

# 一种改进的大尺度高光谱流形降维算法

张晶晶<sup>1,2</sup> 周晓勇<sup>1\*</sup> 刘奇<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 安徽大学电气工程与自动化学院, 安徽 合肥 230601  
<sup>2</sup> 中国科学院通用光学定标与表征技术重点实验室, 安徽 合肥 230031)

**摘要** 经典流形算法等距映射(ISOMAP)和局部线性嵌入(LLE)可以对高光谱数据进行降维,但不能解决大尺度高光谱图像的流形降维难题。详细论述了ISOMAP和LLE在大尺度高光谱流形降维中遇到的问题,提出了一种基于增量等距映射(IISOMAP)和LLE结合的高光谱流形降维算法IISOMAP-LLE,并针对流形降维算法较线性降维算法最小噪声分离(MNF)可以更好地发掘出高光谱数据中的非线性结构的优点,通过AVIRIS和OMIS-II数据实验验证了算法的可行性和优越性,并证明了IISOMAP-LLE算法可以避免增强型等距映射(ENH-ISOMAP)中由于Landmark点选取不当而造成的本征维数较大时类间可分性反而低于MNF的缺点。

**关键词** 遥感;高光谱遥感;大尺度高光谱流形降维;增量等距映射;增强型等距映射;最小噪声分离  
**中图分类号** TP751 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.1128001

## Improved Dimensionality Reduction Algorithm of Large-Scale Hyperspectral Scenes Using Manifold

Zhang Jingjing<sup>1,2</sup> Zhou Xiaoyong<sup>1</sup> Liu Qi<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> College of Electrical Engineering and Automation, Anhui University, Hefei, Anhui 230601, China)  
<sup>2</sup> Key Laboratory of Optical Calibration and Characterization, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China)

**Abstract** It is practicable for dimensionality reduction of hyperspectral scenes using manifold algorithm such as isometric mapping (ISOMAP) and local linear embedding (LLE). However the two classical manifold algorithm are not suitable for solving the large-scale hyperspectral scenes. We elaborate the problems encountered in applying ISOMAP and LLE to dimensionality reduction of large-scale hyperspectral scenes, then an improved algorithm called IISOMAP-LLE, which is based on incremental isometric mapping (IISOMAP) and LLE, is proposed to represent the nonlinear structure of hyperspectral imagery that linear algorithm minimum noise fraction (MNF) could not discover. At last we demonstrate two experiments using large-scale AVIRIS and OMIS-II hyperspectral scenes to illustrate the approach. Experimental results prove that the IISOMAP-LLE not only is much better than linear algorithm MNF but also can avoid superiority decline of separability compared with MNF that encountered in enhanced isometric mapping.

**Key words** remote sensing; hyperspectral remote sensing; manifold dimensionality reduction of large-scale scenes; incremental isometric mapping; enhanced isometric mapping; minimum noise fraction

**OCIS codes** 280.4788; 100.4145; 100.4994; 100.5010

## 1 引言

高光谱图像每个像素提供了上百个波段的光谱反射信息。波段数越多则地物识别的准确性越高,但同时也存在信息相关度高、冗余信息量大等缺点。为了解决“维数灾难”问题,通常在分类前使用特征

提取或特征选择进行降维处理<sup>[1]</sup>。其中常用的线性特征提取算法有主成分分析(PCA)、线性判别分析(LDA)、独立成分分析(ICA)、最小噪声分离(MNF)等<sup>[2]</sup>,然而线性降维算法主要适用于数据空间分布为线性结构的情况,其核心思想是找到一种

收稿日期: 2013-05-08; 收到修改稿日期: 2013-06-14

基金项目: 国家自然科学基金(61272025)、高等学校博士学科点专项科研基金联合项目(20113401120006)

作者简介: 张晶晶(1974—),女,博士,副教授,主要从事遥感信息处理方面的研究。E-mail: helenzjj@aiofm.ac.cn

\* 通信联系人。E-mail: zhou.christian@gmail.com

本文电子版彩色效果请详见中国光学期刊网 www.opticsjournal.net

线性特征变换将高维特征空间变换至低维特征空间并同时保持样本的某些特性不变。高光谱遥感数据中,由于光谱分辨率很高,导致很多异物同谱的地物在高维空间中会分布在不同的但却可能很接近的区域,即异物同谱数据在高维空间中会呈云团状成簇分布。由于这些云团之间并不是呈线性分布的<sup>[3]</sup>,因此需要找到一种非线性特征变换,变换后在低维空间中也可以保持这些云团间的分布特性。

高光谱数据的低维特征可以看作均匀采样于一个高维欧氏空间中的低维流形,流形学习就是从高维采样数据中恢复低维流形结构,即找到高维空间中的低维流形,并求出相应的嵌入映射,以实现维数约简。虽然已经有学者将经典流形算法等距映射(ISOMAP)<sup>[4]</sup>和局部线性嵌入(LLE)<sup>[5]</sup>应用至高光谱数据降维<sup>[3,6-8]</sup>,但只能对小尺寸图像进行处理。这是因为ISOMAP算法中需要求解全局点间最短路径矩阵并对大型稀疏矩阵进行特征分解,LLE算法虽然是基于局部邻近点的线性重构,但处理大尺度高光谱图像时仍需要较大内存来存储光谱间的距离矩阵,因此实际应用中,计算复杂度和内存消耗限制了ISOMAP和LLE在高光谱图像中的应用<sup>[9]</sup>。为解决大尺度高光谱流形降维难题,Bachmann等<sup>[10]</sup>提出了三种大尺度图像分块计算后对流形坐标系进行矫正融合策略,实验结果表明,融合后相邻分块间仍会出现不连续现象。为此又针对高光谱数据特点提出了增强型等距映射(ENH-ISOMAP)算法<sup>[11]</sup>并取得了较好效果,但实验结果表明,当降维结果需要保留更多主成分时,即本征维数选取较大时,其类间可分性反而略低于MNF。

针对大尺度图像的流形降维问题,首先介绍了

经典流形算法在处理大尺度高光谱图像时遇到的问题,然后提出一种基于增量式等距映射(IISOMAP)<sup>[12-15]</sup>和LLE结合的大尺度高光谱流形降维算法IISOMAP-LLE,最后通过AVIRIS和OMIS-II数据实验证明了IISOMAP-LLE算法可以很好解决大尺度高光谱图像的流形降维难题,并通过对感兴趣区域(ROIs)的Jeffries-Matusita(JM)距离<sup>[11,16-18]</sup>的对比实验证明了IISOMAP-LLE对于非线性结构较多的异物同谱地物的类间可分性远优于线性降维算法MNF,且避免了ENH-ISOMAP中本征维数选取过大时类间可分性低于MNF的缺点。

