

高光谱图像 Pareto 优化稀疏解混

徐 夏¹, 张 宁², 史振威¹, 谢少彪³, 齐乃明³

(1. 北京航空航天大学 宇航学院 图像处理中心, 北京 100191;
2. 上海航天电子技术研究所, 上海 201109; 3. 哈尔滨工业大学 航天学院, 黑龙江 哈尔滨 150001)

摘 要: 高光谱解混是学术界的一个难题, 稀疏高光谱解混指的是利用已知光谱库进行解混, 旨在从先验光谱库中找到一些可以表征图像的数个纯光谱向量作为高光谱图像的端元, 并利用这些端元求解相应的端元丰度, 这是一个 NP 难的组合优化问题。目前多通过将 L0 范数凸松弛为 L1 范数进行稀疏解混, 但该方法得到的仅仅是近似解。文中提出了一种基于 Pareto 优化的稀疏解混算法(ParetoSU), 将稀疏解混问题转化为一个两目标优化问题, 其中一个优化目标是建模误差, 另一个目标是端元稀疏度。ParetoSU 直接解决稀疏解混中的组合优化问题, 不需要对 L0 范数进行近似。最后利用仿真数据验证了该解混算法的有效性。

关键词: 高光谱图像; 稀疏解混; Pareto 优化

中图分类号: TP751 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201847.0226002

Sparse unmixing of hyperspectral images based on Pareto optimization

Xu Xia¹, Zhang Ning², Shi Zhenwei¹, Xie Shaobiao³, Qi Naiming³

(1. Image Processing Center, School of Astronautics, Beihang University, Beijing 100191, China;
2. Shanghai Aerospace Electronic Technology Institute, Shanghai 201109, China;
3. School of Astronautics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract: Hyperspectral unmixing is a difficult problem in academia. Sparse hyperspectral unmixing uses priori spectral library, aiming at finding several pure spectral signatures to express hyperspectral images and computing corresponding abundance fractions. This is NP-hard to solve. Convex relaxation for L0 norm as L1 norm is a common approach to solve the sparse unmixing problem, but only approximation results can be achieved. A Pareto optimization based sparse unmixing algorithm was proposed(ParetoSU). ParetoSU firstly transformed sparse unmixing to a bi-objective optimization problem. One of the two objectives was the modelling error and the other one was the sparsity of endmembers. ParetoSU can solve the sparse unmixing problem without any approximation of L0 norm. At last, synthetic data were used to test the performance of ParetoSU.

Key words: hyperspectral images; sparse unmixing; Pareto optimization

收稿日期: 2017-08-05; 修订日期: 2017-10-03

基金项目: 国家自然科学基金(60975003, 61671037); 上海航天科技基金(SAST2016090)

作者简介: 徐夏(1993-), 女, 博士生, 主要从事高光谱图像解混和分类方面的研究。Email: xuxia@buaa.edu.cn

导师简介: 史振威(1977-), 男, 教授, 博士, 主要从事高光谱图像处理和机器学习相关方面的研究。Email: shizhenwei@buaa.edu.cn

0 引言

高光谱遥感是遥感科学与技术近几十年发展的一个前沿领域,相比于普通意义上的图像,高光谱图像具有很高的光谱分辨率。高光谱传感器可以以非常小的波段采样间隔从电磁光谱的紫外到短波红外区域采集数十到几百个近似连续的图像数据,它们形成一个高维的数据立方体。像元是高光谱图像最基本的构成元素,其本质是一条具有约二百左右量级窄波段信息的光谱信号。高光谱数据最主要的特点是不仅具有传统遥感所拥有的地表空间信息还包含它们没有的丰富光谱信息。因此,高光谱遥感能够检测到在传统遥感宽波段图像中检测不到的地物^[1]。由于高光谱传感器的空间分辨率一般不高且不同的物质会结合成一种均匀的物质,高光谱图像中的一个像元中通常包含了多种物质的光谱,这样的像元称为混合像元,高光谱图像应用中的一个潜在难题是如何把这样的混合像元分解为纯物质的光谱(端元)和它们相应的比例(丰度),这个分解过程就叫做光谱解混^[2]。高光谱图像解混的主要应用包括:图像融合、异常检测和目标识别。由于可以在不同情形下简单灵活使用,线性模型被广泛用于光谱解混^[3],该模型假设每个混合像元都是场景中端元的线性组合,而权重就是像元中各个端元对应的丰度。

