

## 约束最小二乘的高光谱图像非线性解混

普晗晔<sup>1,2</sup>, 王斌<sup>1,2\*</sup>, 夏威<sup>3</sup>

- (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. 中国交通通信信息中心, 北京 100011)

**摘要:** 高光谱图像解混是高光谱数据分析的重要研究内容. 在现有混合模型的基础上, 提出一种新的高光谱图像非线性解混算法. 通过在目标函数中引入丰度的非负及和为一约束以及非线性参数的有界约束, 该算法将高光谱图像非线性解混问题转化为求解丰度矢量和非线性参数的约束非线性最小二乘问题, 继而采用一种交替迭代优化算法求解该问题. 仿真和实际高光谱数据的实验结果表明, 所提出的算法有效地克服了线性解混的不足, 同时具有良好的抗噪声性能, 可以作为一种解决高光谱遥感图像非线性解混的有效手段.

**关键词:** 高光谱遥感图像; 非线性解混; 非线性最小二乘; 丰度非负约束; 丰度和为一约束; 有界约束  
**中图分类号:** TP751 **文献标识码:** A

## Nonlinear unmixing of hyperspectral imagery based on constrained least squares

PU Han-Ye<sup>1,2</sup>, WANG Bin<sup>1,2\*</sup>, XIA Wei<sup>3</sup>

- (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. China Transport Telecommunications & Information Center, Beijing 100011, China)

**Abstract:** Hyperspectral unmixing is an important issue to analyze hyperspectral data. Based on the present mixing models, a new nonlinear unmixing algorithm for hyperspectral imagery was proposed. By introducing the abundance nonnegative constraint, abundance sum-to-one constraint and the bound constraints of nonlinear parameters, the proposed algorithm transforms the hyperspectral unmixing problem into a constrained nonlinear least squares problem. It consists of two sub-problems which obtain alternately the abundance vectors and nonlinear parameters of the observation pixels. Then, the alternating iterative optimization technique was used to solve this problem. The experimental results on synthetic and real hyperspectral dataset demonstrated that the proposed algorithm can effectively overcome the inherent limitations of the linear mixing model. Meanwhile, the proposed algorithm performs well for noisy data, and can also be used as an effective technique for the nonlinear unmixing of hyperspectral imagery.

**Key words:** hyperspectral imagery, nonlinear unmixing, nonlinear least squares, abundance nonnegative constraint, abundance sum-to-one constraint, bound constraint

**PACS:** 84.40.X6

### 引言

由于受到空间分辨率、多次散射效应以及地物

分布异质性的限制, 高光谱传感器获得的像元光谱通常是由多种地物光谱混合而成的. 这种包含不止一种地物覆盖类型的像元被称为混合像元. 混合像

收稿日期: 2013-04-23, 修回日期: 2013-05-09

Received date: 2013-04-23, revised date: 2013-05-09

基金项目: 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(2013-KF-02); 国家自然科学基金(41371337); 上海市教委科研创新项目(13ZZ005); 高等学校博士学科点专项科研基金(20110071110018)

**Foundation items:** Supported by the Research Fund for the State Key Laboratory of Earth Surface Processes and Resource Ecology (Grant No. 2013-KF-02); the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 41371337); the Innovation Program of the Shanghai Municipal Education Commission (Grant No. 13ZZ005); the Research Fund for Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20110071110018).

作者简介 (Biography): 普晗晔(1987-), 男, 河南省沈丘县人, 博士研究生, 主要研究领域为高光谱遥感图像处理, EMAIL: 09110720009@fudan.edu.cn

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

元的存在使得传统的像元级高光谱图像的分类、压缩和目标检测等应用受到限制. 因此, 以提取基本组成成分(端元)的特征光谱和估计它们在每个观测像素中所占的比例(丰度)为主要内容的高光谱解混, 成为高光谱图像分析中的关键技术之一. 它可以大大提高高光谱遥感对亚像元级目标的探测能力, 被广泛应用于地质科学、水文科学、精准农业以及军事领域等<sup>[1]</sup>.

通常, 混合像元所记录的光谱信号被认为是端元光谱的线性组合, 其中的组合系数被认为是它们相应的丰度. 满足这种假设的模型被称为线性混合模型(Linear Mixing Model, LMM)<sup>[1]</sup>. LMM 已经被广泛应用于高光谱解混的研究中, 并且可以得到较为准确的结果. 但是, 对于一些包含砂石、矿物、植被以及水域等地物分布的高光谱图像来说, 由于非线性混合现象的存在, LMM 则会得到不精确的结果. 为此, 研究者根据高光谱数据自身特性以及相关的辐射传输理论(Radiative Transfer Theory, RTT)<sup>[2]</sup>, 提出了一些非线性混合模型及其对应的解混算法. 这些模型可以有效地克服 LMM 的局限性, 提高解混的精度, 在实际应用中有重要的现实意义<sup>[2-5]</sup>.

无一例外, 现存的非线性模型都是基于 RTT 的. 该理论为光子间相互作用时的能量传输提供了一个准确的数学模型, 其中涉及到地物的物质密度和分布特征. 比较典型且具有一定影响力的光谱混合模型有 Hapke 模型<sup>[2]</sup>等. 一般情况下, 利用非线性混合模型计算出的结果要比用线性混合模型计算出的结果好. 然而, 由于残存误差的影响, 目前基于这些非线性混合模型的现有方法分析结果仍然不是很理想. 而且这些现有方法都涉及计算复杂的病态问题, 其中包含高度依赖于场景且难以或者不能得到的相应的参数. 因此, 这些方法也很难在实际中得到广泛的应用<sup>[1]</sup>.

