

高光谱分类体积的端元提取

严阳**, 华文深*, 崔子浩, 伍锡山, 刘恂

陆军工程大学石家庄校区电子与光学工程系, 河北 石家庄 050003

摘要 为求解高光谱图像中各物质的分布及含量, 将高光谱分类引入端元提取, 提出了一种新的端元提取方法。首先利用虚拟维度评估端元数目; 然后引入高光谱分类的思想, 通过 K -means 聚类算法对高光谱图像进行非监督分类, 对各类物质进行大致分类; 在每类物质中提取出光谱值最大的像元, 用这些像元构成端元候选集; 最后, 依据单形体理论, 将高光谱图像的像元点在高维空间中构成单形体, 体积最大的单形体的顶点即为端元。模拟和真实高光谱数据证明, 此端元提取方法相对于传统方法具有高效、准确的优点。

关键词 光谱学; 高光谱; 光谱解混; 端元提取

中图分类号 O433.4 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP55.093004

Classification and Volume for Hyperspectral Endmember Extraction

Yan Yang**, Hua Wenshen*, Cui Zihao, Wu Xishan, Liu Xun

*Department of Electronic and Optical Engineering, Army Engineering University,
Shijiazhuang, Hebei 050003, China*

Abstract In order to solve the distribution and content of each substance in hyperspectral images, we introduce the hyperspectral classification into the endmember extraction to propose a new endmember extraction method. Firstly, the number of endmembers is determined by the virtual dimension. And the thought of hyperspectral unsupervised classification is performed by K -means clustering algorithm which classifies each pixel into classifications. Then the pixel with the largest spectral value is extracted from each kind of class. According to the theory of simplex, the pixels of hyperspectral image are used to form a simplex in the high-dimensional space, and the vertexes of the largest simplex are the endmembers which are extracted. The simulation and real data have shown that this method of endmember extraction has the advantages of high efficiency and accuracy compared with the traditional method.

Key words spectroscopy; hyperspectral; spectral unmixing; endmember extraction

OCIS codes 100.4145; 300.6170; 300.6320

1 引言

高光谱图像具有图谱合一的优点, 常被应用于农作物成熟度检测、矿物含量分析、军事目标探测等方面^[1]。然而, 受空间分辨率的限制以及复杂环境的影响, 高光谱图像中存在大量混合像元。对混合像元的解译主要依赖端元的获取(端元是指纯净物质的光谱信号), 而求解每个像元中各端元的权重则被称为丰度反演^[2]。通过丰度反演可获取各物质的含量及分布。

线性光谱混合模型假设光谱仪采集到的光谱信号由各端元依据一定的丰度线性组成。在几何上,

高光谱数据可以被视为是高维光谱特征空间中的凸面单形体, 端元位于凸面单形体的顶点, 而混合像元则位于单形体的内部^[3]。几何学方法通过寻找凸面单形体的顶点提取端元, 有代表性的端元提取方法有 N-FINDR^[4]算法、顶点成分分析^[5]、单形体增长算法^[6]、纯净像元指数^[7]、迭代体积最大化^[8]等。近些年, 国内外学者对这些方法进行了各种改进与优化。

高光谱数据的光谱维度高, 当高光谱图像中的像元数较多时, 会导致数据的处理速度缓慢, 时效性差。为解决时效性问题, 本文提出了一种新的端元提取方法, 即分类体积(CV)端元提取方法。该方法

收稿日期: 2018-02-27; 修回日期: 2018-04-03; 录用日期: 2018-04-08

* E-mail: huawensh@126.com; ** E-mail: 554735438@qq.com

结合物质的聚类特性,利用非监督分类 K -means 算法区分物质,划分物质的类别,再根据由最大单形体端元点构成的凸面单形体理论提取端元,将每类物质中提取出的光谱值最大的像元构成端元候选集,然后借鉴 N-FINDR 算法的思想,利用体积最大化选择最终的端元。通过分类、划分、筛选像元避免了同类物质像元间的重复计算,效率得以显著提高。

