基于光谱信息散度的光谱解混算法

徐 州 赵慧洁

(北京航空航天大学 仪器科学与光电工程学院, 北京 100191)

摘 要: 光谱解混是高光谱遥感定量化的关键,提出了一种基于光谱信息散度和光谱混合分析的光谱解混改进算法(SID-SMA, Spectral Information Divergence-Spectral Mixed Analysis). 以光谱信息散度判定最优端元子集,端元选择时采用端元的初选和二次选择来提高端元选择的精度,得到较小的丰度估计误差. 通过光谱库模拟数据的结果可以看出, SID-SMA的端元选择精度和丰度估计精度要优于其他算法,当信噪比为 100∶1时,算法端元选择正确率达到了 99.8%, 29个端元的丰度估计总误差小于 0.1,并且算法的速度较快.

关 键 词: 光谱解混; 光谱信息散度; 端元选择; 丰度估计
中图分类号: TP 751.1
文献标识码: A 文 章 编 号: 1001-5965(2009)09-1091-04

Advanced spectral unmixing algorithm based on spectral information divergence

Xu Zhou Zhao Huijie

(School of Instrument Science and Optoelectronics Engineering, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: Spectral unmixing is a key issue of quantitative remote sensing. An advanced spectral unmixing algorithm based on per-pixel optimal endmembers selection named spectral information divergence-spectral mixed analysis (SID-SMA) was proposed. It determined the optimal endmembers subset using the criteria of SID and selected endmembers through two selection steps which could improve the precision of endmember selection and obtain small abundance estimation error. The results of simulated data from spectral library indicate that SID-SMA has better precision of endmember selection and abundance estimation. When the signal-to-noise ratio (SNR) is 100∶1, the correct proportion of endmember selection arrives at 99.86% and total abundance error of 29 endmembers is less than 0.1 and the speed of SID-SMA is much faster.

Key words: spectral unmixing; spectral information divergence; endmember selection; abundance estimation

高光谱遥感已经成为遥感探测中主要的探测手段,目前已经广泛应用于农业、工业、深空探测等各个方面[1]. 在高光谱遥感中,普遍存在的一个问题就是混合像元的问题. 由于高光谱传感器的空间分辨率有限,一个像元对应的区域比较大,因此该像元也往往包含不止一种物质,传感器所探测的光谱是多种物质光谱混合在一起的混合光谱. 要实现高光谱遥感的定量化,必须解决混合像元的分解问题,也就是所谓的光谱解混. 它在很多场合的应用中被认为是一种线性光谱混合分析[2],是把每个像元的光谱分解得到该像元的组成成分或者说是端元光谱的丰度. 光谱解混一般包括两个方面:端元提取和丰度估计,有时需要一些预处理,比如说光谱降维. 端元一般从图像中或者光谱库中选取,当从图像中选取端元时,需要用到端元提取技术,目前的端元提取技术有很多,比

收稿日期: 2008-07-21
基金项目: 中国地质调查局资助项目(1212010816033);国家 863计划资助项目(2008AA121102);长江学者和创新团队发展计划资助项目(IRT0705)
作者简介: 徐 州(1984-),浙江台州人,硕士生, yurenzhou2000@163.com.

如像光谱纯化指数[3], 手动端元选择工具[4], N-FINDR[5], 顶点成分分析[6]等等. 获取端元组后, 需要估计每条混合光谱中所含的端元以及各种端元的丰度. 一般情况下, 端元组中所含的端元个数要远大于一个像元中所含的端元个数, 而利用线性光谱混合分析进行丰度估计时, 如果选用的端元正好与像元中所含的物质相同, 则得到的估计的精度最高. 当选用的端元数量太多或太少时, 都会带来较大的误差. 因此对高光谱图像中的每个像元或者某条混合光谱进行解混时, 需要尽可能的选择最准确的端元.

本文提出了一种基于光谱信息散度和光谱混合分析的光谱解混改进算法 (SID-SMA, Spectral Information Divergence-Spectral Mixed Analysis), 它以 SID[7]作为最佳端元选择的判据, 能够准确选择最优端元组, 达到高精度光谱解混.