为了避免复杂的物理模型, 一些学者在保持模型物理意义的基础上力求简化这些复杂的非线性混合模型. 常见的有双线性混合模型(Bilinear Mixing Model, BMM)<sup>[3,4]</sup>. BMM 将光谱之间的混合看作多层混合, 利用特征光谱的 Hadamard 积描述视场中光子之间的散射效应, 如 Fan 模型(Fan Model, FM)<sup>[3]</sup>、广义双线性模型(Generalized Bilinear Model, GBM)<sup>[4]</sup>、后非线性模型(Postnonlinear Mixing Model, PNMM)<sup>[5]</sup>等. 其中, GBM 因其物理意义明确且概括性强而广泛应用于非线性解混算法的研究中. PNMM 则是将混合光谱看作线性混合基础上的

非线性变化. 比较典型的是采用多项式级数技术的后非线性混合模型, 即多项式后非线性混合模型(Polynomial PNMM, PPNMM)<sup>[5]</sup>. 理论上, 无穷项幂级数或者多项式级数的使用可以使得这两类模型能够表征不同的混合情形. 从数学意义上讲, 它们是通过在线性混合模型的基础上增加非线性项来描述非线性混合. 因此, 线性混合模型中的基本概念(如端元、丰度等)仍然被使用, 只是对它们所遵循的约束需要重新加以定义, 而且引入了新的表征非线性的混合系数. 一些应用于线性混合模型的基于单形体几何的端元提取算法如 N-FINDR<sup>[6]</sup>、VCA<sup>[7]</sup>等仍然可以得到应用. 基于上述两类模型, 一些核函数、Bayesian 估计以及梯度优化等方法被应用于非线性解混. 然而, 不可避免地, 这些算法中存在繁多的参数, 既增加了运算的复杂度又不利于实际应用.

为了更有效的处理非线性模型中的参数, 从而提高非线性解混的精度和处理速度, 本文提出一种基于约束的非线性最小二乘的解混算法. 首先, 在现有非线性模型基础上, 本文提出了一种新的高光谱遥感图像非线性解混框架. 该框架将待估计的参数分为引入线性混合的丰度矢量和引入非线性混合的表征非线性形式或强弱的非线性参数, 并根据它们所满足的约束条件将非线性解混问题转化为一种约束的非线性最小二乘问题. 该框架可以很好地概括现存的线性和非线性混合模型. 在此基础上, 本文提出一种基于约束非线性最小二乘的交替迭代优化方法实现非线性解混. 所提出的算法根据丰度矢量和非线性参数所遵循的约束条件设计不同的目标函数, 进而采用不同的优化方法确定最优的估计结果. 与其它非线性解混算法相比, 所提出的新方法既提高了解混结果的正确性, 同时又显著地提升了运算速度.

## 1 非线性混合模型

对于高光谱数据集  $X = (x_1, x_2, \dots, x_N) \in R^{L \times N}$  来说, 每一个观测像素  $x \in R^{L \times 1}$  都可以用端元矩阵  $M = (m_1, m_2, \dots, m_p) \in R^{L \times p}$  及其相应的丰度矢量  $s = (s_1, s_2, \dots, s_p)^T \in R^{p \times 1}$  表示如下

$$x = f(M, s, \gamma) + n \quad (1)$$

其中,  $L, N$  和  $p$  分别表示波段数、像素数和端元数.  $f(\cdot)$  是一个含有固定参数  $\gamma$  的未知线性或非线性的函数.  $n \in R^{L \times 1}$  则表示了噪声和可能的模型误差. 同时, 丰度矢量应满足丰度和为一约束(Abundance Sum-to-one Constraint, ASC)和丰度非负约束(Abun-

dance Nonnegative Constraint, ANC):

$$\sum_{i=1}^p s_i = 1, s_i \geq 0, \forall i \in \{1, 2, \dots, p\} \quad (2)$$

对于 LMM 来说,

$$f(\mathbf{M}, \mathbf{s}) = \mathbf{M}\mathbf{s} \quad (3)$$

即  $f(\cdot)$  为线性函数. 而根据 GBM, 非线性函数  $f(\cdot)$  可以表述为

$$f(\mathbf{M}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\gamma}) = \mathbf{M}\mathbf{s} + \sum_{i=1}^{p-1} \sum_{j=i+1}^p \gamma_{i,j} s_i s_j \mathbf{m}_i \odot \mathbf{m}_j \quad (4)$$

其中,  $\odot$  表示 Hadamard 乘操作,  $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_{1,2}, \gamma_{1,3}, \dots, \gamma_{p-1,p})^T \in R^{\binom{p(p-1)}{2} \times 1}$  被称为非线性参数.  $\boldsymbol{\gamma}$  满足约束条件

$$0 \leq \gamma_{i,j} \leq 1, \forall i \in \{1, 2, \dots, p-1\}, \forall j \in \{i+1, \dots, p\} \quad (5)$$

很显然, LMM 是 GBM 的特例. 当  $\gamma_{i,j} = 1, \forall i \in \{1, 2, \dots, p-1\}, \forall j \in \{i+1, \dots, p\}$  时, GBM 则变成 FM. 在 PPNMM 下, 函数  $f(\cdot)$  可以表述为

$$f(\mathbf{M}, \mathbf{s}, b) = \mathbf{M}\mathbf{s} + b(\mathbf{M}\mathbf{s}) \odot (\mathbf{M}\mathbf{s}) \quad (6)$$

其中, 非线性参数  $b \in R$ . 当  $b = 0$  时, PPNMM 转变为 LMM.