2 线性混合模型及方法

2.1 线性光谱混合模型

线性光谱混合模型假设混合像元由各端元及其对应的丰度线性混合而成。设 x 为高光谱图像中任意 L 维像元的观测光谱向量, $\mathbf{E} = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_P] \in \mathbf{R}_{L \times P}$ 为一个 $L \times P$ 维的端元光谱矩阵, \mathbf{e}_P 为第 P 个端元的光谱向量, $\mathbf{S} = [s_1, s_2, \dots, s_P]^T \in \mathbf{R}_{P \times 1}$ 为像元对应的丰度向量, \mathbf{n} 为 L 维噪声向量,则线性光谱混合模型可表示为^[9]

$$\mathbf{x} = \mathbf{E}\mathbf{S} + \mathbf{n}. \quad (1)$$

\mathbf{S} 满足非负与和为 1 两个约束条件,即 $0 \leq s_z \leq 1$,

$$\sum_{z=1}^P s_z = 1.$$

2.2 N-FINDR 算法

N-FINDR 算法通过寻找最大单形体来获取端元点,需要遍历所有像元点,各像元之间构成单形体时存在多种组合,因此计算量普遍偏大。

N-FINDR 算法首先假设图像中共有 P 个端元,由于体积计算的限制,同时为减小计算量,对高光谱数据用最小噪声分离法^[10]进行降维,降成 $P-1$ 维,然后在高光谱图像中随机选择 P 个初始点作为端元集,再计算端元集构成的单形体的体积。体积计算方法为

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \dots & \mathbf{e}_P \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$V(\mathbf{E}) = \text{abs}(|\mathbf{E}|)/(P-1)!, \quad (3)$$

式中: $\text{abs}(\cdot)$ 代表求绝对值运算。依次将高光谱数据中的其余像元替换端元集的一个端元,重新计算比较体积大小,反复进行迭代,遍历所有的像元点,直至找到构成最大体积的端元集。

N-FINDR 数据降维之后可能会导致图像中的小目标丢失,信息量减少,从而无法准确提取端元。为此,Geng 等^[11]改进了体积计算方法,使体积计算摆脱了维数限制。假设单形体的 P 个顶点分别为 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_P$, 令 $\mathbf{A}_{P-1} = [\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_P - \mathbf{e}_1]$, 对行列式进行变换,则单形体的体积计算公

式为

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \dots & \mathbf{e}_P \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1 & \dots & \mathbf{e}_P - \mathbf{e}_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ \mathbf{e}_1 & \mathbf{A}_{P-1} \end{vmatrix}, \quad (4)$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \dots & \mathbf{e}_P \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ \mathbf{e}_1 & \mathbf{A}_{P-1} \end{vmatrix} =$$

$$|\mathbf{A}_{P-1}| = |[(\mathbf{A}_{P-1})^T \mathbf{A}_{P-1}]|^{1/2}. \quad (5)$$

由于 $(\mathbf{A}_{P-1})^T \mathbf{A}_{P-1}$ 为方阵,因此改进后的公式适用于任何维度的高光谱数据,所以采用 N-FINDR 算法时不需要先降维。但高光谱的光谱维数较高,不降维将会导致算法计算量巨增,影响时效性。

3 分类体积的端元提取

为解决上述矛盾,本课题组提出了一种新的方法:CV 端元提取。首先在一定虚警率下评估端元数,然后根据端元数确定非监督分类类别数。在一般情况下,对于同一类物质,其光谱值越大,像元纯度就越高。在各类中筛选出光谱值最大的像元点,将这些像元点构成端元候选集。依据单形体理论,端元集组成的单形体体积最大,找到构成最大体积的端元集,即可确定端元。

3.1 评估端元数目

本研究采用较为常用的方法——虚拟维度^[12](VD)来评估高光谱图像中的端元数目 P 。基于 Neyman-Pearson 探测理论,在一定虚警率 P_F 下评估端元数 P 。

