVM)均有效.

2.3 基于LLSSVM的SGA实现方法

下面我们利用1-a-r型多类LLSSVM来实现

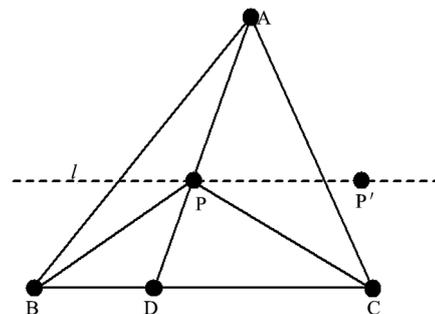


图1 LLSSVM的距离测算功能

Fig. 1 The function of distance testing of LLSSVM

SGA. 首先考虑二维空间的情形. 在图 2 中, 以 A 、 B 、 C 作为顶点形成了一个三角形(二维凸多面体), 记它的体积为 V_{old} . 令 A_0 为不同于 A 、 B 、 C 的点, 则由 A_0 、 B 、 C 形成了一个新的三角形, 记它的体积为 V_{new} . 再记线段 AD 、 A_0D_0 分别为 A 和 A_0 到线段 BC 的距离. 那么, 将 A 替换为 A_0 是否为有效替换只需比较面积(或称二维体积) V_{old} 和 V_{new} 的大小即可. 为此, 原始的 SGA 需要根据体积公式具体地计算 V_{old} 和 V_{new} . 然而, 我们看到 V_{old} 和 V_{new} 的大小关系与 AD 和 A_0D_0 的大小关系是一致的, 因此, 比较 V_{old} 和 V_{new} 可以通过比较 AD 和 A_0D_0 来完成. 图 2 给出了这种直观的说明. 其中, l 是由点 B 和 C 形成的直线, l_1 为过点 A 且与 l 平行的直线, l_2 为直线 l_1 关于直线 l 的对称直线. 图 2 中, 仅当 A_0 落在两虚线外侧时才可选作当前端元.

对于 AD 和 A_0D_0 的长度比较, 我们可根据前面推导的理论利用多类(此时为 3 类) LLSSVM 相应于式(1)的子分类器来完成. 这一情形可以容易地推广到多个端元组合或高维空间中去. 需要说明的是, 对于如上的典型小样本问题, LLSSVM 可以借助显性公式方便地求解, 这里并不是说其他类型的线性 SVM 不可用, 只是方便和效率的问题. 以上算法的基本过程可描述如下:

步骤 1. 随机选取 N 个像素点作为初始端元;

步骤 2. 令目前所选端元中的第 i (首次执行 $i=1$) 个为“1”类, 其余 $N-1$ 个为“0”类, 利用式(7)求解第 i 个 SVM 模型的相关参数;

步骤 3. 利用式(8)获得相应的判别函数即距离测算函数;

步骤 4. 依次计算每个像素的距离, 如果某个像素的绝对距离大于 1, 则将该像素替换第 i 个端元,

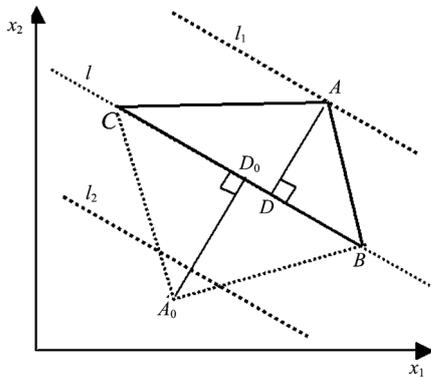


图 2 SGA 中的尺度替换示意图

Fig. 2 Diagram of measure substitution in SGA

置 $i=1$, 算法转入步骤 2, 否则转入步骤 5;

步骤 5. $i=i+1$, 若 $i>N$, 算法转入步骤 6, 否则算法转入步骤 2;

步骤 6. 当前端元即为最终选择端元, 算法结束.