不失一般性, 式(1)可以表述为

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^p \tilde{\mathbf{m}}_i s_i + \mathbf{n} = \tilde{\mathbf{M}}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{s} + \mathbf{n} \quad (7)$$

其中  $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_p)^T \in R^{p \times 1}$ ,  $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_q)^T \in R^{q \times 1}$ ,  $q$  表示非线性参数的个数. 对于式(7)来说, 丰度矢量  $\mathbf{s}$  引入了线性, 而参数  $\boldsymbol{\gamma}$  引入了非线性. 它们所要满足的约束条件为

$$\sum_{i=1}^p s_i = 1, s_i \geq 0, \forall i \in \{1, 2, \dots, p\} \quad (8)$$

$$\gamma_i \in R_{\gamma_i}, \forall i \in \{1, 2, \dots, q\}$$

$R_{\gamma_i}$  即为参数  $\gamma_i$  所属的实数区间. 非线性参数  $\boldsymbol{\gamma}$  表示混合过程中发生的非线性映射的形式及强弱等因素, 例如 GBM 中端元之间发生二次散射的强弱, PPNMM 中的二次项系数等. 端元光谱矩阵  $\mathbf{M}$  和引入非线性后的特征光谱矩阵  $\tilde{\mathbf{M}}$  之间存在函数关系

$$\mathbf{g}(\cdot): R^{L \times p} \rightarrow R^{L \times p}$$

$$\tilde{\mathbf{M}} = (\tilde{\mathbf{m}}_1, \tilde{\mathbf{m}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{m}}_p) \rightarrow \mathbf{M} = (\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots, \mathbf{m}_p) \quad (9)$$

对于 GBM 来说

$$\tilde{\mathbf{m}}_i = \mathbf{m}_i + \sum_{j=i+1}^p \gamma_{i,j} s_j \mathbf{m}_i \odot \mathbf{m}_j, \forall i \in \{1, 2, \dots, p\} \quad (10)$$

而对于 PPNMM 来说

$$\tilde{\mathbf{m}}_i = \mathbf{m}_i + b \sum_{j=1}^p s_j \mathbf{m}_i \odot \mathbf{m}_j, \forall i \in \{1, 2, \dots, p\} \quad (11)$$

式(7)揭示了一种新的解混框架. 从物理意义上讲, 新框架将到达传感器的光谱仍然看作特征光谱的线性组合, 而且组合系数仍然是各个端元所对应的丰度. 所不同的是, 此时的特征光谱不再是原始意义上的端元光谱, 而是在原始端元光谱基础上通过某种非线性映射得到的衍生光谱. 这种非线性映射的强弱是由参数  $\boldsymbol{\theta}$  决定的. 它包括两部分: 决定混合过程中发生的非线性映射的形式及强弱等因素的固有参数  $\boldsymbol{\gamma}$  和地物的分布参数  $\mathbf{s}$ .

## 2 算法描述

根据式(7), 高光谱解混可以通过估计  $\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{s}^T, \boldsymbol{\gamma}^T)^T$  实现, 需要解决一个约束的非线性最小二乘问题

$$\boldsymbol{\theta} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{argmin}} J(\boldsymbol{\theta}) = \quad (12)$$

$$\operatorname{argmin} \|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{M}}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{s}\|^2, \quad s. t. \quad (8)$$

本文中采用交替迭代优化的方法求解最优的  $\boldsymbol{\theta}$ . 我们首先介绍两个重要的约束条件的添加.

### 2.1 约束条件的添加

根据丰度的物理意义, 任意观测像素中, 各个端元的丰度之和必须为 1. 本文中 ASC 可以通过最小化目标函数实现

$$f_{ASC}(\mathbf{s}) = \frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{\delta}(\mathbf{I}^T \mathbf{s} - \mathbf{1}) \right\|^2 \quad (13)$$

其中  $\mathbf{I} \in R^{p \times 1}$  是元素全为一的列矢量,  $\boldsymbol{\delta}$  为一个较大的正数. 当丰度矢量  $\mathbf{s}$  满足 ASC 时,  $f_{ASC}(\mathbf{s}) = 0$ , 否则  $f_{ASC}(\mathbf{s})$  是一个较大的正数.

由(8)的定义可知, 任意观测像素对应的丰度和函数  $f(\cdot)$  所固有的非线性参数(如果该参数存在的话)都可以认为是满足一定的有界约束. 例如, 丰度矢量  $\mathbf{s}$  中任意元素  $s_i$  应满足  $s_i \in [0, 1]$ , GBM 中任一非线性参数均在区间  $[0, 1]$  上. 这样, ANC 也可以被满足. 文中设计了一种新的目标函数以强制这些参数在特定区间上.

以非线性参数  $\boldsymbol{\gamma}$  为例, 假设  $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_q)^T$  中元素均在区间  $[a, b]$  上, 则可以通过最小化目标函数实现这一有界约束:

$$f_B(\boldsymbol{\gamma}) = \sum_{i=1}^q \phi(\gamma_i), \quad (14)$$

$$\phi(\gamma_i) = \begin{cases} 0, & \gamma_i \in [a, b] \\ +\infty, & \gamma_i \notin [a, b] \end{cases}$$

很显然上述  $\phi(\gamma_i)$  使用起来较为困难. 基于此, 我们采用下式来代替式(14)中的  $\phi(\cdot)$

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{(x-a)^{2n}}{2n}, & x < a \\ 0, & a \leq x \leq b \\ \frac{(x-b)^{2n}}{2n}, & x > b \end{cases}, \quad (15)$$

其中  $n$  为正整数. 当  $\boldsymbol{\gamma}$  中所有元素均在区间  $[a, b]$  上时,  $f_B(\boldsymbol{\gamma}) = 0$ ; 否则,  $f_B(\boldsymbol{\gamma}) > 0$ . 该函数的导函数为

$$\frac{\partial f_B(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \boldsymbol{\gamma}} = \left( \frac{\partial f_B(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_1}, \frac{\partial f_B(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_2}, \dots, \frac{\partial f_B(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_q} \right)^T. \quad (16)$$

文中取  $n=1$ . 新的目标函数(12)连续可导,可以保证迅速收敛到预定空间.