1 算 法

1.1 线性光谱混合模型

线性光谱混合分析是以线性光谱混合模型为基础. 线性混合模型是指混合光谱与各个端元之间的关系是线性的, 数学表述如下:

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{a} + \boldsymbol{n} \tag{1}$$

$$\text{s.t} \begin{cases} 0 \leqslant a_j \leqslant 1 \\ \sum_{j=1}^{N} a_j = 1 \end{cases} \tag{2}$$

其中, $\boldsymbol{r} = [r_1, r_2, \cdots, r_L]^{\mathrm{T}}$ 为观测光谱, L 为光谱的波段数; $\boldsymbol{M} = [\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2, \cdots, \boldsymbol{m}_p]$ 为端元光谱组, p 为端元数目; $\boldsymbol{a} = [a_1, a_2, \cdots, a_p]^{\mathrm{T}}$ 为每个端元的丰度估计; $\boldsymbol{n}$ 为噪声, 是一个 L 维向量. 式 (2)表示的是对丰度的物理意义上的限制: 每个端元的丰度不小于 0也不大于 1, 且所有端元的丰度总和不超过 1.

1.2 SID

SID 基于信息论的理论衡量两条光谱之间差异[7]. 假设两条光谱分别为 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_l)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_l)^{\mathrm{T}}$, 可以得到两条光谱的概率向量分别是 $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, \cdots, p_l)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{q} = (q_1, q_2, \cdots, q_l)^{\mathrm{T}}$, 其中 $p_i = x_i \Big\backslash \sum_{i=1}^{l} x_i$, $q_i = y_i \Big\backslash \sum_{i=1}^{l} y_i$. 根据信息理论, 可以得到 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的自信息为

$$I_i(\boldsymbol{x}) = -\log p_i \tag{3}$$

$$I_i(\boldsymbol{y}) = -\log q_i \tag{4}$$

通过式 (3)和式 (4), 可得 $\boldsymbol{y}$ 关于 $\boldsymbol{x}$ 的相对熵:

$$D(\boldsymbol{x} \| \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{l} p_i D_i(\boldsymbol{x} \| \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{l} p_i (I_i(\boldsymbol{y}) - I_i(\boldsymbol{x})) = \sum_{i=1}^{l} p_i \log\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \tag{5}$$

同理可得 $\boldsymbol{x}$ 关于 $\boldsymbol{y}$ 的相对熵:

$$D(\boldsymbol{y} \| \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{l} q_i \log\left(\frac{q_i}{p_i}\right) \tag{6}$$

而 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的光谱信息散度为

$$\mathrm{SID}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = D(\boldsymbol{x} \| \boldsymbol{y}) + D(\boldsymbol{y} \| \boldsymbol{x}) \tag{7}$$

SID 是利用光谱信息的相对熵对两条光谱进行相似度测评的度量, 效果要好于光谱角度匹配[7].

1.3 SID-SMA

SID-SMA 算法主要由 3部分组成: 端元的初选、端元的二次选择和最终的丰度估计. 端元的初选是利用某些规则先去掉一些端元, 然后进入迭代循环, 再去掉一些端元, 留下的那些端元就认为是某个像元真实存在的物质, 最后利用这些端元对该像元进行丰度估计, 实现光谱解混. SID-SMA 算法的流程如图 1所示.

