

文章编号:1001-9014(2011)01-0027-07

基于非负矩阵分解的高光谱遥感图像混合像元分解

刘雪松¹, 王斌^{1,2}, 张立明¹

(1. 复旦大学 电子工程系, 上海 200433; 2. 复旦大学 波散射与遥感信息教育部重点实验室, 上海 200433)

摘要:传统非负矩阵分解算法的目标函数具有大量的局部极小,在进行高光谱图像的光谱解混时,受初始值的影响很大。为解决该问题,作者通过在目标函数中引入丰度分离性和平滑性的约束条件,提出一种基于有约束非负矩阵分解的混合像元分解方法。同时该算法能够满足混合像元分解问题所要求的丰度值非负以及和为一的约束。模拟和实际数据实验结果表明,所提出的算法能够很好地克服局部极小的问题,从而得到更优的解。同时该算法表现出了较强的抗噪声能力,并且能够适用于无纯像元数据的混合像元分解。

关键词:高光谱遥感图像;混合像元分解;非负矩阵分解;丰度分离性;丰度平滑性

中图分类号:TP751 文献标识码:A

Hyperspectral unmixing based on nonnegative matrix factorization

LIU Xue-Song¹, WANG Bin^{1,2}, ZHANG Li-Ming¹

(1. Department of Electronic Engineering, Fudan University, Shanghai 200433, China;
2. The Key Laboratory of Wave Scattering and Remote Sensing Information (Ministry of Education),
Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: Because of the local minima in the objective function, the traditional Nonnegative Matrix Factorization (NMF) algorithm is sensitive to the initial value when being applied to hyperspectral unmixing. In order to solve the problem, a new approach based on constrained NMF was proposed for decomposition of mixed pixels by introducing constraints of abundance separation and smoothness into the objective function of NMF. The algorithm can also satisfy the abundance nonnegative and sum-to-one constraints, which are necessary for hyperspectral unmixing. Experimental results on simulated and real hyperspectral data demonstrate that the proposed approach can overcome the shortcoming of local minima, and obtain better results. Meanwhile, the algorithm performs well for noisy data, and can also be used for the unmixing of hyperspectral data in which pure pixels do not exist.

Key words: hyperspectral imagery; spectral unmixing; nonnegative matrix factorization; abundance separation; abundance smoothness

PACS: 84.40. X6

引言

高光谱遥感的主要特点是,成像光谱仪在电磁波谱的紫外、可见光、近红外和中红外区域中的数十至数百个非常窄且连续的光谱段上同时获取信息,能得到每个像素的完整连续的光谱曲线^[1]。由于成像系统空间分辨率的限制和地表的复杂多样性,所获得的遥感图像的某些像素中往往包含多种地物类型,这被称为混合像元。如何从混合像元广泛存在的高光谱图像中准确地提取出典型地物(端元)的光

谱,并有效地进行混合像元分解,得到它们之间混合的比例(丰度)已经成为遥感图像定量分析中的一个重要研究课题。在通常情况下,端元之间的互相影响可以忽略,这时可以用线性模型来描述混合像元的形成机理^[2]。事实证明,基于线性模型的方法能够给出令人满意的分解结果^[3~7]。

基于线性模型的混合像元分解算法可以分为两类:基于几何学的方法和基于统计学的方法^[3]。几何学方法假设高光谱图像的所有数据点位于一个单纯形体中,其顶点分别对应各端元,因此求解端元光谱

收稿日期:2010-01-26,修回日期:2010-06-18

基金项目:863国家高技术研究计划(2009AA12Z115)和国家自然科学资助基金(61071134)

作者简介:刘雪松(1987-),男,江苏扬州人,复旦大学电子工程系硕士研究生,主要从事遥感图像处理的研究,E-mail:082021037@fudan.edu.cn.

Received date: 2010-01-26, revised date: 2010-06-18

相当于找寻单形体的顶点. 这类方法有 N-FINDR^[4], Vertex Component Analysis(VCA)^[5], Simplex Growing Algorithm(SGA)^[6], Orthogonal Bases Algorithm(OBA)^[7]等. 由于几何学方法是从已有的数据集中寻找顶点, 因此不适用于没有纯像元的数据集.

基于统计学的方法克服了该缺点, 它充分利用数据的统计特性求解端元光谱. 作为统计方法的一种, 由 Lee 和 Seung 等人在 1999 年所提出的非负矩阵分解(Nonnegative Matrix Factorization, NMF)^[8,9]以其能够保证非负性和无需指定迭代步长的优点, 近年来在高光谱解混中受到了较多关注. NMF 的目标函数具有明显的非凸性, 因此存在大量局部极小, 为了克服该缺点, 可以根据实际问题的特点, 在算法中加入一定的约束条件, 防止结果陷入不符合实际的局部极小.

