

基于 Cayley-Menger 行列式的高光谱遥感图像端元提取方法

普晗晔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: 提出了一种基于 Cayley-Menger 行列式的快速端元提取算法。该算法的目标是寻找包含高光谱数据集的最小体积的单形体。与其它基于单形体几何的算法相比, 该方法具有诸多优点。首先, Cayley-Menger 行列式的引入使得算法可以便捷地利用 Hermite 矩阵的特点大大加速搜索过程, 进而得到一个稳定的最终解。其次, 该算法无须对数据进行降维处理, 从而可以避免因数据降维而造成的有用信息的丢失。仿真和实际高光谱数据的实验结果表明, 所提出的算法在获得准确解的同时, 具有非常快的收敛速度。

关键词: 高光谱解混; Cayley-Menger 行列式; 辅助高; 最小体积; 单形体

中图分类号: TP751 文献标识码: A

Cayley-Menger determinant-based endmember extraction algorithm for hyperspectral unmixing

PU Han-Ye¹, 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: A fast Cayley-Menger determinant-based endmember extraction algorithm for hyperspectral unmixing was proposed. The algorithm is to find the simplex enclosing the hyperspectral data with minimum volume. It improves current simplex-based algorithms in several aspects. The introduction of Cayley-Menger determinant makes it easy to use features of Hermite matrix to accelerate the searching process and gives a stable result finally. Moreover, a dimensionality reduction transform is not necessary in this algorithm, which will avoid the loss of useful information during the dimensionality reduction. The experimental results on synthetic and real hyperspectral dataset demonstrated that the proposed algorithm is a fast and accurate algorithm for the hyperspectral unmixing.

Key words: hyperspectral unmixing; Cayley-Menger determinant; auxiliary height; minimum volume; simplex

PACS: 84.40. X6

引言

高光谱成像仪在获得被测空间信息的同时, 把被测物的辐射分解成不同波长的谱辐射, 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而且连续的光谱区间内同时获取信息, 从而得到上百波段的连续图像, 且每一个图像像

元都可以提取一条完整连续的光谱曲线。图像中仅仅包含一种地物类型的像元被称为纯像元, 它记录的正是该类型的光谱响应特征。由于成像系统空间分辨率和地物异质性的限制, 所获得的遥感图像的某些像元对应的地表中, 往往包含不同的地物类型, 它们有着不同的光谱响应特征, 这被称为混合像元。如何从高光谱图像中准确地提取出基本组成成分

收稿日期: 2011-03-04, 修回日期: 2011-07-05

Received date: 2011-03-04, revised date: 2011-07-05

基金项目: 国家自然科学基金(61071134); 高等学校博士点基金(20110071110018)

Foundation item: Supported by National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61071134); Research Fund for Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20110071110018)

作者简介: 普晗晔(1987-), 男, 河南沈丘人, 博士研究生, 主要研究领域为高光谱遥感图像处理. E-mail: 09110720009@fudan.edu.cn.

* 通讯作者: E-mail: wangbin@fudan.edu.cn.

(端元)的特征光谱,并通过对其分布进行估计,有效地得到它们之间混合的比例(丰度)已经成为高光谱遥感图像分析中的一个重要研究课题^[1-2].

线性光谱混合模型 (Linear Spectral Mixture Model, LSMM), 是一种广泛应用于高光谱解混技术的光谱混合模型^[1-2]. 它是基于这样的假设: 端元之间的相互影响可以忽略不记, 每个光子仅能“看到”一种物质, 并将其信号叠加到像元光谱中. 根据 LSMM, 每一个观测像元矢量都可以表述为端元和它们相应的丰度的线性组合. 而且, 高光谱数据集在其特征空间(波段空间)内呈现单形体的结构, 从而便于利用凸面几何的方法, 从特征空间对混合光谱进行诠释^[2].

