

一种考虑光谱变异性的高光谱图像非线性解混算法

智通祥^{1,2,3}, 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:非线性解混可以解释高光谱图像复杂场景中的非线性混合效应,但地物的光谱变异性是其中的一个难点。提出一种考虑光谱变异性的无监督非线性解混算法。通过核函数将原始高光谱图像数据隐式地映射到高维特征空间中,从而在该空间中结合光谱变异性进行线性解混;与此同时,依据实际地物的分布特性,添加丰度和光谱变异系数的局部平滑约束。模拟和真实高光谱数据的实验结果表明,该方法能克服不同非线性混合场景中存在的光谱变异性问题,提高光谱解混的精度。

关键词:高光谱图像;非线性光谱解混;光谱变异性;核方法;平滑约束
中图分类号:TP751 **文献标识码:**A

A nonlinear unmixing algorithm dealing with spectral variability for hyperspectral imagery

ZHI Tong-Xiang^{1,2,3}, 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: Nonlinear unmixing can explain the nonlinear mixing effect in complex scenarios of hyperspectral imagery, but the spectral variability of ground objects is one of the difficulties. An unsupervised nonlinear unmixing algorithm dealing with spectral variability is proposed in this paper. The original hyperspectral image data is implicitly mapped into a high-dimensional feature space through a kernel function and then linear unmixing is applied for hyperspectral imagery in combination with spectral variability in this space. Further, local smoothness constraint is added on abundances and coefficients of spectral variability according to the distribution characteristics of ground objects. Experimental results on simulated and real hyperspectral data indicate that the proposed algorithm can overcome the spectral variability problem in different nonlinear mixing scenarios and improve the unmixing accuracy.

Key words: hyperspectral imagery, nonlinear spectral unmixing, spectral variability, kernel function, smoothness constraints

PACS: 84. 40. Xb

引言

高光谱遥感图像通常包含数百个波段,具有较

高的光谱分辨率,可以在获取地物空间分布的同时得到丰富的光谱信息,被广泛应用在军事侦察、环境监测和地质勘探等诸多领域^[1]。但是,由于传感器

收稿日期:2018-01-06,修回日期:2018-06-10

Received date: 2018-01-06, revised date: 2018-06-10

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(2017-KF-19)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China (61572133) and the Research Fund for the State Key Laboratory of Earth Surface Processes and Resource Ecology (2017-KF-19)

作者简介 (Biography): 智通祥 (1992-), 男, 江苏盐城人, 复旦大学电子工程系硕士研究生, 主要从事高光谱图像解混的研究. E-mail: 15210720044@fudan.edu.cn

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

较低的空间分辨率以及地面物质构成的复杂性,导致混合像元大量存在于高光谱图像中,严重阻碍了高光谱图像的高精度应用。光谱解混可以将高光谱图像中的混合像元分解为纯物质光谱(即端元)和端元在混合像元中所占的比例(即丰度)^[2],从而将图像分析深入到亚像元级,推动了定量遥感的发展。

线性混合模型(Linear Mixing Model, LMM)是在以往的研究中使用比较多的一种模型^[3]。LMM模型简单、物理意义明确,它基于光子只与地面场景中的一种物质发生作用的假设,因而,像元光谱被表示为由端元光谱以一定的比例系数线性组合而成。在LMM模型中,所有像元由一组共同的端元光谱表示,但是在实际情况中,由于光照、采集条件和物质的固有性质等因素的影响,端元光谱在像元中会发生改变,产生光谱变异性问题^[4]。而忽略光谱变异性的存在会给解混结果带来较大的误差,为此学者针对LMM中的光谱变异性问题开展了许多研究。Thouvenin等人提出了一种扰动的线性混合模型(Perturbed Linear Mixing Model, PLMM)^[5],它假定每个像元均对应有一个相同的基础端元矩阵,而同时加上一个互异的扰动来体现光谱变异性。Veganzones等人也提出了一种扩展的线性混合模型(Extended Linear Mixing Model, ELMM)^[6],该模型在LMM的基础上进行扩展,令每个像元所对应的基础端元矩阵乘上一个比例系数向量,以此来描述光谱变异性。关于LMM下的光谱变异性问题,已经有了一定的研究结果,但是LMM的假设在真实场景中并不能总被满足,特别是对于非线性混合效应显著的复杂场景情况^[7-8]。因此,在开展非线性光谱解混研究的同时,考虑场景中的光谱变异性,在实际应用中具有重要的意义。

通常,非线性混合场景中主要关注两种非线性混合模型。第一种是Hapke等模型,其主要针对沙地、矿物等地区存在的紧密混合现象。Hapke模型^[9]依据辐射传输理论,把双向反射率表示为与场景相关的粒子密度和大小以及单次散射反照率等物理参数的非线性函数,从而描述光线在微观尺度上与不同粒子之间的多次散射。第二种是广义双线性模型(Generalized Bilinear Model, GBM)^[10],一般被用来描述植被覆盖、建筑林立的地区存在的多层次混合现象。GBM在LMM的基础上添加了两两端元间存在的二次散射效应并忽略更高次散射的影响。尽管这两种非线性混合模型在混合机理和表达形式上都有很大的不同,但是,核方法可以利用合理的核

函数形式,将低维空间的非线性混合的原始数据投射到高维特征空间中,从而将低维空间的非线性解混问题转变为高维空间中的线性解混问题^[11-12]。因为它不需要考虑具体的非线性形式,所以可适用于不同的非线性模型。Zhu等人提出了Bi-objective NMF算法^[13],同时考虑了原始空间和核方法映射后的高维特征空间中的数据重构误差,并调整两者间的权重因子实现解混。Zhi等人提出了一种基于丰度约束核非负矩阵分解(Abundance Sparseness and Smoothness Constrained KNMF, ASSKNMF)的解混算法,该算法用核方法对数据进行非线性映射的同时,也根据地物分布特性在丰度上添加了稀疏和平滑约束来进行非线性解混。但是,以上所述算法都仅关注非线性解混问题,而没有考虑到非线性场景中存在的光谱变异性,这样仍会使实际的解混结果出现较大的偏差。

为了解决上述非线性解混算法中存在的问题,提出一种考虑光谱变异性的无监督非线性解混算法。该算法首先利用核方法将原始数据映射到高维特征空间,在高维空间中考虑光谱变异系数进行线性解混。与此同时,依据地物分布的空间连续性,对丰度和变异系数添加了局部平滑约束,使得二者具有空间上的平滑性。实验结果表明,所提出的算法在Hapke和GBM两种非线性混合模型中存在光谱变异性时,能进行有效的无监督非线性光谱解混。

1 问题描述

对于高光谱数据 $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_N] \in \mathbb{R}^{L \times N}$,其每列 $x_n \in \mathbb{R}^{L \times 1}$ ($n = 1, 2, \dots, N$)都对应一个具有 L 个波段的像元向量,共有 N 个这样的像元。以 $\mathbf{A} = [a_1, a_2, \dots, a_p] \in \mathbb{R}^{L \times P}$ 表示端元矩阵(其中 P 是端元数), $s_{p,n}$ 是端元 a_p 在像元 x_n 中的丰度, e_n 表示模型误差和噪声。LMM假设下的像元向量是端元光谱的线性组合,另外,考虑到丰度的物理意义,还需满足丰度的“非负”与“和为一”的约束条件^[2]:

$$\mathbf{x}_n^{LMM} = \sum_{p=1}^P \mathbf{a}_p s_{p,n} + \mathbf{e}_n \quad \text{s. t. } s_{p,n} \geq 0, \sum_{p=1}^P s_{p,n} = 1 \quad (1)$$

然而,在较多的复杂真实场景中,非线性混合效应十分显著,线性混合模型LMM的假设并不能总被满足。为实现非线性解混,在本文中我们重点考虑了Hapke和GBM两种非线性光谱混合模型。

1.1 Hapke 混合模型

在沙地、矿物紧密混合地区的遥感图像数据中,

依据辐射传输理论^[9],同时假设粒子为球形且各向散射同性,且表面反照比低,光谱反射率 \mathbf{x} 可以简化地表示为:

$$\mathbf{x} = r(\boldsymbol{\omega}) = \frac{\boldsymbol{\omega}}{4(\mu_0 + \mu)} h(\boldsymbol{\omega}, \mu_0) h(\boldsymbol{\omega}, \mu) \quad (2)$$

