

高光谱遥感图像非线性解混研究综述

杨斌^{1,2,3}, 王斌^{1,2,3*}

- (1. 复旦大学 电磁波信息科学教育部重点实验室, 上海 200433;
2. 北京师范大学 地表过程与资源生态国家重点实验室, 北京 100875;
3. 复旦大学 信息学院智慧网络与系统研究中心, 上海 200433)

摘要:介绍了近年来非线性光谱解混方法的发展状况, 主要包括矿物沙地地区的紧密混合模型和植被覆盖区域的多层次混合模型, 以及基于这些模型的非线性解混算法和利用核函数、流形学习等方法的数据驱动非线性光谱解混算法及非线性探测算法. 最后分析总结了现有非线性解混模型与算法的优势与缺陷及未来的研究趋势.

关键词:高光谱遥感; 混合像元; 非线性光谱解混; Hapke 模型; 双线性混合模型; 核方法; 流形学习
中图分类号: TP751 **文献标识码:** A

Review of nonlinear unmixing for hyperspectral remote sensing imagery

YANG Bin^{1,2,3}, WANG Bin^{1,2,3*}

- (1. Key Laboratory for Information Science of Electromagnetic Waves (MoE), Fudan University, Shanghai 200433, China;
2. State Key Laboratory of Earth Surface Processes and Resource Ecology, Beijing Normal University, Beijing 100875, China;
3. Research Center of Smart Networks and Systems, School of Information Science and Technology, Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: The development of non-linear spectral unmixing methods in recent years is introduced. There are mainly two types of models. One is the close-mixing model of mineral sand area and the other is multi-level mixing model of vegetation coverage area. The data-driven nonlinear spectral unmixing algorithms such as kernel methods and manifold learning are presented. Both advantages and disadvantages of these models and algorithms are summarized and the future research trends are analyzed.

Key words: hyperspectral remote sensing, mixed pixel, nonlinear spectral unmixing, Hapke model, bilinear mixture model, kernel method, manifold learning

PACS: 84. 40. Xb, 95. 75. Mn

引言

高光谱遥感图像通过将成像光谱学与传统遥感成像技术相结合^[1], 能在获取地物空间分布信息的同时, 得到从可见光到短波红外甚至更宽光谱区间中数百个连续波段上的地物详细光谱信息. 高光谱遥感技术的出现为更精细的地物分类和识别提供了可能, 并已被广泛应用于矿物探测、环境灾害监测、军事等诸多领域^[2-3]. 然而由于空间分辨率的限制以

及自然地表的复杂多样性, 高光谱遥感图像的混合像元现象十分普遍. 混合像元由多种纯物质光谱混合而成, 会对高光谱遥感应精度造成较大影响. 为改善该问题, 通常需要对图像进行混合像元分解以达到亚像元级别, 即光谱解混. 经过光谱解混, 混合像元被分解为一系列不同的纯物质光谱(称为端元)以及它们在像元对应观测区域内的地表覆盖比例(称为丰度)^[4].

为获取符合地物真实的端元及丰度, 以提供更

收稿日期: 2016-03-31, 修回日期: 2016-09-27

Received date: 2016-03-31, revised date: 2016-09-27

基金项目: 国家自然科学基金(61572133), 北京师范大学地表过程与资源生态国家重点实验室开放基金(2015-KF-01)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China (61572133), Research Fund for the State Key Laboratory of Earth Surface Processes and Resource Ecology (2015-KF-01)

作者简介 (Biography): 杨斌 (1989-), 男, 江西南昌人, 博士研究生, 主要从事高光谱图像解混研究. E-mail: 15110720039@fudan.edu.cn

* 通讯作者 (Corresponding author): E-mail: wangbin@fudan.edu.cn

有价值的定量研究信息,近十几年国内外学者在光谱解混领域做了大量研究并取得丰富的成果^[3,5].对于一定的观测瞬时视场角(Instantaneous Field of View, IFOV),地表的物类型、空间分布结构、光照条件以及应用需求等因素的差异都会造成混合方式及解混所要求的模型与方法不同.其中,线性混合模型(Linear Mixture Model, LMM)假设反射表面的地物呈棋盘式分布(如图1(a)所示),入射光每次只与一种物质发生作用后就直接被遥感仪器接收.由于LMM模型较为简单且具有一定的物理意义并能适用于许多场景,所以线性光谱解混算法一直是研究重点.主要包括纯像元指数(Pixel Purity Index, PPI)^[6],内部最大体积法 N-FINDR^[7],顶点成分分析(Vertex Component Analysis, VCA)^[8],正交基算法(Orthogonal Bases Algorithm, OBA)^[9]等端元提取算法,常用于丰度估计的全约束最小二乘算法(Fully Constrained Least Squares, FCLS)^[10-11],以及同时提取端元和估计丰度的独立成分分析(Independent Component Analysis, ICA)^[12]和非负矩阵分解(Nonnegative Matrix Factorization, NMF)^[13-19]等非监督光谱解混算法.

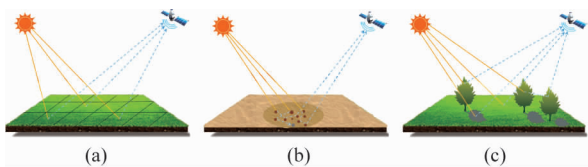


图1 光谱混合机制 (a) 线性混合, (b) 紧密混合, (c) 多层次混合

Fig. 1 Mechanism of spectral mixing (a) linear mixture, (b) intimate mixture, (c) multilayer mixture

一般来说, LMM只适用于本质上属于或者宏观尺度上可认为是线性混合的地物场景^[2],而对于较难准确描述的某些特殊地物分布情形,就需要根据实际情况考虑更复杂的非线性混合模型(Nonlinear Mixture Model, NMM).常见的非线性混合地物类型主要包括微观尺度上的紧密混合(图1(b))和具有较大三维几何结构的地物混合(图1(c)).其中紧密混合的代表地物主要有沙地、矿物混合区域以及浅水环境等,光线在不同粒子间进行多次交互传播产生复杂的非线性混合效应^[20-21].第二种典型的非线性混合现象发生在植被覆盖地区以及较复杂的城市建筑的多层次混合场景中,观测到的往往是光线在不同高度的地物间多次散射的结果.相对于线性解混来说,非线性解混在原理及实现上需要考虑更

多复杂的影响因素,因此虽然相关研究一直在进行中且仍处于探索阶段.随着线性解混算法的逐步成熟和为满足更高的应用要求,非线性解混问题逐步引起越来越多的关注并已成为高光谱遥感的研究热点^[21-22].目前的非线性光谱解混算法基本可分为两类:基于模型的方法和不基于模型的数据驱动的方法.

前者先根据辐射传输理论(Radiative Transfer Theory, RTT)建立描述光子与物体接触时能量传递的数学模型以表达复杂的非线性混合现象,再用相关方法求解模型参数.比较典型的模型有Hapke模型、Kubelk-Munk模型、SAIL模型和PROSPECT模型等^[2].Hapke模型^[20]是其中具有较大影响力的理论模型,但是因为存在模型先验参数难以获取、适用的局限性(适合紧密混合但难于植被覆盖的地表)、求解复杂等问题,严重阻碍了将其直接应用于解混.最近十年,许多研究在保持这些模型物理意义的基础上使其简化,给出了双线性混合模型(Bilinear Mixture Model, BMM)及较复杂的多线性混合模型.这类模型利用特征光谱的Hadamard积描述视场中光子间的散射效应,可用于描述植被覆盖区域的多层次混合.另外,目前大多基于模型的非线性解混方法都是有监督的,仅在用其它算法提取端元后对丰度进行估计.

数据驱动的方法避免了对复杂非线性混合模型的建立与求解,而采用如核函数、流形学习等机器学习理论方法将原始数据映射到高维或低维的线性特征空间中,然后在特征空间中利用相关的线性算法解混.例如采用核函数的神经网络经过训练后可实现非线性丰度估计,而NMF也可通过核函数映射到高维特征空间继而完成解混.此外,在解混前判断像元混合特性的非线性探测方法也有被考虑用于改进算法求解.本文将从基于模型和数据驱动两类方法出发,介绍非线性光谱解混算法的研究状况和进展.

1 非线性光谱混合模型及求解算法

1.1 线性与非线性混合

LMM中的像元是端元集的线性组合,丰度满足非负(Abundance Nonnegative Constraint, ANC)及“和为一”(Abundance Sum-to-one Constraint, ASC)^[4-5]两个约束条件.在不受噪声影响的条件下,所有像元点都位于端元集张成的单形体中.数学表达式如下:

$$x_j = \mathbf{A} \mathbf{s}_j + \varepsilon = \sum_{i=1}^r \mathbf{a}_i s_{ij} + \varepsilon, j = 1, 2, \dots, m$$

$$s. t. \quad s_{ij} \geq 0, \sum_{i=1}^r s_{ij} = 1, \quad (1)$$

其中, $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ 是观测像元向量, $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_r] \in \mathbb{R}^{n \times r}$ 是端元矩阵, s_{ij} 是第 j 个像元中端元 $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ 的丰度值, ε 是噪声或模型误差, n 是波段数目, m 是像元数目.