基于 LSMM 的高光谱解混算法通常由两步构成: 第一步是提取基本组成成分的特征光谱, 即端元提取; 第二步是估计各个端元混合的比例, 即丰度估计. 常见的解混算法可以分为两大类. 一类是基于几何学的方法^[4-7], 另一类是基于统计学的方法^[8-9]. 基于几何学的方法认为端元提取问题等价于寻找一个包含高光谱图像数据集的最小体积单形体, 而端元就位于这个单形体的顶点上. 这类方法有 N-FINDR^[4], Simplex Growing Algorithm (SGA)^[5], Vertex Component Analysis (VCA)^[6], Orthogonal Bases Algorithm (OBA)^[7] 等. 无一例外, 这些方法都是基于“高光谱数据集中存在纯像元”这一假设. 因此对于某些端元的纯像元缺失的数据集, 这些方法的适应性相对较差. 基于统计学的解混算法则是利用数据的统计特性求解端元光谱. 比较典型的算法有 Non-negative Matrix Factorization (NMF)^[8]、Independent Component Analysis (ICA)^[9] 等. 这些算法虽然可以处理纯像元缺失的数据集, 但是高运算复杂度使其的运算时间难以与基于几何学的算法相比拟.

提出了一种新的基于单形体几何的高光谱遥感图像端元提取方法. 与以往类似算法不同的是, 提出的算法将距离几何理论中的一个重要概念——Cayley-Menger 行列式^[10]引入单形体体积的计算, 从而将基于行列式(如 N-FINDR 和 SGA 等)或者正交基(如 OBA 等)的单形体体积计算, 转换为搜寻最大辅助高的计算. 在该算法的递推搜索过程中, 搜寻一个新的最大体积单形体被等价于在以往计算的基础上搜寻一个新的最大的辅助高, 而该最大辅助高对应的像元即为新确定的端元. 与其它基于单形体几何的算法相比, 所提出的新方法在保证结果的正确性和唯一性的同时, 显著地提升了运算速度. 此外,

新方法无须对原始数据做降维处理, 从而可以避免有用信息(如小目标信息)的丢失.

1 算法描述

根据线性混合模型, 高光谱数据矩阵可以描述为:

$$\mathbf{X} = \mathbf{AS} + \mathbf{N}, \quad (1)$$

其中矩阵 $\mathbf{X} \in R^{L \times N}$ 、 $\mathbf{A} \in R^{L \times p}$ 、 $\mathbf{S} \in R^{p \times N}$ 分别为观测像元矩阵、端元光谱矩阵和丰度矩阵, 矩阵 $\mathbf{N} \in R^{L \times N}$ 表示模型中的可能误差以及噪声. 维度 L, N 和 p 分别代表高光谱图像中波段数、像元数以及端元数.

同时, 混合像元各端元对应的丰度 s_i 应满足丰度和为一约束 (Abundance Sum-to-one Constraint, ASC) 和丰度非负约束 (Abundance Nonnegative Constraint, ANC) :

$$\sum_{i=1}^p s_i = 1, s_i \geq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (2)$$

端元提取算法的目标是在已知观测像素矩阵 \mathbf{X} 和端元数目 p 的基础上求解端元光谱矩阵 \mathbf{A} .

1.1 算法原理及步骤

在这一部分将提出一种新的基于 Cayley-Menger 行列式的串行端元提取算法. 在给出算法之前, 首先介绍与算法相关的两个重要的定理和一个推论.

定理 1 在一个 n 维空间中, 由 $k+1$ 点 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{k+1}$ 构成的 k 维单形体 Σ_k 的体积 V_k 满足

$$V_k^2 = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} \det(\mathbf{D}_{k+2}), \quad (3)$$

其中 $\mathbf{D}_{k+2} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I}_{k+1}^T \\ \mathbf{I}_{k+1} & \mathbf{G}_{k+1} \end{pmatrix}$ 是 $k+2$ 阶 Hermite 矩阵, 而且 $\det(\mathbf{D}_{k+2})$ 是 $k+2$ 阶 Cayley-Menger 行列式, $\mathbf{I}_{k+1} \in R^{k+1}$ 为全为一的列矢量, $\mathbf{G}_k = \{d_{i,j}^2\}_{i,j=1,2,\dots,p}$, $d_{i,j} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$, $\mathbf{D}_1 = 0$.

定理 1 的详细证明可参考文献^[10].