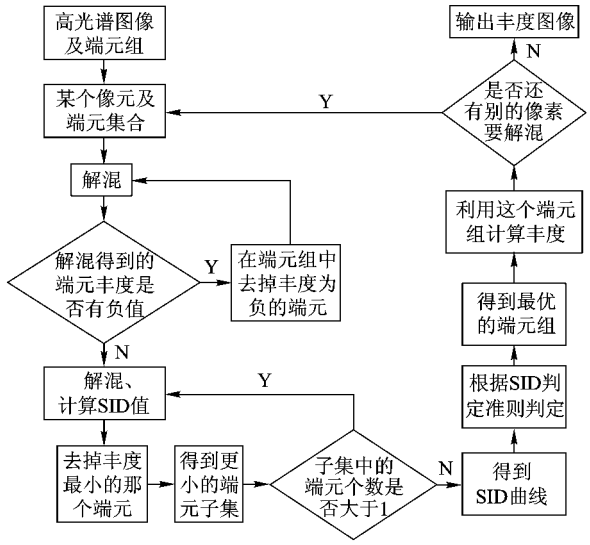

图 1 SID-SMA 算法流程图

根据数据信噪比的不同, 端元的初选有两种规则. 当数据的信噪比较高时, 采用线性逆卷积 (LD, Linear Deconvolution)[8]的规则, 该规则能够在较少的循环内去掉较多的无用端元, 在信噪比较高时, 端元选择的精度较高, 这样既能提高算法的速度, 又能取得好的精度. 当信噪比较低时, 利用 LD 规则容易造成正确端元的遗漏, 当信噪比降低到一定值时, 采用全限制最小二乘法 (FCLS, Full Constrained Least Squares)[9]进行端元的初选. 利用 FCLS每次循环只能去掉一个端元, 效率比 LD 要低, 但在数据信噪比较低时选择端元的正确率较高, 遗漏的端元较少, 因此, 在信噪比低时使用它作为端元的初选. 信噪比的阈值通过实验认为选择 40比较合适.

初选后, 二次选择时先利用剩下的端元组对混合光谱进行最小二乘估计, 利用估计的丰度值以及相应的端元重新建模得到建模光谱, 计算建模光谱与原光谱的 SID, 去掉丰度最小的端元, 得到较小的端元组, 进入下一个循环, 这样, 直到端元组里剩下一个端元为止, 停止循环. 到循环结束时得到一条 SID 曲线, 根据这条曲线能够判定算法进行到第几个循环后留下的是正确的端元. 最后利用这些正确的端元对混合光谱进行最小二乘估计, 得到最终的光谱解混结果.

在二次选择时, 使用的 SID 判定准则是两个相邻循环得到的 SID 变化量:

$$\Delta SID = SID_n - SID_{n-1} \tag{8}$$

其中, n 为迭代次数. 当变化量大于某个阈值时, 认为已经有正确的端元被排除出端元组, 而这个循环之后剩下的端元都是正确的端元. 在实际应用时, 由于正确的端元个数相对整个端元组总是比较少的, 所以判定最佳端元组时, 从最后一个循环往前推, 当 SID 的变化量小于某个阈值时, 认为这个循环以后正确端元开始被排除出端元组. 在判定最佳端元组时, 选用的 SID 变化量阈值要适当. 阈值太大容易造成较多的正确端元遗漏, 而阈值太小, 会使最优端元组的数量过多, 造成端元选择的正确率下降, 导致丰度估计的误差增大. 通过试验, 当阈值的取值在 $2\times10^{-6}\sim6\times10^{-6}$时, 算法的性能变化不大. 本文采用的 SID 变化量阈值是 3×10^{-6}.

选出最佳端元组之后再利用最小二乘的方法求解最终的丰度.

2　算法验证方法与数据

2 1　算法验证方法

为了验证 SID-SMA 的性能, 采用了光谱库中的 29条光谱作为端元组, 混合其中的某些端元形成混合光谱, 把算法实施在这些混合光谱上, 检验算法的端元选取能力和丰度估计能力. 丰度估计的误差为

$$f_{avg} = \frac{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} | a_{ij} - e_{ij} |}{m} \tag{9}$$

其中, n 为端元组中端元的个数, 本文设为 29; m 为混合光谱的条数; a_{ij}为预先设定的第 i条混合光谱第 j个端元的丰度值; e_{ij}为计算得到的第 i条混合光谱第 j个端元的丰度值. 把 SID-SMA 得到的丰度估计误差和端元选择精度与 ISMA[2], FCLS和 LD这 3种算法进行比较, 其中 FCLS已经应用于 ISDAS[10], LD 则已经应用于火星探测中的 Mini-TES数据[11], 而 ISMA 也是用迭代思想选择最优端元组, 它没有初选步骤并且用均方差作为判定准则[2].