3 基于 SVM 的光谱解混方法

3.1 特定条件下 LSVM 与 LSMM 的等效性

借助图 1, 可视化起见, 考虑三个光谱端元的情形. 在最小二乘意义下, LSMM 对于点 P 解混的闭式公式为

$$F_{LSMM}^{A,B,C}(P) = \Theta P \quad (4)$$

$$\Theta = ([A, B, C]^T [A, B, C])^{-1} [A, B, C]^T$$

定义 Δ_{xyz} 为由 x 、 y 和 z 所组成的三角形, 其面积表示为 $S(\Delta_{xyz})$; L_{xy} 为由 x 和 y 形成的直线, 其长度为 $le(L_{xy})$. 假定面积 $S(\Delta_{ABC})$ 为 1, 由 LSMM 的内涵可以推知, 像素 P 在基于 LSMM 的光谱解混下, 光谱端元 A 所占的比例 $F_{LSMM}^A(P)$ 等于 $S(\Delta_{PBC})$, 则有

$$F_{LSMM}^A(P) = S(\Delta_{PBC}) = \frac{le(L_{PD})}{le(L_{AD})} \quad (5)$$

现在我们来证明 LSVM 解混出的分量 $F_{LSVM}^A(P)$ 与式(5)相等. 规定光谱端元 A 为“1”类别, B 和 C (因此 D)为“0”类别, 即

$$f(A) = 1, f(B) = f(C) = f(D) = 0 \quad (6)$$

根据式(5), 分量 $F_{LSVM}^A(P)$ 可以计算如下

$$F_{LSVM}^A(P) = f(P) = f\left(\frac{PD}{AD}A + \frac{AP}{AD}D\right) = \frac{PD}{AD} \quad (7)$$

由式(5)和式(7)可见两个结果相同. 这一相等结论同样可以推广到端元 B 和 C 所对应的分量.

令 l 表示经过点 P 的线段 L_{BC} 的平行线. 设 P' 为直线 l 上不同于 P 的另外一点. 那么, 无论 P' 落在 Δ_{ABC} 内部与否, 则两种模型下均可得出 P' 与 P 解混结果相同.

为了推广式(1), 令 $F^j(\cdot)$ 表示 \cdot 的第 j 个类别的无约束解混分量, $f_j(\cdot)$ 为 1-a-r 型 SVM 的第 j 个输出, 则下式成立

$$F^j(x) = f_j(x) \quad (8)$$

以上分析表明了只在利用光谱端元信息和无约束条件下, LSVM 与 LSMM 在解混效果上完全相同. 事实上, 二者都是基于距离尺度的方法, 只是距离测算的方向不同. 比较式(5)和式(7)还可以看出, LSVM 与 LSMM 的复杂度也完全相同.

3.2 LSVM 解混的独特优势

第一方面是关于信息的扩展利用. LSMM 中每

类地物只能用一个端元信息来表示,而当类内光谱变化较大时,这种表示是很不准确的,从而导致了解混精度的下降. LSVM 则可以方便地利用多个训练样本刻画一个类别,从而获得更为合理的分析模型.

第二方面是关于模型的非线性推广. 实际的高光谱图像光谱解混问题常为非线性问题而不是线性的,而 LSMM 只是为解决线性问题而提出的,目前尚无有效方法推广到非线性问题中. LSVM 则可以通过引入非线性映射 φ 很容易地做到这一点.

4 仿真实验

前两组实验中为了简便起见,将所提出的 SGA 实现方法简记为 LLSSVM-SGA. 关于 SGA 的端元选择效果文献已不乏论证,而 LLSSVM-SGA 无论是在理论上还是在下面的实验中都说明二者具有相同的选择结果. 故本文只重点对两者的执行效率进行对比论证. 在第一组实验中,选择三个点 $(-15, 0)$, $(15, 0)$, $(0, 20)$ 作为端元向量,然后由这三个端元混合生成 10000 个点. 这些混合的点随机分布在由这三个点形成的三角形内. 原始算法和改进算法分别应用于这个数据集中,最终得到了相同的选择结果即图 3 中三角形的三个顶点,但是所消耗的时间却大不相同. 表 1 给出了两个算法的各方面的比较. 在本实验中,改进算法的运行速度较之原始算法提高了 3.7 倍. 两种算法每次选择的结果均相同,因此它们的体积计算次数和距离计算次数相同.