## 2 ISOMAP和LLE在大尺度高光谱图像降维中的问题

ISOMAP与经典多维尺度变换(MDS)<sup>[19]</sup>的基本思想相似,不同之处在于MDS计算的是两点之间的“欧氏距离”,而ISOMAP则引入了“测地线距离”的概念,以描述流形上两点之间的真实差异,欧氏距离是两点之间的直线距离,不一定能反映实际距离;而测地线距离是沿着数据分布的曲线计算的,能够反映数据点之间的真实距离。无论采用欧氏距离或者测地线距离,对于大尺度高光谱数据,实际计算中都需要较大内存空间来存储这个距离矩阵,此距离矩阵的内存消耗为 $O(N^2)$ , $N$ 为图像中总光谱数,实际应用中高光谱图像的光谱数一般在 $O(10^6)$ 数量级,则内存消耗为 $O(10^{12})$ ,因此需要对大尺度图像分块计算,ISOMAP对200 pixel×200 pixel图像分为4 pixel×4 pixel小块计算,结果如图1(a)所示,可知由于分块间流形坐标系不统一而造成明显的不连续。

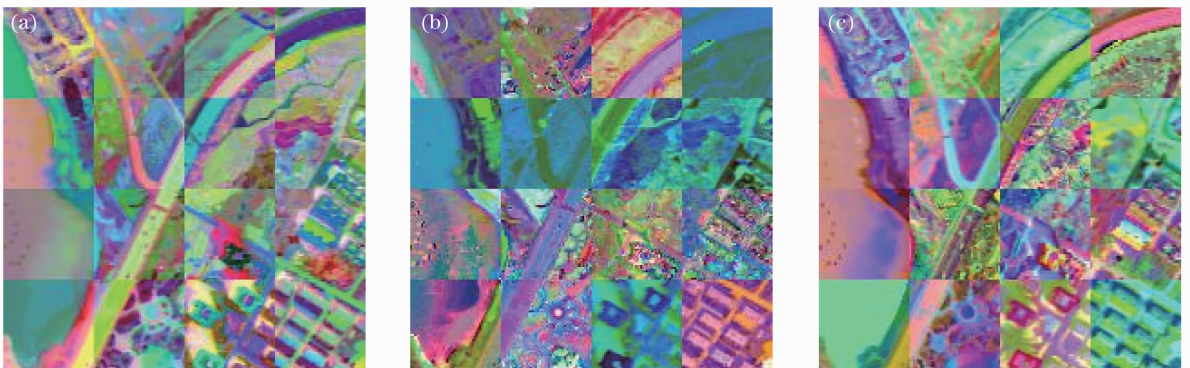


图1 分块降维后1-2-3波段伪彩色图。(a) ISOMAP; (b)使用欧氏距离的LLE; (c)使用测地线距离的LLE

Fig. 1 Pseudo color image with 1-2-3 bands after block dimension reduction. (a) ISOMAP; (b) LLE with Euclidean distance; (c) LLE with Geodesics distance

LLE 算法也是基于光谱间距离来进行计算的,也需要较大内存空间来存储距离矩阵。为了减小计算量,Roweis 等<sup>[5]</sup>在经典 LLE 算法中采用的是欧氏距离,使用欧氏距离分块计算的结果如图 1(b)所示。如果类似 ISOMAP 选用测地线距离可以更好地保持内蕴的流形结构,使用测地线距离的 LLE 算法计算结果如图 1(c)所示。这里需要说明的是图 1 中为对比实验结果选用了相同的  $K$  邻域大小,最优  $K$  邻域的选取将在后续研究中继续探讨,这里要说明的重点是无论 ISOMAP 还是 LLE,由于内存限制,在处理大尺度高光谱图像时都会产生分块间流形坐标系不统一问题。Bachmann 等<sup>[10]</sup>基于 ISOMAP 提出了三种分块处理后融合矫正的方法,但其实验结果表明三种方法都不能彻底消除分块间不连续。

### 3 IISOMAP 在大尺度高光谱图像降维中的问题

ISOMAP 的计算过程主要集中在求解点间最短路径和特征分解上。当一组新的数据进来时,这些计算量几乎没有变化:图中一个新的顶点只会改变其子集中的最短路径,而且实对称矩阵的特征值和特征向量只会围绕其原值有微小变化。这证明了可以对当前的测地线距离和坐标系重复利用来进行更新,这就为 IISOMAP 提供了算法基础。

IISOMAP 要解决的主要问题是:假设前  $n$  个点  $y_i$  的低维空间坐标系  $x_i$  已知,新增点为  $y_{n+1}$ ,通过已知坐标系  $x_i$  来算出点  $x_{n+1}$ 。分三步计算:考虑到邻域图随着  $y_{n+1}$  的到来而变化,首先更新邻域图和测地线  $g_{ij}$ ;然后新增点到已知点的测地线距离用来估计  $x_{n+1}$ ;最后,随着  $g_{ij}$  的变化最终所有的  $x_i$  都被更新。IISOMAP 主要步骤如图 2 所示,算法详细内容参见文献<sup>[12-13]</sup>。

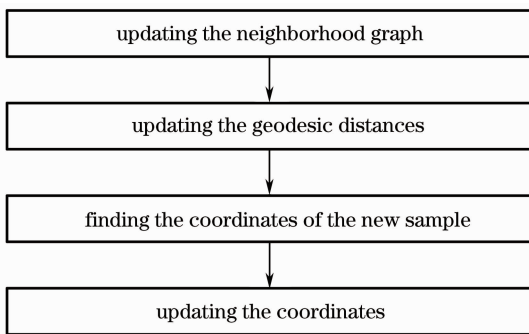


图 2 IISOMAP 算法主要过程

Fig. 2 Main procedure of IISOMAP algorithm

算法中使用测地线更新邻域图最短路径的复杂度为  $O(N^2 \log N + N^2 q)$ ,更行全局流形坐标系的复杂度为  $O(N^2)$ ,其中  $q$  为邻域图中顶点的最大深度。因为 ISOMAP 算法是非参数的,其数据点本身需要存储空间,在 IISOMAP 中有一个顶点收缩步骤,这个步骤可以对新增数据点的测地线距离进行测量而不占用存储空间。所以针对大尺寸高光谱图像,这种增量式处理的思路可以解决 ISOMAP 不能一次性计算较大尺寸图像的问题,  $200 \times 200 \times 64$  波段高光谱图像的 IISOMAP 降维结果如图 3(a)所示,图 3(b)为 MNF 结果。由图 4 可知 IISOMAP 较 MNF 在细节部分更丰富,可以直观地区分出地物的更多细节特征。