Miao 和 Qi 在 2007 年提出了一种最小体积约束 NMF(Minimum Volume Constrained NMF, MVCNMF) 混合像元分解算法^[10], 它通过最小化以端元光谱为顶点所形成的单形体体积, 使其尽可能紧贴数据云, 从而接近真实结果. 由于该方法中体积的约束条件以矩阵行列式的形式出现, 故梯度的计算较复杂且不可控. 此外, 该算法通过在每一步迭代后将所有负值强制置 0 来保证非负性, 这将对收敛性产生不可预测的影响. Jia 和 Qian 在 2009 年提出了一种带有分段平滑和丰度稀疏约束的混合像元分解算法(Piecewise Smoothness NMF with Sparseness Constraint, PSNMFSC)^[11]. 但是该方法中的平滑和稀疏假设并非对所有数据都成立, 此外, 该方法还需要事先给出精确的丰度稀疏度, 这在实际应用中是无法得到的.

本文通过分析高光谱遥感图像的物理性质, 向 NMF 算法中加入了合适的约束条件, 提出了一种带有丰度分离性和平滑性约束的 NMF 方法, 并将其称为 ASSNMF(Abundance Separation and Smoothness constrained NMF). 实验证明该方法很好地克服了局部极小的问题, 能够获得满意的解混效果.

1 线性混合模型(LMM)

线性混合模型是高光谱遥感图像分析中最常用的数据模型. 在线性混合模型中, 像素的观察值等同于各端元的光谱特征按照它们的丰度进行线性组合. 用 $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ 表示 L 个波段的遥感图像, 其中每波段有 N 个像素. 假设它由 P 个端元线性混合而成, 则 \mathbf{R} 可被表示为

$$\mathbf{R} = \mathbf{MS} + \mathbf{E} \quad . \quad (1)$$

$\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots, \mathbf{m}_P] \in \mathbb{R}^{L \times P}$ 被称为端元光谱矩阵, 其中的 \mathbf{m}_j 对应着第 j 个端元的光谱特征; $\mathbf{S} = [s_1, s_2, \dots, s_p]^T \in \mathbb{R}^{P \times N}$ 为丰度矩阵, 其中 $s_j = [S_{j1}, S_{j2}, \dots, S_{jN}]^T \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ 表示某一个端元上所有像素的丰度. \mathbf{E} 是误差矩阵. 根据丰度的物理意义, 在线性模型中, 丰度必须满足和为一约束(Abundance Sum-to-one Constraint, ASC) 和非负约束(Abundance Non-negative Constraint, ANC)^[2]

$$\sum_{j=1}^P S_{jn} = 1, \quad S_{jn} \geq 0 \quad . \quad (2)$$

高光谱解混的目标是在已知 \mathbf{R} 的情况下求解 \mathbf{M} 和 \mathbf{S} , 它可以通过最小化欧式距离目标函数

$$\begin{aligned} J(\mathbf{M}, \mathbf{S}) &= \| \mathbf{R} - \mathbf{MS} \| ^2 \\ &= \sum_{ij} (\mathbf{R}_{ij} - (\mathbf{MS})_{ij})^2 \quad , \end{aligned} \quad (3)$$

来得到最优解. 由于 \mathbf{R}, \mathbf{M} 和 \mathbf{S} 都是非负矩阵, 因此可以应用 NMF 算法^[8,9], 得到迭代公式

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &\leftarrow \mathbf{M} \cdot * (\mathbf{RS}^T) ./ (\mathbf{MS}^T) \quad , \\ \mathbf{S} &\leftarrow \mathbf{S} \cdot * (\mathbf{M}^T \mathbf{R}) ./ (\mathbf{M}^T \mathbf{MS}) \quad , \end{aligned} \quad (4)$$

以上式子中的“ $\cdot *$ ”和“ $\cdot /$ ”表示矩阵中的各元素分别相乘和相除.

2 算法描述

由于地物一般均成片分布, 不会布满整个图像区域, 因此对于实际的丰度分布情况, 各端元均有各自的主导区域, 它们之间的相关性较小. 该约束条件被称为分离性(Separation) 约束. 分离性考虑的是不同端元间的关系, 但是未考虑不同像素间的空间关系. 平滑性(Smoothness) 的加入正是体现了数据的空间关系, 这是由于实际地物的分布往往是有规律的且在大部分地方都保持连贯性和均匀性, 突变只会存在于少数的地物边缘.

2.1 丰度分离性约束

K-L 散度^[12]是一种在信息论中被广泛应用的信号相似度度量, 它是一种非对称的概率意义上的距离. 若将两个离散随机信号的概率分布写作矢量, 也即 $\mathbf{P} = [P_1, \dots, P_n \dots, P_N]^T$ 和 $\mathbf{Q} = [Q_1, \dots, Q_n, \dots, Q_N]^T$, 其中 $\sum_n P_n = \sum_n Q_n = 1$, 那么定义 \mathbf{Q} 相对于 \mathbf{P} 的 K-L 散度为

$$D_{KL}(\mathbf{P} | \mathbf{Q}) = \sum_n P_n \log \frac{P_n}{Q_n} \quad . \quad (5)$$

式(5)的物理意义是用 \mathbf{Q} 中的元素来表示 \mathbf{P} 中的所有元素所需要的额外信息量的大小.