早期解混算法主要集中在三个方向:基于几何学的方法、基于统计学的方法和基于非负矩阵分解的方法。然而,虽然这些方法不需要任何先验信息,可以直接从高光谱图像中直接提取端元,但是它们中有些方法可能提取出没有物理意义的虚拟端元,其它的方法则假设每个端元在高光谱图像中有至少一个对应的纯像元存在(该假设在真实图像中很难成立)^[4-5]。

为了克服解混算法的上述局限性,近年来学者们提出了一种利用日益公开的光谱库作为先验的解混方法^[6]。该方法假设存在一个含有大量纯物质光谱信号的光谱库,而高光谱图像中的端元都可以在里面找到。则解混问题就变为找到该光谱库中最佳的光谱信号子集来表示像元。由于光谱库中的光谱向量的个数远远大于高光谱图像中端元的数目,这类解混方法所求得解是稀疏的,因此被称为稀疏解混^[7-9]。

目前常用的稀疏解混算法主要包括两大类:基

于凸松弛和贪婪算法。基于凸松弛的方法把 L0 范数的组合优化问题近似为 L1 范数凸优化问题,这种近似方法使得 NP-hard 的非凸优化混问题转化为方便求解的凸优化问题,现有文献多采用交替方向乘法(ADMM)对求解^[8],但凸松弛求得的仅仅是稀疏解混问题的近似解,并且所求最优解的稀疏性不够,这种方法具有一定局限性,因此还有学者们提出基于贪婪算法的稀疏解混方法,贪婪算法的主要思想是在一个给定的可以衡量相关性的指标下从光谱库中挑选可以用于信号重构的成员,在每次迭代过程中提取和当前残差相关性最高的光谱信号作为候选端元,数次重复此步骤可以得到对输入信号的稀疏复原,贪婪算法旨在启发式地在每一步中寻找局部最优解来最终求得全局最优解^[9],对于一些问题虽然不能求得全局最优解,但能在有效的时间内得到接近全局解的局部解。

基于现有研究现状,文中提出一种基于 Pareto 最优的高光谱图像稀疏解混算法 ParetoSU,该算法的灵感来源于 Pareto 最优对最优子集的选择^[10],所选的最优子集能够满足一些设定的优化指标,比如拟合误差最小等,ParetoSU 将高光谱稀疏解混问题转化为一个两目标优化问题,一个优化目标为建模误差,另一个优化目标为所选光谱特征的稀疏度,为直接求解基于 L0 范数的组合优化问题,对光谱库中的每条光谱分配二进制码,通过二进制码的翻转完成最优光谱库子集的确定,两个优化目标在寻优过程中相互制约,每次迭代过程中生成的新个体,通过 Pareto 占优比较,更新候选解,总的目标为用最少的光谱特征表述高光谱图像。

1 稀疏解混的数学描述

稀疏解混模型假设每个像元的观测光谱都可以表示成已知光谱库中少量光谱向量的线性组合。假设 $A \in R^{L \times m}$ 是光谱库,其中 L 表示波段数, m 表示光谱库中光谱的个数。那么稀疏解混模型可以表示为:

$$y = \sum_{i=1}^m a_i x_i + n = Ax + n \quad (1)$$

式中: $y \in R^L$ 是对应于一个具有 L 个波段的混合像元光谱向量; $x \in R^m$ 是对应于已知光谱库 A 的丰度向量; $n \in R^L$ 是噪声向量。出于物理上的约束,高光谱

图像中的每个像元中的丰度应该满足如下非负性和和为一的限制:

$$\begin{aligned} \text{ANC: } x_i &\geq 0, i=1, 2, \dots, m \\ \text{ASC: } \sum_{i=1}^m x_i &= 1 \end{aligned} \quad (2)$$

