

## 基于正交非负矩阵分解的高光谱遥感图像混合像元分解

孙莉<sup>1,2</sup>,赵庚星<sup>2</sup>

1. 山东农业大学 信息科学与工程学院, 山东 泰安 271018

2. 山东农业大学 农业资源与环境博士后科研流动站, 山东 泰安 271018

**摘要:** 像元分解是遥感图像信息挖掘的重要手段, 非负矩阵分解模型应用于高光谱遥感图像混合像元分解时, 分解的效果与算法所获局部最优解密切相关。本文将带正交性约束的非负矩阵分解用于光谱解混, 保证了分解矩阵列向量的线性无关性, 进而使分解所得端元光谱具有较大的独立性。通过试验分析, 利用正交非负矩阵分解, 实现了对1997年机载可见光及红外成像光谱仪(AVIRIS)高光谱图像的混合像元分解, 结果表明, 增加约束条件后的正交非负矩阵分解, 能成功分离出6种端元光谱, 解混出的端元光谱与参考光谱的光谱角距离更小, 与真实地物的丰度谱图吻合度增强。

**关键词:** 非负矩阵分解; 高光谱遥感图像; 混合像元分解

**中图分类号:** O221; TP751.1

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1000-2324(2017)02-0264-04

## Decomposition of Mixed Pixels of Hyperspectral Remote Sensing Images Based on Orthogonal Non-negative Matrix Factorization

SUN Li<sup>1,2</sup>, ZHAO Geng-xing<sup>2</sup>

1. College of Information Science and Engineering/Shandong Agricultural University, Tai'an 271018, China

2. The Post-doctorate Research Station of Agricultural Resources and Environment/Shandong Agricultural University, Tai'an 271018, China

**Abstract:** Hyperspectral unmixing is a powerful tool for the remote sensing image mining. Nonnegative matrix factorization (NMF) has been adopted to deal with this issue, while the precision of unmixing is closely related with the local minimizer of NMF. Orthogonal NMF which imposes orthogonality constraints on the factor matrices can improve the clustering performance, since it ensures the independent of the endmember spectra. In the experimental test, ONMF was used to unmix the Urban scene which was captured by airborne visible/infrared imaging spectrometer (AVIRIS) in 1997, numerical results showed that ONMF could extract the endmember signature and accurately estimate abundance maps.

**Keywords:** Nonnegative matrix factorization; hyperspectral remote sensing image; decomposition of mixed pixels

高光谱遥感图像由航天、航空载体上的高光谱成像仪获得, 它具有高光谱分辨力的特点, 可在几百、上千个连续光谱波段获取目标图像。高光谱遥感图像的主要优势是它的图像数据可视为三维图像, 即二维图像加一维光谱信息。二维图像描述地表被测物空间信息特征, 一维光谱信息揭示每一像元的光谱曲线特征。由于遥感图像空间分辨率的限制以及地物的复杂多样性, 一个像元内往往会包含多种地物类型(混合像元), 为了提高光谱遥感图像对真实地表覆盖的描述准确性, 需要对图像进行混合像元分解。

近年来, 非负矩阵分解(Nonnegative Matrix Factorization, NMF)被逐渐引入混合像元分解中, 为基于线性光谱混合模型的混合像元分解提供了新的途径。若仅满足线性光谱模型的非负性限制条件, NMF的求解不具有唯一性, 这是由NMF所转化的目标函数的非凸性所导致的, 一般优化算法只能找到其局部最优解。文献<sup>[1,2]</sup>将没有附加任何条件的NMF直接应用于光谱解混, 并针对模拟数据进行实验取得了一定的结果, 由于局部最优解的限制, 真正用于高光谱数据时效果不佳。针对NMF在高光谱混合像元分解的具体应用, 已有学者尝试通过增加有效的约束条件, 改进上述局限性。Jia S.等<sup>[3]</sup>在NMF模型中增加了稀疏性和分段平滑性约束, Miao L.提出了最小体积约束的NMF<sup>[4]</sup>, 吴波等<sup>[5]</sup>以端元光谱之间的差距为约束条件, 问题模型综合了图像的分解误差和端元光谱的影响。赵春晖等<sup>[6]</sup>提出了以最小估计丰度协方差和单形体各顶点到中心点均方距离总和最小约束的NMF, 杨秀

**收稿日期:** 2016-01-09

**修回日期:** 2016-02-23

**基金项目:** 国家自然科学基金(41271235,10901094,11301307);“十二五”国家科技支撑计划(2013BAD05B06-5);山东省优秀中青年科学家科研奖励基金(BF2011SF024,BF2012SF025);山东省高等学校科技计划项目(J16L116)

**作者简介:** 孙莉(1980-),女,博士,讲师,研究方向为最优化算法与理论. E-mail:sunli@sdau.edu.cn

**\*通讯作者:** Author for correspondence. E-mail:zgx@sdau.edu.cn

坤等<sup>[7]</sup>引入端元光谱数学期望的四阶累积量和负熵约束,在问题模型中加入了端元独立性约束。研究表明,增加特定约束条件后,对高光谱图像进行解混,可取得较好的分类效果。