其中, μ_0, μ 分别是光线入射角和出射角的余弦值, $\boldsymbol{\omega}$ 是单次散射反照率, h 是多项散射函数,其表达式如下:

$$h(\boldsymbol{\omega}, \mu) = \frac{1 + 2\mu}{1 + 2\sqrt{1 - \boldsymbol{\omega}\mu}} \quad (3)$$

根据式(2-3),可以在已知反射率 \mathbf{x} 的情况下推导出单次散射反照率 $\boldsymbol{\omega}, r^{-1}$ 表示反函数:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega} &= r^{-1}(\mathbf{x}) \\ &= 1 - \left(\frac{\sqrt{(\mu_0 + \mu)^2 \mathbf{x}^2 + (1 + 4\mu_0 \mu \mathbf{x})} - (\mu_0 + \mu) \mathbf{x}}{1 + 4\mu_0 \mu \mathbf{x}} \right)^2 \end{aligned} \quad (4)$$

根据 Hapke 模型^[9],像元的反射率 \mathbf{x} 由(4)非线性映射为单次散射反照率 $\boldsymbol{\omega}$ 后,便能被端元的单次散射反照率线性表示:

$$\tilde{\boldsymbol{\omega}}_n = r^{-1}(\mathbf{x}_n) \approx \sum_{p=1}^P \boldsymbol{\omega}_p s_{p,n} \rightarrow \mathbf{x}_n^{Hapke} = r\left(\sum_{p=1}^P \boldsymbol{\omega}_p s_{p,n}\right) + \mathbf{e}_n \quad (5)$$

其中 $\boldsymbol{\omega}_p$ 是端元 \mathbf{a}_p 的单次散射反照率, $s_{p,n}$ 是对应的丰度系数。对端元的单次散射反照率按丰度系数进行线性组合后,再经由非线性映射 $r(\boldsymbol{\omega})$ 变为高光谱数据中的反射率。

1.2 GBM 混合模型

针对植被覆盖、建筑林立地区的非线性混和现象,GBM 在 LMM 的基础上主要考虑了两两端元间二次散射项的非线性效应^[10],它的表达式如下:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_n^{\text{GBM}} &= \sum_{p=1}^P \mathbf{a}_p s_{p,n} + \sum_{p=1}^{P-1} \sum_{q=p+1}^P (\mathbf{a}_p \odot \mathbf{a}_q) \zeta_{p,q,n} s_{p,n} s_{q,n} + \mathbf{e}_n \\ \text{s. t. } &0 \leq \zeta_{p,q,n} \leq 1, s_{p,n} \geq 0, \sum_{p=1}^P s_{p,n} = 1 \end{aligned} \quad (6)$$

其中, $\mathbf{a}_p \odot \mathbf{a}_q = [a_{p,1} a_{q,1}, a_{p,2} a_{q,2}, \dots, a_{p,L} a_{q,L}]^T$ 是端元之间的 Hadamard 乘积,用来描述光线在两种端元物质间的二次散射,参数 $\zeta_{p,q,n}$ 用于控制非线性程度,使得 GBM 模型可以更加灵活地描述非线性混合效应。

2 方法描述

提出一种考虑光谱变异性的带平滑约束的无监督非线性光谱解混(Unsupervised Nonlinear Spectral Unmixing with Smoothness Constraints) for dealing with Spectral Variability, UNSUSC-SV) 算法。该算法通

过核函数方法将原始高光谱数据映射到高维特征空间,然后在高维空间中利用光谱变异性模型进行线性解混。同时根据实际地物的分布特性,对丰度和变异系数添加了局部平滑约束,以更好地改善光谱解混效果。

2.1 核方法

考虑非线性映射:

$$\phi: \mathbf{x} \in \mathbb{R}^L \rightarrow \phi(\mathbf{x}) \in C^M \quad (7)$$

将原始的高光谱数据映射到高维空间中,使得数据在高维空间中变得线性可分。通常情况下,非线性映射 ϕ 的形式很复杂且难以求得,但可通过核函数的方法来避免这个问题^[14-16]。两个向量在高维空间中的内积能用核函数的形式表示:

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle \quad \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^L \quad (8)$$

根据式(8)可以定义核矩阵,对于一个向量集 $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$,核矩阵 \mathbf{K} 定义为一个 $N \times N$ 的矩阵,它的矩阵元素为 $K_{m,n} = \langle \phi(x_m), \phi(x_n) \rangle = \kappa(x_m, x_n)$,是一个对称矩阵。一般来说,满足 Mercer 定理或正定性的函数就可以作为核函数,采用 RBF 函数^[14]:

$$\kappa(x_m, x_n) = \exp\left(-\frac{\|x_m - x_n\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (9)$$

其中 σ 是核参数。

2.2 考虑光谱变异性的解混算法

针对前面所提及的 Hapke 和 GBM 两类非线性混合模型,我们可将原始高光谱数据先用核方法映射到高维空间,然后在高维空间中,与 ELMM^[6] 类似,使基础端元矩阵乘上对应的比例系数向量来描述光谱变异性,最后同时求解端元、丰度和光谱变异系数进行无监督的线性解混。这样既能不需要考虑具体的非线性混合形式,也可以顾及到光谱变异性的影响。因此,在核空间中,像元相应的表达式为:

$$\phi(\mathbf{x}_n) = \phi(\mathbf{A}) \text{diag}(z_n) s_n = \phi(\mathbf{A}) (z_n \odot s_n) \quad (10)$$

其中, $\phi(\mathbf{A}) = [\phi(a_1), \phi(a_2), \dots, \phi(a_p)]$, $z_n \in \mathbb{R}^{P \times 1}$ 和 $s_n \in \mathbb{R}^{P \times 1}$ 分别是像元对应的光谱变异系数和丰度,再结合地物分布特性加入对应的平滑约束后,得到了如下的目标函数:

$$\begin{aligned} J(\mathbf{A}, \mathbf{S}, \mathbf{Z}) &= \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{x}_n) - \phi(\mathbf{A}) (z_n \odot s_n)\|_F^2 \\ &+ \alpha \varphi(\mathbf{S}) + \beta \psi(\mathbf{Z}) + \tau_c(\mathbf{S}) \end{aligned} \quad (11)$$

这里的第一项考虑了光谱变异性的重构误差;

$\varphi(\mathbf{S})$ 和 $\varphi(\mathbf{Z})$ 用于反映物质空间分布的连续性, 是对丰度和变异系数添加的局部平滑约束, α 和 β 分别是相应的惩罚系数; $\tau_c(\mathbf{S})$ 是丰度满足“非负”与“和为一”约束的指示函数 \mathbf{B} 。为了方便目标函数的求解, 我们引入了一个新的变量, 得到新的目标函数:

$$J(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{S}, \mathbf{Z}) = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|\phi(x_n) - \phi(\mathbf{A})b_n\|_F^2 + \lambda \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|b_n - z_n \odot s_n\|_F^2 + \alpha\varphi(\mathbf{S}) + \beta\psi(\mathbf{Z}) + \tau_c(\mathbf{S}),$$

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{S}) &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|s_n - s_m\|_F^2 w_{n,m}, \psi(\mathbf{Z}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|z_n - z_m\|_F^2 w_{n,m}, w_{n,m} \\ &= \exp(-\|x_n - x_m\|_F^2), \end{aligned}$$

$$C = \{s_n \mid 0 \leq s_{p,n} \leq 1, \sum_{p=1}^P s_{p,n} = 1\}, \quad (12)$$

其中, 约束参数 λ 衡量了所引入变量 b_n 与 $z_n \odot s_n$ 间的差异。这里将像元光谱差异 $w_{n,m}$ 作为权重^[17], 可使 $\varphi(\mathbf{S})$ 和 $\psi(\mathbf{Z})$ 较好地反应中心像素丰度和变异系数与邻域像素对应取值间的相似性。最后, 通过优化该目标函数, 可以实现考虑光谱变异性的非线性光谱解混。针对目标函数的变量, 我们采取逐一交替优化的方法, 使得目标函数的值到达一个平稳点, 四个变量的优化过程如下:

A. 优化端元矩阵 \mathbf{A}

保留式(12)中与端元矩阵 \mathbf{A} 相关的项, 可将式(12)重新写成:

$$\hat{\mathbf{A}} = \underset{\mathbf{A}}{\operatorname{argmin}} f(\mathbf{A}) = \underset{\mathbf{A}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \|\phi(x_n) - \phi(\mathbf{A})b_n\|_F^2. \quad (13)$$