3.2 非监督分类

高光谱分类是将各物质根据光谱信息归类,光谱越相似,属于同一类的概率就越高。高光谱分类方法主要有监督分类和非监督分类两种。由于通常情况没有先验知识,因此本研究采用非监督的方法对高光谱图像进行分类。非监督分类通常有 K -means^[13]算法和迭代自组织数据分析^[14]算法,这里以 K -means 算法为例进行非监督分类。假设 K -means 算法聚类类别数为 k ,初始化 k 个像元作为类别的聚类中心,其他像元通过比较与中心像元的光谱相似度来确定该像元所属的类别,利用各类的均值更新各类的中心,反复迭代,直至聚类中心不变。该算法简洁快速,不需要先验知识。

由于非监督分类存在误差,可能会导致错分现象。基于后续端元提取的准确率及解混精度考虑,根据实验, K -means 算法的 k 值一般取端元数的两倍,即 $2P$ 。非监督分类后,相同的物质归为一类,使

得端元提取时减少了同种端元的选择比较,这将大大提高效率。

3.3 单形体的体积计算

基于最大单形体理论,在各类别中筛选出光谱值最大的像元作为端元候选集,计算由 P 个端元组成的单形体的体积。由于端元候选集中只有 $2P$ 个

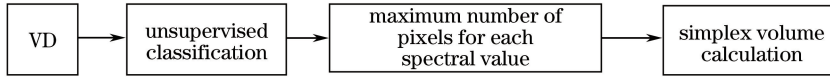


图 1 CV 流程图

Fig. 1 Flow chart of CV

本研究采用光谱角(SA)和重构图像的均方根误差(RMSE)评价算法的性能。对于 SA^[15],通过计算两条光谱曲线的夹角来判断曲线间的相似性,夹角越小,两条曲线越相似。光谱角 S 的表达式为

$$S = \arccos \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n y_i^2}}, \quad (6)$$

式中: x_i 和 y_i 分别为两条光谱曲线中第 i 个波段的光谱值。

对于 RMSE^[2],通过对比原高光谱图像与端元矩阵、丰度矩阵重构图像的差别来判断端元的提取效果。RMSE 越小,表明算法效果越好。计算方法为

$$e_{\text{RMSE}} R = \sum_{k=1}^L \left\{ \left\{ \frac{1}{NM} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M [x(i, j) - \hat{x}(i, j)]^2 \right\} \right\}^{1/2}, \quad (7)$$

式中: $x(i, j)$ 为原高光谱图像中的像元光谱值; $\hat{x}(i, j)$ 为解混的端元矩阵与丰度矩阵重构图像的像元光谱值; M 、 N 、 L 分别为行数、列数、波段数。

4 实验与结果分析

为探究所提方法的效果,采用模拟高光谱数据及真实高光谱数据进行实验分析,模拟数据能得到标准端元光谱曲线的先验知识,有利于评价所提方法的效能;同时,真实高光谱数据能检验所提方法在实际应用中的性能。本研究将 CV 方法与传统端元提取方法 N-FINDR(降维和未降维)进行对比,评价 CV 的效能。

4.1 模拟数据

模拟高光谱图像采用一种相对简单的遥感数据模型。从美国地质勘探局光谱库中随机选择 5 种不同物质的光谱曲线作为模拟数据的端元,5 种端元

候选点,数据量小,因此可以利用改进的未降维的体积计算方法,得到最大体积对应的 P 个端元。

本研究将高光谱非监督分类与高光谱端元提取相结合,利用单形体理论提取端元,大大减小了计算量,避免了相同类别中体积的计算与比较。端元提取方法 CV 流程图如图 1 所示。

在光谱库中的名称分别为: Dolomite COD2005、Kaolinite CM3、Calcite CO2004、Gibbsite WS214、Clinoptilolite GDS2 Zeolite, 5 种端元分别用 A 、 B 、 C 、 D 、 E 表示, F 代表背景,背景为 5 个端元的光谱平均值。5 个端元的光谱反射特性各不相同,波长范围为 $0.4011 \sim 2.9760 \mu\text{m}$,波段数量为 430。图 2 为仿真模拟高光谱数据第 50 波段的图像,图 3 为所选真实端元的光谱曲线。