而对于非线性混合的场景, 像元与端元间呈非线性关系:

$$\mathbf{x}_j = g(\mathbf{A}, \mathbf{s}_j) + \varepsilon, j = 1, 2, \dots, m, \quad (2)$$

这里的 $g(\mathbf{A}, \mathbf{s}_j)$ 是与端元和丰度相关的未知非线性函数, 数据呈非线性流形的几何结构.

1.2 紧密混合

紧密混合一般发生于物体的空间尺度比光线通过的路径要小得多的微观尺度上(图 1(b)). 在矿物分布地区, 入射辐射光会在矿物粒子间发生复杂的交互作用形成混合光谱, 其光学特性建立在如物质成分的数量及比例, 颗粒的大小、形状、方向与分布, 吸收和散射特性等诸多参数的基础上, 而要对该过程进行准确建模是比较困难的^[22]. 本小节主要介绍常用于描述紧密混合地物的 Hapke 模型及相关改进模型方法.

1.2.1 Hapke 模型

假设粒子是各向同性散射的, Hapke 模型将观测双向反射率与质量分数, 粒子的密度和大小及单次散射反照率 (Single Scattering Albedo, SSA) 等参数相关联, 得到反射率关于 SSA 的(与波长相关)的双向反射率分布函数 (Bidirectional Reflectance Distribution Function, BRDF)^[23]:

$$x(\mu, \mu_0, g) = \frac{\omega \mu_0}{4\pi(\mu + \mu_0)} \left[(1 + B(g))p(g) + H(\omega, \mu_0)H(\omega, \mu) - 1 \right], \quad (3)$$

其中, ω 为介质散射系数与消光系数之比. μ_0 和 μ 分别是平行光入射角和出射角的余弦. g 是相位角, 散射平面内入射光与出射光间的夹角. $p(g)$ 是介质相位函数, $B(g) = B_0 / (1 + \tan(g/2)/h)$ 是后向散射函数, 对于低反照比的表面, $B_0 \approx 1$. $H(\omega, \mu) = (1 + 2\mu) / (1 + 2\mu \sqrt{1 - \omega})$ 是多向散射函数.

假设所有端元物质的粒子密度与大小相等, 得到像元与端元的 SSA 间呈线性混合的关系 $\tilde{\omega} = \sum_{i=1}^r \omega_i s_i$, 丰度满足 ANC 和 ASC 条件. 另外, 如果假设粒子为球形且各向同性散射, 同时相位角足够大, 有 $p(g) = 1$ 和 $B(g) = 0$, 便可将双向反射率 \mathbf{x}

近似简化为式(4)^[24]并对其定标与等价变换后得到式(5):

$$\mathbf{x}(\mu, \mu_0, \omega) = R(\omega) = \frac{\omega}{4(\mu + \mu_0)} H(\omega, \mu_0) H(\omega, \mu), \quad (4)$$

$$\omega = R^{-1}(x) = 1 - \left(\frac{\sqrt{(\mu_0 + \mu)^2 x^2 + (1 + 4\mu_0 \mu x)(1 - x)} - (\mu_0 + \mu)x}{1 + 4\mu_0 \mu x} \right)^2. \quad (5)$$

以上的简化假设减少了大量额外先验参数, 而只需获取入射角和出射角信息便可将非线性混合的像元反射率转换为对应呈线性混合的 SSA, 然后在此基础上将线性光谱解混算法用于非线性混合问题的求解.

1.2.2 其他改进模型及方法

目前很多用于紧密混合的解混方法都是基于 Hapke 模型的, Rahman 等^[25]用最大似然估计方法对 BRDF 中的参数进行估计以实现解混. 林红磊等^[26]先用式(5)将矿物地区图像的像元反射率转换为其 SSA, 构建单次散射反照率光谱库, 然后以半监督的方式实现非线性稀疏回归解混, 最后实验证明该方法能够有效地提高矿物的非线性丰度反演精度. Close 等人^[27-28]认为紧密混合场景中像元可由紧密混合物、宏观的线性混合物或是这两类混合物共同混合而成, 提出了多混合物像元模型 (Multi-mixture Pixel Model, MMP):

$$\mathbf{x}_j = \sum_{i=1}^r \mathbf{a}_i s_{ij} + R \left(\sum_{i=1}^r \omega_i f_{ij} \right) s_{r+1,j} + \varepsilon, \quad (6)$$

其中, f_{ij} 是微观紧密混合物的端元丰度比例, s_{ij} 是宏观线性混合物的端元丰度比例, $R \left(\sum_{i=1}^r \omega_i f_{ij} \right)$ 是紧密混合物的反射率向量, 可视作第 $r+1$ 个线性混合的端元. 利用式(5)反射率与 SSA 间的转换, 文中根据模型(6)交替地以二次规划法估计丰度和以牛顿法更新端元.

Heylen 等^[29]在 MMP 的基础上, 将 Hapke 模型与 LMM 结合得到紧密混合物的线性混合模型 (Linear Mixture of Intimate Mixtures Model, LIM). LIM 中像元内每个空间分块都可能是紧密混合物, 通过选取合适的模型参数可以转换为 LMM、Hapke 模型或者 MMP 模型. 文中用约束优化和逐步二次规划法实现对 LIM 的丰度估计:

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^r R \left(\sum_{k=1}^r \omega_k f_{ki} \right) s_i + \varepsilon, \quad s. t. \quad \sum_{i=1}^r s_i = 1, \forall i: \sum_{k=1}^r f_{ki} = 1. \quad (7)$$

模型需求取 r 个混合物丰度和各混合物内部各端元的丰度, 端元 \mathbf{a}_k 的总丰度为 $\tilde{s}_k = \sum_{i=1}^r s_i f_{ki}$.

1.3 多层次混合

植被覆盖地区和更为复杂的城市场景中常见多层非线性混合, 由于树木冠层具有复杂的三维几何结构, 入射光线很可能在不同高度上与周边地物发生多次散射, 如植被冠层与土壤, 植被冠层与植被冠层等 (图 1(c)), 因而观测光谱往往表现出多次散射的非线性效应. 多次散射强度会受到树木的类型、高度和间距, 树木冠层的覆盖度与叶片的透光性, 土壤的类型与理化特性, 太阳高度角等因素的显著影响. 另外, 光的散射作用是与波段相关的, 不同波段间非线性散射强度也存在一定差异, 例如植被近红外区域的非线性混合现象一般更为严重. 针对多层次非线性混合问题, Borel 和 Gerstl^[30] 根据辐射传输原理建立模型来描述植被冠层的层次结构和植被土壤混合物间的多次散射现象. Ray 和 Murray^[31] 分析了干旱区中植物冠层叶片不同分布和不同土壤背景对非线性混和的影响.

1.3.1 双线性光谱混合模型

为避免复杂的物理模型并减少对场景相关参数的依赖, 近几年一些学者在保证模型物理意义的基础上提出了不同形式的双线性混合模型 (Bilinear Mixture Model, BMM)^[32-41]. 这些模型的共同点在于都只考虑物体间的二次散射作用而忽略三次以上的高阶散射, 并以端元向量间的 Hadamard 积和非线性系数来表示非线性散射效应. 主要的 BMM 有: Nasimento 模型 (Nasimento Model, NM), Fan 模型 (Fan Model, FM), 广义双线性模型 (Generalized Bilinear Model, GBM), 多项式后验非线性模型 (Polynomial Post-Nonlinear Model, PPNM) 和线性二次混合模型 (Linear-quadratic Mixing Model, LQM) 等.

Nasimento 等人^[32] 2009 年提出了一种针对土壤与单层植被间二次散射效应的非线性混合模型 NM, 并以半监督的方法实现对模型的参数估计. NM 的数学表达式如下:

$$\mathbf{x}_j = \sum_{i=1}^r \mathbf{a}_i s_{i,j} + \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{k=i+1}^r (\mathbf{a}_i \odot \mathbf{a}_k) b_{i,k,j} + \boldsymbol{\varepsilon}_j,$$

$$\text{s. t. } s_{i,j} \geq 0, b_{i,k,j} \geq 0 (i \neq k), \sum_{i=1}^r s_{i,j} + \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{k=i+1}^r b_{i,k,j} = 1, \quad (8)$$

其中 $\mathbf{a}_i \odot \mathbf{a}_k = [a_{i,1} a_{k,1}, a_{i,2} a_{k,2}, \dots, a_{i,n} a_{k,n}]^T$ 表示非线性的端元 Hadamard 乘积项, 以参数 $b_{i,k,j}$ 权衡非线性影响程度. 当所有的非线性参数 $b_{i,k,j}$ 都等于 0 时,

NM 等价于 LMM.