式(3)中的矩阵 \mathbf{D}_k 是一个 k 阶 Hermite 矩阵. 它可以写成分块的形式如下:

$$\mathbf{D}_{k+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_k & \mathbf{d}_k \\ \mathbf{d}_k^T & 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

其中, $\mathbf{d}_k = (1 \quad d_{k,1}^2 \quad d_{k,2}^2 \quad \dots \quad d_{k,k-1}^2)^T \in R^k$. 根据矩阵行列式的展开规则, 我们可以得到

$$\det(\mathbf{D}_{k+1}) = -\mathbf{d}_k^T \mathbf{D}_k^{-1} \mathbf{d}_k \det(\mathbf{D}_k). \quad (5)$$

此处, 我们引入一个新的概念, 即辅助高 h_k , 定义为 $h_k = \mathbf{d}_k \mathbf{D}_k^{-1} \mathbf{d}_k^T \in R$. 它表征了 k 和 $k+1$ 阶 Cayley-Menger 行列式之间的递推关系. 我们可以证明

在最大单形体的搜索过程中,搜索到的最大辅助高 h_k 有单调衰减的性质。

定理 2 (Hermite 矩阵的分块求逆引理) 如果一个 $k+1$ 阶 Hermite 矩阵可以表述为式(4)所示的分块形式,则它的逆矩阵为

$$\mathbf{D}_{k+1}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_k^{-1} & \mathbf{0}_k \\ \mathbf{0}_k^T & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{h_k} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_k \mathbf{b}_k^T & \mathbf{b}_k \\ \mathbf{b}_k^T & 1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中, $\mathbf{b}_k = -\mathbf{d}_k^T \mathbf{D}_k^{-1} \mathbf{D}_k^{-1}$ 和 $h_k = -\mathbf{d}_k^T \mathbf{b}_k = \mathbf{d}_k^T \mathbf{D}_k^{-1} \mathbf{d}_k$.

定理 2 的证明详见参考文献^[12].

推论 1 对于一个 k 维辅助矢量 $\boldsymbol{\gamma}_k \in R^{k \times 1}$ 和 $\boldsymbol{\gamma}_{k+1} = [\boldsymbol{\gamma}_k^T \ \ \boldsymbol{\gamma}_{k+1}]^T$, 由定理 2, 我们可以得到

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\gamma}_{k+1}^T \mathbf{D}_{k+1}^{-1} \boldsymbol{\gamma}_{k+1} &= \boldsymbol{\gamma}_{k+1}^T \begin{pmatrix} \mathbf{D}_k^{-1} & \mathbf{0}_k^T \\ \mathbf{0}_k & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\gamma}_{k+1} - \frac{1}{h_k} \boldsymbol{\gamma}_{k+1}^T \begin{pmatrix} \mathbf{b}_k \mathbf{b}_k^T & \mathbf{b}_k \\ \mathbf{b}_k^T & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{\gamma}_{k+1} \\ &= \boldsymbol{\gamma}_k^T \mathbf{D}_k^{-1} \boldsymbol{\gamma}_k - \frac{1}{h_k} [(\boldsymbol{\gamma}_k^T \mathbf{b}_k + \boldsymbol{\gamma}_{k+1})^2], \end{aligned} \quad (7)$$

其中, $\mathbf{b}_k = -\mathbf{d}_k^T \mathbf{D}_k^{-1}$ 和 $h_k = -\mathbf{d}_k^T \mathbf{b}_k = \mathbf{d}_k^T \mathbf{D}_k^{-1} \mathbf{d}_k$.

假设 k 维单形体的体积为 V_k , 则基于单形体体积的算法的目的是搜索最大体积的 $p-1$ 维单形体, 即在已知数据集的基础上计算最大的 V_{p-1}^2 . 由定理 1 和 2 可以得到:

$$V_k^2 = \frac{\mathbf{d}_{k+1}^T \mathbf{D}_{k+1}^{-1} \mathbf{d}_{k+1}}{2k^2} V_{k-1}^2 = \frac{1}{2k^2} h_{k+1} V_{k-1}^2. \quad (8)$$

因此如果想要的得到一个最大的 V_k^2 , 则只需在已知 V_{k-1}^2 的基础上乘上对应的辅助高 h_{k+1} 和一个与 k 有关的常数即可, 其中 \mathbf{D}_{k+1} 由计算 V_{k-1}^2 时得到. 利用推论 1 中的递推公式(7)可以简化这一迭代搜索运算过程, 大大降低运算的复杂度.