根据前面介绍的核方法, $f(\mathbf{A})$ 的核矩阵形式为:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{A}) &= \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\phi(\mathbf{X})^T \phi(\mathbf{X})) + \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{B}^T \phi(\mathbf{A})^T \phi(\mathbf{A})^T \phi(\mathbf{A})\mathbf{B}) \\ &\quad - \operatorname{tr}(\phi(\mathbf{X})^T \phi(\mathbf{A})\mathbf{B}) \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{K}_{XX}) + \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{B}^T \mathbf{K}_{AA} \mathbf{B}) - \operatorname{tr}(\mathbf{K}_{XA} \mathbf{B}), \quad (14) \end{aligned}$$

其中, $\mathbf{K}_{XX} = \phi(\mathbf{X})^T \phi(\mathbf{X})$, $\mathbf{K}_{AA} = \phi(\mathbf{A})^T \phi(\mathbf{A})$, $\mathbf{K}_{XA} = \phi(\mathbf{X})^T \phi(\mathbf{A})$ 是对应的核矩阵。由于核函数的存在, 这里采用投影梯度法 (Projected Gradient, PG)^[18] 对端元矩阵进行更新:

$$\mathbf{A}^{t+1} = \max(\mathbf{A} - \eta_t \nabla_{\mathbf{A}} f(\mathbf{A}^t), 0), \quad (15)$$

其中, $\max(\cdot, 0)$ 用于保证非负性, t 是用投影梯度

法更新时的迭代次数, $\nabla_{\mathbf{A}} f(\mathbf{A}^t)$ 是优化函数对端元矩阵的 \mathbf{A} 偏导, 这里我们采取逐个端元求导:

$$\begin{aligned} \nabla_{a_p} f(\mathbf{A}) &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{n=1}^N \mathbf{K}_{XA}(n, p) \mathbf{B}(p, n) (a_p - x_n) - \\ &\quad \frac{1}{\sigma^2} \sum_{q=1}^P \mathbf{K}_{AA}(q, p) \langle \mathbf{B} \mathbf{B}^T \rangle (p, q) (a_p - a_q) \end{aligned} \quad (16)$$

尺度因子 η_t 的计算采用回溯 Armijo 搜索法^[19], 使得在该过程中, 目标函数值都能满足一定的单调下降:

$$f(\mathbf{A}^{t+1}) - f(\mathbf{A}^t) \leq \gamma \eta_t \operatorname{vec}(\nabla_{\mathbf{A}} f(\mathbf{A}^t))^T \operatorname{vec}(\mathbf{A}^{t+1} - \mathbf{A}^t), \quad (17)$$

$\operatorname{vec}(\cdot)$ 是将矩阵转为向量, γ 是下降程度, 通常可设为 0.01。

B. 优化变量矩阵 \mathbf{B}

保留式(12)中与矩阵 \mathbf{B} 相关的项, 可将式(12)重新写成:

$$\hat{\mathbf{B}} = \underset{\mathbf{B}}{\operatorname{argmin}} \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{2} b_n^T \mathbf{Q} b_n - b_n^T c_n \right) + \lambda \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|b_n - z_n \odot s_n\|_F^2, \quad (18)$$

对矩阵 \mathbf{B} 逐个像素进行求解, 表达式如下:

$$\hat{b}_n (\mathbf{Q} + \lambda \mathbf{I}_{P \times P})^{-1} (c_n + \lambda z_n \odot s_n), \quad (19)$$

其中, $\mathbf{Q}_{p,q} = \kappa(a_p, a_q)$, $c_{p,n} = \kappa(a_p, x_n)$, $\mathbf{I}_{P \times P}$ 是一个单位矩阵。

C. 优化丰度矩阵 \mathbf{S}

保留式(12)中与丰度矩阵相关的项, 可将式(12)重新写成:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}} &= \underset{\mathbf{S}}{\operatorname{argmin}} \lambda \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|b_n - z_n \odot s_n\|_F^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|s_n - s_m\|_F^2 w_{n,m} + \tau_c(\mathbf{S}), \quad (20) \end{aligned}$$

因为难以对式(20)直接逐像素求丰度, 所以这里采用了 ADMM 的方法^[20-21] 进行求解, 并引入两个变量 g^1 和 g^2 :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}} &= \underset{\mathbf{S}}{\operatorname{argmin}} \lambda \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|b_n - z_n \odot s_n\|_F^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|g_n^1 - g_m^1\|_F^2 w_{n,m} + \tau_c(g^2) \\ \text{s. t. } &\mathbf{S} = g^1, \mathbf{S} = g^2 \end{aligned} \quad (21)$$

对应的增广拉格朗日表达式是:

$$\begin{aligned} L_p(s_n, g_n^1, g_n^2, v_n^1, v_n^2) &= \lambda \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|b_n - z_n \odot s_n\|_F^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|g_n^1 - g_m^1\|_F^2 w_{n,m} + \tau_c(g_n^2) \end{aligned}$$

$$+ \frac{\rho}{2} \sum_{n=1}^N (\|s_n - g_n^1 + v_n^1\|_F^2 + \|s_n - g_n^2 + v_n^2\|_F^2), \quad (22)$$

其中, g_n^1 和 g_n^2 分别是 g^1 和 g^2 的列向量, v^1 和 v^2 是尺度化的对偶变量, v_n^1 和 v_n^2 是它们对应的列向量, ρ 是惩罚参数。我们逐一对式 (22) 中的变量进行求解。

① S

$$\begin{aligned} \hat{s}_n = \operatorname{argmin}_{s_n} & \frac{1}{2} \lambda \|b_n - \operatorname{diag}(z_n) s_n\|_F^2 \\ & + \frac{\rho}{2} (\|s_n - g_n^1 + v_n^1\|_F^2 + \|s_n - g_n^2 + v_n^2\|_F^2) \end{aligned} \quad (23)$$

对应的每个像元的丰度可以求得:

$$\begin{aligned} \hat{s}_n = & (\lambda \operatorname{diag}(z_n)^T \operatorname{diag}(z_n) + 2\rho \mathbf{I}_{p \times p})^{-1} \\ & (\lambda \operatorname{diag}(z_n)^T b_n + \rho(g_n^1 - v_n^1 + g_n^2 - v_n^2)) \end{aligned} \quad (24)$$

② g^1

$$\begin{aligned} \hat{g}^1 = \operatorname{argmin}_{g^1} & \frac{1}{2} \alpha \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|g_n^1 - g_m^1\|_F^2 w_{n,m} \\ & + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{S} - g^1 + v^1\|_F^2 \\ = & \frac{1}{2} \alpha \operatorname{Tr}(g^1 \mathbf{D} (g^1)^T) - \frac{1}{2} \alpha \operatorname{Tr}(g^1 \mathbf{W} (g^1)^T) \\ & + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{S} - g^1 + v^1\|_F^2 \\ = & \frac{1}{2} \alpha \operatorname{Tr}(g^1 \mathbf{L} (g^1)^T) + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{S} - g^1 + v^1\|_F^2 \end{aligned} \quad (25)$$

其中, $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$ 是一个拉普拉斯矩阵, \mathbf{D} 是一个对角矩阵, 对角元素满足 $d_{n,n} = \sum_{m \in N(n)} w_{n,m}$, 根据式 (25)

可以推得 g^1 的解是:

$$\hat{g}^1 = \rho (\mathbf{S} + v^1) (\alpha \mathbf{L} + \rho \mathbf{I}_{N \times N})^{-1} \quad (26)$$

③ g^2

$$\hat{g}_n^2 = \operatorname{argmin}_{g_n^2} \tau_C(g_n^2) + \frac{\rho}{2} \|s_n - g_n^2 + v_n^2\|_F^2, \quad (27)$$

g^2 的求解很简单, 主要是为了满足非负与“和为一”约束:

$$\hat{g}_n^2 = \Pi_C(s_n + v_n^2, 0) \quad \hat{g}_n^2 = \hat{g}_n^2 / (\mathbf{I}_{p \times 1}^T \hat{g}_n^2), \quad (28)$$

④ v^1, v^2

$$\begin{aligned} \hat{v}_n^1 &= v_n^1 + s_n - g_n^1 \\ \hat{v}_n^2 &= v_n^2 + s_n - g_n^2 \end{aligned} \quad (29)$$

D. 优化变异系数矩阵 \mathbf{Z}

变异系数矩阵 \mathbf{Z} 的求解过程和丰度矩阵 \mathbf{S} 类似, 也是采用 ADMM 方法并引入一个新的变量 g^3 , 对应的优化问题为:

$$\hat{\mathbf{Z}} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{Z}} \lambda \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|b_n - z_n \odot s_n\|_F^2$$

$$+ \frac{1}{2} \beta \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|g_n^3 - g_m^3\|_F^2 w_{n,m} \quad \text{s. t. } \mathbf{Z} = \mathbf{g}^3 \quad (30)$$