Fan 等^[34] 比较了用于森林高光谱模拟数据的线性与非线性模型, 并通过实验得到模型 FM. FM 假设像元内两种物质间的非线性交互程度是与这两个端元各自丰度直接相关的, 当像元中不存在某端元时其丰度为 0, 此时也不存在与该端元相关的二次散射:

$$\mathbf{x}_j = \sum_{i=1}^r \mathbf{a}_i s_{i,j} + \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{k=i+1}^r (\mathbf{a}_i \odot \mathbf{a}_k) s_{i,j} s_{k,j} + \boldsymbol{\varepsilon}_j,$$

$$\text{s. t. } s_{i,j} \geq 0, \sum_{i=1}^r s_{i,j} = 1 \quad (9)$$

FM 相对 NM 来说需要求解的参数更少, 只需估计 r 个丰度参数. 但是 FM 模型是个相对较为严格的模型, 不能像 NM 一样转换为 LMM.

GBM 是由 Halimi 等^[35] 提出的一种 FM 改进模型, 额外加入了参数 $\gamma_{i,k,j}$. 因为光线经过两种物质反射后被接收所经过的路径要长于与单一物质接触后直接被接收的路径, 所以反射率应更小:

$$\mathbf{x}_j = \sum_{i=1}^r \mathbf{a}_i s_{i,j} + \sum_{i=1}^{r-1} \sum_{k=i+1}^r (\mathbf{a}_i \odot \mathbf{a}_k) \gamma_{i,k,j} s_{i,j} s_{k,j} + \boldsymbol{\varepsilon}_j,$$

$$\text{s. t. } 0 \leq \gamma_{i,k,j} \leq 1, s_{i,j} \geq 0, \sum_{i=1}^r s_{i,j} = 1 \quad (10)$$

参数 $\gamma_{i,k,j}$ 使得端元间交互的控制更灵活: 当 $\gamma_{i,k,j} = 0, \forall i = 1, \dots, r-1, k = i+1, \dots, r$ 时, GBM 成为 LMM; 若 $\gamma_{i,k,j} = 1, \forall i = 1, \dots, r-1, k = i+1, \dots, r$, GBM 就等价于 FM 模型.

Altmann 等^[37-38] 以二阶多项式展开形式描述非线性函数, 提出多项式后验非线性混合模型 PPNM:

$$\mathbf{x}_j = \sum_{i=1}^r \mathbf{a}_i s_{i,j} + b_j \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^r (\mathbf{a}_i \odot \mathbf{a}_k) s_{i,j} s_{k,j} + \boldsymbol{\varepsilon}_j,$$

$$\text{s. t. } s_{i,j} \geq 0, \sum_{i=1}^r s_{i,j} = 1 \quad (11)$$

参数 b_j 用于调控像元中的非线性影响, 一个像元对应一个参数 b_j , 当 $b_j = 0$ 时 PPNM 就转变为 LMM. 因为 b_j 与像元非线性程度密切相关, 所以可以用于检测像元的非线性混合程度. 与其它双线性模型不同, PPNM 考虑了对像元光谱具有重要贡献的端元自身二次散射.

其它双线性混合模型还有: 余先川等^[39] 给出的与 PPNM 相似的二次散射模型 $\mathbf{x}_j = c\mathbf{A}s_j + d\mathbf{A}s_j \odot \mathbf{A}s_j + \boldsymbol{\varepsilon}_j$, 参数 c 表示光线照射到地物上被直接反射的概率, 而参数 d 则为光线照射到地物上再散射到其他物体上的概率; Meganem^[41] 等提出的线性二次混合模型 LQM 等. 另外, Someers, Dobigeon 和 Tits 等人^[42-47] 通过构造果园与森林场景模拟数据以及利

用实地测量得到真实数据,对非线性效应以及 LMM, NM, FM, GBM 和 PPNM 模型进行定量和定性的分析和比较,证实了 BMM 用于植被场景非线性解混的合理性。

1.3.2 多线性光谱混合模型

对于多次散射占主要成分的复杂城市建筑等特殊场景,需要考虑 BMM 中端元间二次散射以外的高阶散射. Heylen 等^[48]在 PPNM 的基础上引入了一个描述光线在物质间发生高阶交互概率的参数 P , 从而将 PPNM 扩展为无穷阶线性混合模型 (Multi-linear Mixing Model, MLM):

$$x_j = (1 - P) \sum_{i=1}^r \omega_i s_{i,j} + (1 - P)P \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^r (\omega_i \odot \omega_k) s_{i,j} s_{k,j} + (1 - P)P^2 \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^r \sum_{l=1}^r (\omega_i \odot \omega_k \odot \omega_l) s_{i,j} s_{k,j} s_{l,j} + \dots \quad (12)$$

模型满足的物理条件为光线至少与一种物质相接触;每次与一种物质接触后,以概率 P 反射到其它物质上发生进一步的交互作用,同时以概率 $1 - P$ 脱离场景达到遥感仪器;与某物质接触的概率与其丰度成正比;光线被某物质散射后强度与其 SSA 相关. 文中对式(12)简化整理后,利用二次规划等方法求解模型参数,并将结果与 Hapke 及 BMM 对比证明了在某些场景上该方法的优越性. 而 Marinoni 等^[49-50]将 BMM 扩展为 p 阶 ($p \geq 2$) 多项式混合模型,简化形式为: $x_j = \sum_{i=1}^r a_i s_{i,j} + \sum_{k=2}^p \sum_{i=1}^r a_i^k \beta'_{i,k,j}$, 并采用多胞形分解 (Ploytope Decomposition, POD) 及与神经网络结合的改进方法实现解混,同样通过实验证明了该模型能够描述复杂城市环境下的高阶散射混合效应。

1.4 基于模型的解混方法

1.4.1 BMM 的常用求解方法

基于 BMM 的非线性解混方法通常是有监督的,即需借助其它算法提取端元后再估计丰度及非线性参数. 对于 FM 和 GBM 来说,因为纯像元依然是数据集的顶点,如 VCA 等线性端元提取算法仍可以有效地提取端元. BMM 的求解算法主要包括:让目标函数线性化后用 FCLS 算法求解丰度的一阶泰勒展开的 FCLS^[34], 梯度下降方法 GDA, 和需要选择模型参数先验分布并利用马尔科夫链蒙特卡罗 (Markov chain Monte Carlo, MCMC) 方法生成后验分布本来估计未知参数的 Bayesian 方法等. 文献^[35,37]分别将 Bayesian 方法用于 GBM 和 PPNM 的参数求解,但存在计算复杂度较大的问题。

为了改善 BMM 非线性解混算法的性能, Pu

等^[51]利用边界控制函数将 GBM 和 PPNM 两种模型的目标函数约束优化问题转换为无约束优化问题,并提出了基于交替迭代 AIM 和结构总体最小二乘 STLS 求解算法. Heylen 等^[52]从几何角度出发,认为基于测地线的解混方法不能准确地抓住流形的真实非线性结构,而将测地线距离与 GBM 相结合,计算 GBM 模型生成的非线性流形数据测地线距离,然后利用得到的结果对数据进行非线性降维作为解混的预处理. 另外,他们也提出了基于距离的端元提取算法^[53]并与基于距离的丰度估计方法结合,可有效地应用于 Hapke 和 PPNM 模型的解混以及测地线距离计算等,而且容易与核方法结合构建核距离为高光谱图像的解混与预处理提供了灵活的方式。

1.4.2 基于稀疏及空间信息的改进方法

虽然 BMM 忽略了物质端元间三次以上的高阶散射,但是当端元数目较多时解混同样需要考虑大量的非线性混合项和参数,而且端元与虚拟端元间的共线性效应也更加明显^[54],在增加丰度估计误差的同时也会降低算法的效率. 值得注意的是,高光谱图像数据本身具有较强的光谱及空间相关性和稀疏性的特点,充分利用这些特性可以减少端元数目的影响,而且许多研究显示非线性效应只发生在一定距离范围内的物质间,当两种物质相距过远时它们之间的多次散射可以忽略. 因此,结合图像稀疏与空间信息的非线性解混算法^[55-60]也开始得到较多关注. Raksuntorn 等^[55]利用端元变异线性混合模型 EVLMM 确定每个像元中的真实端元个数和类型后再进行解混,并且选择空间近邻端元以降低计算复杂度. 后来他们在 EVLMM 算法的基础上用 OMP (Orthogonal Matching Pursuit) 加上稀疏约束进一步提高了解混效果^[56]. Cui 等^[57]也考虑了利用空间信息的非线性解混方法,他们在对 NM 模型改进后用最小二乘法初步估计端元丰度,并以此确定与每个像元相关的主要成分端元类别来减少需考虑的端元数目,最后用二次规划方法解混. Chen 等^[58-59]在其所提出的基于核方法的非线性混合模型中加入空间正则化约束项以提升邻近像元丰度的相似性来改善解混性能. Qu 等^[60]则利用高光谱图像的联合稀疏特性和与空间相关的低秩表示提高双线性混合模型的丰度估计精度。

1.4.3 BMM 非监督解混算法

基于 BMM 的非监督解混方法也受到了较多关注, Altmann 等^[61-62]利用高斯过程潜在变量模型 GPLVM 对非线性混合建模,然后利用 Bayesian 和高

斯过程模型估计丰度并确定端元. 此外, Altmann 等^[63-64]也结合 Byasion 和 MCMC 方法将 PPNM 模型中的端元、丰度及非线性参数同时作为未知待估参数进行求解, 但存在计算量大的问题. NMF 作为一种盲源分离方法也可用于非监督的非线性解混, 如 Echtes 等^[65]将 FM 模型表达为矩阵形式 $X = AS + A_b S_b + E$, s. t. $1^T A = 1^T, A \geq 0$, 并令 $A^* = [A^T, A_b^T]^T$ 及 $S^* = [S^T, S_b^T]$ 得到目标函数 $f(A, S) = \|X - A^* S^*\|_F^2 + \delta(1^T A - 1^T)(1^T A - 1^T)$ 从而转化为 NMF 的求解问题. Yokoya 等^[66]提出了 GBM 模型的非负矩阵分解 Semi-NMF 优化求解算法, 将 GBM 中的线性混合与非线性扰动项裂变为两个交替迭代求解的最优化问题实现求解.