## 2.2 约束的非线性最小二乘算法

综合考虑目标函数(12)和上述两个约束条件的添加方式,解混问题转化为两个约束优化问题如下

$$\boldsymbol{\gamma}^{(t+1)} = \underset{\boldsymbol{\gamma}}{\operatorname{argmin}} J_1(\boldsymbol{\gamma}) = \underset{\boldsymbol{\gamma}}{\operatorname{argmin}} \left\{ \frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{M}}(\mathbf{s}^{(t)}, \boldsymbol{\gamma}) \mathbf{s}^{(t)} \right\|^2 + \lambda_1 f_B(\boldsymbol{\gamma}) \right\}, \quad (17)$$

$$\mathbf{s}^{(t+1)} = \underset{\mathbf{s}}{\operatorname{argmin}} J_2(\mathbf{s}) = \underset{\mathbf{s}}{\operatorname{argmin}} \left\{ \frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{M}}(\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}) \mathbf{s} \right\|^2 + \lambda_1 f_{ASC}(\mathbf{s}) + \lambda_2 f_B(\mathbf{s}) \right\}, \quad (18)$$

其中,  $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = ((\mathbf{s}^{(t)})^T, (\boldsymbol{\gamma}^{(t+1)})^T)^T$ , 上标  $(t)$  表示执行第  $t$  次迭代. 正实数  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  分别表示所添加约束的强弱.

问题(17)在已知  $\mathbf{s}^{(t)}$  的基础上求解  $\boldsymbol{\gamma}^{(t+1)}$ , 是一个约束的非线性优化问题. 我们采用梯度下降法求解该问题. 第  $t$  次迭代步骤为

$$\boldsymbol{\gamma}^{(t+1)} = \boldsymbol{\gamma}^{(t)} - \lambda^{(t)} \frac{\partial J_1(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \boldsymbol{\gamma}}, \quad (19)$$

其中  $\lambda^{(t)}$  可以采用固定步长也可以通过线性搜索的方法求得. 文中我们采用固定步长  $\lambda^{(t)} = 0.5$ .

问题(18)在  $\boldsymbol{\gamma}^{(t+1)}$  已经确定的基础上求解  $\mathbf{s}^{(t+1)}$ , 它是一个全约束的线性最小二乘问题, 同样可以采用类似于式(19)的梯度法迭代步骤求解. 文中我们采用 FCLS 算法<sup>[8]</sup>求解, 该算法输出问题(18)的最优解.

下面给出了整个算法的流程.

算法: 基于约束非线性最小二乘的丰度估计算法 (Constrained Nonlinear Least Squares-based Abundance Estimation, CNLS-AE)

输入: 观测数据矩阵  $\mathbf{X} \in R^{L \times N}$ , 端元矩阵  $\mathbf{M} \in R^{L \times p}$

输出: 估计的丰度矩阵  $\mathbf{S} = (\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_N) \in$

$R^{p \times N}$ , 非线性参数矩阵  $\boldsymbol{\Gamma} = (\boldsymbol{\gamma}_1, \boldsymbol{\gamma}_2, \dots, \boldsymbol{\gamma}_N) \in R^{q \times N}$

步骤 1. 初始化  $\mathbf{S}$  和  $\boldsymbol{\Gamma}$  采用 FCLS 算法或者随机初始化得到初始的丰度矩阵  $\mathbf{S}^{(0)} = (\mathbf{s}_1^{(0)}, \mathbf{s}_2^{(0)}, \dots, \mathbf{s}_N^{(0)})$ , 随机选取满足要求的初始非线性参数矩阵  $\boldsymbol{\Gamma}^{(0)} = (\boldsymbol{\gamma}_1^{(0)}, \boldsymbol{\gamma}_2^{(0)}, \dots, \boldsymbol{\gamma}_N^{(0)})$ .

步骤 2. 对于每一个观测像素  $\mathbf{x}_n$  ( $n=1, 2, \dots, N$ ) 执行以下操作:

2a) 设置迭代次数  $t=0$ ;

2b) 依次求解优化问题(17)和(18)得到  $\boldsymbol{\gamma}^{(t+1)}$  和  $\mathbf{s}^{(t+1)}$ ;

2c) 判断目标函数  $J(\boldsymbol{\theta})$  是否已收敛: 若收敛则处理下一个观测像素, 否则返回 2b) 继续执行.

步骤 3. 输出结果  $\mathbf{S}^{(t+1)} = (\mathbf{s}_1^{(t+1)}, \mathbf{s}_2^{(t+1)}, \dots, \mathbf{s}_N^{(t+1)})$  和  $\boldsymbol{\Gamma}^{(t+1)} = (\boldsymbol{\gamma}_1^{(t+1)}, \boldsymbol{\gamma}_2^{(t+1)}, \dots, \boldsymbol{\gamma}_N^{(t+1)})$ .