其中, g_n^3 是 g^3 的列向量, 对应的增广拉格朗日表达式是:

$$\begin{aligned} L_0(z_n, g_n^3, v_n^3) &= \lambda \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \|b_n - z_n \odot s_n\|_F^2 \\ &+ \frac{1}{2} \beta \sum_{n=1}^N \sum_{m \in N(n)} \|g_n^3 - g_m^3\|_F^2 w_{n,m} + \frac{\theta}{2} \|z_n - g_n^3 + v_n^3\|_F^2 \end{aligned} \quad (31)$$

其中, v^3 是尺度化的对偶变量, v_n^3 是它的列向量, θ 是惩罚参数, 优化过程和上述丰度矩阵优化类似, 我们直接写出三个变量的求解表达式:

$$\hat{z}_n = (\lambda \operatorname{diag}(s_n)^T \operatorname{diag}(s_n) + \theta \mathbf{I}_{p \times p})^{-1} (\lambda \operatorname{diag}(s_n)^T b_n + \theta(g_n^3 - v_n^3)) \quad (32)$$

$$\hat{g}_n^3 = \theta (\mathbf{Z} + v_n^3) (\beta \mathbf{L} + \theta \mathbf{I}_{N \times N})^{-1} \quad (33)$$

$$\hat{v}_n^3 = v_n^3 + z_n - g_n^3 \quad (34)$$

综合四个变量的求解过程, 整个算法的流程图如表 1 所示。

表 1 UNSUSC-SV 算法流程

Table 1 The flow of UNSUSC-SV algorithm

输入: 高光谱图像 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{L \times N}$

步骤 1: 初始化端元矩阵 \mathbf{A}_0 , 变量矩阵 \mathbf{B}_0 , 丰度矩阵 \mathbf{S}_0 和变异系数矩阵 \mathbf{Z}_0

步骤 2: 根据式 (15), (16), (17) 对端元矩阵 \mathbf{A} 进行迭代

步骤 3: 根据式 (18), (19) 对变量矩阵 \mathbf{B} 进行迭代

步骤 4: 根据式 (24), (26), (28), (29) 对丰度矩阵 \mathbf{S} 进行迭代

步骤 5: 根据式 (32), (33), (34) 对变异系数矩阵 \mathbf{Z} 进行迭代

步骤 6: 如果达到最大迭代次数或满足收敛精度, 则输出 \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{S} , \mathbf{Z} ; 否则, 返回步骤 2

输出: 端元矩阵 $\hat{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{L \times P}$, 丰度矩阵 $\hat{\mathbf{S}} \in \mathbb{R}^{P \times N}$, 变异系数矩阵 $\hat{\mathbf{Z}} \in \mathbb{R}^{P \times N}$

本文采用 VCA^[22] 提取的端元对端元矩阵 \mathbf{A} 初始化, 丰度矩阵 \mathbf{S} 的初始化采用 FCLS 算法^[23] 的估计结果, 变异系数矩阵 \mathbf{Z} 每个元素均初始取 1, 最后, 变量矩阵 \mathbf{B} 则是用 \mathbf{S} 和 \mathbf{Z} 初始值的乘积初始化。

3 实验结果与分析

本节将提出的算法 UNSUSC-SV 与双目标非负矩阵分解算法 Bi-objective NMF^[13], 基于丰度约束核非负矩阵分解的非线性解混算法 ASSKNMF, 进行解混效果的比较, 同时将本文所提出的不加丰度和光谱变异系数平滑约束的方法记为 UNSU-SV, 以考察添加平滑约束的作用。需要指出的是, 算法 Bi-

objective NMF 和 ASSKNMF 并没有考虑光谱变异性,而 UNSU-SV 和 UNSUSC-SV 则是在非线性解混的同时考虑光谱变异性。评价指标主要包括端元的光谱角距离 (Spectral Angle Distance), 丰度的均方根误差 $RMSE(\mathbf{S})$ (Root Mean Square Error), 端元矩阵的均方根误差 $RMSE(\mathbf{A}_n)$ 和重构误差 (Reconstruction Error):

$$SAD = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \cos^{-1} \frac{\mathbf{a}_p^T \mathbf{a}'_p}{\|\mathbf{a}_p\|_F \|\mathbf{a}'_p\|_F}, \quad (35)$$

$$RMSE(\mathbf{S}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{1}{L} \|\mathbf{s}_n - \mathbf{s}'_n\|_F^2}, \quad (36)$$

$$RMSE(\mathbf{A}_n) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{1}{LP} \|\mathbf{A}_n - \mathbf{A}'_n\|_F^2}, \quad (37)$$

$$RE = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{1}{L} \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}'_n\|_F^2}, \quad (38)$$

其中, $\mathbf{a}_p, \mathbf{s}_n$ 和 \mathbf{x}_n 是求得的端元光谱, 丰度值和像元光谱, $\mathbf{a}'_p, \mathbf{s}'_n$ 和 \mathbf{x}'_n 是真实的端元光谱, 丰度值和像元光谱。式(35)度量了基础端元矩阵的求解精度, 但因为光谱变异性的存在, 每个像元的端元矩阵都不同, 所以进一步用式(37)的 $RMSE(\mathbf{A}_n)$ 来度量求得的每个像元的端元矩阵 \mathbf{A}_n 和真实的端元矩阵 \mathbf{A}'_n 之间的差异。具体的算法都在 Matlab (版本为 R2015b) 上实现并运行, 所使用计算机的 CPU 是 Intel Core i7-6700 K @ 4.00 GHz, 内存 32 GB。

3.1 模拟数据实验

从美国地质调查局 (USGS) 光谱库中选取了五种不同地物的光谱作为端元生成模拟数据, 该光谱库中地物光谱的波长在 $0.3 \sim 2.5 \mu\text{m}$ 之间, 分辨率 10 nm, 共有 224 个波段, 图 1 显示了这 5 种端元的

光谱曲线。分别针对 Hapke 和 GBM 两种非线性混合模型生成数据的方式如下。

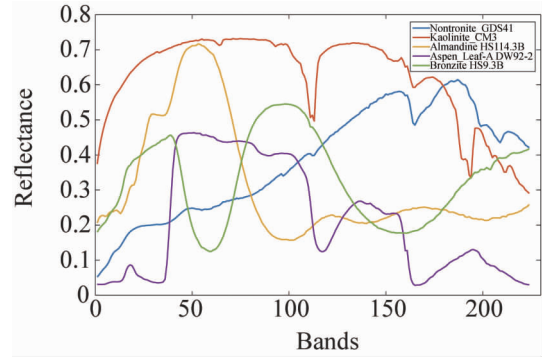


图 1 USGS 光谱库中的 5 条光谱

Fig. 1 Five endmember spectra from USGS spectral library

1) 首先生成丰度, 将 36×36 大小的图像分割为互不重叠的大小为 6×6 的正方形块, 并随机地分配不同的端元给这些块; 用 7×7 的低通滤波器对地物的丰度进行滤波^[24]; 变异系数矩阵的生成方式和丰度矩阵类似, 并在 $1.5 \sim 0.5$ 的范围内随机生成, 图 2 显示了 5 个端元对应的丰度图和变异系数图。

2) 生成 Hapke 模型数据时, 先将端元光谱反射率按照式(4)转为单次散射反照率, 然后与生成的变异系数相乘, 以添加光谱变异性。接着, 与 1) 中产生的丰度按 LMM 的形式混合得到单次散射反照率, 再按式(2)转换为混合光谱反射率数据。最后, 向生成的模拟数据中添加不同信噪比的高斯白噪声。

3) 生成 GBM 模型数据时, 将端元矩阵乘以每个像元的变异系数, 然后将产生的丰度带入式(6)