2 数据驱动的非线性光谱解混算法

与基于模型的非线性解混方法不同, 数据驱动的方法在非线性混合具体形式未知情况下只需利用数据就可实现端元提取与丰度反演, 而流形学习和核方法是其中最常用的方法. 流形学习算法以保持数据局部或全局结构的方式将高维观测数据投影到低维的线性空间实现解混. 核方法则是将原始非线性数据向更高的维度投影, 然后在高维空间中采用线性解混算法进行求解.

2.1 基于核方法的解混算法

目前基于核函数的非线性光谱解混算法主要包括: 核化的 FCLS 算法^[74-82], 支持向量机^[83-86], 基于核函数的正交子空间投影方法^[87-91], 基于核函数的非线性模型方法^[92-93], 多核改进方法^[94-97], 基于核方法的 NMF 解混算法^[98, 109]等. 此外, 由于神经网络方法也多以核函数作为神经元的激活函数这里将其归为核方法一类.

2.1.1 核函数方法原理

为使原始空间中线性不可分的数据变成线性可分, 根据模式识别理论可将该数据向其高维特征空间中进行映射, 然后在此新特征空间使用线性算法求解原非线性问题^[67]. 但是未知的非线性映射函数形式和参数以及较高的特征空间维数通常会给求解造成困难. 然而采用核方法后便可将高维空间中的内积运算转化为原始低维空间中核函数的计算, 继而隐式地实现非线性映射并避免维度灾难.

核函数是这样的一个函数 κ , 对于原始数据空间 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 中所有的 $x, z \in S$, 存在一个从 S 到特征空间 $F \subseteq \mathbb{R}^m$, ($m > n$) 的非线性映射 $\phi: x \rightarrow \phi(x)$, 满足 $\kappa(x, z) = \langle \phi(x), \phi(z) \rangle = \phi(x)^T \phi(z)$ ^[67], 而根

据 Hilbert-Schmidt 定理只要映射满足 Mercer 条件就可构建核函数. 向量集合 $S = \{x_1, \dots, x_N\}$ 的核矩阵 G 为元素 $G_{ij} = \langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle = \kappa(x_i, x_j)$ 的 $N \times N$ 半正定方阵. 常用的核函数包括线性核函数 $\kappa(x, z) = x^T z$, 多项式核函数 $\kappa(x, z) = (\langle x, z \rangle + c)^p$ 和高斯(径向基)核函数 $\kappa(x, z) = \exp(-\|x - z\|^2 / 2\sigma^2)$ 等. 核方法一般流程为先处理数据并利用核函数构造核矩阵, 再用相关算法处理核矩阵得到模式函数后用于求解相关问题^[67].

2.1.2 神经网络方法

神经网络经过样本训练后能够学习数据集的复杂非线性关系, 在选取合适的样本并构建有效的网络后可很好地解决高光谱图像的非线性混合问题. 文献^[68, 71]将径向基神经网络 RBFNN 用于非线性光谱解混, 分别使用 LMM 和 Hapke 方程得到的数据集进行训练, 然后将网络用于估计像元测试集的丰度. 结果显示对于非线性混合的数据, 该方法能比基于 LMM 的方法得到更准确的丰度和更小的重构误差. Plaza 等^[69-70]也将多层感知器 MLP 和 Hopfield 网络用于解混, 先采用端元提取算法获得端元再用于网络训练, 最后用得到的网络实现图像像元丰度估计. Ayerdi 等^[72-73]将极端学习机器 (Extreme Learning Machines, ELM) 回归方法用于非线性光谱解混, ELM 作为单层前馈神经网络的一种快速训练算法, 利用图像中部分样本像元进行训练能有效地反演得到整个图像的丰度分布.

2.1.3 核函数的一般解混应用

主成分分析 (Principle Component Analysis, PCA) 算法常用于高光谱遥感图像特征提取, 但不足以描述数据高阶复杂度与非线性分布. 文献^[74]将经典 PCA 的改进算法 CCIPCA (Candid Covariance-Free Incremental Principle Component Analysis) 与核函数结合, 提出了更有效的核化 PCA 算法.

由于线性光谱解混算法 FCLS 对于非线性混合数据的丰度估计精度不高, Broadwater 等^[76]提出一种核化的 FCLS 算法 KFCLS, 通过用径向基核函数替换目标函数中的内积, 构建了到高维特征空间的隐式非线性映射并在该空间中实现丰度估计, 其精度要好于 FCLS 算法. 针对与解混相关的核函数选择问题, Broadwater 等^[77]比较了 3 种常用核函数以及根据 BRDF 所得到的物理核函数对 KFCLS 算法性能的影响差异, 然后提出一种适用于线性和紧密混合的广义核函数 $\kappa_\gamma(x, z) = (1 - e^{-\gamma x})^T (1 - e^{-\gamma z})$ ^[78-79], 若 γ 很小则接近于线性核, 而当 γ 较大

时近似于物理核. Rand 等^[80-82] 则通过实地测量及高光谱图像实验分析比较了基于物理核与广义核的 FCLS 算法解混性能,并证实后者对于线性与非线性混合场景的适用性.

此外,也有学者将核函数的典型方法支持向量机(Support Vector Machine, SVM)用于非线性光谱解混. 吴波等^[84] 提出了基于 SVM 的高光谱混合像元分解方法,先以 Hapke 近似模型生成非线性混合的训练与测试数据,再对 SVM 进行训练后用于丰度估计. Plaza 等^[83] 以端元作为支持向量,对植被覆盖地区的数据用 SVM 实现丰度估计. 李慧等^[85] 通过构建多个支持向量机提出了端元可变的非线性混合像元分解模型.

与前面的方法类似,将目标函数中的内积用核函数替换,核化的正交子空间投影算法 OSP 便可用于非线性端元提取. Wu 等^[87] 应用正交子空间投影在高维核特征空间中找到所有端元,再用传统的最小二乘回归方法求解丰度. Zhao 等^[88] 提出了一种核函数改进的单形体体积增长算法以寻找构成最大体积的像元作为端元. 文献[89-90] 同样也把基于核方法的 OSP 算法 KOSP 用于端元提取和丰度反演.

2.1.4 基于核函数的混合模型与多核方法

KFCLS 等算法主要用核函数替换目标函数中的端元内积实现,这种做法可以看作是对端元施加非线性扰动,而与不同端元间的相互作用无关. 因为非线性混合会受到光谱扰动和物质间非线性交互作用的影响,所以 Chen 等^[93] 认为此类方法虽然对探测与分类问题有效,但是对解混问题来说却缺乏物理意义. 因此提出了一种核非线性光谱解混模型^[92-93], 并采用多核方法^[94] 权衡核函数 $\kappa_{lin}(A(i,:), A(j,:)) = A(i,:)^\top A(j,:)$ 和 $\kappa_{nlin}(A(i,:), A(j,:)) = (1 + A(i,:)^\top A(j,:))^q$ 得到最优化问题:

$$\phi^*, u^* = \arg \min_{\phi, u} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{u} \|\phi_{lin}\|_{H_{lin}}^2 + \frac{1}{1-u} \|\phi_{nlin}\|_{H_{nlin}}^2 \right) + \frac{1}{2u} \sum_{i=1}^m (x(i,:) - \phi(A(i,:)))^2 \quad \text{s. i. } 0 \leq u \leq 1, \quad (13)$$

其中 $\phi = \phi_{lin} + \phi_{nlin}$, 二次规划和梯度投影迭代的 SK-Hype 算法被用于求解该问题实现解混.