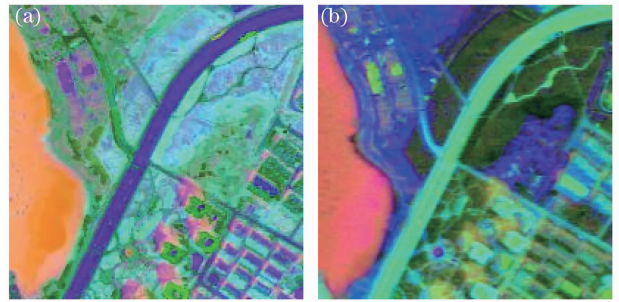


图 3 降维后 1-2-3 波段伪彩色图。

(a) IISOMAP; (b) MNF

Fig. 3 Pseudo color image with 1-2-3 bands after dimension reduction. (a) IISOMAP; (b) MNF

当直接用 IISOMAP 算法对高光谱图像进行处理时,虽然每加入一个光谱只需更新局部的邻域图和测地线,但更新全局流形坐标系时具有  $O(N^2)$  复杂度,所以其计算复杂度随着像素点数的增加呈指数增长。实验对  $200 \text{ pixel} \times 200 \text{ pixel}$  图像直接做 IISOMAP 耗时曲线,如图 4 所示,验证了耗时与光谱数成指数倍增长的推断,故不易直接将 IISOMAP 算法应用至大尺度高光谱图像降维。

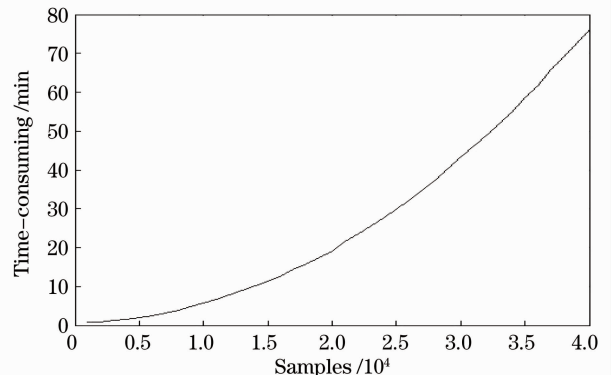


图 4 IISOMAP 耗时曲线

Fig. 4 IISOMAP time-consuming



## 4 IISOMAP-LLE 算法 —— 基于 IISOMAP 和 LLE 结合的大尺度高光谱降维算法

IISOMAP 可以突破内存限制对较大尺寸的高光谱数据进行降维, LLE 可以基于流形局部近似线性的特点进行权值重构嵌入, 因此基于“Think Globally, Fit Locally”的思想<sup>[20-23]</sup>, 本文提出的 IISOMAP-LLE 算法分两步实现: 1) 在大尺度高光谱图像中全局随机选取一定量的样本点作为 Backbone 样本集, 估算出 Backbone 的低维流形坐标系, 用  $B$  表示。如果 Backbone 选取合适,  $B$  就可以代表全局图像的低维流形坐标系(4.1 节中将给出证明)。由于图像为大尺度, 此 Backbone 样本集大小可能会超过 ISOMAP 一次可处理的最大限度, 因此使用 IISOMAP 进行估算。2) LLE 算法是根据自身点与点间距离最近的  $K$  个邻域点构建权值矩阵并进行低维嵌入, IISOMAP-LLE 算法则使用点与 Backbone 点间距离最近的  $K$  个邻域点构建权

值矩阵, 如果此处  $K$  邻域大小选取合适, 则图像的所有光谱都可以准确地嵌入至以  $B$  为基准的低维空间中(4.2 节中将给出详细步骤), 最后得到全局大尺度图像在低维空间中的表示。

### 4.1 使用 IISOMAP 估算大尺度高光谱图像的全局流形坐标系

首先以图 5(a) 所示的高光谱图像为例证明 IISOMAP-LLE 算法第一步, 随机采样的 Backbone 样本集的低维流形坐标系可以代表全局图像的低维流形坐标系。图 5(b) 中通过简单 ISODATA 聚类将图像分为 7 类地物, 用不同颜色划分为 ROIs, 类似噪声的黄色点即为随机选取的 Backbone, 其在原始 64 维空间中的分布如图 5(c) 所示, 其相对于 ROIs 在高维空间的分布见图 5(e) 中黄色 ‘+’ 号点, 可见随机选取的 Backbone 涵盖了所有特征的地物。通过 IISOMAP 降维后 Backbone 在本征 3 维空间中的分布如图 5(d) 所示, 这些黄色点即为内蕴在图 5(c) 所示的高维数据空间中的低维流形,

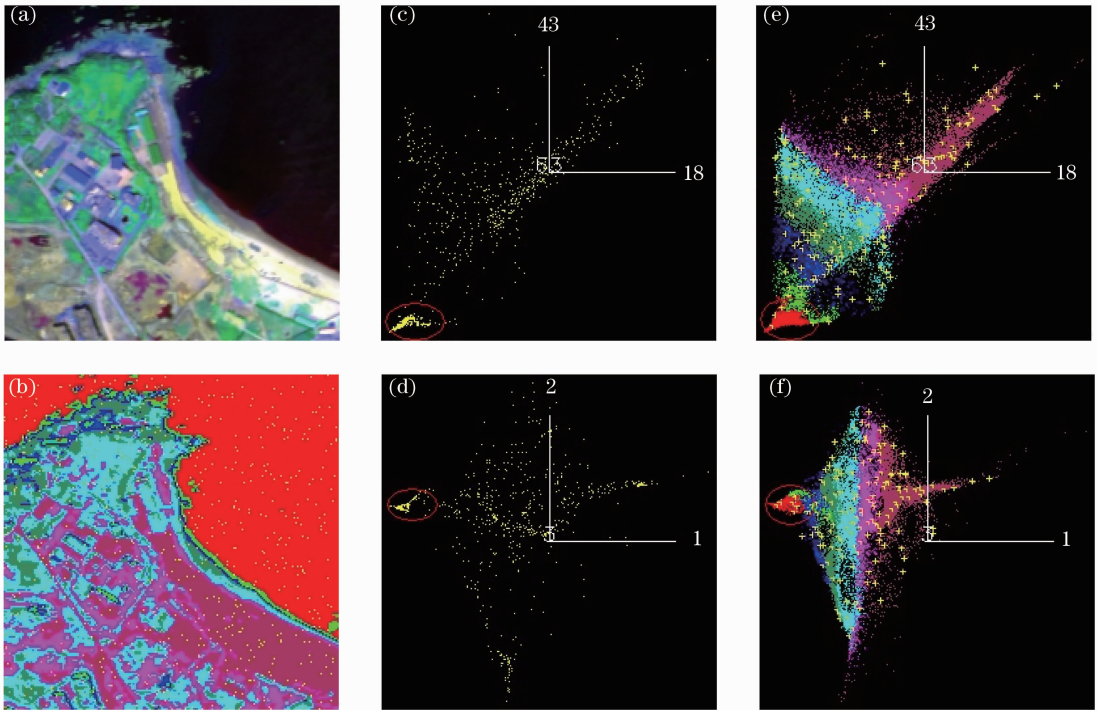


图 5 Backbone 的分布图。(a) 高光谱 18-43-63 波段合成伪彩色图; (b) Backbone (类似噪声的黄色点) 在 ROIs 中的随机分布; (c) Backbone 在高维空间中的分布; (d) Backbone 在低维空间中的分布; (e) 高维空间中 Backbone (黄色 ‘+’ 号点) 在 ROIs 中的分布; (f) 低维空间中 Backbone (黄色 ‘+’ 号点) 在 ROIs 中的分布