我们的算法流程如下所示. 其中, 符号⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_k$ 表示像元 \mathbf{x}_i 与前 $k-1$ 个端元的距离的平方 $\gamma_{i,j}^2$ ($j=1, 2, \dots, k-1$) 组成的 k 维辅助矢量⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_k = [1 \ \ \boldsymbol{\gamma}_{i,1}^2 \ \ \boldsymbol{\gamma}_{i,2}^2 \ \ \dots \ \ \boldsymbol{\gamma}_{i,k-1}^2]^T$, 随着端元提取过程的进行, 该矢量的维数逐渐增加, 而且满足⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_{k+1} = [{}^{(i)} \boldsymbol{\gamma}_k^T \ \ \boldsymbol{\gamma}_{i,k}^2]^T$.

算法: 基于 Cayley-Menger 行列式的端元提取算法(CMEE 算法)

输入: 观测数据矩阵 $\mathbf{X} \in R^{L \times n}$ 和端元数目 p

输出: 提取的端元矩阵 $\mathbf{A} \in R^{L \times p}$

步骤 1 初始化:

i) 从所有的像元中选择一个模最大的像元作为初始端元 \mathbf{e}_1 .

ii) 计算任一像元 \mathbf{x}_i 与端元 \mathbf{e}_1 的欧氏距离, 记为 $\gamma_{i,1}$, 进而得到辅助矢量⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_2$. 搜索满足下式的⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_2$, 令其对应的像元为端元

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_2 &= \operatorname{argmax}_i ({}^{(i)} \boldsymbol{\gamma}_2^T \mathbf{D}_2^{-1(i)} \boldsymbol{\gamma}_2) \\ &= \operatorname{argmax}_i (2\gamma_{i,1}^2). \end{aligned} \quad (9)$$

计算 \mathbf{D}_3 和 h_2 .

步骤 2 对于 $k=3, 5, \dots, p$, 计算任一像元 \mathbf{x}_i 与第 $k-1$ 个端元 \mathbf{e}_{k-1} 的欧氏距离 $\gamma_{i,k-1}$, 进而得到 k 维辅助矢量⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_k$. 利用式(7)计算⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_k^T \mathbf{D}_k^{-1(i)} \boldsymbol{\gamma}_k$. 搜索满足下式的⁽ⁱ⁾ $\boldsymbol{\gamma}_k$, 令其对应的像元为端元

$$\mathbf{e}_k = \operatorname{argmax}_i ({}^{(i)} \boldsymbol{\gamma}_k^T \mathbf{D}_k^{-1(i)} \boldsymbol{\gamma}_k). \quad (10)$$

计算 \mathbf{D}_{k+1} , \mathbf{b}_k 和 h_k .

然后返回步骤 2 直至所有的端元被提取出来.

步骤 1 的目的是搜索前 2 个端元. 确定前 2 个端元的方法是这样的: 将所有像元矢量中模最大的像元作为第 1 个端元 \mathbf{e}_1 , 将离 \mathbf{e}_1 最“远”的像元作为第 2 个端元 \mathbf{e}_2 . 实际上这个像元正好对应于最大辅助高 h_2 . 算法步骤 2 完成在前 2 个端元的基础上利用式(7)中的一阶递推关系依次确定余下的端元.

最大辅助高随着搜索过程的进行保持非负且单调减小. 在无噪声的情况下, 当搜索到第 $p+1$ 步时, 搜索到的最大辅助高减小到零, 此时, 搜索到的单形体的体积为零. 而在存在噪声的情况下, 最大辅助高趋近于一个和噪声强度相关的值. 因此, 可以将其作为一参数辅助判定端元数目.

1.2 算法复杂度分析

为了分析算法效率, 比较所提出的算法和其它常见算法(如 N-FINDR、SGA、VCA 和 OBA)的计算复杂度. 算法中涉及的浮点操作次数(floating-point operations, flops)常被用来作为衡量算法复杂度的标准之一.