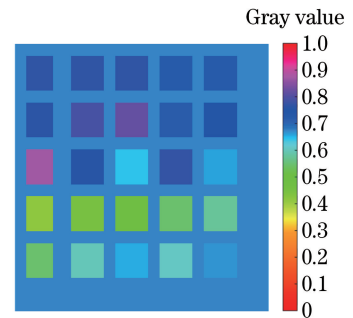


图 2 模拟数据第 50 波段的图像

Fig. 2 Image of simulation data of the 50th band

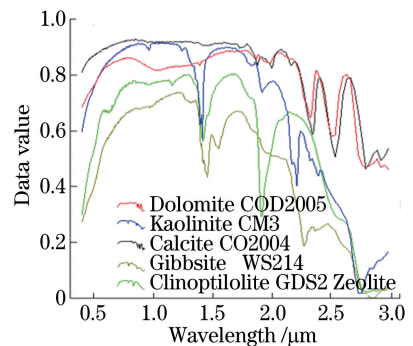


图 3 真实端元的光谱曲线

Fig. 3 Spectral curves of real endmember

模拟高光谱图像的空间大小为 $200 \text{ pixel} \times 200 \text{ pixel}$ 。在 5 行中,每行中均有 5 个大小为 $25 \text{ pixel} \times 25 \text{ pixel}$ 的方块,其余部分为背景。方块的含量分布如表 1 所示。

表1 方块的含量分布

Table 1 Content distribution of the cube

| Item | First column | Second column | Third column | Fourth column | Fifth column |
|------------|--------------|-----------------|---------------|---------------|------------------------|
| First row | A | $0.75A + 0.25B$ | $0.5A + 0.5B$ | $0.5A + 0.5F$ | $0.25A + 0.25B + 0.5F$ |
| Second row | B | $0.75B + 0.25C$ | $0.5B + 0.5C$ | $0.5B + 0.5F$ | $0.25B + 0.25C + 0.5F$ |
| Third row | C | $0.75C + 0.25D$ | $0.5C + 0.5D$ | $0.5C + 0.5F$ | $0.25C + 0.25D + 0.5F$ |
| Fourth row | D | $0.75D + 0.25E$ | $0.5D + 0.5E$ | $0.5D + 0.5F$ | $0.25D + 0.25E + 0.5F$ |
| Fifth row | E | $0.75E + 0.25A$ | $0.5E + 0.5A$ | $0.5E + 0.5F$ | $0.25E + 0.25A + 0.5F$ |

在实际的高光谱图像中会存在噪声,因此在模拟图像中加入不同程度的高斯噪声,信噪比分别为 20 dB, 30 dB, 40 dB。在不同的信噪比下,利用 N-FINDR 算法和 CV 提取端元。根据先验知识,比较提取的端元与真实端元的光谱角,光谱角越小,代表

提取的端元与真实端元越相似。端元的平均光谱角如表 2 所示。根据提取的端元,利用全约束最小二乘法解混^[16],计算端元矩阵和丰度矩阵的重构图像与原数据的 RMSE,解混精度如表 3 所示。在不同信噪比下,端元提取算法所用时间如表 4 所示。

表2 端元的平均光谱角

Table 2 Average spectral angle of endmember

| Signal-to-noise ratio /dB | Spectral angle | | |
|---------------------------|---|--|-----------|
| | N-FINDR algorithm with dimensionality reduction | N-FINDR algorithm without dimensionality reduction | CV method |
| 20 | 0.1378 | 0.1610 | 0.1543 |
| 30 | 0.0478 | 0.0510 | 0.0606 |
| 40 | 0.0207 | 0.0211 | 0.0445 |