Fig. 5 Sketch map of Backbone. (a) Hyperspectral pseudo color image with 18-43-63 bands; (b) Backbone (yellow points like noise) is randomly distributed in ROIs; (c) distribution of Backbone in higher space; (d) distribution of Backbone in low-dimensional space; (e) higher space distribution of Backbone (yellow ‘+’) in ROIs; (f) low-dimensional space distribution of Backbone (yellow ‘+’) in ROIs

Backbone 的低维流形相对于低维全局流形的分布如图 5(f) 所示。由图 5 可知在低维空间中随机采样的 Backbone 也可以涵盖所有类型地物的 ROIs, 因此图 5(d) 所示的 Backbone 低维流形坐标系可以为算法第二步的 LLE 权值重构嵌入提供坐标系基准。

这里需要说明的有三点: 1) IISOMAP-LLE 算法第一步中由于 IISOMAP 算法增量式计算的特点并且 IISOMAP 中有一个顶点收缩步骤, 这个步骤可以对新增数据点的测地线距离进行测量而不占用存储空间, 所以可以对较大的 Backbone 进行计算, 但过大的 Backbone 采样率会增加计算耗时, 本文通过实验证明 Backbone 的采样率达到 2% 左右即可满足算法第二步中的低维嵌入。2) 本文中 Backbone 的选取策略是在全局图像中随机选取, 如图 5(b) 中类似噪声的黄色点所示, 这些样本点在高维空间的分布如图 5(c)、(e) 所示, 在低维空间中分布如图 5(d)、(f) 所示, 图中红色圆圈标记部分为海面 ROI, 可见同类地物在高维和低维空间中都呈云团状聚类分布。从海面 ROI 中采样的 Backbone 样本点因为 ROI 的一个子集, 因此也呈云团状分布, 但是高光谱数据的非线性结构主要蕴藏在这些云团之间。仅使用随机采样策略虽然覆盖了全局图像, 但可能会导致 Backbone 样本点过于集中在云团内部, 这样的采样策略是否最充分地发掘了高光谱数据的非线性结构有待进一步研究。3) 算法第 1) 步中 IISOMAP 算法的核心与 ISOMAP 相同, 第 2) 步中基于 Backbone 的 LLE 嵌入其实质也与 LLE 相同, 因此 ISOMAP 和 LLE 中关于  $K$  邻域大小选取的问题不可避免地需要进一步详细研究, 本文通过实验经验选取  $K_{\text{isomap}} = 30$ ,  $K_{\text{lle}} = 100$ 。

#### 4.2 以 Backbone 低维流形坐标系为基准在局部对光谱进行类 LLE 权值重构嵌入

前面已经证明 Backbone 的低维流形坐标系  $B$  可以为类 LLE 权值重构嵌入提供坐标系基准, 因此遍历所有  $N$  个图像光谱  $X_i$ , 与 LLE 算法权值重构类似, 通过下式在  $B$  中进行权值重构得到低维的 LLE 嵌入  $X'_i$ ,

$$X'_i = \sum_{j=1}^{K_{\text{lle}}} W_{ij} B_j, \quad (1)$$

式中  $B_j$  为  $X_i$  在  $B$  集中的  $K_{\text{lle}}$  个最近邻点, 如果要计算权值矩阵  $W$ , 需要定义一个误差函数并使之最小, 这里只需对高维  $X_i$  在低维  $B$  中重构, 所以定义为

$$\min \epsilon(W) = \sum_{i=1}^N \left| X_i - \sum_{j=1}^{K_{\text{lle}}} W_{ij} B_j \right|^2, \quad (2)$$

式中  $B_{ij}$  ( $j = 1, 2, \dots, K_{\text{lle}}$ ) 为  $X_i$  的  $K_{\text{lle}}$  个最近邻点,  $W_{ij}$  是  $X_i$  与  $B_{ij}$  之间的权值, 且要满足

$$\sum_{i=1}^{K_{\text{lle}}} W_{ij} = 1. \quad (3)$$

这里求取  $W$  矩阵, 需要构造一个关于  $X_i$  和  $B_j$  欧式距离  $d_j = X_i - B_j$  的局部协方差矩阵  $C_{jk}$ ,

$$C_{jk} = d_j \times d_k. \quad (4)$$

将(3)式,(4)式相结合, 采用拉格朗日乘子法, 即可求出局部最优化重建权值矩阵,

$$W_i = \frac{\sum_k C_{ik}^{-1}}{\sum_j \sum_k C_{jk}^{-1}}. \quad (5)$$

在实际运算中,  $C_{jk}$  可能是一个奇异矩阵, 此时必须对  $C_{jk}$  正则化。

这里需要说明的是, 在(4)式中  $d_j = X_i - B_j$  类似于 LLE 算法中为简化计算使用的欧式距离, 正如第 2 节中已经讨论过的, LLE 算法中如果使用和 ISOMAP 一样的测地线距离将会提高嵌入精度, 如图 1(b)、(c) 所示。所以为使算法第二步中光谱的嵌入更精准, (4)式中  $d$  可以用测地线距离计算, 这将会增大计算量, 并且 LLE 算法中使用测地线距离提高重构精度的初衷是因为没有一个低维流形坐标系基准, 需要在自身点与点之间用测地线距离来更好地保持内蕴的流形结构, 而此处 Backbone 低维流形坐标系已经为类 LLE 重构嵌入提供了坐标系基准。所以考虑到大尺度图像的计算量本文算法中仍使用欧式距离, 如何更高效地使用测地线距离代替欧式距离提高嵌入精度则可以作为进一步研究的课题。

## 5 实验及讨论

选取两种类型的高光谱数据作为实验对象, 分别为 1994 年 Moffett Field 地区矫正后  $500 \times 350 \times 56$  波段的 AVIRIS 影像和中国科学院上海光学精密机械研究所提供的 2008 年 5 月山东省烟台市附近海域  $400 \times 1200 \times 64$  波段的 OMIS-II 影像。实验所用计算机配备 Pentium(R) Dual-Core E5700 3.00 GHz 型中央处理器和 2 G 内存, 程序运行环境为 32 位 Windows 7 系统下的 Matlab 2011a 软件。

### 5.1 AVIRIS 数据实验

流形降维算法的优势在于可以更好地发掘出高光谱数据在高维空间中异物同谱聚类云团间的非线性结构, 为此本实验选取了 30 类非线性结构较多的 ROIs 进行类间可分性分析, 如图 6(a) 中的彩色区