对于 N-FINDR、SGA 和 VCA 算法来说, 降维变换都是不可避免的操作, 因此计算的这 5 种算法的复杂度是针对降维后数据集. 在 N-FINDR 算法中, 每次循环需要计算 pN 次复杂度为 p^η 的 p 阶方阵的行列式, 其中 $2.3 < \eta < 2.9$ ^[11]. 一般来说 N-FINDR 需要 4~5 次循环达到稳定解, 因此 N-FINDR 算法中的浮点操作次数大于 $p^{\eta+1} N$ ^[4]. SGA 算法的整个搜索过程中总的浮点操作次数为 $N \sum_{k=2}^p k^\eta$ ^[5]. VCA 算法的核心是将 N 个降维后的 p 维矢量投影到 p 维正交矩阵确定的空间上, 这些运算共需要 $2p^2 N$ 次浮点操作^[6]. OBA 算法中的迭代的目的是搜索模最大的正交基, 整个算法共进行 $(3p^2 - 4p + 1) N$ 次浮点运算^[7]. 而提出的算法总共涉及 $(1.5p^2 + 0.5p - 5) N$ 次浮点乘法操作. 据此, 得到 5 种算法的计算复杂度如表 1 所示. 可以看出提出的算法计算

复杂度明显低于 N-FINDR 和 SGA 算法,也低于 VCA 和 OBA 算法.

表 1 各种算法的运算复杂度

Table 1 Computational complexity of the algorithms

算法	运算复杂度 (flops)
N-FINDR	$\geq p^{\eta+1}N$
SGA	$N \sum_{k=2}^p k^\eta$
OBA	$(3p^2 - 4p + 1)N$
VCA	$2p^2N$
CMEE	$(1.5p^2 + 0.5p - 5)N$

此外,由于 OBA 算法也可以不对数据集进行降维处理,因为需要比较一下不降维情况下 OBA 算法和提出的算法之间的复杂度. 不降维时,通常 $N \geq p$ 且 $L \geq p$,由两个算法流程可知:OBA 算法的复杂度为 $F_{OBA} = (3p - 2)LN$,而提出的算法的复杂度为 $F_{CMEE} = pLN < F_{OBA}$.

综上可知,提出的算法是所有算法中复杂度最低的.

2 实验结果与讨论

2.1 仿真数据实验

在本节中,采用人工产生的仿真数据测试算法的性能. 将本文提出的算法与常见的性能较优的几种算法进行比较:N-FINDR、SGA、VCA 和 OBA. 在端元提取的基础上利用 FCCLS 算法^[13]进行丰度估计. 通过分析端元提取和丰度估计的结果以及算法执行时间综合评价 5 种算法的性能.

端元提取结果的优劣可以使用光谱角距离 (Spectral Angle Distance, SAD)^[6] 和均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE)^[2] 这两个指标来衡量. 它们分别衡量端元提取和丰度解混结果与参考值的近似程度. 将所有端元的平均 $\overline{SAD} = (1/p) \sum_{k=1}^p SAD_k$ 以及平均 $\overline{RMSE} = (1/p) \sum_{k=1}^p RMSE_k$ 作为性能标准.

算法运行时间可以作为一个定量的指标衡量算法的复杂度. 测算了各个算法针对降维后数据集的运行时间. 时间测试的硬件环境为 Intel (R) Xeon (R) E5504 CPU 2.00 GHz, 24 GB 和 Windows 7 Matlab 7.0.

仿真数据由已知特定的端元光谱及其对应的丰度分布构成. 端元光谱是从 USGS 光谱库得到的矿物光谱数据,其中 5 种矿物为 a) Alunite GDS83 Na63, b) Nontronite GDS41, c) Desert Varnish GDS78A Rhy, d) Pyrope WS474, e) Buddingtonite

NHB2301. 而丰度矩阵则是由 Dirichlet 分布^[6]得到,它满足丰度和为一(ASC)和丰度非负(ANC)约束. 端元光谱矩阵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. 仿真数据波段数为 224,光谱分辨率为 10 nm,波长范围为 0.37 ~ 2.48 μm. 这样仿真数据构造方式一方面通过改变参数可以方便地得到不同参数的仿真数据,另一方面它利用实际矿物光谱构造仿真数据,与实际数据有一定的相似之处,因此可以用来有效地测试算法的性能.