在第二组实验中,选取端元的数目增大至 10. 在 9 维空间中,9 个标准单位向量和原点作为端元向量. 然后由这 10 个端元线性组合生成 10000 个点. 实验结果如表 2 所示. 改进的算法的运行速度比原始算法提高了 2 个数量级.

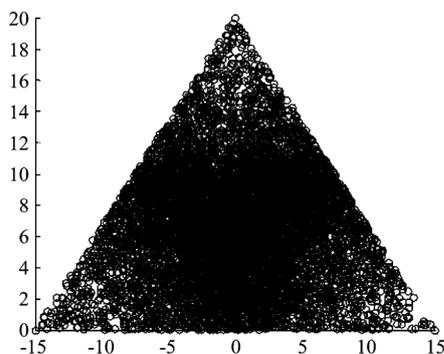


图 3 实验 1 中的合成数据图

Fig. 3 Scatter plot of synthetic data used in experiment 1

表 1 实验 1 中各结果的比较

Table 1 Results comparison for experiment 1

	运算时间(s)	体积或距离计算次数
SGA	1.5557	20003
LLSSVM-SGA	0.4247	20003

表 2 实验 2 中各结果的比较

Table 2 Results comparison for experiment 2

	运算时间(s)	体积或距离计算次数
SGA	23.5404	90045
LLSSVM-SGA	2.0108	90045

第三组实验旨在比较 LSVM 与 LSMM 的解混效果. 为了获得监督评价,采用人工合成数据进行测算. 从真实高光谱数据中选取 2 个类别的各 500 个纯数据: $a(1), a(2), a(3), \dots, a(500)$ 和 $b(1), b(2), b(3), \dots, b(500)$. 随机产生混合比例数据 $\alpha_j = j \times 0.1, j = 1, 2, \dots, 10$. 对于每个 α_j ,再随机生成 100 对 1 至 500 间的顺序数 $p_k, q_k, k = 1, 2, \dots, 100$, 则混合像素生成如下: $m_j(k) = \alpha_j a(p_k) + (1 - \alpha_j) b(q_k), k = 1, 2, \dots, 100, j = 1, 2, \dots, 10$. 这样,每个混合像素的混合比例都是已知的,从而可以进行监督评价. 在每类的 500 个纯样本中,随机选择 300 个用于训练,其余 200 个纯样本及合成的混合样本用于测算. 结果显示,LSMM 与 LSVM 的解混误差分别为 0.0942、0.0690. 相关的解混分量图如图 4 所示,该图大小为 56×25 ,上 8 行对应一类纯像素的解混分量,9~16 行对应另一类纯像素的解混分量,以下每 4 行为一个单位,对应与第一类的合成比例由 90% 依次递减到 0% 的混合数据. 该图直观地反映出 LSVM 的解混优势.