传统的核方法都基于单个核特征空间,不同的核函数或者参数不同的相同核函数的性能差异较大,而且多数单核方法还需面对根据经验和反复验证的方式来选择核函数与参数的问题^[95]. 多核学习

MKL 的方法则是构建一组基核函数的凸组合,并能从数据中得到基核函数的权重系数从而解决核函数选择的问题. 由于特征空间由一组基核而不是单一核构成,因此可适应于更复杂的情况. Liu 等^[95] 通过 MKL 的方法将线性光谱分析用于高光谱图像分类,并采用交替优化的方式同时提取丰度与各基核函数的权重系数. Gu 等^[96] 以及谭熊等^[97] 将多核学习 MKL 与 SVM 相结合,求解各基核的权重系数实现非线性光谱解混,而 MKL 的方法与传统的单核方法相比解混精度更高.

2.1.5 基于核方法的 NMF 解混算法

NMF 本身属于线性解混方法,但与核函数结合^[98-101] 后可为实现非监督的非线性光谱解混提供途径. 目前 KNMF 非线性光谱解混算法的思路主要是构建非线性映射将数据映射到高维特征空间中,再在特征空间中实现 NMF 的解混. 但局部极小值是 NMF 不可避免的问题,与线性的 NMF 算法一样需要解决. 因此, Wu 等^[102] 在目标函数中加入了空间相关性约束, Fang 等^[103] 提出了核稀疏的 NMF 光谱解混算法, Li 等^[104-105] 同时考虑了丰度的稀疏性与单形体体积约束并与 KNMF 相结合,以缓解局部极小问题. 崔建涛等^[106] 使用 KNMF 求解双线性混合模型,并在考虑端元距离与丰度稀疏约束^[109] 的同时,利用多核学习 MKL 解决核函数的选择问题以提高算法性能.

2.2 基于流形学习的解混算法

流形学习(Manifold Learning)自 2000 年在 Science 上被提出以来现已成为信息科学领域的研究热点. 流形学习以保持数据局部结构的方式将高维数据向低维空间投影,从而获取数据内在的几何结构与规律. 其中, ISOMAP(Isometric Mapping)^[110] 算法采用微分几何中的测地线距离而不是用传统的欧式距离计算高维流形上数据点间距离,局部线性嵌入 LLE(Locally linear embedding)算法^[111] 先寻找每个样本点的 k 个近邻点再计算它们的局部重构权值矩阵,最后得到保持流形上最近邻点间局部线性关系的结果. 对于高光谱数据非线性解混来说,可以先通过流形学习得到降维后线性空间中的数据,然后在此基础上用传统的线性方法解混. 但是这些非线性降维的方法存在计算复杂度太高,难以应用于实际较大高光谱遥感图像的问题.

Heylen 等^[112] 先以 Cayley-Menger 行列式距离几何的方式实现 N-FINDR 算法中的体积计算,然后构建连接的 K 近邻图并用 Dijkstra 算法计算测地线距

离,从而在解混时考虑数据的流形结构. Heylen 等^[113,114]对该算法继续改进,采用同样的距离方法使几何丰度估计方法 SPU (simplex-projection unmixing) 同时也能用于非线性混合数据的丰度反演. Chi 等^[115-116]针对非线性流形降维方法 ISOMAP 计算量大的问题,结合模糊 K -均值聚类方法选取图像子集界标点 (Landmark Points) 以降低计算负荷. 文献^[116]则以传统界标点选择的结果初始化再用积极采样方法进行界标点选择,避免丢失独立的小区域中有价值的点,从而构建一个更好的流形. 唐晓燕等^[117]对 Heylen 方法^[112]进行改进并在算法中考虑了空间信息的影响,增大空间相似的像元权重而减小光谱差异性大的像元权重. Lu 等^[118]认为多数稀疏 NMF 光谱解混算法只考虑了欧式空间中的数据结构而忽略了其内在流形特征,因此他们构建最近邻图并提出流形正则化的稀疏 NMF 解混算法,实验结果证明该方法要好于许多常用的解混算法.

2.3 非线性探测方法

BMM 的非线性解混方法存在高计算复杂度和共线性等问题,如果能在解混前对高光谱图像所有像元的非线性混合程度进行分析,然后用线性算法求解线性混合的像元,而非线性方法处理非线性混合程度较高的像元,便可以提高解混的效率和精度. 目前已有学者关注和研究了非线性检测问题并与解混算法结合取得了一定成果. Altmann 等^[119-120]提出了基于 PPNM 模型的像元非线性检测方法,其中待估参数包括丰度 s_j , 非线性参数 b_j 以及噪声方差 σ^2 . 因为 b_j 反映了像元 j 的非线性混合程度,所以可以通过对其值进行估计并设定一个阈值来实现非线性检测. 文中为选择恰当的阈值保证虚警率,在广义最大似然估计检验的基础上使其近似于高斯分布 $\hat{b}_j \sim N(b_j, s^2(s_j, b_j, \sigma^2))$, 将非线性检测问题转换为一个二值假设检验问题:

$$\begin{cases} H_0: \hat{b}_j \sim N(0, s_0^2) & \mathbf{x}_j \text{ 服从 LMM} \\ H_1: \hat{b}_j \sim N(b_j, s_1^2) & \mathbf{x}_j \text{ 服从 PPNM} \end{cases}, \quad (14)$$

其中 $s^2(s_j, b_j, \sigma^2)$ 是 \hat{b}_j 的方差, $s_0^2 = s^2(s_j, 0, \sigma^2)$, $s_1^2 = s^2(s_j, b_j, \sigma^2)$. Altmann 等^[121]认为基于 PPNM 非线性检测中备择假设的非线性模型过于严格,当真实混合情况不符合该模型时会带来不正确的检测结果. 因此,他们根据像元来确定零假设和备择假设的超平面的距离设计统计检验,得到一般化的非线性检测假设检验:

$$\begin{cases} H_0: E(\mathbf{x}_j | H_0) = \mathbf{A} \mathbf{s}_j \in H, & \mathbf{x}_j \text{ 服从 LMM} \\ H_1: E(\mathbf{x}_j | H_1) = \mathbf{A} \mathbf{s}_j + \boldsymbol{\mu}_j \notin H, & \mathbf{x}_j \text{ 服从 NMM} \end{cases}. \quad (15)$$

此外,他们^[122]还使用残余成分分析 (Residual Component Analysis, RCA) 将非线性解混和非线性检测相结合取得了很好的解混效果.

3 问题及展望

3.1 问题

虽然,非线性混合模型和算法的提出使高光谱遥感图像的非线性光谱解混问题在一定程度上得到解决,但是目前仍存在许多问题有待深入研究和改进.

从基于模型的非线性解混算法来看,其中 Hapke 模型因为是针对星球表面提出的,而难以适用于有植被覆盖的地表,且需要获取如粒子粒径大小、光线传输过程中的折射与散射系数、相位函数等参数. 这样就使得要利用 Hapke 模型实现解混就必须提前对大量矿物进行详尽的分析^[2]. 虽然经过一定假设,令如所有粒子密度与大小都相等、各向同性散射等降低了模型对先验参数的依赖,但是解混算法的精度和效率依然不够理想. 而 BMM 模型虽然相对简单而且具有一定的物理意义,但也存在如下问题^[21-22]: 1) 忽略了三次以上的散射,仅考虑了两两物质间的二次散射作用,难适用于更复杂的情形; 2) 多数 BMM 如 NM、FM 和 GBM 忽视了非线性效应中重要的端元物质与自身的二次散射; 3) 只考虑了给定像元内的多次散射,而没有考虑与其空间邻近的像元非线性贡献; 4) 随着端元数目的增加,模型待求解的参数也随之增多,同时端元与二次散射的虚拟端元间的共线性效应显著,导致结果过拟合并对噪声更为敏感; 5) 目前 BMM 解混算法基本上都是监督的,端元的正确性会较大影响非线性解混的结果; 6) 物质的真实面积比例丰度与 BMM 中线性与非线性丰度间的关系; 7) 假设所有波段上具有一致的非线性混合效应而带来的模型误差; 8) BMM 解混算法性能存在的不足.

而就数据驱动的非线性解混算法而言,流形学习方法通常需要计算复杂度很高的最近邻图,难以应用于实际中较大的高光谱图像. 虽然该方法对于非线性光谱解混来说具有非常大的潜力,但当前的相关算法都较少而且尚处于初步研究阶段. 另外,目前许多流形学习方法只适用于学习内部平坦的低

维流形而难用于有较大内在曲率的流形,对深入应用造成难题.神经网络方法的明显缺陷在于需要使用已知丰度的像元或者模型训练网络,训练数据的质量将会对最后的解混性能造成影响,而且算法收敛较慢易陷入局部最优.此外,由于各个图像数据存在不同程度的差异,用一种数据训练好的网络通常难以适用于其它数据,需要在解混前对网络再次进行训练而导致解混效率的降低.核函数方法的局限在于与特征空间性质直接相关的核函数及其参数的选择.目前一般是利用经验或者交叉验证法来选择核函数,虽然多核方法在一定程度上可以缓解核函数的选择难题,但依然会受到基核函数选择的影响.基于核函数的解混方法也并未考虑非线性混合效应在不同波段上的差异,而将整体数据向同一高维特征空间中映射可能会造成误差.