通过 3 组仿真数据实验来说明所提出方法的有效性,并与其它类似方法进行比较. 这 3 组实验的目的分别为:评判算法的抗噪声性能,研究算法对于纯像元缺失数据的适应性,验证运算复杂度的分析结果. 每组实验都在同等条件下针对噪声强度相同而数据不同的仿真数据实验 20 次,并取这 20 次的平均结果作为最终的结果,这样就可以避免因单次实验偏差造成的误差.

实验 1 (算法的抗噪声干扰分析实验):在这个实验中,改变仿真数据的信噪比 SNR,来比较各算法的抗噪声性能. SNR 从 ∞ (无噪声)、50 dB 降至 15 dB,每隔 5 dB 为一档,而且 5 种端元的最大纯度 ρ 均为 1.0 (即 5 个端元都存在相应的纯像元),数据像元个数为 256×256 .

图 1(a)和(b)分别给出了 5 种算法的 SAD 和 RMSE 指标的变化情况. 当 $SNR = \infty$ 时,5 种算法都可以完美地将端元提取出来. 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, N-FINDR 和 VCA 算法的表现相对较差. 而其他基于单形体的算法则可以得到近似的結果. 此外,可以看到,由于每次实验添加的噪声强度相同,而每次的实际数据却不同,因此 CMEE 和 OBA 算法性能虽然几乎相同,但也略有差异.

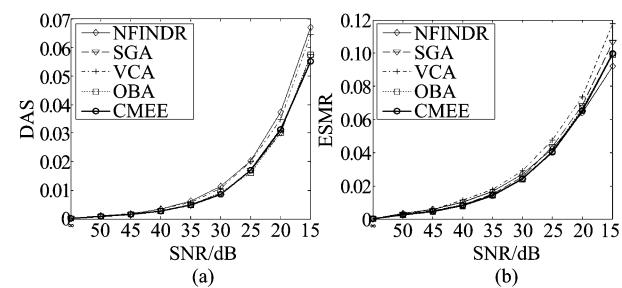


图 1 不同噪声强度下算法性能的比较 (a) SAD (b) RMSE
Fig. 1 Comparison of the algorithms with different noise levels
(a) SAD (b) RMSE

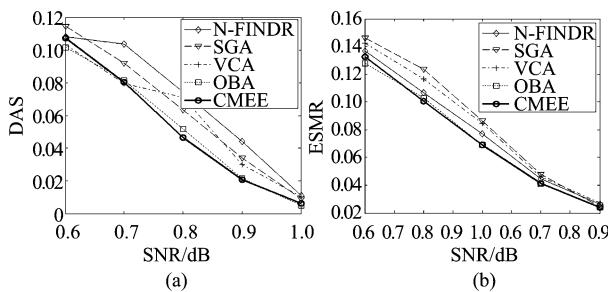


图 2 不同混合程度下算法性能的比较 (a)SAD (b)RMSE
Fig. 2 Comparison of the algorithms with different mixing degrees (a)SAD (b)RMSE

实验 2 (算法的纯像元缺失适应性实验):虽然这些算法都是基于“高光谱数据集中存在纯像元”的假设,但是这一假设在实际中并不总是成立,因为有必要分析这些算法在纯像元缺失的数据集中的表现。此时,各个算法将会从图像中找到与真实端元最接近的像元作为端元。在这个实验中,采用的仿真数据集中,五种端元的最高丰度值 ρ 从 0.6 升至 1.0(其中 1 表示数据集中存在纯像元),每隔 0.1 为一档。信噪比 SNR 被固定在 30 dB,同样是添加强度相同而数据却不同的噪声,像元个数为 256×256 。

图 2(a)和(b)分别给出了各个算法的 SAD 和 RMSE 的变化情况。同样,随着纯度的降低各种算法的表现都逐渐变差,而且 5 种方法都表现出较为接近的结果,其中 N-FINDR 算法的结果相对较差而提出的算法具有相对较好的性能。