采用每次迭代与前一次迭代之间  $J(\boldsymbol{\theta})$  的相对变化

$$\xi = \frac{J(\boldsymbol{\theta})^{t+1} - J(\boldsymbol{\theta})^t}{J(\boldsymbol{\theta})^t}, \quad (20)$$

作为判断是否收敛的标准. 当该值小于某个阈值  $\eta$  (我们取  $\eta = 10^{-6}$ ) 时, 可以认为目标函数已经收敛.

## 3 实验结果与讨论

### 3.1 仿真数据实验

在本节中, 采用仿真数据集测试所提出的算法的性能. 将本文提出的算法与文献[4]和[5]中提到的分别基于 GBM 和 PPNMM 的两种梯度法, 即 GBM-GDA 和 PPNMM-GDA 算法作比较. GBM-GDA 将观测像素的第  $p$  个端元的丰度  $s_p$  用其余端元表示, 即  $s_p = 1 - \sum_{i=1}^{p-1} s_i$ , 然后通过梯度下降法求解  $\boldsymbol{\theta}^t = (s_1, s_2, \dots, s_{p-1}, \boldsymbol{\gamma}^T)^T$ . 在迭代过程中, 采用黄金分割法 (Golden Section Method, GSM) 合理的选择每次迭代的步长以使 ANC 和非线性参数有界约束得以满足<sup>[4]</sup>. PPNMM-GDA 则是采用次梯度优化算法 (Subgradient Optimization Algorithm, SOA) 实现约束优化问题的求解<sup>[5]</sup>. 其中, ASC 的实现类似于 GBM-GDA. 此外, 我们还要与性能较优的基于 LMM 的 FCLS 算法<sup>[8]</sup>进行比较.

使用均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE) 和重构误差 (Reconstruction Error, RE) 来衡量丰度估计算法的优劣. RMSE 用于衡量丰度矩阵的估计结果与真实值的近似程度. 假设算法得到的端元丰度为  $\hat{\mathbf{S}} = \{\hat{\mathbf{s}}_1, \hat{\mathbf{s}}_2, \dots, \hat{\mathbf{s}}_N\} \in R^{p \times N}$ , 真实丰度为  $\mathbf{S} = \{\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_N\} \in R^{p \times N}$ , 则 RMSE 被定义为<sup>[9]</sup>

$$\text{RMSE} = \frac{1}{P} \sum_{i=1}^P \left[ \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\hat{s}_{ij} - s_{ij})^2} \right], \quad (21)$$

其中  $\hat{s}_{ij}$  和  $s_{ij}$  分别为矩阵  $\hat{S}$  和  $S$  的第  $i$  行第  $j$  列的元素. RE 则衡量了算法对模型的适用程度, 它被定义为<sup>[9]</sup>

$$\text{RE} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left[ \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\hat{x}_{ij} - x_{ij})^2} \right], \quad (22)$$

其中  $X = (x_1, x_2, \dots, x_N) \in R^{L \times N}$  和  $\hat{X} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_N) \in R^{L \times N}$  分别是原始数据矩阵和从估计结果重构得到的数据矩阵, 即  $\hat{x}_n = f(M, \hat{s}_n, \gamma)$ ,  $\forall n \in \{1, 2, \dots, N\}$ .  $\hat{x}_{ij}$  和  $x_{ij}$  分别为矩阵  $\hat{X}$  和  $X$  的第  $i$  行第  $j$  列的元素.

作者还测算各个算法的运行时间以定量衡量它们的复杂度. 所有实验的软硬件环境为 Intel(R) Xeon(R) E5504 CPU 2.00 GHz, 24 GB 内存和 Windows 7 及 Matlab 7.0.

仿真试验中采用的模拟数据共有四组, 分别依据 LMM、FM、GBM 和 PPNMM 产生. 其中 GBM 的非线性参数为区间  $[0, 1]$  上的随机实数, PPNMM 中的非线性参数  $b \in [-0.3, 0.3]$ . 端元光谱是从 USGS 光谱库得到 20 种不同的矿物光谱数据, 其中五种矿物光谱曲线如图 1 所示. 它们共有 224 个波段, 覆盖  $0.37 \sim 2.48 \mu\text{m}$  的波长范围. 而丰度矩阵则是由 Dirichlet 分布<sup>[7]</sup> 得到, 它满足 ANC 和 ASC. 每组数据包含 2 500 个像素. 构造的图像上叠加由信噪比 (Signal-to-Noise Ratio, SNR) 衡量的不同强度的高斯白噪声, 就得到了实验用的仿真数据. 每组解混试验都在同等条件下执行 40 次, 然后使用平均结果作

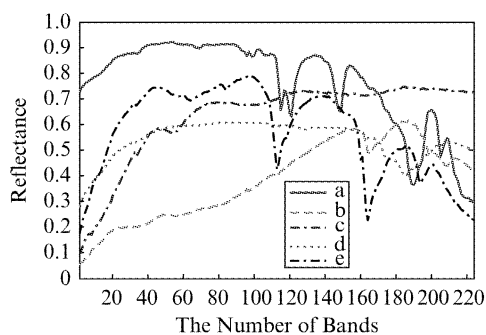


图 1 USGS 光谱库中得到的五种光谱: (a) Alunite GDS83 Na63, (b) Nonttronite GDS41, (c) Pyrope WS474, (d) Buddingtonite NHB2301, (e) Montmorillonite CM20

Fig. 1 Five spectra selected from the USGS spectral library. (a) Alunite GDS83 Na63. (b) Nonttronite GDS41. (c) Pyrope WS474. (d) Buddingtonite NHB2301. (e) Montmorillonite CM20

为最终的输出结果, 以避免单次实验造成的误差.