表3 解混精度

Table 3 Unmixing precision

| Signal-to-noise ratio /dB | Unmixing precision | | |
|---------------------------|---|--|-----------|
| | N-FINDR algorithm with dimensionality reduction | N-FINDR algorithm without dimensionality reduction | CV method |
| 20 | 0.1112 | 0.1120 | 0.1123 |
| 30 | 0.0373 | 0.0372 | 0.0375 |
| 40 | 0.0147 | 0.0147 | 0.0158 |

表4 端元提取算法所用时间

Table 4 Elapsed time of endmember extraction algorithm

| Signal-to-noise ratio /dB | Elapsed time /s | | |
|---------------------------|---|--|-----------|
| | N-FINDR algorithm with dimensionality reduction | N-FINDR algorithm without dimensionality reduction | CV method |
| 20 | 34.86 | 444.26 | 20.64 |
| 30 | 35.11 | 442.43 | 20.56 |
| 40 | 34.86 | 438.46 | 20.43 |

由表 2 可知:与降维的 N-FINDR 算法相比, CV 法得到的光谱角略大。但根据表 3 中的解混误差可以看出, CV 法与未降维的 N-FINDR 算法提取的端元解混精度相近,说明 CV 法提取的端元能有效解混。同时,对比端元提取时间可以发现, CV 法的效率约为降维 N-FINDR 算法 2 倍,相对于未降维 N-FINDR 算法有了大幅提高。

4.2 真实高光谱数据

实验采用的真实高光谱数据为 1997 年机载可见光/红外成像光谱仪拍摄的美国内达华州 Cuprite 矿区的图像。文中采用大小为 200 pixel × 200 pixel

的部分 Cuprite 高光谱图像数据进行实验,图 4 为所选区域的第 50 波段的灰度图,数据全波长范围为

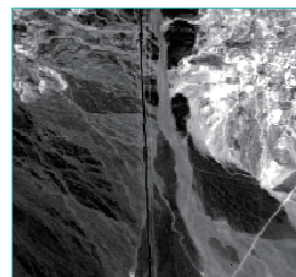


图4 第50波段的灰度图

Fig. 4 Grayscale image of the 50th band

0.37~2.51 μm , 移除低信噪比波段(第 98~第 128 波段和第 148~第 170 波段), 本实验共采用 170 个波段。

通过 VD 判断高光谱数据中端元的个数, 虚警率为 10^{-7} 时, $P=6$ 。分别用 3 种方法提取端元, 然后再用全约束最小二乘法解混。端元提取所用时间

表 5 端元提取所用时间及解混精度

Table 5 Time and unmixing precision of endmember extraction

| Item | N-FINDR algorithm with dimensionality reduction | N-FINDR algorithm without dimensionality reduction | CV method |
|---------|---|--|-----------|
| Time /s | 52.85 | 218.34 | 39.62 |
| RMSE | 257.15 | 206.64 | 136.41 |

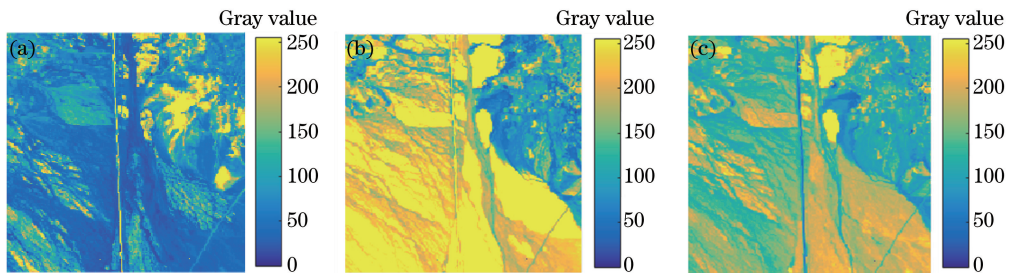


图 5 RMSE 图像。(a) CV 法; (b) 降维 N-FINDR 算法; (c) 未降维 N-FINDR 算法

Fig. 5 Pictures of RMSE. (a) CV method; (b) N-FINDR algorithm with dimensionality reduction; (c) N-FINDR algorithm without dimensionality reduction