实验 3 (算法复杂度实验):这个实验主要测试两种情况下的运算时间,即

1) 改变仿真数据像元数的大小,以研究算法复杂度和像元数的关系。仿真数据像元数 1×10^4 增加到 150×10^4 ,每隔 10×10^4 为一档,而且 5 种端元的最高丰度值均为 1.0,信噪比 SNR 为 30 dB。

2) 改变端元的个数,以研究算法复杂度和端元个数的关系。端元仍然是从 USGS 矿物光谱库中取得。端元个数由 3 增加到 20。同样,各端元的最高丰度值为 1.0,信噪比 SNR 为 30 dB,像元个数为 256×256 。

图 3(a)和(b)分别给出了 2 种情况下算法的运行时间的变化情况。为了清晰地显示不同算法运行时间的差距我们采用了半对数坐标系,其中运行时间采用对数坐标。随着像元个数和端元个数的增加,5 种算法运行时间均逐渐增加,且运算耗时依次为 N-FINDR、SGA、OBA、VCA 和 CMEE,这些和理论分析一致。

仿真实验表明,提出的算法具有较好的抗噪声

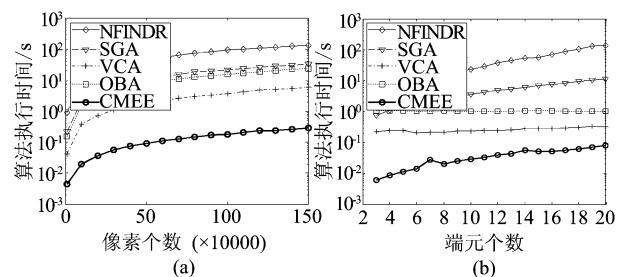


图 3 不同情况下的算法运行时间 (a)像元个数 (b)端元个数
Fig. 3 The computational time of different algorithms (a) the number of pixels (b) the number of endmembers

性能和较好的对纯像元缺失数据集的适应性,而且具有最低的运算复杂度。

2.2 实际数据实验

在本节中,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并和其它算法作比较。

使用的数据集是高光谱混合像元分解研究中广泛使用的美国 Nevada 州南部沙漠地区的 Cuprite 数据 (<http://aviris.jpl.nasa.gov/html/aviris.freedata.html>)。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 19 日。该数据共有 224 个波段,波长范围是 $0.37 \sim 2.48 \mu\text{m}$,光谱分辨率为 10 nm。该区域内主要为裸露的矿物,存在矿物地物纯像元,而且各种矿物之间的混合现象也较为普遍,很适合用来检验高光谱解混算法的性能。同时,Swatze 和 Clark 等人已经给出了该地区的地物真实分布的报告^[14],这样更易于根据地物真实分析算法的各种性能指标。

截取原始数据集中一块大小为 250×191 的比较典型的数据用于实验^[6]。在解混之前,波段号为 1 ~ 2, 104 ~ 113, 148 ~ 167, 221 ~ 224 的共 36 个波段因为信噪比太低或为水吸收波段而被移除,留下的 188 个波段被用于算法验证。

结合 HySime 端元估计方法和地物真实分布情况确定端元数目为 14。HySime 算法是一种基于特征值分解的全自动无监督的端元数目估计算法。它首先估计信号和噪声的协方差矩阵,然后选择对应于最小均方误差的最能代表信号子空间的特征值的子集并将子集大小作为端元数目。

随后利用 FCLS 算法得到丰度解混结果并与实际调查结果^[14]比较。为了衡量算法性能,将美国地质调查局(USGS)库中的对应矿物光谱作为参考光

谱,求取解混结果与它们之间的光谱角距离(SAD). 几种算法的 SAD 的定量对比如表 2 所示. 针对相同的数据集,CMEE 和 OBA 算法得到相同的结果,并且其结果优于其它 3 种算法的提取结果. 另外,表 3 分别给出了使用这 5 种算法针对该数据集时消耗的时间. 对于该数据集,提出的算法的运行速度是 VCA 算法的 6 倍多,而是 N-FINDR 算法的 1600 倍多.