表 2 端元数目为 3 时各算法结果比较

Table 2 Comparison of the algorithms when the number of endmembers is three

		The Number of Endmembers = 3							
Model		Hapke				GBM			
Metric	SNR	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV
SAD ($\times 10^{-2}$)	50 dB	10.7 \pm 3.31	8.47 \pm 1.96	8.16 \pm 2.21	7.22 \pm 1.59	7.15 \pm 0.17	4.03 \pm 0.31	3.93 \pm 0.30	2.01 \pm 0.32
	40 dB	10.9 \pm 3.65	8.78 \pm 2.02	8.45 \pm 2.33	7.42 \pm 1.60	7.19 \pm 0.17	4.33 \pm 0.35	4.41 \pm 0.31	2.77 \pm 0.33
	30 dB	11.2 \pm 3.82	8.82 \pm 2.35	8.49 \pm 3.62	7.51 \pm 1.69	7.27 \pm 0.30	4.38 \pm 0.37	4.51 \pm 0.31	2.85 \pm 0.39
RMSE(\mathbf{A}_n) ($\times 10^{-2}$)	50 dB	-	-	8.51 \pm 0.88	8.25 \pm 0.81	-	-	8.34 \pm 0.32	6.29 \pm 0.34
	40 dB	-	-	8.52 \pm 0.90	8.30 \pm 0.87	-	-	8.38 \pm 0.34	6.34 \pm 0.36
	30 dB	-	-	8.57 \pm 1.05	8.33 \pm 1.01	-	-	8.38 \pm 0.35	6.35 \pm 0.37
RMSE(\mathbf{S}) ($\times 10^{-2}$)	50 dB	10.1 \pm 1.34	6.43 \pm 1.57	9.60 \pm 1.04	1.16 \pm 0.09	5.34 \pm 0.35	2.92 \pm 0.30	3.57 \pm 0.35	0.30 \pm 0.04
	40 dB	10.4 \pm 1.42	6.76 \pm 1.99	9.83 \pm 1.12	1.19 \pm 0.11	5.47 \pm 0.46	3.32 \pm 0.32	4.26 \pm 0.38	0.41 \pm 0.04
	30 dB	10.4 \pm 1.67	6.94 \pm 1.18	10.1 \pm 1.38	1.20 \pm 0.12	5.62 \pm 0.82	3.44 \pm 0.37	4.30 \pm 0.39	0.42 \pm 0.05
RE ($\times 10^{-4}$)	50 dB	76.4 \pm 4.75	23.2 \pm 1.07	1.48 \pm 0.07	1.14 \pm 0.10	81.0 \pm 1.21	19.2 \pm 0.55	1.55 \pm 0.15	0.96 \pm 0.02
	40 dB	78.3 \pm 5.51	23.6 \pm 1.22	1.50 \pm 0.07	1.16 \pm 0.12	82.2 \pm 1.41	19.5 \pm 0.56	1.66 \pm 0.19	1.08 \pm 0.02
	30 dB	83.2 \pm 6.69	26.0 \pm 1.50	1.51 \pm 0.08	1.18 \pm 0.13	87.4 \pm 2.38	21.2 \pm 0.60	2.11 \pm 0.20	1.83 \pm 0.03

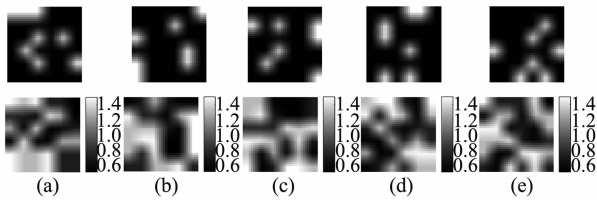


图2 从左到右依次是5个端元的丰度图(上面)和变异系数图(下面):(a)绿脱石(b)高岭石(c)铁铝榴石(d)山杨(e)古铜辉石
Fig.2 Maps of abundance (top) and variability coefficients (bottom) for five endmembers: (a) Nontronite, (b) Kaolinite, (c) Almandine, (d) Aspen, (e) Bronzite, from left to right

逐像素地产生双线性混合数据,参数 γ 在 $[0, 1]$ 中随机取值。生成模拟数据后,再添加不同信噪比的高斯白噪声。

实验1 参数确定实验:提出的算法中主要有变量 B 的约束参数 λ , 丰度和变异系数的平滑约束正则参数 α 和 β ,核参数 σ 以及增广拉格朗日表达式里的惩罚参数 ρ 和 θ 。实验的图像包含 36×36 个像元,由4个端元构成,并加入40 dB的高斯白噪声,分别针对 Hapke 和 GBM 模型的模拟数据进行实验,取10次实验的平均结果。本文采取控制变量法,并结合经验^[6,25],通过实验来确定这些参数的取值。以下是参数取值的确定过程:

1) 固定参数 $\lambda = 0.01, \alpha$ 和 β 为 $0.001, \rho$ 和 θ 为 0.1 ,变化核参数 σ 来分析结果。图3显示了 σ 对 Hapke 和 GBM 模型结果的影响。由图可知,在两种不同的非线性模型下, σ 取50左右基本就可以使结果比较好。

2) 固定 $\sigma = 50$,其余参数不变,变化来观察结果,图3显示了 λ 对两个模型结果的影响,可以看出 λ 在所取区间上对结果的影响不是很大,在后续的实验 λ 取 0.01 。

3) 固定 $\sigma = 50, \lambda = 0.01, \beta = 0.001, \rho$ 和 θ 依然为 0.1 ,观察丰度的平滑约束参数 α 对结果的影响。从图4的结果可以发现, α 取 0.001 是个比较好的选择。

4) 变异系数的平滑约束参数 β 通过实验发现对结果影响不大,也取值为 0.001 。

5) 最后变化 ρ 和 θ 的取值观察实验结果,为了简便我们取 ρ 和 θ 相等。通过图4的结果可以看出, ρ 和 θ 在 $0.01 \sim 0.1$ 之间取值比较合适,后续实验中选 ρ 和 θ 分别为 0.1 。

在所有参数确定后,我们列出了在 Hapke 和

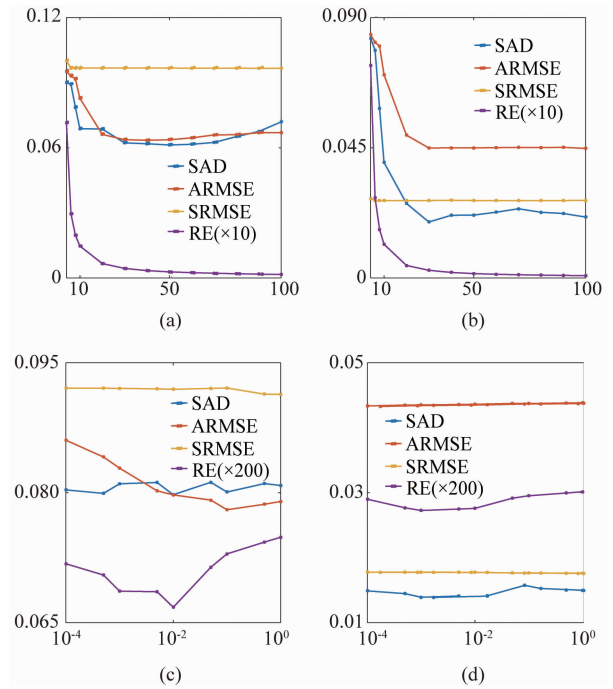


图3 σ 和 λ 对两种模型结果的影响:(a) σ -Hapke, (b) σ -GBM, (c) λ -Hapke, (d) λ -GBM
Fig.3 Results with respect to σ and λ of two models: (a) σ -Hapke, (b) σ -GBM, (c) λ -Hapke, (d) λ -GBM

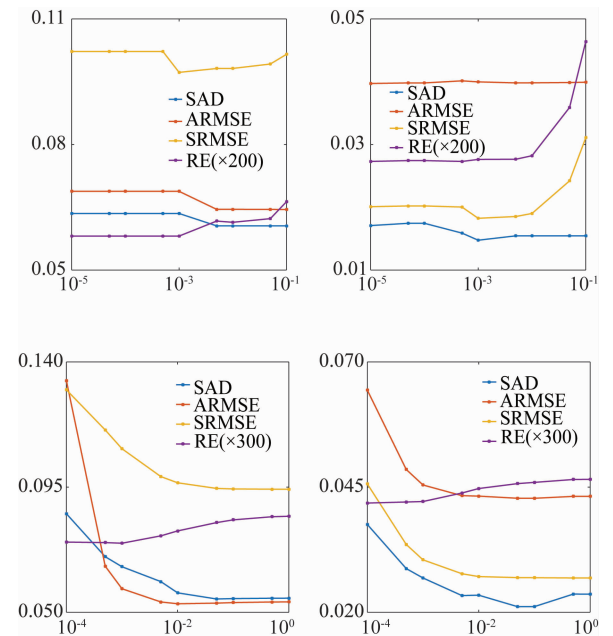


图4 α 和 ρ, θ 对两种模型结果的影响:(a) α -Hapke, (b) α -GBM, (c) ρ, θ -Hapke, (d) ρ, θ -GBM
Fig.4 Results with respect to α and ρ, θ of two models: (a) α -Hapke, (b) α -GBM, (c) ρ, θ -Hapke, (d) ρ, θ -GBM