式中:ANC 约束丰度向量的每个元素 x_i 都不能小于 0;ASC 约束单个像素对所有光谱特征的丰度之和为 1, 但是因为在真实高光谱图像中存在光谱变换,公式(3)中的和为一约束应该被替换为所谓的“广义和为一约束”^[3]。前面已经提到,由于光谱库中光谱信号的个数远远大于高光谱图像中存在的端元个数,丰度向量 x 是稀疏的。因此,稀疏解混需要求解的优化问题可以表示为:

$$\min \|x\|_0 \quad \text{s.t. } \|y-Ax\|_2 \leq \delta, x \geq 0 \quad (3)$$

式中: $\|x\|_0$ 表示丰度向量 x 的 L0 范数,即向量 x 中的非零元素的个数, $\delta \geq 0$ 为建模误差的容忍度。为了提高算法的效率,并且多个像素很可能共享相同的端元,目前对高光谱图像解混时通常对整幅图像进行处理,原稀疏解混优化问题转化为:

$$\min \|X\|_{\text{row-}0} \quad \text{s.t. } \|Y-AX\|_F \leq \delta, X \geq 0 \quad (4)$$

式中: $Y \in R^{L \times n}$ 是对应于幅具有 L 个波段 n 个像元的图像, $Y \in R^{L \times n}$ 是对应于已知光谱库 A 的丰度矩阵。

不幸的是,上述稀疏解混优化问题是一个 NP 难问题,很难使用常用的优化算法进行求解。因此,有学者提出将 x 的 L0 范数松弛为 L1 范数,将 $\|x\|_1$ 作为 $\|x\|_0$ 的近似,这样原非凸优化问题可近似为如下凸优化问题:

$$\min \|x\|_1 \quad \text{s.t. } \|y-Ax\|_2 \leq \delta, x \geq 0 \quad (5)$$

进一步转化为带有稀疏正则项的优化问题:

$$\min \|y-Ax\|_2 + \lambda \|x\|_1, x \geq 0 \quad (6)$$

该优化问题可用交替方向乘法(ADMM)求解^[5]。但基于凸松弛的稀疏解混算法也具有一定的局限性,因为 L1 范数只是对 L0 范数的有限近似,所求最优解并不能达到很好的稀疏性。因此,有必要继续探索直接求解原稀疏解混问题的方法。

2 基于 Pareto 最优的稀疏解混算法

近年来提出一种基于 Pareto 优化的子集提取算法(POSS)^[10],旨在从一系列变量中选取一个小的子集,该子集可以很好地优化一些目标函数。该方法已经从理论上和实际中验证能够在最大主迭代次数内选到最优的子集,POSS 将一系列的变量进行二进制

编码为“0”和“1”,标注为“1”的变量为候选变量,利用随机翻转策略对这些编码进行选择。受 POSS 的子集选择思想启发,公式(4)中的稀疏解混问题被转化为下式中的两目标优化问题:

$$\begin{aligned} \min_{A_s \in A} f(A_s) &= [f_1(A_s), f_2(A_s)] \\ f_1(A_s) &= \begin{cases} +\infty & |A_s|=0 \text{ 或 } \geq 2k \\ \|Y-A_s X\|_F & \text{其他情况} \end{cases} \\ f_2(A_s) &= |A_s| \end{aligned} \quad (7)$$

式中: $f_1(A_s)$ 为模型误差; $f_2(A_s)$ 为端元稀疏度; S 为被选中的候选端元的索引,如果 A_i 的二进制码为 1,则该光谱向量被选中。基于 Pareto 最优的稀疏解混算法流程如下:

初始化

光谱库中所有光谱特征为 $A=\{A_1, A_2, \dots, A_m\}$,最大主迭代次数为 T ,端元稀疏度为 k ,初始化候选端元素引为 $S=\{0\}^m$,候选解的集合为 $P=\{S\}$ 。