2 2　数　据

本文采用的端元从美国地质调查局光谱库中获得, 光谱端元一共 29条, 波段范围从 0 4~ 2 56μm, 波段数为 420个, 光谱分辨率在可见光区域约为 2 nm, 在近红外区域约为 10 nm.

在进行算法验证时, 本文研究了混合光谱分别由 2~ 10个端元合成时的情况. 每种情况都有 1 000条混合光谱, 每次试验时的端元从 29个端元中随机选取. 为了研究噪声对算法性能的影响, 在混合光谱中加入随机噪声. 噪声加入的公式为

$$r'_b = r_b + M \cdot \frac{q(0\ 1)}{SNR} \tag{10}$$

其中, r'_b 为加噪声后的光谱; r_b 为无噪声光谱; $q(0\ 1)$为均值为 0, 方差为 1的随机噪声; SNR (Signal-to-Noise Ratio)为信噪比; M 为噪声的假想反射率, 这里设为 0 5. 本文在研究中, SNR 分别取 100, 50, 25, 12.

3　实验结果

3 1　端元选择精度

端元选择的精度好坏直接决定了 f_{avg}的大小. 当参与解混的端元相对于实际的端元数太多或太少时, 都会带来较大的估计误差. 表 1为 4种方法的端元选择情况. 表 1中的平均选择端元数是每种算法在最终解混时用到的端元数的平均数 (实际平均端元数是 2~ 10个, 平均为 6个), 正确率是选中的端元中实际存在的端元的个数除以选中的端元总个数, 遗漏的端元数是实际混合光谱中存在但是解混时没选中的端元平均个数.

表 1　4种算法的端元选择精度比较

SNR	SID-SMA			ISMA[1]		
	平均选择端元数	正确率	遗漏端元数	平均选择端元数	正确率	遗漏端元数
100	5 87	0 998	0 15	5 63	0 997	0 39
50	5 95	0 938	0 55	5 12	0 965	1 11
25	6 39	0 798	0 85	4 17	0 901	2 20
12	6 95	0 652	1 54	3 26	0 794	3 43
SNR	FCLS[7]			LD[8]		
	平均选择端元数	正确率	遗漏端元数	平均选择端元数	正确率	遗漏端元数
100	10 60	0 567	0 00	8 76	0 681	0 00
50	10 43	0 563	0 16	8 42	0 670	0 37
25	9 96	0 553	0 55	7 94	0 640	0 95
12	9 09	0 533	1 22	7 25	0 594	1 73

从表 1中可知,当 SNR较大时, LD算法的端元选择性能比较好,正确端元遗漏比较少,而且端元选择的正确率比 FCLS要高;但是当 SNR下降到 25和 12时, LD遗漏的端元要比 FCLS多,这也会影响到 LD丰度估计的精度. SID-SMA与 ISMA相比,虽然在端元选择的正确率上不如 ISMA,但是 SID-SMA遗漏的端元要比 ISMA少得多,特别是 SNR为 12时, ISMA遗漏的端元达到了 3.43个,已经漏掉了实际端元的一半多,而它较高的端元选择正确率是以此为代价的,所以这影响了 ISMA在低信噪比时丰度估计性能.

3.2 整体丰度估计误差

图 2为 4种算法的 f_{avg}随 SNR变化的情况.

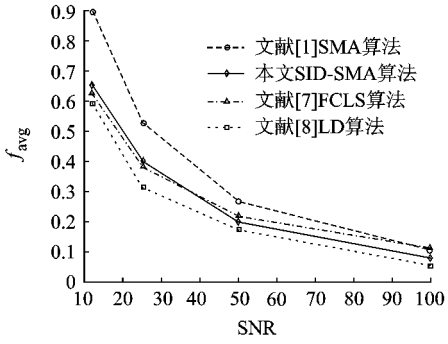

图 2 4种算法的 f_{avg}随 SNR变化曲线

从图 2可知, SNR在 12~100时, SID-SMA算法 f_{avg}最小,且当 SNR为 100时, SID-SMA的 f_{avg}小于 0.1; LD算法在 SNR在 25~100时性能较好,但当 SNR下降到 25时, f_{avg}大于 FCLS,说明 LD比较适合在高信噪比的情况下使用; ISMA算法当 SNR下降时,由于遗漏正确端元多,从而导致 f_{avg}急剧增大,当 SNR下降到 12时, f_{avg}达到 0.9,明显高于其它 3种算法. FCLS在 SNR较高的时候性能稍差,抗噪性能比较强.