在 K-L 散度的基础上,Chang 于 1999 年提出了一种衡量光谱之间相关信息的尺度 SID(Spectral Information Divergence)^[13], 该尺度可直接推广应用到丰度, 并被称为 AID(Abundance Information Divergence)^[10]. 设 $\mathbf{s}_i = [S_{i1}, S_{i2}, \dots, S_{iN}]^T$ 和 $\mathbf{s}_j = [S_{j1}, S_{j2}, \dots, S_{jN}]^T$ 分别是两个端元的丰度, 令

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \mathbf{s}_i / \sum_{n=1}^N S_{in} , \\ \mathbf{q} &= \mathbf{s}_j / \sum_{n=1}^N S_{jn} , \end{aligned} \quad (6)$$

它们是归一化的 \mathbf{s}_i 和 \mathbf{s}_j , 可以理解为丰度值在不同像素之间分布的概率函数. 那么 AID 被定义为

$$AID(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j) = D_{KL}(\mathbf{p} \| \mathbf{q}) + D_{KL}(\mathbf{q} \| \mathbf{p}) . \quad (7)$$

可以看出 AID 实际上是一种对称化的 K-L 散度, 很明显它始终非负.

显然, 如果将 AID 直接应用到分离性目标函数中, 其梯度的值域是 $(-\infty, +\infty)$, 这将给分离性约束的权重选择带来困难, 并且易使算法发散, 稳定性较差. 基于这一原因, 本文对 K-L 散度进行了改进, 得到了一种新的函数来衡量相关信息. 我们称它为分离性函数. 如果令 $c_p = \sum_k S_{pk}$, $Q_{jk} = S_{jk}/c_j$ 也就是说, c_p 是第 p 个端元的丰度之和, 而 \mathbf{Q} 是归一化之后的 \mathbf{S} 矩阵, 那么两个端元丰度 \mathbf{s}_i 和 \mathbf{s}_j 的分离性函数被定义为

$$Separation(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j) = \sum_{n=1}^N \left[Q_{in} f\left(\frac{Q_{in}}{Q_{jn}}\right) + Q_{jn} f\left(\frac{Q_{jn}}{Q_{in}}\right) \right] . \quad (8)$$

$f(x)$ 的选取须满足如下几个原则: 首先, $f(x)$ 在 $(0, +\infty)$ 上有定义, 单调增, 且 $f(1) = 0$, 为了能体现分离性的物理意义, 这是显然的. 其次, $f(x) + f(1/x) \geq 0$, 这可以保证分离性函数始终非负. 最后, $f(x)$ 和 $f'(x)$ 都是有界的, 且在 $x \rightarrow +\infty$ 或 $x \rightarrow 0$ 时, $f'(x) \rightarrow 0$, 这一点有助于权重的选择, 并可使算法更稳定, 不易发散. 综合以上三点, 我们选择以下的函数:

$$f(x) = 1 - 2^{1-x^2} . \quad (9)$$

以上我们定义了完整的分离性函数, 它始终非负, 且函数值越大表示信号间的相关性越小.

考虑所解出的一组端元的丰度, 在它们之间两两求分离性并相加, 作为整个丰度组的分离性目标函数:

$$J_1(\mathbf{S}) = \frac{1}{2P^2} \sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^P Separation(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j) . \quad (10)$$

在迭代中该目标函数应被最大化. 将该目标函数对 \mathbf{S} 中每个元素求导数, 可得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_1(\mathbf{S})}{\partial S_{pn}} &= \frac{4\ln 2}{P^2 \cdot c_p} \left\{ \sum_{j=1}^P \sum_{k=1}^N Q_{jk} \left[\frac{Q_{jk}^3}{Q_{pk}^3} 2 - \frac{Q_{jk}^2}{Q_{pk}^2} + \left(\frac{1}{2\ln 2} - \frac{Q_{pk}^2}{Q_{jk}^2} \right) 2 - \frac{Q_{jk}^2}{Q_{pk}^2} - \frac{1}{4\ln 2} \right] \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=1}^P \left[\frac{Q_{jn}^3}{Q_{pn}^3} 2 - \frac{Q_{jn}^2}{Q_{pn}^2} + \left(\frac{1}{2\ln 2} - \frac{Q_{pn}^2}{Q_{jn}^2} \right) 2 - \frac{Q_{jn}^2}{Q_{pn}^2} - \frac{1}{4\ln 2} \right] \right\} . \end{aligned} \quad (11)$$

2.2 丰度平滑性约束

丰度平滑性约束考虑的是像素之间的空间关系, 为了得到这些信息, 我们必须暂时改变数据的表示方式, 将每个端元的丰度 \mathbf{s}_j 按照其像素的空间关系整理成对应的一个矩阵. 由于丰度平滑约束是对每个端元分别考虑的, 所以在这一节我们只讨论任意一个端元的丰度, 设其被整理为 $\underline{\mathbf{S}} \in \mathbb{R}^{r \times c}$, 其中 r 和 c 分别表示图像的行数和列数, 并有 $r \times c = N$.