**实验 1 抗噪声性能实验** 在这个实验中, 比较了四种算法的抗噪声性能. 改变了仿真数据的 SNR, 将其从  $\infty$  (无噪声)、50 dB 降至 10 dB, 每隔 5 dB 为一档. 所采用的端元光谱为如图 1 所示. 图 2~5 分别给出了不同的混合模型下, 四种算法的 RMSE 和 RE 关于 SNR 的变化曲线. 可以看到随着噪声的增加, 四种算法的性能都逐渐下降. 在 LMM 下, FCLS 算法总是得到最小的 RMSE, 而提出的 CNLS-AE 算法与之很接近. 由此可见, CNLS-AE 算法对线性模型的数据也有较好的性能. 在非线性混合模型, 即 FM、GBM 和 PPNMM 下, FCLS 性能则较差. 三种非线性解混算法相比, CNLS-AE 算法总是具有较好的性能, 即具有相对小的 RMSE 和 RE. 此外, 还可以看出, 在 FM 和 GBM 下, PPNMM-GDA 也可以得到优于 GBM-GDA 的结果. 这是由于当实际混合模型与所假设的模型存在偏差时, PPNMM 与 FM 和 GBM 相比具有较强的鲁棒性, 这也吻合了文献<sup>[5]</sup>的结论.

为了测试算法的复杂度, 在这部分实验中, 还比较了 4 种算法在不同模型下的运行时间. 图 6(a)~(d) 给出了 4 种模型下 4 种算法的运行时间变化情况. 很显然, FCLS 算法的运行时间总是最小的. 3 种

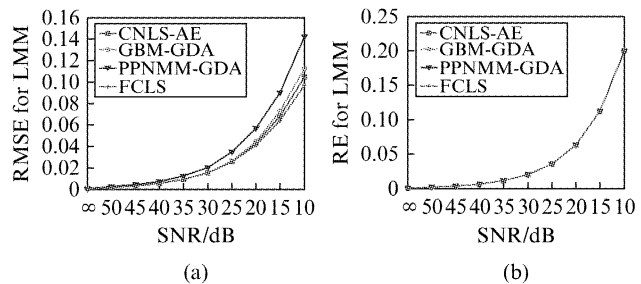


图 2 LMM 下算法性能的比较 (a) RMSE, (b) RE  
Fig. 2 Comparison of the algorithms for LMM. (a) RMSE, (b) RE

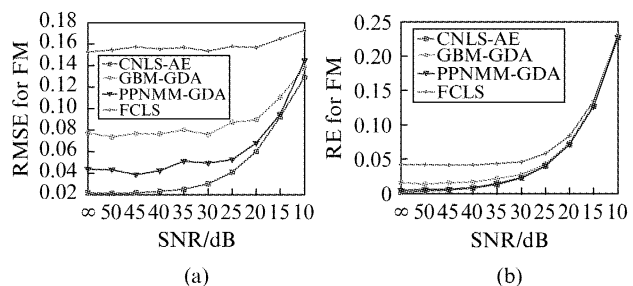


图 3 FM 下算法性能的比较 (a) RMSE, (b) RE  
Fig. 3 Comparison of the algorithms for FM. (a) RMSE, (b) RE

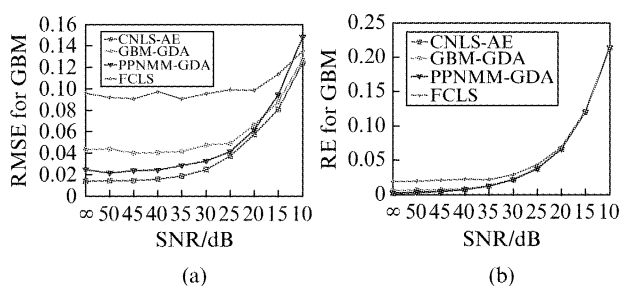


图4 GBM下算法性能的比较(a)RMSE,(b)RE  
Fig. 4 Comparison of the algorithms for GBM.  
(a)RMSE,(b)RE

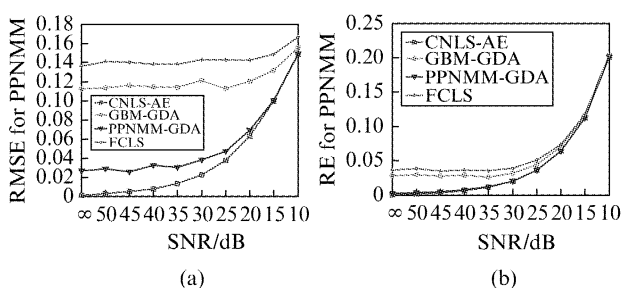


图5 PPNMM下算法性能的比较(a)RMSE,(b)RE  
Fig. 5 Comparison of the algorithms for PPNMM.  
(a)RMSE,(b)RE

非线性解混算法相比,提出的CNLS-AE算法的运行时间则是最小的.这说明提出的算法具有较小的计算复杂度.