3.2 展望

非线性光谱解混方法的研究虽然还处于探索阶段,但随着线性解混方法的逐步成熟将会成为未来的研究重点.从目前存在的问题来看,需要考虑的挑战和研究方向主要有如下:1)构建适用性更好和更准确的模型来改善目前非线性混合模型的局限性,如考虑异质区域中线性混合与多种非线性混合共存的模型,以及不但能像 Hapke 模型用于紧密混合地物,而且如 BMM 也可较好地用于多层次混合的一般性模型;2)考虑空间信息、近邻区域非线性贡献及共线性效应的 BMM 解混算法,把图像的空间邻近信息加入目标函数求解中,或采用统计方法降低端元与虚拟端元间的共线性效应以提高求解精度;3)开发基于不同波段非线性混合差异性的非线性解混算法,各波段上的解混将根据具体混合情况,采用线性或非线性方法分别进行;4)开发非线性混合数据的低维特征提取和端元数目准确估计算法,如可用流形学习及其改进等方法获取图像的低维本质线性特征;5)对非线性端元提取算法及非监督非线性解混算法进行深入研究,如基于数据流形几何特性的端元提取和考虑不同合理约束的 NMF 非监督非线性解混;6)构建与具体非线性混合问题相关核函数的核解混方法,如推导与 Hapke 或 BMM 相关的核函数用于改进传统线性解混算法;7)算法复杂度过高是非线性解混算法的重要问题,结合并行计算等高性能计算方法可显著提升运算速度;8)开发非线性检测算法及基于非线性检测的解混算法,在区分线性与非线性混合像元后,用适合的算法进行解混;9)在有充足的训练样本情况下,深度学习可

准确地学习数据内在复杂的非线性结构,在非线性和解混上具有很大应用潜力.此外还有许多值得探索的地方未在这提及,这些方向对未来非线性光谱解混算法的深入研究具有重要的意义.

4 结论

非线性光谱解混算法的研究具有非常高的理论价值和实际应用意义.针对近些年国内外非线性光谱解混算法的发展状况,首先介绍了 Hapke 模型和双线性混合模型等非线性模型与求解方法以及利用高光谱图像特点的改进算法等基于模型的非线性解混算法.然后对主要由核方法与流形学习方法等构成的数据驱动非线性解混算法进行总结.最后分析了这些算法存在的问题与发展方向.非线性光谱解混算法在解决高光谱遥感图像中复杂的非线性混合问题上表现出了比传统的线性算法更好的性能,其理论和技术的研究将是今后高光谱遥感图像处理的重要趋势,也将为更有效的地物目标检测与识别奠定基础.

References

- [1] Goetz A F H, Vane G, Solomon J E, et al. Imaging spectrometry for earth remote-sensing [J]. *Science*, 1985, **228** (4704): 1147 - 1153.
- [2] TONG Qin-Xi, ZHANG Bin, ZHENG Lan-Fen. *Hyperspectral remote sensing—principles, techniques and applications* [M]. Beijing: Higher Education Press (童庆禧, 张兵, 郑兰芬. 高光谱遥感—原理、技术与应用. 北京: 高等教育出版社), 2006.
- [3] Tong Q, Xue Y, Zhang L. Progress in hyperspectral remote sensing science and technology in china over the past three decades [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2014, **7**(1): 70 - 91.
- [4] Keshava N, Mustard J F. Spectral unmixing [J]. *IEEE Signal Process. Mag.*, 2002, **19**(1): 44 - 57.
- [5] Bioucas-Dias J M, Plaza A, Dobigeon N, et al. Hyperspectral unmixing overview: Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2012, **5**(2): 354 - 379.
- [6] Boardman J W, Kruse F A, Green R O. Mapping target signatures via partial unmixing of AVIRIS data [J]. in *Proc. Summ. 5th Annu. JPL Airborne Geosci. Workshop*, R. O. Green, Ed, 1995, **1**: 23 - 26.
- [7] Winter M E. N-FINDR: An algorithm for fast autonomous spectral endmember determination in hyperspectral data [J]. in *Proc. SPIE Conf. Imaging Spectrometry V*, 1999, **3753**: 266 - 275.
- [8] Nascimento J M P, Dias J M B. Vertex component analysis: A fast algorithm to unmix hyperspectral data [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2005, **43**(4): 898 - 910.
- [9] Tao X, Wang B, Zhang L. Orthogonal bases approach for the decomposition of mixed pixels in hyperspectral imagery [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2009, **6**(2): 219

- 223.
- [10] 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.
- [11] Pu H, Xia W, Wang B, et al. A fully constrained linear spectral unmixing algorithm based on distance geometry [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2014, **52**(2):1157-1176.
- [12] Xia W, Liu X, Wang B, et al. Independent component analysis for blind unmixing of hyperspectral imagery with additional constraints [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2011, **49**(6):2165-2171.
- [13] Lee D D, Seung H S. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization [J]. *Nature*, 1999, **401**(6755):788-791.
- [14] 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.
- [15] Yu Y, Guo S, Sun W. Minimum distance constrained non-negative matrix factorization for the endmember extraction of hyperspectral images [J]. in *Proc. SPIE MIPPR 2007: Remote Sensing and GIS Data Processing and Applications, and Innovative Multispectral Technology and Applications*, 2007, **6790**:151-159.
- [16] Wang N, Du B, Zhang L. An endmember dissimilarity constrained non-negative matrix factorization method for hyperspectral unmixing [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2013, **6**(2):554-569.
- [17] Schachtner R, Poppel G, Tomé A M, et al. Minimum determinant constraint for non-negative matrix factorization [J]. *Lecture Notes in Computer Science*, 2009, **5441**:106-133.
- [18] Jia S, Qian Y. Constrained nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2009, **47**(1):161-173.
- [19] Liu X, Xia W, Wang B, et al. An approach based on constrained nonnegative matrix factorization to unmix hyperspectral data [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2011, **42**(9):757-772.
- [20] Hapke B W. Bidirectional reflectance spectroscopy. I. Theory [J]. *J. Geophys. Res.*, 1981, **86**:3039-3054.
- [21] Dobigeon N, Tournet J, Richard C, et al. Nonlinear unmixing of hyperspectral images; models and algorithms [J]. *IEEE Signal Process. Mag.*, 2014, **31**(1):82-94.
- [22] Heylen R, Parente M, Gader P. A review of nonlinear hyperspectral unmixing methods [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2014, **7**(6):1844-1868.
- [23] Close R, Gader P, Wilson J, et al. Using physics-based macroscopic and microscopic mixture models for hyperspectral pixel unmixing [J]. in *Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. (SPIE), Algorithms Technol. Multispectral Hyperspectral Ultraspectral Imagery XVIII*, 2012, **8390**:1-13.
- [24] Mustard J F, Pieters C M. Quantitative abundance estimates from bidirectional reflectance measurements [J]. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 1987, **92**:617-626.
- [25] Rahman M T, Alam M S. Nonlinear unmixing of hyperspectral data using BDRF and maximum likelihood algorithm [J]. in *Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. (SPIE), Automatic Target Recognition. XVII*, 2007, **6566**:1-10.
- [26] LIN Hong-Lei, ZHANG Xia, SUN Yan-Li. Hyperspectral sparse unmixing of minerals with single scattering albedo [J]. *Journal of Remote Sensing* (林红磊, 张霞, 孙艳丽. 基于单次散射反照率的矿物高光谱稀疏解混. *遥感学报*), 2016, **20**(1):53-61.
- [27] Close R, Gader P, Zare A, et al. Endmember extraction using the physics-based multi-mixture pixel model [J]. in *Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. (SPIE), Imag. Spectrom. XVII*, 2012, **8515**:1-14.
- [28] Close R, Gader P, Wilson J. Hyperspectral unmixing using macroscopic and microscopic mixture models [J]. *J. Appl. Remote Sens.*, 2014, **8**(1):1-16.
- [29] Heylen R, Gader P. Nonlinear spectral unmixing with a linear mixture of intimate mixtures model [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2014, **11**(7):1195-1199.
- [30] Borel C C, Gerstl S A. Nonlinear spectral unmixing models for vegetative and soil surfaces [J]. *Remote Sens. Environ.*, 1994, **47**:403-416.
- [31] Ray T W, Murray B C. Nonlinear spectral mixing in desert vegetation [J]. *Remote Sens. Environ.*, 1996, **55**(1):59-64.
- [32] Nascimento J M P, Bioucas-Dias J M. Nonlinear mixture model for hyperspectral unmixing [J]. in *Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. (SPIE), Image Signal Process. Remote Sens. XV*, 2009, **7477**:1-8.
- [33] Altmann Y, Dobigeon N, Tournet J. Bilinear models for nonlinear unmixing of hyperspectral images [C]. Lisbon: 2011.
- [34] Fan W, Hu B, Miller J, et al. Comparative study between a new nonlinear model and common linear model for analyzing laboratory simulated forest hyperspectral data [J]. *Int. J. Remote Sens.*, 2009, **30**(11):2951-2962.
- [35] Halimi A, Altmann Y, Dobigeon N, et al. Nonlinear unmixing of hyperspectral images using a generalized bilinear model [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2011, **49**(11):4153-4162.
- [36] Halimi A, Altmann Y, Dobigeon N, et al. Unmixing hyperspectral images using the generalized bilinear model [C]. Vancouver: 2011.
- [37] Altmann Y, Halimi A, Dobigeon N, et al. A post nonlinear mixing model for hyperspectral images unmixing [C]. Vancouver: 2011.
- [38] Altmann Y, Halimi A, Dobigeon N, et al. Supervised nonlinear spectral unmixing using a post-nonlinear mixing model for hyperspectral imagery [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2012, **21**(6):3017-3025.
- [39] YU Xian-Chuan, LI Jian-Guang, XU Jin-Dong, et al. A nonlinear spectral mixture model for hyperspectral imagery based on secondary scattering [J]. *Remote Sensing for Land and Resource* (余先川, 李建广, 徐金东, 等. 基于二次散射的高光谱遥感图像光谱非线性混合模型. *国土资源遥感*), 2013, **25**(1):18-25.
- [40] TANG Xiao-Yan, GAO Kun, NI Guo-Qiang. Advances in nonlinear spectral unmixing of hyperspectral images [J]. *Remote Sensing Technology and Applications* (唐晓燕, 高昆, 倪国强. 高光谱图像非线性解混方法的研究进展. *遥感技术与应用*), 2013, **28**(4):731-738.
- [41] Meganem I, Déliot P, Briottet X, et al. Linear quadratic