GBM 两种非线性模拟数据下,该方法 (UNUSC-SV) 求得的丰度图以及对应的真实丰度图(如图5所示),通过对照可以看出 UNUSC-SV 在两种非线性

模型下都可以估计得到丰度图,且 GBM 模型下估计的结果要比 Hapke 来的更加准确。

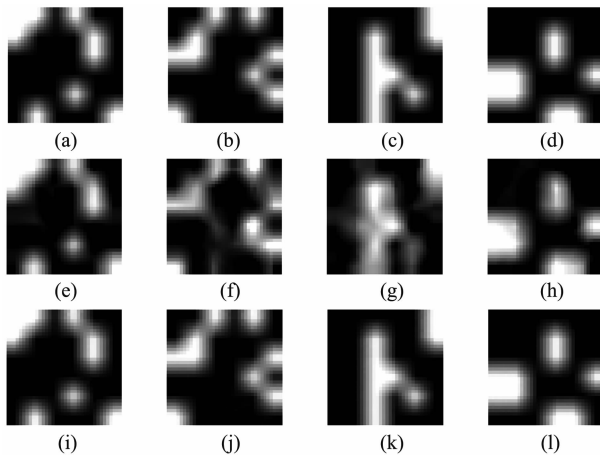


图 5 真实丰度图(图 5(a)到(d))和 UNSUSC-SV 估计的模拟数据的丰度图(图 5(e)到(h)和图 5(i)到(l)). 第一行对应真实的丰度图,第二和第三行分别对应 Hapke 和 GBM 模型的解混结果

Fig. 5 True abundance maps (Fig. 5(a) to (d)) and the estimated results (Fig. 5(e) to (h) and Fig. 5(i) to (l)) by UNSUSC-SV for synthetic datasets. The first row corresponds to ground truth of abundance map. The second and third rows correspond to Hapke and GBM model's unmixing results, respectively

实验 2:端元数目和信噪比的影响分析:在该实验中比较了各算法在不同端元数目和信噪比下解混的精度。图像大小是 36×36 ,端元数目分别取 3、4、5。在端元数目固定的情况下,对信噪比分别取 50、40、30 dB 的 Hapke 和 GBM 模型数据进行解混。表 2~4 分别显示了端元数目为 3、4、5 情况下各算法的解混结果。从表中的数据可以看出:1) 在端元提取方面,UNSU-SV 和本文提出的方法由于考虑了光

谱变异性的存在, SAD 比 Bi-objective NMF 和 ASSKNMF 方法要低,同时还可以逐像素求得每个像元的端元矩阵,很好地体现了光谱变异性的存在;UNSU-SV 根据实际地物分布特性添加了平滑约束,能得到比不加约束的 UNSU-SV 方法更好的结果。Bi-objective NMF 在解混中同时权衡了线性和非线性贡献,但是效果不理想,ASSKNMF 通过添加丰度的稀疏和平滑约束,结果比 Bi-objective NMF 要好一点。2) 在丰度估计方面,该方法 UNSUSC-SV 既考虑了光谱变异性,又添加了平滑约束,其 RMSE 比其它三种方法低 10 倍左右。UNSU-SV 虽然考虑了光谱变异性,但是没有添加任何约束,其 RMSE 比添加了稀疏和平滑约束的 ASSKNMF 方法要高;Bi-objective NMF 既没有考虑光谱变异性,也没有添加约束,效果是最差的。3) 从重构误差上来看,UNSU-SV 和 UNSUSC-SV 通过将光谱变异性纳入考虑范畴,得到的 RE 基本在 $1e-4$ 数量级,Bi-objective NMF 和 ASSKNMF 的 RE 是它们的 80 至 20 倍左右,效果差很多;而相对 UNSU-SV 的 RE 来说,UNSUSC-SV 还要更小一点。

实验 3:运算时间分析:在该实验中比较了各算法在不同端元数目下的运算时间。图像大小是 36×36 ,信噪比是 40 dB,端元数目分别取 3、4、5。表 5 给出了端元数目分别为 3、4、5 情况下各算法的运行时间。从表中的数据可以看出:1) 非线性模型的不同对各算法的运算时间几乎没有影响,相差基本都在 $1 \sim 2$ s。2) 随着端元数目的增加,各算法的运算时间都有所上升,其中 Bi-objective NMF 上升幅度较大,其余算法只是略微上升,受端元数目影响不大。3) Bi-objective NMF 的运算时间最长,ASSKNMF 和

表 3 端元数目为 4 时各算法结果比较

Table 3 Comparison of the algorithms when the number of endmembers is four

The Number of Endmembers = 4									
Model		Hapke				GBM			
Metric	SNR	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV
SAD ($\times 10^{-2}$)	50 dB	15.4 \pm 3.02	14.4 \pm 3.31	9.71 \pm 2.29	6.38 \pm 0.55	8.48 \pm 0.04	4.96 \pm 0.08	4.78 \pm 0.17	3.13 \pm 0.25
	40 dB	15.7 \pm 3.05	14.9 \pm 4.60	10.0 \pm 2.39	6.42 \pm 0.79	8.49 \pm 0.05	5.01 \pm 0.09	4.80 \pm 0.18	3.40 \pm 0.26
	30 dB	15.8 \pm 3.23	15.2 \pm 4.65	10.0 \pm 2.64	6.51 \pm 0.99	8.51 \pm 0.07	5.05 \pm 0.10	4.88 \pm 0.25	3.40 \pm 0.33
RMSE(A_n) ($\times 10^{-2}$)	50 dB	-	-	11.0 \pm 0.72	7.02 \pm 0.69	-	-	8.95 \pm 0.31	7.60 \pm 0.33
	40 dB	-	-	11.1 \pm 0.78	7.07 \pm 0.72	-	-	8.96 \pm 0.32	7.60 \pm 0.33
	30 dB	-	-	11.1 \pm 0.81	7.07 \pm 0.73	-	-	8.97 \pm 0.32	7.63 \pm 0.34
RMSE(S) ($\times 10^{-2}$)	50 dB	10.8 \pm 2.84	8.91 \pm 1.78	9.14 \pm 2.23	1.89 \pm 0.33	5.82 \pm 0.11	3.09 \pm 0.15	4.73 \pm 0.13	0.36 \pm 0.03
	40 dB	11.3 \pm 2.86	9.36 \pm 2.10	9.80 \pm 2.56	1.97 \pm 0.38	5.82 \pm 0.13	3.20 \pm 0.20	4.77 \pm 0.20	0.39 \pm 0.04
	30 dB	11.4 \pm 2.89	9.69 \pm 2.23	9.88 \pm 2.71	1.99 \pm 0.40	5.89 \pm 0.24	3.24 \pm 0.22	4.87 \pm 0.21	0.40 \pm 0.05
RE ($\times 10^{-4}$)	50 dB	67.3 \pm 5.53	16.1 \pm 2.12	0.85 \pm 0.20	0.44 \pm 0.05	107 \pm 0.36	25.5 \pm 0.12	1.42 \pm 0.03	0.89 \pm 0.01
	40 dB	68.5 \pm 5.59	16.3 \pm 2.61	0.86 \pm 0.21	0.45 \pm 0.06	108 \pm 0.60	25.9 \pm 0.17	1.62 \pm 0.06	1.08 \pm 0.02
	30 dB	70.0 \pm 5.63	19.5 \pm 2.79	0.90 \pm 0.22	0.51 \pm 0.07	115 \pm 0.77	28.5 \pm 0.24	2.42 \pm 0.08	2.12 \pm 0.02