域,这些 ROIs 在原始高维空间中的分布如图 7(a) 所示。由图 6、图 7 可知这些 ROIs 在高维流形上呈连续分布,其中大部分在高维空间中的分布是重合的,为衡量这些 ROIs 的类间可分性,实验选取 JM 距离<sup>[11,16-18]</sup>作为可分性指标, JM 距离  $V_{JM}$  越大则类间可分性越好,  $V_{JM}$  取值范围为  $[0, 2]$ , 实际应用

中分类要求  $V_{JM} > 1.85$ , 需要说明的是本实验计算 JM 距离时假定本征维数<sup>[24]</sup>为 9。IISOMAP-LLE 算法其他参数为  $K_{isomap} = 30, K_{lle} = 100$ , Backbone 的像素数为  $60 \text{ pixel} \times 60 \text{ pixel}$ , 对应的 Backbone 的采样率为 2.06%。

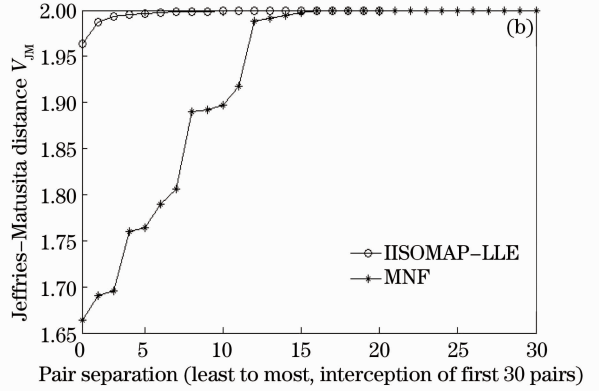
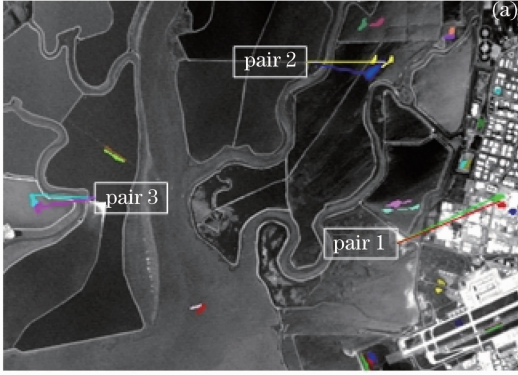


图 6 (a) ROIs 示意图; (b) IISOMAP-LLE 与 MNF 结果的类间可分性对比

Fig. 6 (a) ROIs; (b) difference of JM distance (least to most) of first 30 points between IISOMAP-LLE and MNF

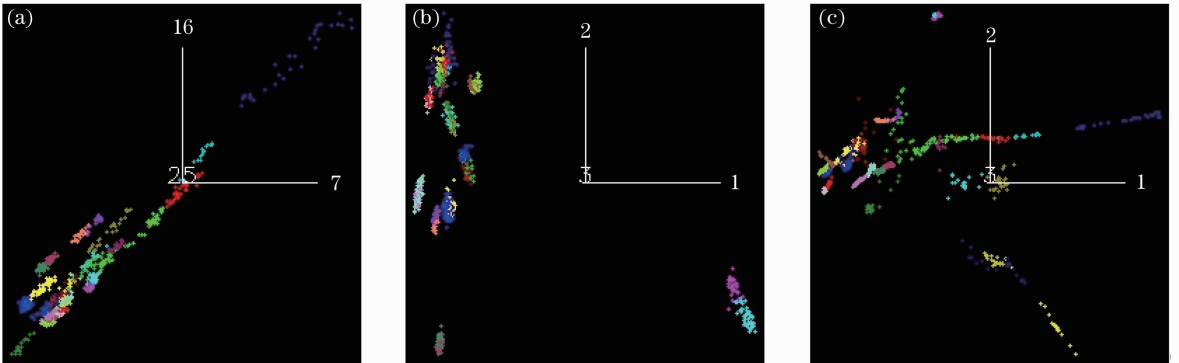


图 7 ROIs 的散点图。(a) ROIs 在原始高维空间中的分布; (b) MNF 降维后 ROIs 在低维空间中的分布; (c) IISOMAP-LLE 降维后 ROIs 在低维空间中的分布

Fig. 7 Scatter diagram of ROIs. (a) ROIs in higher space; (b) ROIs in low-dimension space of MNF; (c) ROIs in low-dimension space of IISOMAP-LLE

MNF 和 IISOMAP-LLE 两种算法降维后前三波段伪彩色图分别如图 8(a)、(b) 所示。实验选取 30 类 ROIs 的类间 JM 距离从小到大排列曲线如图 6(b) 所示, 加星号的曲线为 IISOMAP-LLE 算法结果, 其最小类间可分性  $\min(V_{JM_j}) = 1.9011$ , 远高于 MNF 的  $\min(V_{JM_j}) = 1.6634$ , 并且曲线较 MNF 更快速收敛至  $V_{JM} = 2$ 。因此对于高光谱图像中的非线性结构, IISOMAP-LLE 降维后的类间可分性远远优于 MNF。图 7(b)、(c) 分别为 MNF 和 IISOMAP-LLE 降维后 ROIs 在低维空间中的分布, 由图 7(b) 可知, MNF 只能将高维空间中异物同

谱成云团分布的线性结构在低维空间中区分开, 但是对于云团之间或者云团内部的非线性结构在低维空间中仍混为一团, 而图 7(c) 中 IISOMAP-LLE 算法可以很好地将这些非线性结构在低维流形中区分开, 这些非线性结构的最小类间可分性  $\min(V_{JM_j}) = 1.9011$  也达到 1.85 的分类要求。实验中对 3600 点 Backbone 用 IISOMAP 算法估算全局流形坐标系耗时为 60.7 s, 平均每光谱耗时为 16.9 ms, 对全局图像进行类 LLE 权值重构嵌入耗时为 609.2 s, 平均每光谱耗时为 3.5 ms, 所以本实验中对  $500 \times 350 \times 56$  波段的 AVIRIS 影像进行 IISOMAP-LLE 降维总