3.3 算法的运行时间

当 SNR较高时, SID-SMA采用 LD进行端元的初选,不仅能够取得较高的端元选择和丰度估计的精度,还能够减少算法的循环次数,加快运行速度. 表 2为 SNR为 100时 SID-SMA, ISMA和 FCLS在混合端元数为 3~8个时运行一次所需要的平均时间. 从表 2知, SID-SMA的运行时间最短,速度最快,说明加入 LD作为初选过程的效果十分明显.

表 2 SNR为 100时 3种算法单次运行平均时间 s

算 法	3端元	4端元	5端元	6端元	7端元	8端元
SID-SMA	0.009	0.010	0.011	0.012	0.014	0.015
ISMA[1]	0.032	0.032	0.032	0.032	0.0322	0.032
FCLS[7]	0.026	0.025	0.023	0.023	0.022	0.022

4 结 论

本文提出了一种基于 SID的光谱解混改进算法 SID-SMA,能够通过选择最优的光谱端元子集用于解混来提高丰度估计的精度. 从模拟数据的结果可以看出, SID-SMA的端元选择精度较高,算法的丰度估计误差比 ISMA, FCLS和 LD都要小,能够有效地实现高精度的光谱解混.

参考文献 (References)

[1] 赵慧洁,李娜,贾国瑞,等. 改进独立成分分析在高光谱图像分类中的应用[J]. 北京航空航天大学学报, 2006, 32(11): 1333-1336
Zhao Huijie, Li Na, Jia Guorui, et al. Improved independent component analysis applied to classification hyperspectral imagery[J]. Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2006, 32(11): 1333-1336(in Chinese)

[2] Rogge D M, Rivard B, Zhang J K, et al. Iterative spectral unmixing for optimizing per-pixel endmember sets[J]. IEEE Transaction Geoscience Remote Sensing, 2006, 44(12): 3725-3736

[3] Boardman J W. Automating spectral unmixing of AVIRIS data using convex geometry concepts[C]//In Proceeding of Summary 4th Annual JPL Airborne Geoscience Workshop[S.l.]: JPL Publication 93-26, 1993, I: 11-14

[4] Bateson A, Curtiss B. A method for manual endmember selection and spectral unmixing[J]. Remote Sensing Environment, 1996, 55(3): 229-243

[5] Winter M E. Fast autonomous spectral endmember determination in hyperspectral data[C]//In Proceeding of 13th International Conference of Application of Geologic Remote Sensing. Vancouver, BC, Canada: [s.n.], 1999, II: 337-344

[6] Nascimento J M P, Dias J M B. Vertex component analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data[J]. IEEE Transaction Geoscience Remote Sensing, 2005, 43(4): 898-910

[7] Chang C I. An information-theoretic approach to spectral variability, similarity, and discrimination for hyperspectral image analysis[J]. IEEE Transactions on Information Theory, 2000, 45(5): 1927-1932

[8] Ramsey M S, Christensen P R. Mineral abundance determination: quantitative deconvolution of thermal emission spectra[J]. Journal of Geophysics Research, 1998, 103(B1): 577-596

[9] Heinz D C, Chang C I. Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery[J]. IEEE Transaction Geoscience Remote Sensing, 2001, 39(3): 529-545

[10] Staenz K, Szeredi T, Schwarz J. ISDAS-A system for processing/analyzing hyperspectral data[J]. Technical note, Canadian Journal of Remote Sensing, 1998, 24(2): 99-113

[11] Ruff S W, Christensen P R, Blaney D L, et al. The rocks of Gusev Crater as viewed by the Mini-TES instrument[J]. Journal of Geophysics Research, 2006, 111(E12), doi: 10.1029/2006JE002747

(责任编辑: 刘登敏)