迭代过程

置 $t=0$;

While $t < T$,从 P 中随机选择一个候选解 s 。

S 中每一个元素都以 $1/m$ 的概率随机翻转,并以 $1-1/m$ 的概率保持不变,得到新的解 s' 。

基于 Pareto 最优更新 P :如果 $z \in P, f_1(z) < f_1(s') \wedge f_2(z) \leq f_2(s')$ 或

$f_1(z) \leq f_1(s') \wedge f_2(z) < f_2(s')$, 则 $Q=\{z \in P | f_1(z) \leq f_1(s') \wedge f_2(z) \leq f_2(s')\}$, $P=(P \setminus Q) \cup \{s'\}$, 置 $t=t+1$

返回 $\text{argmin}_{f_1} (A_s)$

ParetoSU 中的随机翻转策略示意图如图 1 所示。

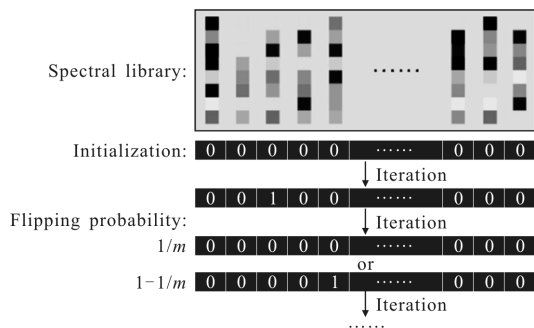


图 1 ParetoSU 中的随机翻转策略

Fig.1 Randomly flipping strategy of ParetoSU

3 仿真实验

3.1 参数设置

ParetoSU 中最重要的参数为稀疏度 k ,通常情况

下它是未知的,文中采用 HySime 算法预先得到图像的端元稀疏度,进一步进行稀疏解混。

3.2 评价标准

均方根误差(Root-Mean-Square Error, RMSE)被用来评价丰度估计的好坏。对于第 i 个端元, RMSE 定义为:

$$RMSE_i = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{i,j} - \hat{x}_{i,j})^2} \quad (8)$$

式中: $x_{i,j}$ 为第 j 个像素的第 i 个端元丰度的真实值; $\hat{x}_{i,j}$ 为响应的估计值; n 为图像的像素数, 通过计算所有像素的 RMSE 值得均值来评价算法的好坏, 总体来说, RMSE 越小, 估计值就越接近真实值。

3.3 实验结果

在这一节中, 探索 ParetoSU 在解混应用中的潜力。文中用一个仿真数据来测试不同算法的表现。所有的算法都考虑了丰度非负的约束。用于比较的算法为 SUnSAL^[11], SUnSAL-TV^[12], SMP^[13]。所有仿真实验中用的光谱库都是 USGS(<http://speclab.cr.usgs.gov/spectral-lib.html>) 数字光谱库, 498 种材料的反射值在 $0.4 \sim 2.5 \mu\text{m}$ 之间的光谱上均匀采样成 224 个光谱波段 $A \in R^{224 \times 498}$ 。在不同信噪比, $\text{SNR} = 10 \log_{10}(\|Ax\|^2 / \|n\|^2)$ (20, 30 dB), 不同端元数(num=3~10)的情形下评价不同稀疏解混算法的好坏。两组实验的图像大小均为 64×64 , 仿真数据的具体制作过程见参考文献[14]。此实验中的光谱库为 USGS 中随机抽取的 240 个光谱向量, 表 1~2 列出了最终的 RMSE 实验结果, 图 2

表 1 仿真数据在 20 dB 相关噪声下, 不同端元数对应的 RMSE 值

Tab.1 RMSE results of synthetic data under 20 dB noise with different endmember number

Number of endmember	SUnSAL	SUnSAL-TV	SMP	ParetoSU
3	0.230 2	0.241 0	0.062 6	0.062 6
4	0.201 5	0.156 1	0.102 8	0.070 4
5	5	0.122 0	0.085 1	0.067 5
6	0.143 4	0.113 3	0.069 7	0.069 7
7	0.279 4	0.248 1	0.239 7	0.192 7
8	0.154 1	0.118 2	0.104 1	0.075 7
9	0.132 3	0.107 5	0.129 0	0.075 9
10	0.124 4	0.099 5	0.106 7	0.069 8