5 结 论

将高光谱分类与端元提取相结合提出了一种新的端元提取方法。采用 K -means 非监督分类对高光谱图像分类, 避免了端元提取过程中对同类物质的重复迭代与计算, 然后依据最大单形体理论提取端元。模拟及真实高光谱数据都证明, 所提 CV 方法与传统 N-FINDR 算法相比, 精度相近甚至更高; 同时, CV 方法的计算时间大幅缩减, 效率得到明显提高。

参 考 文 献

- [1] Zhang L P, Zhang L F. Hyperspectral remote sensing[M]. Wuhan: Wuhan University Press, 2005: 23-24.
张良培, 张立福. 高光谱遥感[M]. 武汉: 武汉大学出版社, 2005: 23-24.
- [2] Plaza A, Martinez P, Perez R, *et al.* A quantitative and comparative analysis of endmember extraction algorithms from hyperspectral data [J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2004, 42(3): 650-663.
- [3] Bioucas-Dias J M, Plaza A, Dobigeon N, *et al.*

及解混精度如表 5 所示, RMSE 图像如图 5 所示。

误差图像中的像元数值越小, 则误差越小。从图 5 中可以直观地看出, 在真实的高光谱图像中, 利用 CV 提取的端元求解, 绝大部分像元点中的误差比 N-FINDR 算法的误差小, 并且端元提取时间也有较大缩短, 如表 5 所示。

Hyperspectral unmixing overview: geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches [J]. IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing, 2012, 5(2): 354-379.

- [4] Winter M E. N-FINDR: an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data [J]. Proceedings of SPIE, 1999, 3753: 266-275.
- [5] Nascimento J M P, Dias J M B. Vertex component analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data [J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2005, 43(4): 898-910.
- [6] Wang L J, Li X R, Zhao L Y. Fast implement of the simplex growing algorithm for endmember extraction [J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(11): 1128001.
王丽姣, 厉小润, 赵辽英. 快速实现基于单形体体积生长的端元提取算法 [J]. 光学学报, 2014, 34(11): 1128001.
- [7] Boardman J W, Kruse F A, Green R O. Mapping target signatures via partial unmixing of AVIRIS data [C]. Fifth JPL Airborne Earth Science Workshop, 1995: 23-26.
- [8] Ambikapathi A M, Chan T H, Ma W K, *et al.* A robust alternating volume maximization algorithm for

- endmember extraction in hyperspectral images [C]. Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing, 2010: 1-4.
- [9] Iordache M D, Bioucas-Dias J M, Plaza A. Total variation spatial regularization for sparse hyperspectral unmixing [J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2012, 50 (11): 4484-4502.
- [10] Li S Y, Du S S, Zeng Z Y. Decoy spectrum design based on feature space significance [J]. Acta Optica Sinica, 2017, 37(1): 0128001.
李姝颖, 杜山山, 曾朝阳. 基于特征空间显著性的假目标光谱设计 [J]. 光学学报, 2017, 37 (1): 0128001.
- [11] Geng X, Zhao Y C, Wang F X, *et al.* A new volume formula for a simplex and its application to endmember extraction for hyperspectral image analysis [J]. International Journal of Remote Sensing, 2010, 31(4): 1027-1035.
- [12] Chang C I, Du Q. Estimation of number of spectrally distinct signal sources in hyperspectral imagery [J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2004, 42(3): 608-619.
- [13] Hartigan J A, Wong M A. Algorithm AS 136: A K -means clustering algorithm [J]. Applied Statistics, 1979, 28(1): 100-108.
- [14] Martin G, Plaza A. Region-based spatial preprocessing for endmember extraction and spectral unmixing [J]. IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters, 2011, 8(4): 745-749.
- [15] Miao L D, Qi H R. Endmember extraction from highly mixed data using minimum volume constrained nonnegative matrix factorization [J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2007, 45(3): 765-777.
- [16] Heinz D C, Chang C I. Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery [J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2001, 39(3): 529-545.