表 2 几种算法的 SAD 比较

Table 2 SAD comparison for the Cuprite dataset

序号	参考矿物光谱	N-FINDR	SGA	VCA	CMEE & OBA
1	白云母 Muscovite #1	0.0801	0.0709	0.1631	0.0778
2	沙漠地表 Desert Varnish	0.2133	0.1599	0.2454	0.1599
3	明矾石 Alunite	0.0690	0.2576	0.2172	0.0689
4	高岭石 Kaolinite #1	0.2576	0.0683	0.2201	0.2577
5	蒙脱石 Montmorillonite #1	0.0553	0.1379	0.0544	0.0490
6	高岭石 Kaolinite #2	0.0997	0.0525	0.1769	0.0819
7	长石 Buddingtonite	0.0774	0.1888	0.1053	0.0680
8	黄铁矿 Jarosite	0.1543	0.0819	0.2368	0.1545
9	皂石 Nontronite	0.1300	0.0565	0.0741	0.0727
10	玉髓 Chalcedony	0.0713	0.0942	0.1317	0.0713
11	高岭石 Kaolinite #3	0.2039	0.0774	0.2776	0.1747
12	白云母 Muscovite	0.0797	0.1610	0.0888	0.0793
13	钙钛硅酸盐 Spheine	0.0700	0.0743	0.0970	0.0708
14	蒙脱石 Montmorillonite #2	0.1989	0.2198	0.1103	0.1692
	平均 SAD	0.1258	0.1215	0.1571	0.1111

表 3 算法运行时间

Table 3 Computational times of the algorithms

算法	N-FINDR	SGA	OBA	VCA	CMEE
时间(s)	66.0074	5.0125	3.0971	0.2441	0.0396

实际数据表明,提出的算法相对于其他类似算法而言,具有较好的端元提取精度和较快的分解速度,可以快速而精确地实现高光谱图像的端元提取.

3 结论

提出了一种基于单形体几何的快速高光谱遥感图像端元提取算法. 与传统的基于单形体几何的算法不同,它将 Cayley-Menger 行列式引入单形体体积的计算,从而将基于行列式或者正交基的单形体体积计算等价于一组最大辅助高的搜索计算. 通过利用 Hermite 矩阵的分块特性及其求逆引理得出的辅助高递推公式,该算法可以方便地在已确定端元的基础上递推出新的端元,而且在保证结果的唯一性和精确性的同时,极大地提高了搜索效率. 同时,

该算法不需要执行降维操作,从而避免了因降维造成的小目标信息的丢失. 仿真数据和实际高光谱数据实验表明,与同类算法相比,该算法具有较好的抗噪声性能,而且对于端元缺失的数据集也有较好的适应性. 该算法在准确地执行高光谱数据的端元提取的同时,大大提高了运算速度,这对于大数据集的高光谱图像的快速处理有重要的实际意义.

REFERENCES

- [1] Chang C-I. *Hyperspectral imaging: techniques for spectral detection and classification*[M]. New York: Plenum, 2003.
- [2] Plaza A, Martinez P, Perez R, et al. A quantitative and comparative analysis of endmember extraction algorithms from hyperspectral data[J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2004, **42**(3): 650–663.
- [3] Boardman J. Automating spectral unmixing of AVIRIS data using convex geometry concepts [C]. in Summaries 4th Annu. JPL Airborne Geoscience Workshop, 1993, **1**: 11–14.
- [4] Winter M E. N-findr: an algorithm for fast autonomous spectral endmember determination in hyperspectral data [C]. in: Proceedings of the SPIE conference on Imaging Spectrometry V, 1999, **3753**: 266–275.
- [5] 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.
- [6] Nascimento J, Bioucas-Dias J. Vertex Component Analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2002, **43**(4): 898–910.
- [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] Hyvärinen A, Karhunen J, Oja E. *Independent Component Analysis*[M]. New York: Wiley, 2001.
- [10] Blumenthal L M. *Theory and applications of distance geometry*[M]. New York: Chelsea, 1970.
- [11] ZHANG Xian-Da. *Matrix analysis and applications*[M]. Beijing: Tsinghua University Press(张贤达. 矩阵分析和应用. 北京: 清华大学出版社), 2004, 70–71.
- [12] Kaltofen E, Villard G. On the complexity of computing determinants [C]. in Proc. 5th Asian Symp. Computer Mathematics, 2001, **9**: 13–27.
- [13] 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.
- [14] 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>