表 2 仿真数据在 30 dB 相关噪声下, 不同端元数对应的 RMSE 值

Tab.2 RMSE results of synthetic data under 30 dB noise with different endmember number

Number of endmember	SUnSAL	SUnSAL-TV	SMP	ParetoSU
3	0.121 2	0.072 8	0.020 5	0.020 5
4	0.104 8	0.104 8	0.029 6	0.023 1
5	0.082 4	0.045 7	0.030 4	0.022 5
6	0.075 0	0.043 7	0.0229 2	0.023 8
7	0.097 2	0.051 9	0.053 4	0.023 7
8	0.095 2	0.052 4	0.033 6	0.028 0
9	0.080 9	0.045 2	0.045 9	0.027 4
10	0.077 5	0.042 2	0.069 2	0.024 9

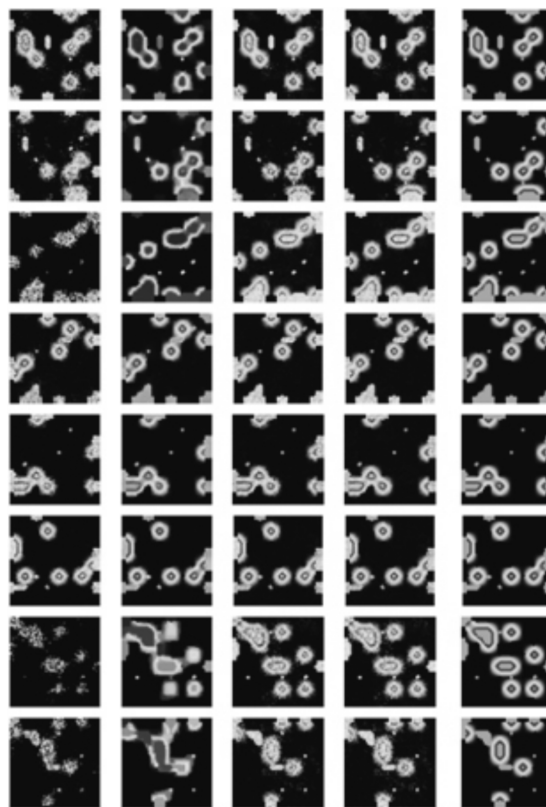


图 2 仿真数据在 30 dB 相关噪声下, 端元数为 8 时各个端元的丰度结果图

Fig.2 Abundance maps of synthetic data with 30 dB correlated noise when endmember number is eight

仿真数据在 30 dB 相关噪声下, 端元数为 8 时的各个端元的丰度结果图, 从左到右分别为 SUnSAL, SUnSAL-TV, SMP, ParetoSU 算法估计的丰度图和真实的丰度图, 从上到下分别为第 1~8 个端元的丰度图。从结果中可以看出 ParetoSU 总是能取得最好

的解混效果,而且从图 2 中可以看出 SUnSAL, SUnSAL-TV, SMP 估计的各端元丰度图通常包含很多噪点, ParetoSU 取得的丰度图更接近真实结果。综合上述实验结果,可以得出,文中所采用的基于 Pareto 最优的稀疏解混算法是有效的。

4 结 论

高光谱图像稀疏解混问题是近年来的一个热点问题,虽然现有文献已经提出多种解混算法,但归根于稀疏解混的非凸性,该问题还没有得到彻底解决,文中利用多目标优化直接解决基于 L0 范数的稀疏解混问题,而不对其进行松弛近似,力图得到更精确的解混结果,经仿真实验验证,该方法比现有一些经典的算法效果更好一些,另外,光谱库的强相关性,即光谱库与图像端元的差异性等原因也造成解混问题没有得到很好解决,因此,高光谱图像的稀疏解混问题还需要进一步改进发展。

参 考 文 献:

[1] Pan B, Shi Z W, Zhang N, et al. Hyperspectral image classification based on nonlinear spectral-spatial network [J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2016, 13 (12): 1782-1786.