对于矩阵 $\underline{\mathbf{S}}$ 中的某一个参考像素 S_{ij} , 可以用它和周围像素丰度值的差异来表征该像素附近的平滑程度. 我们将 S_{ij} 周围的所有像素划分为八个区域 G_k ($k = 1, 2, \dots, 8$), 图 1(a) 给出了划分的方法. 令 \tilde{S}_{ijk} 表示第 k 个区域所有像素丰度的加权平均值, 也即

$$\tilde{S}_{ijk} = \sum_{u,v, S_{uv} \in G_k} w_{uv} S_{uv} , \quad (12)$$

其中 w_{uv} 为指定位置的权值, 可定义参考像素 S_{ij} 附近的丰度平滑性函数为

$$J_2(S_{ij}) = \frac{1}{2} \times \frac{1}{8} \sum_{k=1}^8 (\tilde{S}_{ijk} - S_{ij})^2 , \quad (13)$$

其中的 $1/8$ 表示在一般情况下, 各区域在平滑性中所占的权重相等, 均为 $1/8$.

将式(13)推广到 $\underline{\mathbf{S}}$ 中所有的像素, 得到整个图像的平滑性函数如下:

$$J_2(\underline{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2} \times \frac{1}{8} \sum_{k=1}^8 \|\tilde{\mathbf{S}}_k - \underline{\mathbf{S}}\|^2 , \quad (14)$$

其中 $\tilde{\mathbf{S}}_k$ 是由 \tilde{S}_{ijk} 按照 i, j 所指定的位置排列而得到的矩阵.

$\tilde{\mathbf{S}}_k$ 的求取方法由权值 w_{uv} 分配的方式决定. 分配权值应遵循的原则是, 越靠近参考像素的点给予越大的权值. 此外, 每个区域的所有权值之和应为 1. 本文采用图 1(b) 的方式进行分配, 将最靠近参考像素的位置的权值定为 $1/2$, 此后每向外延伸一层, 权值减半. 如果令

$$\mathbf{P}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{2^2} & \frac{1}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2^{r-1}} & \frac{1}{2^{r-2}} & \cdots & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} ,$$

$$\mathbf{P}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \frac{1}{2^2} & \cdots & \frac{1}{2^{c-1}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \frac{1}{2^2} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (15)$$

则有 $\tilde{\underline{S}}_1 = \underline{P}_1 \underline{S}$, $\tilde{\underline{S}}_3 = \underline{S} \underline{P}_3$, 采用类似方法, 可定义一组常数矩阵 $\underline{P}_k (k=1, 2, \dots, 8)$ 和 $\underline{T}_k (k=1, 2)$ 使得

$$\begin{aligned} \tilde{\underline{S}}_1 &= \underline{P}_1 \underline{S}, \quad \tilde{\underline{S}}_2 = \underline{P}_2 \underline{S}, \quad \tilde{\underline{S}}_3 = \underline{S} \underline{P}_3, \\ \tilde{\underline{S}}_4 &= \underline{S} \underline{P}_4, \quad \tilde{\underline{S}}_5 = \underline{P}_5 \underline{S} \underline{T}_2, \quad \tilde{\underline{S}}_6 = \underline{P}_6 \underline{S} \underline{T}_1, \\ \tilde{\underline{S}}_7 &= \underline{P}_7 \underline{S} \underline{T}_2, \quad \tilde{\underline{S}}_8 = \underline{P}_8 \underline{S} \underline{T}_1. \end{aligned} \quad (16)$$

至此我们就对平滑性函数给出了完整的说明. 对该约束条件求解梯度, 可得

$$\frac{\partial J_2(\underline{S})}{\partial \underline{S}} = \frac{1}{8} (\underline{P}_{12} \underline{S} + \underline{S} \underline{P}_{34} + 4\underline{S} + A\underline{S}B - 2\underline{P}\underline{S}Q), \quad (17)$$

其中

$$\begin{aligned} \underline{P}_{12} &= (\mathbf{I} - \underline{P}_1)^T (\mathbf{I} - \underline{P}_1) + (\mathbf{I} - \underline{P}_2)^T (\mathbf{I} - \underline{P}_2), \\ \underline{P}_{34} &= (\mathbf{I} - \underline{P}_3)^T (\mathbf{I} - \underline{P}_3) + (\mathbf{I} - \underline{P}_4)^T (\mathbf{I} - \underline{P}_4) \\ \mathbf{P} &= \underline{P}_5 + \underline{P}_7 = \underline{P}_6 + \underline{P}_8, \quad T = \underline{T}_1 + \underline{T}_2 \\ \mathbf{A} &= \underline{P}_5^T \underline{P}_5 + \underline{P}_7^T \underline{P}_7 = \underline{P}_6^T \underline{P}_6 + \underline{P}_8^T \underline{P}_8, \\ \mathbf{B} &= \underline{T}_1 \underline{T}_1^T + \underline{T}_2 \underline{T}_2^T, \end{aligned} \quad (18)$$

其中所有符号已在前面定义过. 虽然平滑性目标函数本身较复杂, 但其梯度的计算量很小, 式(18)中的所有矩阵都可在算法初始化时生成, 实际迭代过程中每步只需计算式(17). 和 PSNMFSC^[11]相比, 本文的平滑性约束可以明显地降低运算复杂度.