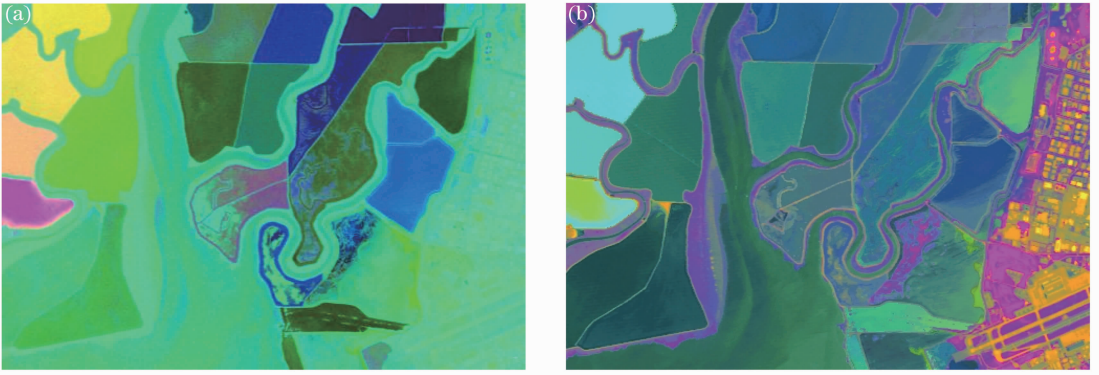


图 8 Moffett Field 地区  $500 \times 350 \times 56$  波段 AVIRIS 影像降维后前三波段伪彩色图。(a) MNF; (b) IISOMAP-LLE

Fig. 8 Pseudo color mage with 1-2-3 bands for AVIRIS of Moffett Field ( $500 \times 350 \times 56$  bands). (a) MNF; (b) IISOMAP-LLE  
耗时为 669.9 s, 平均每光谱耗时为 3.8 ms。

### 5.2 OMIS-II 数据实验

实验中 OMIS-II 影像的总光谱数为  $4.8 \times 10^5$ , 选取  $K_{isomap} = 30$ ,  $K_{lle} = 100$ , Backbone 的像素数为

100 pixel  $\times$  100 pixel, 对应 Backbone 采样率为 2.08%。MNF 降维后前三波段伪彩色图如图 9(a) 所示, 本文 IISOMAP-LLE 算法降维结果如图 9(b) 所示。

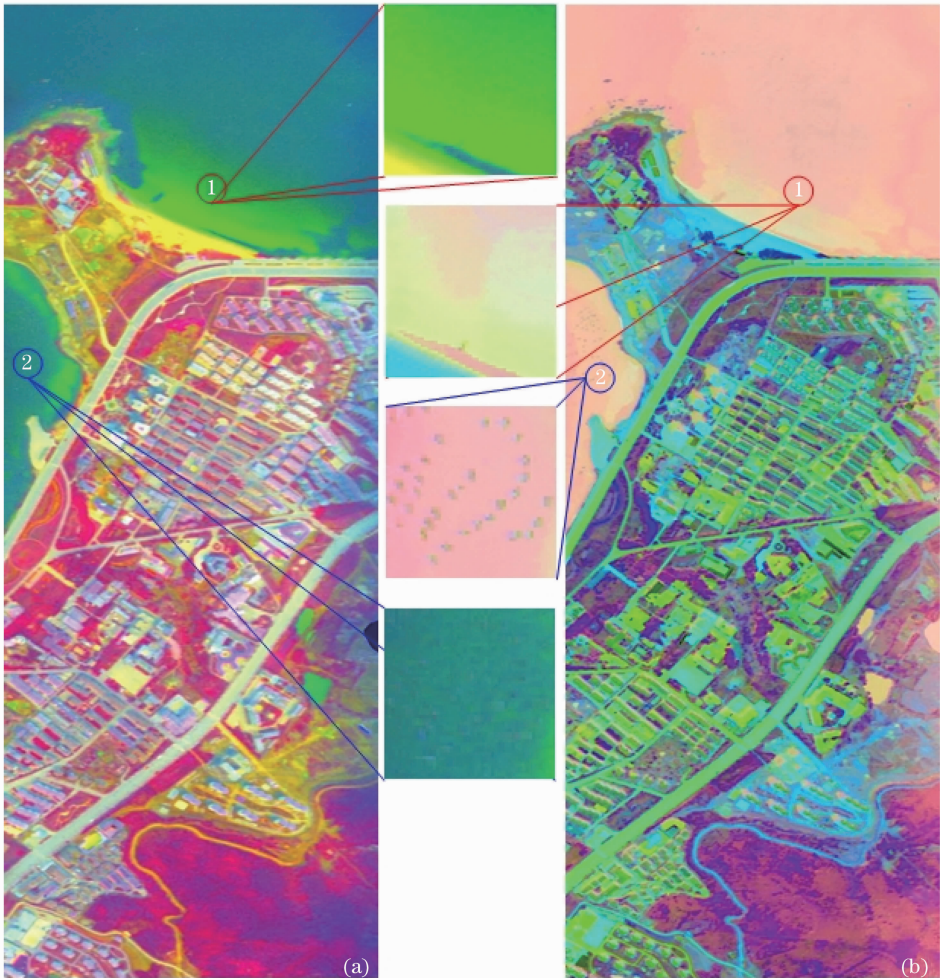


图 9 2008 年 5 月中国烟台附近海岸 OMIS-II ( $400 \times 1200 \times 64$  波段) 高光谱图像降维后前三波段伪彩色图。

(a) MNF; (b) IISOMAP-LLE

Fig. 9 Pseudo color image with 1-2-3 bands for OMIS-II hyperspectral scene ( $400 \times 1200 \times 64$  bands) of Yantai, China, May, 2008. (a) MNF; (b) IISOMAP-LLE

对比图 9(a)、(b)可知,图 9(b)中 IISOMAP-LLE 的降维结果图在地物的细节轮廓部分较图 9(a)中 MNF 更精细,这是因为非线性结构多隐藏在相邻的异物同谱云团之间,即图中较明显分类之间的过渡区域,通过非线性流形降维算法可以提高高维空间中呈非线性分布地物之间的类间可分性。高光谱图像中海岸线附近蕴藏非线性结构较多,图 9 中在海面选取①②两处 ROIs,由放大图像和图 10 散点图可知:对于①, IISOMAP-LLE 可以发掘出浅海海域蕴藏三类不同海水反射特征,这可能是由于此处海水深度有剧烈变化或者海水内藻类分布不同造成的,还有可能是工厂或生活污水的排放造成。可以从图 9 中看出,在①②周围更大面积海域也有明显颜色变化,这种变化最可能是海水深度变化造成的,这三类地物见图 10(a)中红绿蓝三色 ROIs。图 10(b)、(c)分别为其在 MNF 和 IISOMAP-LLE 低维空间中的分布。图 10(b)中三类地物间 JM 距

离分别为 1.6372、1.9770 和 1.9781,其中红色‘·’点与绿色‘×’点间的可分性最差,  $V_{JM} = 1.6372$ ,图 10(c)中对应 JM 距离为 1.9999、1.9999 和 2.0000;对于②,从图 9 中②处的放大图像中可以明显看出 IISOMAP-LLE 可以发现海面上呈点状分布的目标,这些目标可能是船只或者岛礁;图 10(d)中黄色 ROI 为海上目标,蓝绿色 ROI 为目标附近海水,可以从 MNF 和 IISOMAP-LLE 的散点图 10(e)、(f)对比看出 IISOMAP-LLE 算法可以较 MNF 更好地提高分类准确度;图 10(e)中两类地物  $V_{JM} = 1.6446$ ,图 10(f)中  $V_{JM} = 1.9997$ 。综上所述 IISOMAP-LLE 可以从 OMIS-II 高光谱数据中发掘出 MNF 不能发现的一些非线性地物特征,尤其是海岸线附近非线性结构较多的地方,可以为海面目标识别、海水深度测量、藻类分布或者沿海排污治理等工作提供更多的参考信息。