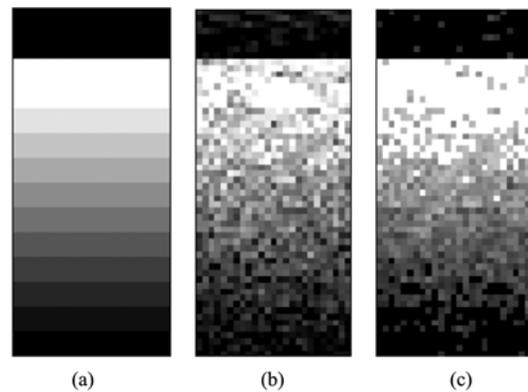


图 4 (a)合成数据 (b)LSMM 解混结果 (c)LSVM 解混结果

Fig. 4 (a)Synthesized data (b)LSMM unmixed results (c)LSVM unmixed results

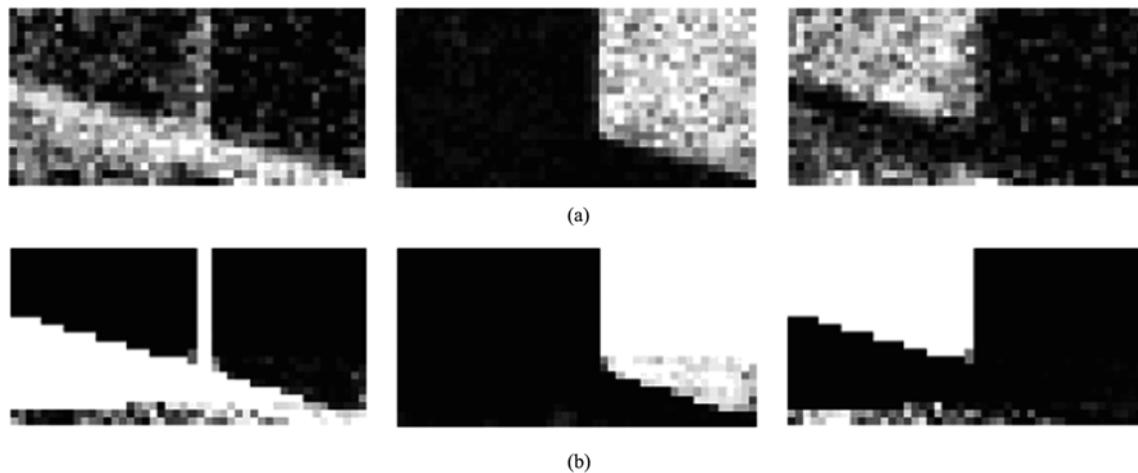


图5 不同模型下的解混分量图比较 (a)LSVM (b)NLSVM
Fig. 5 Unmixing fractional images under different modellings (a)LSVM (b)NLSVM

第四组实验利用真实高光谱数据进一步说明 NLSVM 较之 LSVM 的解混优势. 图像来自 1992 年拍摄的美国印第安遥感试验区的一部分, 大小为 23×46 , 包含牧场、玉米和背景类别, 该子图的解混分量图对比显示于图 5 中. 实验中的训练样本是在相应的遥感子图像各类别不含边界点的内部区域内划定矩形窗, 将窗内像素作为训练样本, 这样为每个类别提取 100 个训练样本. 由图 5 可见, 由于背景类别的参与, 线性解混方法效果较差, NLSVM 取得了明显的优势.

5 结论

对于 SVM 理论, 人们更多了解的是它的分类和回归功能, 而文中则开发利用了其距离测算功能. 首先利用 LSVM 构建了免于降维预处理的端元选择算法, 通过距离比较搜索最大体积的单纯形, 使得其复杂度不再随着光谱端元数目的增加而增加. 新方式在选择结果上与传统方式等价, 而在执行效率上明显优于后者, 所选择的光谱端元数目越大, 文中算法的优势越明显. 然后, 以几何方式证明了 LSVM 应用于光谱解混中的可能性, 并从理论和实验角度表明其特有优势, 为进一步提高光谱解混效果提供了新思路.

REFERENCES

- [1] Adams J B, Smith M O, Johnson P E. Spectral mixture modeling: a new analysis of rock and soil types at the Viking Lander I site [J]. *J. Geophys. Res.* 1985, **91** (B8): 8098—8112.
- [2] Winter M E. N-FINDR: An algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data [C]. In Proc. SPIE Conf. Imaging Spectrometry V, 1999, vol. **3753**:266—275.
- [3] Chang C I, Wu C C, Liu W M, *et al.* A new growing method for simplex-based endmember extraction algorithm [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 2006, **44** (10):2804—2819.
- [4] Winter E M, Winter M E. Autonomous hyperspectral end-member determination methods [C]. In Proc. SPIE EUROPTO Conf., 1999, vol. 3870.
- [5] Plaza A, Martinez P, Pérez R, *et al.* Spatial/spectral end-member extraction by multidimensional morphological operations [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing.* 2002, **40** (9):2025—2040.
- [6] Keshava N, Mustard J F. Spectral unmixing [J]. *Signal Processing Magazine, IEEE*, 2002, **19** (1):44—57.
- [7] Suykens J A K, Brabanter J D, Lukas L, *et al.* Weighted least squares support vector machines: robustness and sparse approximation [J]. *Neurocomputing.* 2002, **48** (1-4): 85—105.
- [8] Vapnik V N. *The nature of statistical learning theory* [M]. New York, Springer Press, 1995.