由于在实际算法中, 是对 \underline{S} 而非 \underline{S} 进行迭代, 因此在求出每个端元的梯度 $\partial J_2(\underline{S})/\partial \underline{S}$ 之后, 必须将它们分别重新整理为矢量, 再合并作为平滑性的梯

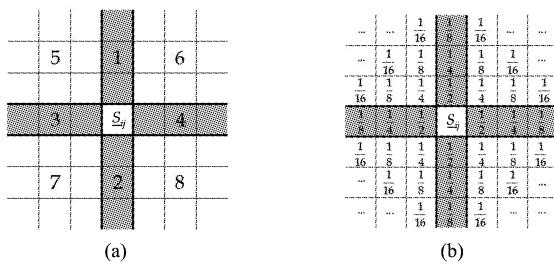


图 1 丰度平滑性 (a) 像素周围区域的划分 (b) 权值的分配
Fig. 1 Abundance smoothness (a) Surrounding blocks, and (b) assigned weights for a reference pixel

度 $\partial J_2(\underline{S})/\partial \underline{S}$.

2.3 ASC 约束

线性混合模型所必需的 ANC 约束已通过 NMF 得到满足, 而 ASC 约束必须额外被加入到算法中. 这里我们直接采用文献[14]中的方法, 在算法初始化时进行下面的扩展:

$$\mathbf{M}_A \leftarrow \begin{bmatrix} \mathbf{M} \\ \delta \mathbf{I}^T \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}_A \leftarrow \begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ \delta \mathbf{I}^T \end{bmatrix}, \quad (19)$$

其中 \mathbf{I}^T 是元素全为 1 的矢量, 而 δ 控制 ASC 影响的大小. 用 \mathbf{M}_A 和 \mathbf{R}_A 替代 \mathbf{R} 和 \mathbf{M} 进行算法的迭代, 并在 \mathbf{M} 的每次迭代之后重新进行一次式(19)的扩展, 在算法收敛的同时 ASC 也能得到满足.

2.4 ASSNMF 迭代公式

将所有约束条件加入 NMF, 得到 ASSNMF 的目标为:

$$\text{最小化 } J(\mathbf{M}, \mathbf{S}) = \frac{1}{2} \| \mathbf{R} - \mathbf{MS} \| ^2 - \lambda_1 J_1(\mathbf{S}) +$$

$\lambda_2 J_2(\mathbf{S})$, 并满足以下条件: $\mathbf{M} \geq 0, \mathbf{S} \geq 0$.

其中 λ_1 和 λ_2 分别是分离性和平滑性约束条件的权重. 分别用 \mathbf{R}_A 和 \mathbf{M}_A 替代 \mathbf{R} 和 \mathbf{M} , 并且与文献[9]类似地定义迭代步长, 可得到乘法迭代公式如下:

$$\mathbf{M}_A \leftarrow \mathbf{M}_A \cdot * (\mathbf{R}_A \mathbf{S}^T) ./ (\mathbf{M}_A \mathbf{S} \mathbf{S}^T), \quad (20)$$

$$\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{S} \cdot * (\mathbf{M}_A^T \mathbf{R}_A + \lambda_1 \frac{\partial J_2(\mathbf{S})}{\partial \mathbf{S}} - \lambda_2 \frac{\partial J_2(\mathbf{S})}{\partial \mathbf{S}}) ./ (\mathbf{M}_A^T \mathbf{M}_A \mathbf{S}). \quad (21)$$

3 实验结果与讨论

3.1 仿真数据实验

在本节中, 人工产生的仿真数据被用于测试算法的性能. 本文提出的 ASSNMF 与以下几种算法进行比较: VCA^[5]、PSNMFSC^[11] 以及 MVCNMF^[10]. 其中 VCA 只能从数据中得到光谱, 其他方法可以直接解出光谱和丰度. 对于 VCA, 我们在其结果基础上使用 FCLS 算法^[14], 以得到对应的丰度, 这种方法被记为 VCA-FCLS.

我们使用光谱角距离 (Spectral Angle Distance, SAD) 和均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE) 两个广泛应用的指标来衡量解混结果的优劣. 它们分别计算光谱与丰度解混结果与参考值的近似程度. 对于第 k 个端元, 其 SAD 被定义为^[5]

$$\text{SAD}_k = \cos^{-1} \frac{\langle \hat{\mathbf{m}}_k, \mathbf{m}_k \rangle}{\| \hat{\mathbf{m}}_k \| \| \mathbf{m}_k \|}, \quad (22)$$

其中 \mathbf{m}_k 和 $\hat{\mathbf{m}}_k$, 分别表示该端元的光谱解混结果和参考值. 而 RMSE 被定义为^[11]

$$RMSE_k = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (S_{kj} - \hat{S}_{kj})^2}, \quad (23)$$

其中 S_{kj} 和 \hat{S}_{kj} 分别表示该端元在某一指定像素的丰度解混结果和参考值. 我们将所有端元的平均 SAD (用 d_{SAD} 表示) 以及平均 RMSE (用 d_{RMSE} 表示) 作为比较标准.