- mixing model for reflectances in urban environments [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2014, **52**(1):544–558.
- [42] Somers B, Cools K, Delalieux S, *et al.* Nonlinear hyperspectral image analysis for tree cover estimates in orchards [J]. *Remote Sens. Environ.*, 2009, **113**:1183–1193.
- [43] Tits L, Delabastita W, Somers B, *et al.* First results of quantifying nonlinear mixing effects in heterogeneous forests: A modeling approach [C]. Munich: 2012.
- [44] Somers B, Tits L, Coppin P. Quantifying nonlinear spectral mixing in vegetated areas; Computer simulation model validation and first results [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2014, **7**(6):1956–1965.
- [45] Dobigeon N, Tits L, Somers B, *et al.* A comparison of nonlinear mixing models for vegetated areas using simulated and real hyperspectral data [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2014, **7**(6):1869–1878.
- [46] Dobigeon N, Tits L, Somers B, *et al.* Nonlinear unmixing of vegetated areas; a model comparison based on simulated and real hyperspectral data [C]. in *Proc. IEEE Int. Workshop Hyperspectral Image Signal Process.*, 2014:1–4.
- [47] Tits L, Delabastita W, Somers B, *et al.* Validating nonlinear mixing models: benchmark datasets from vegetated areas [C]. in *Proc. IEEE Workshop Hyperspectral Image Signal Process. Evol. Remote Sens. (WHISPERS)*, 2014:1–6.
- [48] Heylen R, Scheunders P. A multilinear mixing model for nonlinear spectral unmixing [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2015, **54**(1):240–251.
- [49] Marinoni A, Gamba P. A novel approach for efficient p-linear hyperspectral unmixing [J]. *IEEE J. Sel. Signal Process.*, 2015, **9**(6):1156–1168.
- [50] Marinoni A, Plaza J, Plaza A, *et al.* Nonlinear hyperspectral unmixing using nonlinearity order estimation and polytope decomposition [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2015, **8**(6):2644–2654.
- [51] Pu H, Chen Z, Wang B, *et al.* Constrained least squares algorithms for nonlinear unmixing of hyperspectral imagery [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2015, **53**(3):1287–1303.
- [52] Heylen R, Scheunders P, Rangarajan A, *et al.* Nonlinear unmixing by using different metrics in a linear unmixing chain [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, 2014, **8**(6):2655–2664.
- [53] Heylen R, Scheunders P. Calculation of geodesic distances in non-linear mixing models; Application to the generalized bilinear model [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2012, **9**(4):644–648.
- [54] Chen X, Chen J, Jia X, *et al.* A quantitative analysis of virtual endmembers' increased impact on the collinearity effect in spectral unmixing [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2011, **49**(8):2945–2956.
- [55] Raksuntorn N, Du Q. Nonlinear spectral mixture analysis for hyperspectral imagery in an unknown environment [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2010, **7**(4):836–840.
- [56] Raksuntorn N, Du Q, Younan N, *et al.* Orthogonal matching pursuit for nonlinear unmixing of hyperspectral imagery [C]. Xi'an: 2014.
- [57] Cui J, Li X, Zhao L. Nonlinear spectral mixture analysis by determining per-pixel endmember sets [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2014, **11**(8):1404–1408.
- [58] Chen J, Richard C, Honeine P. Nonlinear estimation of material abundances in hyperspectral images with l_1 -norm spatial regularization [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2013, **52**(5):2654–2665.
- [59] Chen J, Richard C, Hero A O. Nonlinear unmixing of hyperspectral images using a semiparametric model and spatial regularization [C]. Florence: 2014.
- [60] Qu Q, Nasrabadi N M, Tran T D. Abundance estimation for bilinear mixture models via joint sparse and low-rank representation [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2014, **52**(7):4404–4423.
- [61] Altmann Y, Dobigeon N, McLaughlin S, *et al.* Unsupervised nonlinear unmixing of hyperspectral images using Gaussian processes [C]. Kyoto: 2012.
- [62] Altmann Y, Dobigeon N, McLaughlin S, *et al.* Nonlinear spectral unmixing of hyperspectral images using gaussian processes [J]. *IEEE Trans. Signal Process.*, 2013, **61**(10):2442–2453.
- [63] Altmann Y, Dobigeon N, Tourneret J. Bayesian unsupervised unmixing of hyperspectral images using a post-nonlinear model [C]. Marrakech: 2013.
- [64] Altmann Y, Dobigeon N, Tourneret J. Unsupervised post-nonlinear unmixing of hyperspectral images using a hamiltonian monte carlo algorithm [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2014, **23**(6):2663–2675.
- [65] Eches O, Guillaume M. A bilinear-bilinear nonnegative matrix factorization method for hyperspectral unmixing [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2014, **11**(4):778–782.
- [66] Yokoya N, Chanussot J, Iwasaki A. Nonlinear unmixing of hyperspectral data using semi-nonnegative matrix factorization [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2014, **52**(2):1430–1437.
- [67] Taylor J S, Cristianini N. *Kernel methods for pattern analysis* [M]. England: Cambridge University Press, 2004.
- [68] Guilfoyle K J, Althouse M L, Chang C. A quantitative and comparative analysis of linear and nonlinear spectral mixture models using radial basis function neural networks [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2001, **39**(10):2314–2318.
- [69] Plaza J, Martínez P, Pérez R, *et al.* Nonlinear neural network mixture models for fractional abundance estimation in AVIRIS hyperspectral images [C]. in *Proc. AVIRIS Workshop*, Pasadena, CA, 2004.
- [70] Plaza J, Plaza A, Perez R, *et al.* On the use of small training sets for neural network-based characterization of mixed pixels in remotely sensed hyperspectral images [J]. *Pattern Recogn.*, 2009, **42**(11):3032–3045.
- [71] Altmann Y, Dobigeon N, Tourneret J, *et al.* Nonlinear unmixing of hyperspectral images using radial basis functions and orthogonal least squares [C]. Vancouver: 2011.
- [72] Ayerdi B, Grana M. Hyperspectral image nonlinear unmixing and reconstruction by ELM regression ensemble [J]. *Neurocomputing*, 2015, **14**(2):143–167.
- [73] Ayerdi B, Grana M. Hyperspectral image nonlinear unmixing by ensemble ELM regression [J]. in *Proc. Adaptation, Learning and Optimization*, 2015, **4**:289–297.
- [74] Liao W, Pizurica A, Philips W, *et al.* A fast iterative ker-