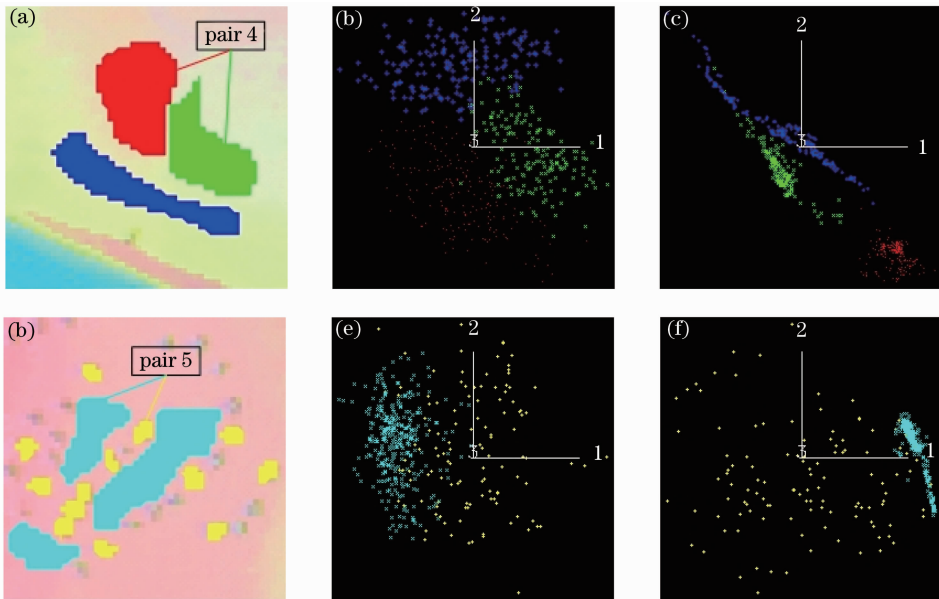


图 10 (a)图 9 中局部①中的 ROIs 及其  $n$  维散点图; (b) MNF; (c) IISOMAP-LLE; (d)图 9 中局部②中的 ROIs 及其  $n$  维散点图; (e) MNF; (f) IISOMAP-LLE

Fig. 10 (a) ROIs of zoom ① in Fig. 9 and its  $n$ -dimensional scatter diagram; (b) MNF; (c) IISOMAP-LLE;

(d) ROIs of zoom ② in Fig. 9 and its  $n$ -dimensional scatter diagram; (e) MNF; (f) IISOMAP-LLE

实验中 IISOMAP-LLE 算法估算  $10^4$  个 Backbone 样本点的流形坐标系耗时为 540.7 s,平均每光谱耗时为 205.8 ms,类 LLE 嵌入耗时为 6802.7 s,平均每光谱耗时为 12.4 ms,算法处理  $400 \times 1200 \times 64$  波段 OMIS-II 影像总耗时 7343.4 s,平均每光谱总耗时 13.1 ms。

### 5.3 JM 距离与本征维数关系实验

最后需要再次补充说明的是 AVIRIS 和

OMIS-II 实验中关于 JM 距离的结果都是在本征维数为 9 的假设基础上计算得到的,为了证明本征维数不影响实验中 IISOMAP-LLE 降维结果的 JM 可分性优于 MNF 的结论,图 11 给出本征维数由 2(计算 JM 要求的最小维数)到 15(前 15 维内 IISOMAP-LLE 结果的 JM 距离已经达到最大值 2)变化时对应类间 JM 距离对应的变化曲线。



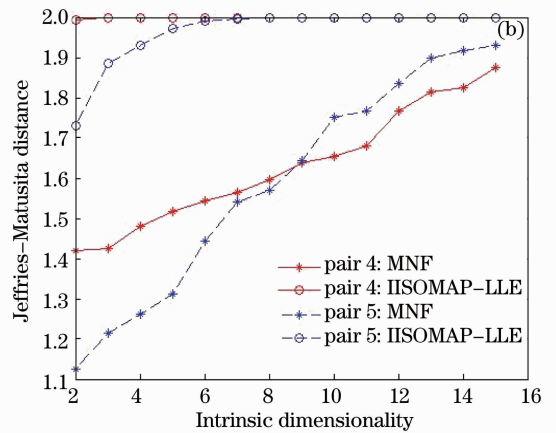
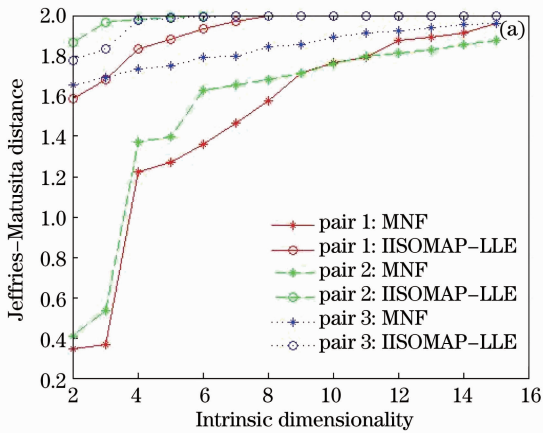


图 11 不同本征维数下 JM 距离的变化曲线。(a)图 6 中 pair 1-2-3; (b)图 10 中 pair 4-5

Fig. 11 JM distance under different intrinsic dimensionalities. (a) Pair 1-2-3 in Fig. 6; (b) pair 4-5 in Fig. 10

图 11(a)中红绿蓝三色曲线分别为 AVIRIS 实验中图 6 中 pair 1-2-3 的 JM 距离随本征维数的变化曲线,图 11(b)中红蓝两色曲线分别为 OMIS-II 实验中图 10 中 pair 4-5 的 JM 距离随本征维数的变化曲线,图中加星的曲线为在 MNF 降维结果中计算结果,加圈的曲线为 IISOMAP-LLE 的。这 5 对地物都是高光谱数据中不易区分的,在高维空间中具有非线性分布结构的地物,从 5.1 和 5.2 节可知 IISOMAP-LLE 算法可以较 MNF 更好地区分此类非线性结构,ENH-ISOMAP 算法<sup>[11]</sup>虽然也可以很好地区分高光谱数据中的非线性结构,但由于其某些缺陷导致当本征维数选取较大时 MNF 结果的类间可分性反而会稍优于 ENH-ISOMAP。Bachmann 等<sup>[20]</sup>在文中分析其原因为由于 ENH-ISOMAP 中使用了 Landmark 点加快计算速度,如果 Landmark 点选取过少或没有覆盖整个流形的全局轮廓,就将导致后续分类精度的下降,即类间可分性指标 JM 距离的下降。而本文提出的 IISOMAP-LLE 算法在估算全局流形坐标系时虽然使用带 Landmark 点的 IISOMAP 算法加速计算,但由于算法是增量式地计算,所以 Landmark 点只用于对初始较小数据集的计算中。而 IISOMAP-LLE 算法中使用的 IISOMAP 初始数据集大小仅为 400,所以很好地避免了 ENH-ISOMAP 算法中因 Landmark 点选取不当造成的本征维数较大时分类精度反而低于 MNF 的缺点。