表 4 端元数目为 5 时各算法结果比较

Table 4 Comparison of the algorithms when the number of endmembers is five

The Number of Endmembers = 5									
Model		Hapke				GBM			
Metric	SNR	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV
SAD ($\times 10^{-2}$)	50 dB	16.4 ± 4.28	13.5 ± 2.69	11.0 ± 3.10	8.13 ± 1.04	6.85 ± 0.16	3.69 ± 0.18	3.78 ± 0.27	3.33 ± 0.30
	40 dB	17.1 ± 4.64	13.5 ± 2.88	11.4 ± 3.76	8.15 ± 1.22	6.90 ± 0.18	3.75 ± 0.19	3.99 ± 0.36	3.58 ± 0.45
	30 dB	17.1 ± 4.84	13.8 ± 2.95	12.2 ± 3.87	8.58 ± 1.50	6.92 ± 0.27	3.80 ± 0.32	4.07 ± 0.55	3.74 ± 0.58
RMSE(A_n) ($\times 10^{-2}$)	50 dB	-	-	11.4 ± 0.64	9.98 ± 0.49	-	-	9.49 ± 0.35	8.31 ± 0.35
	40 dB	-	-	11.6 ± 0.79	9.11 ± 0.53	-	-	9.53 ± 0.38	8.35 ± 0.39
	30 dB	-	-	11.7 ± 0.83	9.18 ± 0.65	-	-	9.55 ± 0.40	8.39 ± 0.41
RMSE(S) ($\times 10^{-2}$)	50 dB	9.83 ± 2.73	8.49 ± 1.35	9.04 ± 1.25	1.90 ± 0.12	4.98 ± 0.28	3.54 ± 0.26	4.41 ± 0.24	0.45 ± 0.04
	40 dB	10.1 ± 2.74	8.67 ± 1.59	9.93 ± 2.04	1.94 ± 0.15	5.07 ± 0.31	3.66 ± 0.44	4.58 ± 0.47	0.49 ± 0.06
	30 dB	10.2 ± 3.45	8.87 ± 1.78	10.4 ± 2.10	1.96 ± 0.20	5.05 ± 0.41	3.79 ± 0.46	4.67 ± 0.50	0.52 ± 0.07
RE ($\times 10^{-2}$)	50 dB	75.2 ± 8.70	32.2 ± 3.55	1.03 ± 0.14	0.45 ± 0.05	103 ± 0.69	24.6 ± 0.16	1.42 ± 0.06	0.75 ± 0.01
	40 dB	84.2 ± 10.9	32.2 ± 3.62	1.03 ± 0.14	0.46 ± 0.06	104 ± 0.92	25.1 ± 0.24	1.61 ± 0.11	0.95 ± 0.01
	30 dB	100 ± 15.7	36.3 ± 3.64	1.04 ± 0.18	0.53 ± 0.07	112 ± 1.03	27.7 ± 0.39	2.46 ± 0.16	2.00 ± 0.01

表 5 不同端元数目下算法运行时间比较(s)

Table 5 Time cost comparison of the algorithms with different endmember number (s)

Model		Hapke				GBM			
Number of Endmembers	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV	Bi-objective	ASSKNMF	UNSU-SV	UNSUSC-SV	
3	45.34	17.50	18.64	21.08	46.30	17.83	19.79	22.00	
4	66.73	21.27	19.72	23.47	66.85	21.23	20.02	22.08	
5	92.64	23.92	20.75	26.03	91.05	21.57	20.70	22.46	

UNSU-SV 时间最短,而所提议方法 UNSUSC-SV 的运算时间只比 ASSKNMF 和 UNSU-SV 多 1 ~ 5 s,还能同时保持解混效果最好。

3.2 实际数据实验

本小节采用两个真实地区的高光谱数据来分析和评价各算法的解混结果。第一个数据集是机载可见光/红外成像光谱仪(Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer, AVIRIS)获取的美国加利福尼亚州 Moffett 地区的高光谱图像,我们从中选取了一块感兴趣区域(如图 6(a)所示)。该数据有 224 个波段,解混前剔除了信噪比低和水吸收波段(1 ~ 4, 105 ~ 115, 150 ~ 170, 222 ~ 224),还剩余 185 个波段。第二个数据集是 AVIRIS 获取的美国内华达州 Cuprite 矿物地区的高光谱图像,也从图像中选取了一块 50 × 50 的研究区域(如图 6(b)所示),并剔除

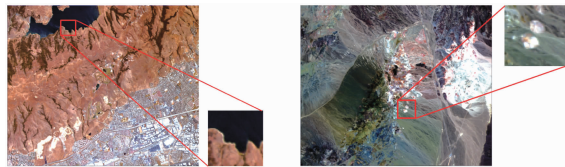


图 6 真实高光谱遥感图像:(a) AVIRIS Moffett 及子区域 (b) AVIRIS Cuprite 及子区域

Fig. 6 Real hyperspectral remote sensing images: (a) AVIRIS Moffett and its subscene (b) AVIRIS Cuprite and its subscene

信噪比低和水吸收波段(1 ~ 2, 104 ~ 113, 148 ~ 167, 221 ~ 224),剩余 188 个波段。这两个数据集中所选取区域中均存在一定的光谱变异性,而且它们以往也常被用作高光谱解混研究的数据^[5,26]。

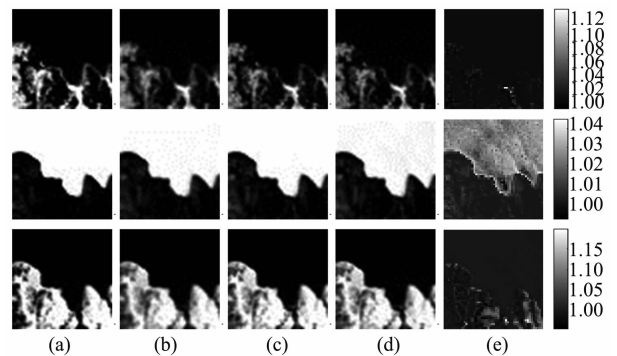


图 7 从左到右每列是 Moffett 数据各算法估计的丰度图和 UNSUSC-SV 估计的变异性系数图:(a) Bi-objective NMF, (b) ASSKNMF, (c) UNSU-SV 和 (d) UNSUSC-SV 算法所获得的丰度图,从上到下每行分别为植被,水体和土壤三种物质;(e) UNSUSC-SV 所获得的变异性系数图

Fig. 7 Abundance maps for Moffett dataset estimated by different algorithms and variability coefficient maps estimated by UNSUSC-SV: abundance maps obtained by (a) Bi-objective NMF, (b) ASSKNMF, (c) UNSU-SV, and (d) UNSUSC-SV; variability coefficient maps obtained by (e) UNSUSC-SV, from left column to right column. Each row corresponds to Plant, Water and Soil, respectively, from top row to bottom row

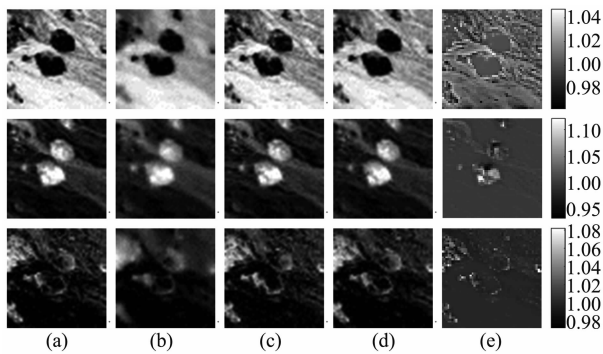


图 8 从左到右每列是 Cuprite 数据各算法估计的丰度图和 UNSUSC-SV 估计的变异系数图: (a) Bi-objective NMF, (b) ASSKNMF, (c) UNSU-SV 和 (d) UNSUSC-SV 算法所获得的丰度图; (e) UNSUSC-SV 算法所获得的变异系数图。从上到下每行分别为白云母, 明矾石和高岭石三种物质

Fig. 8 Abundance maps for Cuprite dataset estimated by different algorithms and variability coefficient maps estimated by UNSUSC-SV; abundance maps obtained by (a) Bi-objective NMF, (b) ASSKNMF, (c) UNSU-SV, and (d) UNSUSC-SV; variability coefficient maps obtained by (e) UNSUSC-SV, from left column to right column. Each row corresponds to Muscovite, Alunite and Kaolinite, respectively, from top row to bottom row

表 6 不同算法在 Moffett 数据上的光谱角距离和重构误差比较
Table 6 Comparison of SAD and RE by different algorithms of Moffett data set

Methods	SAD				RE
	Plant	Water	Soil	Average	
Bi-objective	0.163 0	0.107 3	0.023 6	0.097 9	49.00e-4
ASSKNMF	0.060 8	0.096 6	0.016 1	0.057 8	14.00e-4
UNSU-SV	0.048 5	0.140 3	0.010 5	0.064 4	1.210e-4
UNSUSC-SV	0.042 3	0.097 9	0.009 8	0.052 1	1.050e-4