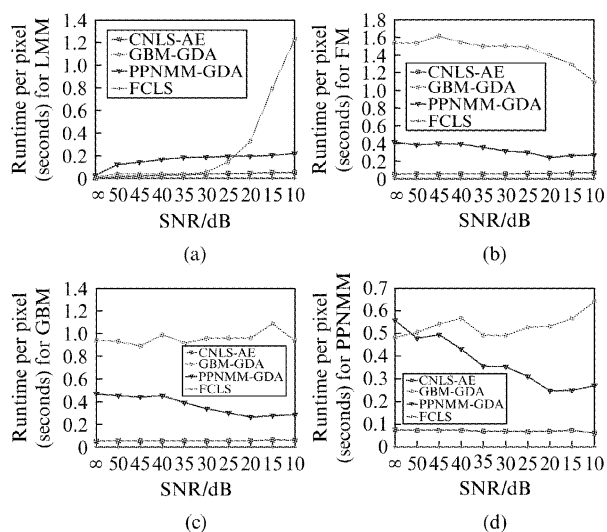


图6 不同模型下四种算法的运行时间比较(a)LMM,  
(b)FM,(c)GBM,(d)PPNMM  
Fig. 6 Comparison of the runtimes for four models,  
(a)LMM,(b)FM,(c)GBM, and(d)PPNMM

**实验2 端元数目与算法性能实验** 在这个实验,调查了4种算法的性能随着端元数变化的情况.

采用的端元数目从3增加到15.每次试验时,使用从20种光谱数据中随机选取所需数目的光谱产生模拟数据.模拟数据是依据GBM产生的,而且所含噪声的SNR为30dB.

图7给出了四种算法的RMSE和RE随端元数目增加的变化情况.在所选的端元数目范围内,提出的算法的RMSE总是小于GBM-GDA和FCLS算法,具有较好的性能.

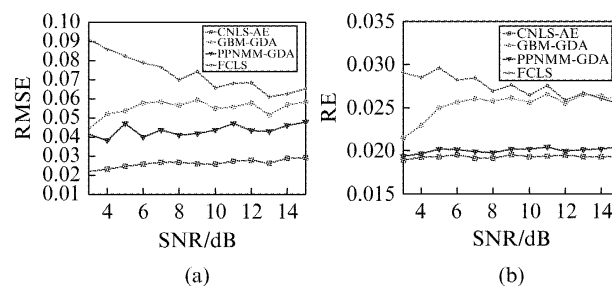


图7 不同端元数目下算法性能的比较(a)RMSE,  
(b)RE  
Fig. 7 Comparison of the algorithms for different numbers of endmembers, (a)RMSE, and(b)RE

### 3.2 实际数据实验

在本节中,使用实际的Cuprite地区的高光谱数据集对所提出算法的性能进行测试.该数据集是由机载可见光及红外成像光谱仪(Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer, AVIRIS)拍摄于1997年6月19日.它包含 $512 \times 614$ 个像素,224个波段,波长范围是 $0.37 \sim 2.48 \mu\text{m}$ ,光谱分辨率为10nm.所覆盖区域位于美国Nevada州南部沙漠中,地表覆盖主要为裸露的矿物和一些人工建筑.各种地物之间的混合现象较为普遍,适合用来检验算法对高光谱遥感图像混合像元的分解能力.而且,该地区存在详实的地物真实分布的报告,这样更易于根据地物真实分析算法的各种性能指标<sup>[10]</sup>.图8显示了该数据的假彩色图.波段号为1~3,105~115,150~170的共35个波段因为信噪比太低或为水吸收波段而被移除,留下的189个波段被用于算法验证.我们选取两块较为典型的子图像块用于实验(如图8所示),实地勘测和实验表明这些地区存在明显的非线性现象.

#### 3.2.1 子图像块一

该子图像块的大小为 $50 \times 50$ ,其所在区域如图8所示.根据实地调查可知,该地区包含三种矿物,即Muscovite, Alunite和Kaolinite<sup>[5]</sup>.图9给出了采用N-FINDR<sup>[6]</sup>算法得到的这三种矿物的光谱.

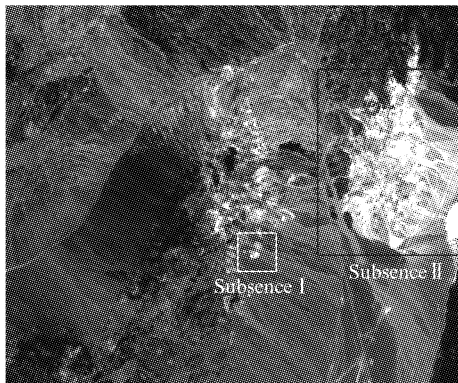


图8 Cuprite 数据集的假彩色图(R、G、B通道分别为波段40、20和10)

Fig. 8 False-color image for the Cuprite data set (RGB channels are bands 40, 20, 10)