仿真数据的产生方法是, 在一个正方形区域的四个角上各放置一种端元, 在区域中间放置第 5 种端元, 它们的丰度值均从中心往外递减直至 0. 随后对所有端元的丰度之和进行归一化, 利用 ASC 约束, 将各端元混合到一起. 根据所指定的各端元中心的丰度值不同, 可产生纯像元缺失程度不同的图像. 从 USGS 矿物光谱库中选取 5 种 224 波段的光谱作为各端元的光谱特性, 与丰度矩阵相乘并加上不同强度的高斯白噪声, 就得到了实验用的仿真数据.

我们通过三个实验来比较几种方法的性能. 在所有的实验中, 我们的算法 ASSNMF 的参数均设置为 $\lambda_1 = 0.28 \times N$, $\lambda_2 = 5/P$, $\delta = 0.02 \times L$. PSNMFSC 算法的参数按照文献[11]的标准, 设置为 $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.1$, $\gamma_m = 0.01$, $\gamma_s = 0.5$. 此外, 对于所有算法均认为端元个数是已知的.

实验 1(测试算法的抗噪声性能): 在这个实验中我们改变所加噪声的强度, 来比较各算法的抗噪声性能. 实验数据的信噪比 τ 从 ∞ (无噪声)、35dB 降至 10dB, 每隔 5dB 为一档.

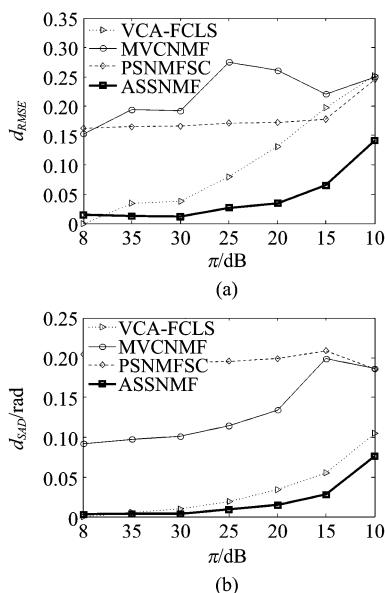


图 2 不同噪声强度下算法性能的比较 (a) RMSE (b) SAD
Fig. 2 Comparison of the algorithms with different noise levels
(a) RMSE (b) SAD

图 2(a) 和图 2(b) 分别给出了几种算法的 RMSE 和 SAD 指标的变化情况. 随着信噪比的降低, 所有算法的效果在整体上都逐渐变差. 在所有方法中, ASSNMF 综合表现最好. 当 $SNR = \infty$, 也即没有噪声时, VCA-FCLS 给出了最好的结果. 随着噪声的增加, ASSNMF 相对于 VCA-FCLS 的优势开始凸显.

实验 2(测试算法对无纯像元情况的适应性): 在这个实验中, 我们改变仿真数据的混合程度, 以此来比较各算法对无纯像元情况的适应性. 所有端元的最高丰度值 α 从 1 降至 0.5 (其中 1 表示数据中存在纯像元), 每隔 0.1 为一档, 而信噪比 τ 被固定在 30dB.

图 3(a) 和图 3(b) 分别给出了各算法的 RMSE 和 SAD 的变化情况. ASSNMF 的表现仍然是最好的. 随着像元纯度的降低, ASSNMF 和 VCA-FCLS 的效果都在逐渐变差, 而其他两种方法由于没有解出正确的结果, 故评价参数变化不大.

实验 3(研究算法性能和像素个数的关系): 在这个实验中我们改变仿真数据的大小, 以研究算法性能和像素数的关系. 实验范围从 20×20 像素到 100×100 像素, 纯度 α 和信噪比 τ 分别被固定在 0.9 和 30dB.

图 4(a) 和图 4(b) 分别给出了各算法的 RMSE 和 SAD 的变化情况. 随着像素数的增加, 所有算法的性能均有小幅改善. 对于 VCA, 这是因为更多的像素

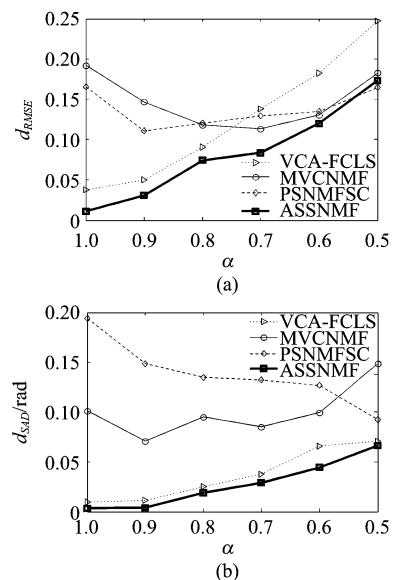


图 3 不同混合程度下算法性能的比较 (a) RMSE (b) SAD
Fig. 3 Comparison of the algorithms with different mixing degrees
(a) RMSE (b) SAD