表 7 不同算法在 Cuprite 数据上的光谱角距离和重构误差比较

Table 7 Comparison of SAD and RE by different algorithms of Cuprite data set

Methods	SAD				RE
	Muscovite	Alunite	Kaolinite	Average	
Bi-objective	0.149 2	0.168 2	0.263 3	0.193 4	230.0e-5
ASSKNMF	0.150 5	0.167 0	0.265 2	0.194 3	79.95e-5
UNSU-SV	0.148 9	0.163 6	0.267 5	0.193 4	10.10e-5
UNSUSC-SV	0.147 1	0.166 7	0.257 2	0.190 3	8.720e-5

Moffett 地区主要包含植被, 水体和土壤三种物质, 表 6 中列出了各算法对该区域解混得到的 SAD 以及 RE 值。该方法 UNSUSC-SV 比其它三种方法结果都要好, SAD 和 RE 的平均值都是最低的, 其 RE 略高于 $1e-4$, 依然远小于 Bi-objective NMF 和 ASSKNMF 的 RE, 水体的光谱角距离 SAD 则比 ASSKNMF 略低。图 7 展示了四种方法求解的端元对

应的丰度图以及 UNSUSC-SV 求得的变异系数图。在另一方面, 在选取的 Cuprite 子地区中, 主要存在 Muscovite, Alunite 和 Kaolinite 三种物质。表 7 中列出了各算法对该区域解混得到的 SAD 以及 RE 值, UNSUSC-SV 的结果依然是最好的, Alunite 的光谱角距离比 UNSU-SV 略低。图 8 描述了各方法得到的对应物质丰度图以及 UNSUSC-SV 求得的变异系数图, 从两幅变异系数图可以看出物质在自身分布多的地方相对来说越容易发生光谱变异。

4 结论

提出了一种考虑光谱变异性的无监督高光谱非线性解混算法。首先利用核方法将原始高光谱数据投影到高维特征空间, 继而在高维空间中结合光谱变异系数进行线性解混。另外, 利用地物空间分布的连续性, 添加了丰度和变异系数上的平滑约束, 以得到更好的解混效果。由于核方法的使用, 所提出的算法无需考虑具体的非线性表达形式, 能同时适用于紧密混合情况下的 Hapke 模型和多层次混合下的 GBM 模型。模拟和真实高光谱数据的实验结果表明, 该算法与其它解混方法相比, 考虑了非线性场景中存在的光谱变异性, 并且根据地物分布特性添加了光谱变异系数的平滑约束, 从而在有效地解释了非线性混合效应的同时, 较好地克服了端元光谱变异性问题, 对实际应用具有重要的意义。

然而, 因为所提出的算法涉及核函数, 并使用了梯度下降法来估计端元, 仍需耗费较多的计算时间。今后, 一方面可以考虑进一步优化端元的求解算法, 另一方面也可以考虑采用 GPU 加速算法的实现。

References

- [1] TONG Qing-Xi, XUE Yong-Qi, ZHANG Li-Fu. 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.
- [2] Keshava N, Mustard J F. Spectral unmixing [J]. *IEEE Signal Process. Mag.*, 2002, **19**(1): 44-57.
- [3] 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.
- [4] Somers B, Asner G P, Tits L, et al. Endmember variability in spectral mixture analysis: A review [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2011, **115**(7): 1603-1616.
- [5] Thouvenin P A, Dobigeon N, Tournet J Y. Hyperspectral unmixing with spectral variability using a perturbed linear mixing model [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2016, **64**(2): 525-538.

(下转第 132 页)

- Engineering, 2011, **8004**(3): 510–514.
- [7] LI Zhong-Bin, SHI Wen-Zhong. Partial differential equation-based object extraction from remote sensing imagery [J]. *Journal of Infrared & Millimeter Waves*. (李仲珍, 史文中. 基于偏微分方程的遥感图像目标提取. *红外与毫米波学报*), 2016, **35**(3): 257–262.
- [8] Zhao Y, Pan H B, Du C P, *et al.* Bilateral two-dimensional least mean square filter for infrared small target detection [J]. *Infrared Physics & Technology*, 2014, **65**(5): 17–23.
- [9] Bai X Z, Chen Z G, Zhang Y, *et al.* Spatial information based FCM for infrared ship target segmentation [C]. *IEEE International Conference on Image Processing*, 2015, **46**(12): 5127–5131.
- [10] Qu S R, Yang H H. Automation S O. Infrared image segmentation based on PCNN with genetic algorithm parameter optimization [J]. *High Power Laser & Particle Beams*, 2015, **27**(5): 32–37.
- [11] Rother C, Kolmogorov V, Blake A. "Grab Cut": interactive foreground extraction using iterated graph cuts [C]. *ACM SIGGRAPH*, 2004, **23**(3): 309–314.
- [12] Shijin K P S, Dharun V S. Extraction of texture features using GLCM and shape features using connected regions [J]. *International Journal of Engineering & Technology*, 2016, **8**(6): 2926–2930.

(上接第 124 页)

- [6] Drumetz L, Veganzones M A, Henrot S, *et al.* Blind hyperspectral unmixing using an Extended Linear Mixing Model to address spectral variability [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2016, **25**(8): 3890–3905.
- [7] 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.
- [8] YANG Bin, WANG Bin. Review of nonlinear unmixing for hyperspectral remote sensing imagery [J]. *J. Infrared Millim. Waves*. (杨斌, 王斌. 高光谱遥感图像非线性解混综述. *红外与毫米波学报*), 2017, **36**(2): 173–185.
- [9] Hapke B W. Bidirectional reflectance spectroscopy. I. Theory [J]. *J. Geophys. Res.*, 1981, **86**: 3039–3054.
- [10] 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.
- [11] Ammanouil R, Ferrari A, Richard C, *et al.* Nonlinear unmixing of hyperspectral data with vector-valued kernel functions [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2017, **26**(1): 340–354.
- [12] Chen J, Richard C, Honeine P. Nonlinear unmixing of hyperspectral images based on multi-kernel learning [C]. *Hyperspectral Image and Signal Processing (WHISPERS)*, 2012 4th Workshop on. IEEE, 2012.
- [13] ZHU Fei, Honeine P. Biobjective Nonnegative Matrix Factorization: Linear Versus Kernel-Based Models [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2016, **54**(7): 4012–4022.
- [14] Smola A J, Schölkopf B. Learning with kernels [C]. *Cambridge: MIT Press*, 2008.
- [15] Camps-Valls G, Bruzzone L. Kernel-based methods for hyperspectral image classification [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2005, **43**(6): 1351–1362.
- [16] Evgeniou T, Micchelli C A, Pontil M. Learning multiple tasks with kernel methods [M]. *J. Mach. Learn. Res.*, 2005, **6**: 615–637.
- [17] TANG Yi, WAN Jian-Wei, XU Ke, *et al.* Hyperspectral unmixing based on material spatial distribution characteristics [J]. *J. Infrared Millim. Waves*. (汤毅, 万建伟, 许可等. 地物空间分布特性的高光谱遥感图像解混算法. *红外与毫米波学报*), 2014, **33**(5): 560–570.
- [18] Lin C J. Projected gradient methods for nonnegative matrix factorization [J]. *Neural computation*, 2007, **19**(10): 2756–2779.
- [19] Huck A, Guillaume M, Blanc-Talon J. Minimum dispersion constrained nonnegative matrix factorization to unmix hyperspectral data [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2010, **48**(6): 2590–2602.
- [20] Boyd S, Parikh N, Chu E, *et al.* Distributed optimization and statistical learning via the alternating direction method of multipliers [J]. *Foundations and Trends® in Machine Learning*, 2011, **3**(1): 1–122.
- [21] Alfonso M V, Dias J M B, Figueiredo M A T. Fast image recovery using variable splitting and constrained optimization [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2010, **19**(9): 2345–2356.
- [22] 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.
- [23] 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.
- [24] QIAN Yun-Tao, JIA Sen, ZHOU Jun, *et al.* Hyperspectral unmixing via $L_{1/2}$ sparsity-constrained nonnegative matrix factorization [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2011, **49**(11): 4282–4297.
- [25] LI Xiao-Rui, CUI Jian-Tao, ZHAO Liao-Ying. Blind nonlinear hyperspectral unmixing based on constrained kernel nonnegative matrix factorization [J]. *Signal, Image and Video Processing*, 2014, **8**(8): 1555–1567.
- [26] Swayze G, Clark R, Sutley S, *et al.* Ground-truthing AVIRIS mineral mapping at Cuprite, Nevada [J]. *Summaries of the Third Annual JPL Airborne Geosciences Workshop*, 1992, AVIRIS Workshop JPL Publication: 47–49.