[2] Yang Xinfeng, Hu Xunuo, Nian Yongjian. Class-based compression algorithm for hyperspectral images [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2016, 45(2): 0228003. (in Chinese)
杨新锋, 胡旭诺, 粘永健. 基于分类的高光谱图像压缩算法[J]. 红外与激光工程, 2016, 45(2): 0228003.

[3] Xu X, Shi Z W. Multi-objective based spectral unmixing for hyperspectral images [J]. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 2017, 124: 54-69.

[4] Deng Chengzhi, Zhang Shaoquan, Wang Shengqian, et al. Hyperspectral unmixing algorithm based on L1 regularization [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44 (3): 1092-1097. (in Chinese)
邓承志, 张绍泉, 汪胜前, 等. L1 稀疏正则化的高光谱混合像元分解算法比较 [J]. 红外与激光工程, 2015, 44(3): 1092-1097.

[5] Tang Zhongqi, Fu Guangyuan, Chen Jin, et al. Multiscale segmentation-based sparse coding for hyperspectral image classification [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2015, 23 (9): 2708-2714. (in Chinese)

唐中奇, 付光远, 陈进, 等. 基于多尺度分割的高光谱图像稀疏表示与分类[J]. 光学精密工程, 2016, 9(23): 2708-2714.

[6] Feng Shuyi, Zhang Ning, Shen Ji, et al. Method of cloud detection with hyperspectral remote sensing image based on the reflective characteristics [J]. *Chinese Optics*, 2015, 8(2): 198-204. (in Chinese)
冯书谊, 张宁, 沈霁, 等. 基于反射率特性的高光谱遥感图像云检测方法研究[J]. 中国光学, 2015, 8(2): 198-204.

[7] Huang Hong, Zheng Xinlei. Hyperspectral image classification with combination of weighted spatial-spectral and KNN [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2016, 24(4): 873-881. (in Chinese)
黄鸿, 郑新磊. 加权空-谱与最近邻分类器相结合的高光谱图像分类[J]. 光学精密工程, 2016, 24(4): 873-881.

[8] Fang Hong, Yang Hairong. Greedy algorithms and compressed sensing [J]. *Acta Automatica Sinica*, 2011, 37 (12): 1413-1421. (in Chinese)
方红, 杨海蓉. 贪婪算法与压缩感知理论[J]. 自动化学报, 2011, 37(12): 1413-1421.

[9] Bi Yanmeng, Wang Qian, Yang Zhongdong, et al. Advances on space-based hyper spectral remote sensing for atmospheric CO₂ in near infrared band [J]. *Chinese Optics*, 2015, 8(5): 725-735. (in Chinese)
毕研盟, 王倩, 杨忠东, 等. 星载近红外高光谱 CO₂ 遥感进展 [J]. 中国光学, 2015, 8(5): 725-735.

[10] Qian C, Yu Y, Zhou Z. Subset selection by Pareto optimization [C]//Neural Inf Process Syst, 2015: 1765-1773.

[11] Bioucas-Dias J, Figueiredo M. Alternating direction algorithms for constrained sparse regression: application to hyperspectral unmixing [C]//2nd Workshop Hyperspectr. Image Signal Process Evol Remote Sens, 2010, 1: 1-4.

[12] Iordache M D, Bioucas-Dias J M, Plaza A. Total variation spatial regularization for sparse hyperspectral unmixing [J]. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 2012, 50(11): 4484-4502.

[13] Shi Z, Tang W, Duren Z, et al. Subspace matching pursuit for sparse unmixing of hyperspectral data [J]. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 2014, 52(6): 3256-3274.

[14] Pan B, Shi Z W, An Z Y, et al. A novel spectral-unmixing-based green algae area estimation method for GOCI data [J]. *IEEE J Sel Topics Appl Earth Observ Remote Sens*, 2017, 10(2): 437-449.