- nel PCA feature extraction for hyperspectral images [C]. Hong Kong:2010.
- [75] Zhang L, Wu B, Huang B, *et al.* Nonlinear estimation of subpixel proportion via kernel least square regression [J]. *Int. J. Remote Sens.*, 2007, **28**(18):4157–4172.
- [76] Broadwater J, Chellappa R, Banerjee A, *et al.* Kernel fully constrained least squares abundance estimates [C]. Barcelona: 2007.
- [77] Broadwater J, Banerjee A. A comparison of kernel functions for intimate mixture models [C]. Grenoble: 2009.
- [78] Broadwater J, Banerjee A. A generalized kernel for areal and intimate mixtures [C]. Reykjavik: 2010.
- [79] Broadwater J, Banerjee A. Mapping intimate mixtures using an adaptive kernel-based technique [C]. Lisbon: 2011.
- [80] Rand R S. Automated endmember determination and adaptive spectral mixture analysis using kernel methods [J]. *Imaging Spectrometry*, 2013, **8870**:1–17.
- [81] Rand R S. Using kernel-based and single-scattering albedo approaches for generalized spectral mixture analysis of hyperspectral imagery [J]. *Imaging Spectrometry*, 2014, **9222**:1–18.
- [82] Rand R S, Resmini R G, Allen D W. Characterizing intimate mixtures of materials in hyperspectral imagery with albedo-based and kernel-based approaches [J]. *Imaging Spectrometry*, 2015, **9611**:1–20.
- [83] Plaza J, Plaza A, Martinez P, *et al.* Nonlinear mixture models for analyzing laboratory simulated-forest hyperspectral data [J]. *Image and Signal Processing for Remote Sensing*, 2004, **5238**:480–487.
- [84] WU Bo, ZHANG Liang-Pei, LI Ping-Xiang. Unmixing hyperspectral imagery based on support vector nonlinear approximating regression [J]. *Journal of Remote Sensing*(吴波, 张良培, 李平湘. 基于支撑向量回归的高光谱混合像元非线性分解. *遥感学报*), 2006, **10**(3): 312–318.
- [85] LI Hui, ZHANG Jin-Qu, CAO Yang, *et al.* Nonlinear spectral unmixing for optimizing per-pixel endmember sets [J]. *Acta Geodaetica et Cartographica Sinica*(李慧, 张金区, 曹阳, 等. 端元可变非线性混合像元分解模型. *测绘学报*), 2016, **45**(1): 80–86.
- [86] Chen J, Richard C, Honeine P. Nonlinear unmixing of hyperspectral data with partially linear least-squares support vector regression [C]. Vancouver: 2013.
- [87] Wu B, Zhang L, Li P, *et al.* Nonlinear estimation of hyperspectral mixture pixel proportion based on kernel orthogonal subspace projection [J]. *Advances in Neural Networks*, 2006, **3971**:1070–1075.
- [88] Zhao L, Zheng J, Li X, *et al.* Kernel simplex growing algorithm for hyperspectral endmember extraction [J]. *Journal of Applied Remote Sensing*, 2014, **8**(1):1–15.
- [89] Zhao L, Li F, Cui J. An endmember extraction algorithm for hyperspectral imagery based on kernel orthogonal subspace projection [C]. Sichuan: 2012.
- [90] Liu K, Wong E, Du E Y, *et al.* Kernel-based linear spectral mixture analysis [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2012, **9**(1):129–133.
- [91] Zhao L, Fan M, Li X, *et al.* Fast implementation of linear and nonlinear simplex growing algorithm for hyperspectral endmember extraction [J]. *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, 2015, **126**:1–20.
- [92] Chen J, Richard C, Honeine P. A novel kernel-based nonlinear unmixing scheme of hyperspectral images [C]. Pacific Grove: 2011.
- [93] Chen J, Richard C, Honeine P. Nonlinear unmixing of hyperspectral data based on a linear mixture/nonlinear-fluctuation model [J]. *IEEE Trans. Signal Process*, 2013, **61**(2):480–492.
- [94] Chen J, Richard C, Honeine P. Nonlinear unmixing of hyperspectral images with multi-kernel learning [C]. Shanghai: 2012.
- [95] Liu K, Lin Y, Chen C. Linear spectral mixture analysis via multiple-kernel learning for hyperspectral image classification [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2015, **53**(4):2254–2269.
- [96] Gu Y, Wang S, Jia X. Spectral unmixing in multiple-kernel hilbert space for hyperspectral imagery [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2013, **51**(7):3968–3980.
- [97] TAN Xiong, YU Xu-Chu, ZHANG Peng-Qiang, *et al.* Nonlinear mixed pixel decomposition of hyperspectral imagery based on multiple kernel SVM[J]. *Optics and Precision Engineering*(谭熊, 余旭初, 张鹏强, 等. 基于多核支持向量机的高光谱影像非线性混合像元分解. *光学精密工程*), 2014, **22**(7):1912–1920.
- [98] Doble N, Fevotte C. Robust nonnegative matrix factorization for nonlinear unmixing of hyperspectral images [C]. *5rd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing*, 2013.
- [99] Harmeling S, Ziehe A, Kawanabe M, *et al.* Kernel feature spaces and nonlinear blind source separation [J]. *Advances in neural information processing systems*, 2002:1–8.
- [100] Duong V, Hsieh W, Bao P T, *et al.* An overview of kernel based nonnegative matrix factorization [C]. Xi'an: 2014.
- [101] Zhang D, Zhou Z, Chen S. Non-negative matrix factorization on kernels. 2004.
- [102] Wu X, Li X, Zhao L. A kernel spatial complexity-based nonlinear unmixing method of hyperspectral imagery [J]. in *Proc. Life Syst. Model. Intell. Comput.*, 2010, **6330**: 451–458.
- [103] Fang B, Li Y, Zhang P, *et al.* Kernel sparse NMF for hyperspectral unmixing [C]. Xi'an: 2014.
- [104] LI Xiao-Run, WU Xiao-Ming, ZHAO Liao-Ying. Unsupervised nonlinear decomposing method of hyperspectral imagery [J]. *Journal of Zhejiang University(Engineering Science)*(厉小润, 伍小明, 赵辽英. 非监督的高光谱混合像元非线性分解方法. *浙江大学学报(工学版)*), 2011, **45**(4):607–613.
- [105] Li X, Cui J, Zhao J. Blind nonlinear hyperspectral unmixing based on constrained kernel nonnegative matrix factorization [J]. *Signal, Image and Video Processing*, 2012, **8**(8):1555–1567.
- [106] CUI Jian-Tao, LI Xiao-Run, ZHAO Liao-Ying. Spectral analysis for subpixel materials based on kernel parital nonnegative matrix factorization [J]. *Chinese Space Science and Technology*(崔建涛, 厉小润, 赵辽英. 基于核部分非负矩阵分解的亚像元级地物光谱分析. *中国空间科学技术*), 2014, **4**: 46–65.
- [107] An A, Yun J, Choi S. Multiple kernel nonnegative matrix factorization [C]. Prague: 2011.
- [108] Gu Y, Wang Q, Wang H, *et al.* Multiple kernel learning via low-rank nonnegative matrix factorization for classifica-

- tion of hyperspectral imagery [J]. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ.*, 2015, **8**(6): 2739–2751.
- [109] Cui J, Li X, Zhao L. Nonlinear hyperspectral unmixing based on constrained multiple kernel NMF [J]. *Satellite Data Compression, Communications, and Processing*, 2014, **9124**:1–6.
- [110] Tenenbaum J B, DeSilva V, Langford J C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction [J]. *Science*, 2000, **290**(22): 2319–2323.
- [111] Roweis S T, Saul L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding [J]. *Science*, 2000, **290**(22): 2323–2326.
- [112] Heylen R, Burazerovic' D, Scheunders P. Nonlinear spectral unmixing by geodesic simplex volume maximization [J]. *IEEE J. Sel. Topics Signal Process.*, 2011, **5**(3): 534–542.
- [113] Heylen R, Scheunders P. Non-linear fully-constrained spectral unmixing [C]. Vancouver: 2011.
- [114] Heylen R, Scheunders P. A distance geometric framework for nonlinear hyperspectral unmixing [J]. *IEEE J. Sel. Topics Signal Process.*, 2014, **7**(6): 1879–1888.
- [115] Chi J, Crawford M M. Selection of landmark points on nonlinear manifolds for spectral unmixing using local homogeneity [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2013, **10**(4): 711–715.
- [116] Chi J, Crawford M M. Active landmark sampling for manifold learning based spectral unmixing [J]. *IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.*, 2014, **11**(11): 1881–1885.
- [117] TANG Xiao-Yan, GAO Kun, NI Guo-Qiang, *et al.* An improved N-FINDR endmember extraction algorithm based on manifold learning and spatial information [J]. *Remote Sensing Technology and Applications* (唐晓燕, 高昆, 倪国强, 等. 基于流形学习和空间信息的改进 N-FINDR 端元提取算法. *光谱学与光谱分析*), 2013, **33**(9): 2519–2524.
- [118] Lu X, Wu H, Yuan Y, *et al.* Manifold regularized sparse NMF for hyperspectral unmixing [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2013, **51**(5): 2815–2825.
- [119] Altmann Y, Dobigeon N, Tourneret J. Detecting nonlinear mixtures in hyperspectral images [C]. Shanghai: 2012.
- [120] Altmann Y, Dobigeon N, Tourneret J. Nonlinearity detection in hyperspectral images using a polynomial post-nonlinear mixing model [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2013, **22**(4): 1267–1276.
- [121] Altmann Y, Dobigeon N, Tourneret J, *et al.* A robust test for nonlinear mixture detection in hyperspectral images [C]. Vancouver: 2013.
- [122] Altmann Y, Dobigeon N, McLaughlin S, *et al.* Residual component analysis of hyperspectral images; application to joint nonlinear unmixing and nonlinearity detection [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2014, **23**(5): 2148–2158.