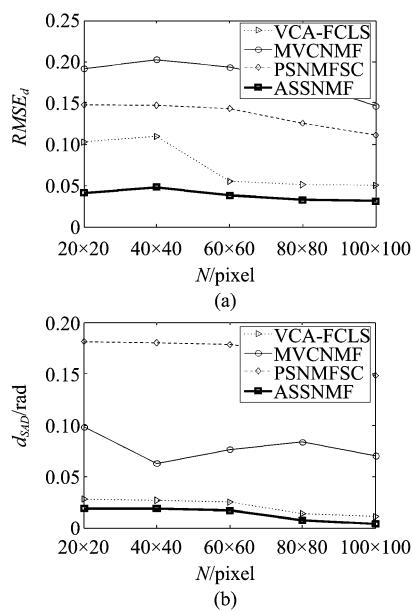


图4 不同像素个数下算法性能的比较 (a) RMSE (b) SAD
Fig. 4 Comparison of the algorithms with different data sizes (a) RMSE (b) SAD

能形成更完整的单形体,使顶点的寻找更精确.而对于其他算法,这是由于能从数据中得到更丰富的信息.与前两个实验一样,ASSNMF 给出了最好的结果.

3.2 实际数据实验

在本节中,我们使用实际的高光谱遥感图像数据集对所提出算法的性能进行测试. 它是由机载可见光及红外成像光谱仪 (Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer, AVIRIS) 拍摄于 1997 年 6 月的 Cuprite 数据(可以从 <http://aviris.jpl.nasa.gov/html/aviris.freedata.html> 下载), 该数据有 224 个波

表1 Cuprite 数据的光谱角比较 (粗体的数字表示最好的结果)
Table 1 SAD comparison for the Cuprite data sets (the numbers in bold represent the best performance)

| | ASSNMF | VCA | PSNMFSC | MVCNMF |
|---------------------|---------------|---------------|---------|--------|
| 明矾石 Alumite | 0.0612 | 0.0892 | 0.0926 | 0.0872 |
| 榍石 Sphene | 0.0722 | 0.0756 | 0.3612 | 0.2106 |
| 高岭石 Kaolinite#1 | 0.2095 | 0.2347 | 0.3507 | 0.2358 |
| 高岭石 Kaolinite#2 | 0.3069 | 0.2119 | 0.4361 | / |
| 高岭石 Kaolinite#3 | 0.1122 | 0.1375 | / | / |
| 玉髓 Chalcedony | 0.1208 | 0.1380 | 0.2890 | 0.1532 |
| 铵长石 Buddingtonite | 0.0939 | 0.1086 | 0.1078 | 0.1381 |
| 皂石 Nortronite | 0.0666 | 0.0733 | / | / |
| 白云母 Muscovite | 0.0701 | 0.0781 | 0.0765 | 0.0823 |
| 黄甲铁石 Jarosite | 0.1817 | 0.1025 | / | / |
| 蒙脱石 Montmorillonite | 0.1056 | 0.0543 | / | 0.1114 |
| 沙漠地表 Desert Varnish | 0.1922 | 0.2080 | 0.3400 | 0.3824 |

段. Swayze 和 Clark 等人已经给出了该地区的地物真实分布的报告^[15]. 该地区位于美国内华达州的沙漠中, 区域内主要为裸露的矿物, 并且各种矿物之间的混合现象较为普遍, 很适合用来检验算法对高混合度数据的适应能力.

在进行分解之前, 有 36 个波段因为信噪比太低或为水吸收波段而被移除(波段号为 1 ~ 2, 104 ~ 113, 148 ~ 167, 221 ~ 224), 留下 188 个波段进行进一步处理. 根据已有的对该数据的研究^[7], 我们设置端元数目为 12, 使用 ASSNMF 得到的丰度解混结果如图 5 所示. 与实地勘测地物分布图^[15]相比较, 可确定这些端元各自对应的矿物. 为了进一步衡量算法性能, 我们将美国地质调查局 (USGS) 库中的对应矿物光谱作为参考光谱, 并求取解混结果与它们

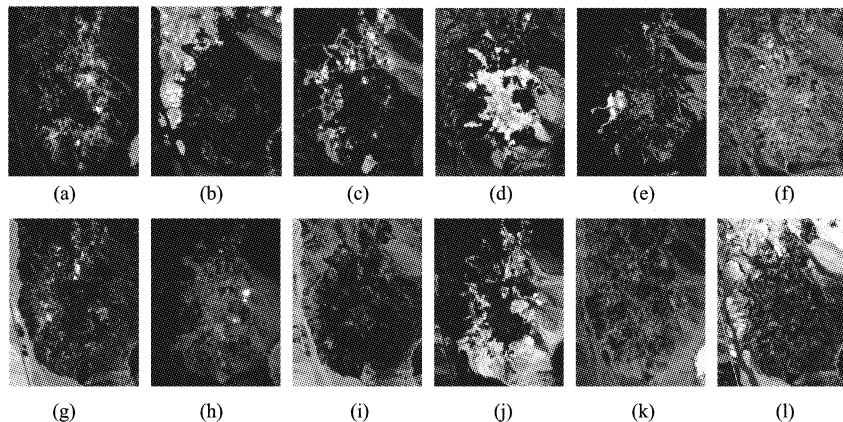


图5 Cuprite 数据的丰度分解结果 (a) 明矾石 (b) 楔石 (c) 高岭石#1 (d) 玉髓 (e) 铵长石 (f) 皂石 (g) 高岭石#2 (h) 白云母 (i) 黄甲铁石 (j) 高岭石#3 (k) 蒙脱石 (l) 沙漠地表
Fig. 5 Unmixing results for the Cuprite data set (a) Alumite (b) sphene (c) kaolinite #1 (d) chalcedony (e) buddingtonite (f) nortronite (g) kaolinite #2 (h) muscovite (i) jarosite (j) kaolinite #3 (k) montmorillonite (l) desert varnish

(下转 54 页)

红外与毫米波学报),2006,25(6):417—420.