## 6 结 论

提出了一种基于 IISOMAP 和 LLE 的改进的大尺度高光谱流形降维算法,通过与 MNF 对比的

AVIRIS 和 OMIS-II 数据实验验证了 IISOMAP-LLE 算法的可行性和优越性,并证明算法避免了 ENH-ISOMAP 算法中因 Landmark 点选取不当造成的本征维数较大时分类精度反而低于 MNF 的缺点。

虽然 IISOMAP-LLE 算法中使用 IISOMAP 估算全局流形坐标系可以减少短路边的产生,但 IISOMAP 不能回避同 ISOMAP 一样的最优  $K$  邻域选取问题;IISOMAP-LLE 使用类似 LLE 的权值重构嵌入,其  $K$  邻域选取较大时可以提高嵌入精度,但也不能回避最优  $K$  邻域选取问题,用测地线距离代替欧氏距离也可以提高嵌入精度,但会增加计算量;IISOMAP-LLE 算法并未解决大尺度高光谱数据本征维数的选取问题,但相比已有流形算法只能处理小块图像而言,IISOMAP-LLE 为使用流形算法估算大尺度高光谱图像本征维数提供了基础。以上三点将成为继续研究和改进的方向。

## 参 考 文 献

- 1 Tong Qingxi, Zhang Bing, Zheng Lanfen. Hyperspectral Remote Sensing [M]. Beijing: China Higher Education Press, 2006.  
童庆禧,张兵,郑兰芬. 高光谱遥感[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006.
- 2 A N Gorban, Balazs Kegl, D C WunschII, *et al.*. Principal Manifolds for Data Visualization and Dimension Reduction [M]. Berlin: Springer-Verlag Berlin and Heideberg GmbH & Co. K, 2007.
- 3 Du Peijun, Wang Xiaomei, Tan Kun, *et al.*. Dimensionality reduction and feature extraction from hyperspectral remote sensing imagery based on manifold learning [J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University, 2011, 36(2): 148-152.  
杜培军,王小美,谭琨,等. 利用流形学习进行高光谱遥感影像的降维与特征提取[J]. 武汉大学学报·信息科学版, 2011, 36(2): 148-152.
- 4 J B Tenenbaum, V De Silva, J C Langford. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction [J]. Science, 2000, 290(5500): 2319-2323.

- 5 S T Roweis, L K Saul. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding [J]. *Science*, 2000, 290(5500): 2323—2326.
- 6 Y Chen, M M Crawford, J Ghosh. Applying nonlinear manifold learning to hyperspectral data for land cover classification [C]. *International Geoscience and Remote Sensing Symposium*, Seoul, 2005, 6: 4311.
- 7 D Guangjun, Z Yongsheng, J Song. Dimensionality reduction of hyperspectral data based on ISOMAP algorithm [C]. *ICEMI'07. 8th International Conference on Electronic Measurement and Instruments*, IEEE, Xi'an, 2007: 3-935—3-938.
- 8 X R Wang, S Kumar, T Kaupp, *et al.*. Applying ISOMAP to the learning of hyperspectral image [C]. *Proceedings of the 2005 Australasian Conference on Robotics & Automation*. Australian Robotics & Automation Association, Sydney, 2005.
- 9 C M Bachmann, T L Ainsworth, R A Fusina, *et al.*. Manifold coordinate representations of hyperspectral imagery; improvements in algorithm performance and computational efficiency [C]. *Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS), 2010 IEEE International*. IEEE, Honolulu, 2010: 4244—4247.
- 10 C M Bachmann, T L Ainsworth, R A Fusina. Exploiting manifold geometry in hyperspectral imagery [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2005, 43(3): 441—454.
- 11 C M Bachmann, T L Ainsworth, R A Fusina. Improved manifold coordinate representations of large-scale hyperspectral scenes [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2006, 44(10): 2786—2803.
- 12 M H C Law, A K Jain. Incremental nonlinear dimensionality reduction by manifold learning [J]. *Pattern Analysis and Machine Intelligence*, IEEE Transactions on, 2006, 28(3): 377—391.
- 13 H C Law. *Clustering, Dimensionality Reduction, and Side Information* [D]. Michigan: Michigan State University, 2006.
- 14 D Zhao, L Yang. Incremental isometric embedding of high-dimensional data using connected neighborhood graphs [J]. *Pattern Analysis and Machine Intelligence*, IEEE Transactions on, 2009, 31(1): 86—98.
- 15 D K Agrafiotis, H Xu. A self-organizing principle for learning nonlinear manifolds [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2002, 99(25): 15869—15872.
- 16 V A Tolpekin, A Stein. Quantification of the effects of land-cover-class spectral separability on the accuracy of Markov-random-field-based superresolution mapping [J]. *Geoscience and Remote Sensing*, IEEE Transactions on, 2009, 47(9): 3283—3297.
- 17 T Murakami, S Ogawa, N Ishitsuka, *et al.*. Crop discrimination with multitemporal SPOT/HRV data in the Saga Plains, Japan [J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2001, 22(7): 1335—1348.
- 18 S M Davis, D A Landgrebe, T L Phillips, *et al.*. *Remote sensing; the quantitative approach* [J]. New York: McGraw-Hill International Book Co., 1978. 405 p., 1978, 1.
- 19 M L Davison. *Multidimensional Scaling* [M]. New York: Wiley, 1983.
- 20 V Silva, J B Tenenbaum. Global versus local methods in nonlinear dimensionality reduction [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2002, 15: 705—712.
- 21 L K Saul, S T Roweis. Think globally, fit locally: unsupervised learning of low dimensional manifolds [J]. *The Journal of Machine Learning Research*, 2003, 4: 119—155.
- 22 T Friedrich. *Nonlinear dimensionality reduction-locally linear embedding versus isomap* [C]. The University of Sheffield, 2004.
- 23 M Bernstein, V De Silva, J C Langford, *et al.*. *Graph Approximations to Geodesics on Embedded Manifolds* [R]. Stanford: Stanford University, 2000.
- 24 E Levina, P J Bickel. Maximum likelihood estimation of intrinsic dimension [J]. *Ann Arbor MI*, 2004, 48109: 1092.

栏目编辑: 张 腾