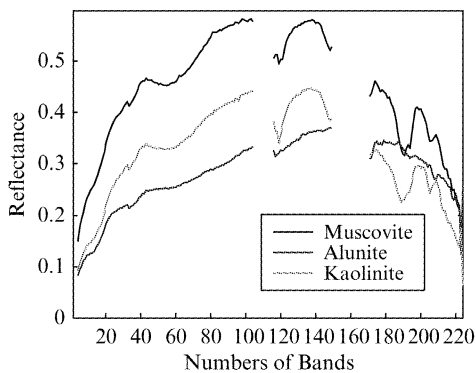


图9 N-FINDR 算法从子图像块一中得到的三种端元光谱

Fig. 9 Three endmember spectra obtained from Subsance I by N-FINDR

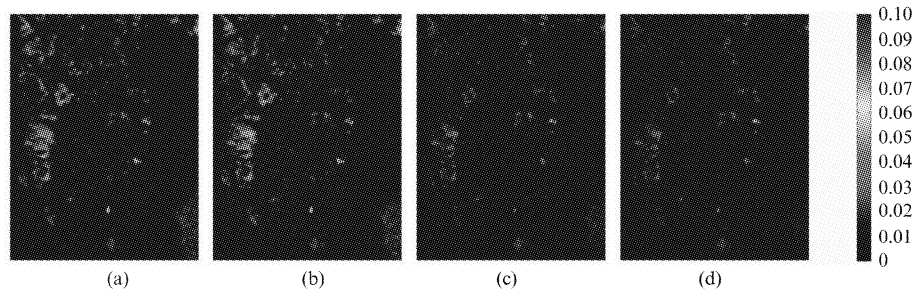


图10 四种算法得到的RE图:(a)FCLS,(b)GBM-GDA,(c)PPNMM-GDA,(d)CNLS-AE

Fig. 10 RE maps obtained by the four algorithms: (a) FCLS, (b) GBM-GDA, (c) PPNMM-GDA, and (d) CNLS-AE

表2 四种算法的平均RE和单像素平均运行时间比较  
Table 2 Comparison of average RE and runtime per pixel of three algorithms

Algorithms	FCLS	GBM-GDA	PPNMM-GDA	CNLS-AE
RE( $\times 10^{-3}$ )	9.592 7	9.503 6	7.037 4	6.867 8
Runtime( $\times 10^{-2}$ s)	0.054 1	7.167 5	19.120 5	4.012 8

综上所述,对于模拟和实际高光谱数据来说,提

出了定量的比较四种算法的性能,我们在表1中给出了它们对应的RE和单像素的平均运算时间.由表1可知,针对该数据集,提出的算法可以得到最小的RE,而且与其他两种非线性解混算法相比,运行时间也是最少的.

表1 四种算法的平均RE和单像素的平均运行时间比较  
Table 1 Comparison of average RE and runtime per pixel of four algorithms

Algorithms	FCLS	GBM-GDA	PPNMM-GDA	CNLS-AE
RE( $\times 10^{-3}$ )	10.773 9	10.039 5	9.637 7	9.467 6
Runtime( $\times 10^{-2}$ s)	0.014 0	8.397 3	2.014 7	0.349 3

### 3.2.2 子图像块二

该子图像块大小为  $250 \times 191$ . 它所在的区域如图8所示.根据实地调研<sup>[10]</sup>和HySime端元估计方法<sup>[11]</sup>可知,该区域存在14种端元. HySime算法是一种基于特征值分解的全自动无监督的端元数目估计算法.为了说明解混结果的性能,给出了四种算法得到的该图像块的RE图,如图10所示.为了便于说明,采用了统一的颜色条表示灰度值的大小.

由图10可以看出,CNLS-AE算法得到的RE图中,各个像素对应的误差普遍较小.同样,在表2中给出了四种算法对应的RE和每像素平均运算时间.所提出的算法仍然是有较小的RE和较少的运行时间.

出的算法相对于其他类似算法而言,都具有较好的解混精度和较快的收敛速度,可以快速而精确地实现高光谱图像的解混.

## 4 结论

提出了一种新的高光谱遥感图像非线性解混算法.该算法将决定非线性混合模型的参数分为线性

参数即丰度矢量和非线性参数两类分别处理,并结合它们所满足的物理意义设计相应的惩罚函数.进而,文中采用交替迭代优化的技术通过求解约束的非线性最小二乘问题方便地实现高光谱图像的非线性解混.仿真和实际高光谱数据实验表明,与同类算法相比,该算法具有更好的解混精度和抗噪声性能以及较低的运算复杂度,而且对于线性和非线性模型都具有较好的适应性,这对于处理复杂的高光谱数据来说具有重要的实际意义.

## References

- [1] 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. (JSTARS)*, 2012, **5**(2): 354 - 379.
- [2] Hapke B. Bidirection reflectance spectroscopy: I. Theory [J]. *J. Geo-phys. Res.*, 1981, **86**(B4): 3039 - 3054.
- [3] Fan W, Hu B, Miller J, Li M. Comparative study between a new nonlinear model and common linear model for analysing laboratory simulated-forest hyperspectral data [J]. *Int. J. Remote Sens.*, 2009, **30**(11): 2951 - 2962.
- [4] 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.
- [5] Altmann Y, Halimi A, Dobigeon N, *et al.* Supervised nonlinear spectral unmixing using a postnonlinear mixing model for hyperspectral imagery [J]. *IEEE Trans. Image Process.*, 2012, **21**(6): 3017 - 3025.
- [6] Winter M E. N-FINDR: an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data [C]. SPIE's International Symposium on Optical Science, Engineering, and Instrumentation. International Society for Optics and Photonics, 1999: 266 - 275.
- [7] 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.
- [8] Heinz D C, Chang C I. Fully constrained least square linear spectral unmixing analysis method for material quantification in hyperspectral imagery [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2001, **39**(3): 529 - 545.
- [9] Plaza J, Hendrix E M T, Garcia I, *et al.* On endmember identification in hyperspectral images without pure pixels: A comparison of algorithms [J]. *J. Math Imaging Vis.*, 2012, **42**(2-3): 163 - 1752.
- [10] Clark R N, Swayze G A. Evolution in imaging spectroscopy analysis and sensor signal-to-noise: an examination of how far we have come [C/OL]. The 6th Annual JPL Airborne Earth Science Workshop, 1996. <http://speclab.cr.usgs.gov/PAPERS.imspec.evol/aviris.evolution.html>.
- [11] Bioucas-Dias J M, Nascimento J M P. Hyperspectral subspace identification [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 2008, **46**(8): 2435 - 2445.