- [19] SHAO Yong-Ni, CAO Fang, HE Yong. Discrimination years of rough rice by using visible/ near infrared spectroscopy based on independent component analysis and BP neural network[J]. *J. Infrared Millim. Waves*(邵咏妮,曹芳,何勇. 基于独立组分分析和BP神经网络的可见/近红外光谱稻谷年份的鉴别. 红外与毫米波学报),2007,26(6):433—436.

- [20] YIN Qiu, SU Xiao-Zhou, XU Zhao-An, et al. Analysis on the ultra-spectral characteristics of water environmental parameters about lake[J]. *J. Infrared Millim. Waves*(尹球,疏小舟,徐兆安,等. 湖泊水环境指标的超光谱响应特征分析. 红外与毫米波学报),2004,23(6):427—430.

(上接 32 页)

之间的光谱角. 几种方法的光谱角的定量对比如表 1 所示. 可以看出, ASSNMF 总体上给出了最好的结果.

4 总结

本文提出了一种高光谱遥感图像的混合像元分解算法. 由于 NMF 算法有大量局部极小, 影响了它在遥感图像中的应用. 本算法通过向 NMF 中加入约束条件来克服以上缺点. 主要约束条件为丰度的分离性与平滑性, 这两个条件符合高光谱图像的物理实际情况. 其中分离性约束基于 K-L 散度, 并根据 NMF 的特点作了相应的改进. 而平滑性约束基于线性变换, 能对所有的像素作全局考虑. 在仿真实验中, 本文提出的算法和其他的基于 NMF 的方法相比, 能够更好地克服局部极小的问题, 从而得到更优的解. 另外, 该算法还表现出了良好的抗噪声性能和对无纯像元数据的适应性, 在几种对比的算法中, 给出了最优的分解结果. 更进一步, 对实际高光谱图像进行的实验也表明, 本文的方法能够取得良好的效果.

REFERENCES

- [1] Chang C-I. *Hyperspectral imaging: techniques for spectral detection and classification*[M]. New York: Plenum, 2003.
- [2] Keshava N. A survey of spectral unmixing algorithms[J]. *Lincoln Lab. J.*, 2003, 14(1): 55—73.
- [3] Li J, Bioucas-Dias J M. Minimum Volume simplex analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data[C]. Boston: IEEE Geosci. Remote Sens. Symp., 2008, 3: 250—253.
- [4] Winter M E. N-find: an algorithm for fast autonomous spectral endmember determination in hyperspectral data [C]. [21] LIU Liang-Yun, ZHANG Bing, ZHENG Lan-Fen, et al. Target classification and soil water content regression using land surface temperature(LST) and vegetation index (VI)[J]. *J. Infrared Millim. Waves*(刘良云,张兵,郑兰芬,等. 利用温度和植被指数进行地物分类和土壤水分反演. 红外与毫米波学报),2002,21(4):269—273.
- [22] LI Hong-Bo, SHU Rong, XUE Yong-Qi. Pushbroom hyperspectral imager and its potential application to oceanographic remote sensing[J]. *J. Infrared Millim. Waves*(李红波,舒嵘,薛永祺. PHI 超光谱成像系统及其海洋遥感应用前景分析. 红外与毫米波学报),2002,21(6):429—433.
- [5] Nascimento J, Bioucas-Dias J M. Vertex component analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2002, 43(4): 898—910.
- [6] Chang C-I, Wu C-C, Liu W, et al. A new growing method for simplex-based endmember extraction algorithm [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2006, 44(10): 2804—2819.
- [7] Tao X, Wang B, Zhang L. Orthogonal bases approach for decomposition of mixed pixels for hyperspectral imagery [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2009, 6(2): 219—223.
- [8] Lee D D, Seung H S. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization[J]. *Nature*, 1999, 401: 788—791.
- [9] Lee D D, Seung H S. Algorithms for non-negative matrix factorization[J]. *Adv. Neural Inform. Process Syst.*, 2000, 13: 556—562.
- [10] 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.
- [11] Jia S, Qian Y. Constrained nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2009, 47(1): 161—173.
- [12] Kullback S, Leibler R A. On information and sufficiency [J]. *The Annals of Math. Stat.*, 1951, 22: 79—86.
- [13] Chang C-I. Spectral information divergence for hyperspectral image analysis[C]. Hamburg: IEEE Geosci. Remote Sens. Symp., 1999, 1: 509—511.
- [14] Heinz D C, Chang C-I. 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.
- [15] 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/OL]. The 6th Annual JPL Airborne Earth Science Workshop, 1996. <http://speclab.cr.usgs.gov/PAPERS.imspec.evol/aviris.evolution.html>.