在非负矩阵分解模型中加入正交性约束,称之为正交非负矩阵分解(Orthogonal Nonnegative Matrix Factorization, ONMF)。本文将 ONMF 应用于高光谱混合像元分解,从数据处理的角度解释了增加正交性约束的优势,即保证分解所得端元光谱的独立性。同时,利用 NMF、ONMF 与 K-均值和球形 K-均值的等价关系,分析了四种方法进行特征提取的优缺点。数值结果表明,利用 ONMF 可成功完成对机载可见光及红外成像光谱仪(AVIRIS)采集的 Urban 区域高光谱图像的混合像元分解。ONMF 解混出的端元光谱与 USGS 谱库的真实光谱间的光谱角更小,同时,与真实地物的丰度谱图吻合度较之 NMF 明显增强。

## 1 非负矩阵分解与光谱解混

### 1.1 非负矩阵分解

Lee D.D.和 Seung H.S.提出非负矩阵分解的思想,对于现有的大规模矩阵  $W_{n \times m}$ , NMF 算法旨在寻找非负矩阵  $U_{n \times r}$  和  $V_{r \times m}$ ,使得  $W \approx UV$ ,其中  $W, U, V$  均为非负矩阵,最终通过两个低秩矩阵  $U$  和  $V$  近似  $W$ 。NMF 在处理大规模数据时所体现出的优势是其它传统矩阵分解算法所无法比拟的。事实上, NMF 模型可以转化为如下具有非负约束的优化问题,

$$\begin{aligned} \min f(U, V) &= \frac{1}{2} \|W - UV\|^2 \\ \text{s.t. } U &\geq 0, V \geq 0. \end{aligned} \quad (1)$$

其中,  $\|\cdot\|$  代表 Frobenius 范数,  $U \geq 0, V \geq 0$  表示矩阵  $U$  和  $V$  所有元素均为非负数。

### 1.2 光谱解混中的非负矩阵分解

高光谱图像可以看成是三维数据构成的立方体,它的  $X$  和  $Y$  维表现的是地球表面的坐标,第三维是波段,它由光波的频率所决定,实际的数据是地球上的特定位置在某一波长下的强度。立方体的顶层对应长的波长数据,底层数据对应短的波长数据。例如,将一幅 AVIRIS 图像读取为  $s \times t \times m$  的矩阵,其中  $m$  对应波段数,  $s \times t$  对应图像的宽度和高度,不妨设图像的像素点有  $n = s \times t$  个。将上述矩阵重新排列后,可得到  $n \times m$  的矩阵  $W$ 。

利用 NMF 实现  $W$  的分解后,得到的矩阵  $U_{n \times r}$  为丰度矩阵,这里  $r$  对应光谱图像中端元的个数,  $U$  的列向量分别对应某个端元的空间分布。 $V_{r \times m}$  则为端元矩阵,它的行向量为某个端元的光谱向量。

## 2 正交非负矩阵分解

### 2.1 问题模型

Ding<sup>[8]</sup>首先提出了 ONMF,已有学者证明 ONMF 与  $K$ -均值聚类等价,研究表明对  $V$  增加正交性约束后, ONMF 等价于对  $W$  按列聚类<sup>[9]</sup>。ONMF 的问题模型可描述如下,

$$\begin{aligned} \min f(U, V) &= \|W - UV\|^2 \\ \text{s.t. } U &\geq 0, V \geq 0, VV^T = I. \end{aligned} \quad (2)$$

这里  $I$  表示  $r \times r$  的单位矩阵。ONMF 可视为增加正交性约束后的 NMF 问题,  $V$  增加正交性约束后,在高光谱数据处理中具有更好的优势。

### 2.2 正交约束在光谱解混中的优势

ONMF 问题模型(2)中,正交约束条件  $VV^T = I$  一旦满足,  $V$  的行向量便保持了正交关系,易推知  $V$  的行向量是线性无关的。由于  $V$  的行向量对应端元光谱,正交约束的满足保证了端元光谱具有较大的独立性。

文献[10],证明了 ONMF 问题(2)与球形  $K$ -均值问题等价。事实上,利用  $K$ -均值和球形  $K$ -均值可实现光谱解混的第一步工作——端元提取。 $K$ -均值聚类算法采用均值作为某类的代表点,当类间的大小差别较大时,通过分割以达到极小化目标函数的目的,这会导致错误的聚类结果。球形  $K$ -均值以最大化相同类中数据点的相似度为目标,可以很好的克服上述  $K$ -均值的缺陷。NMF 和 ONMF

与  $K$ -均值和球形  $K$ -均值相比, 优势在于前两个方法可以同时完成端元提取和混合像元分解的工作, 而后者在获知端元光谱后, 需要与其它方法结合, 进一步求解描述端元分布的丰度矩阵。

### 3 试验分析

#### 3.1 遥感数据

文中数据取自 1997 年机载可见光及红外成像光谱仪(AVIRIS)采集到的 Urban 高光谱图像 (307×307 像素), 有 210 个波段。该地区包含了屋顶、草地、树木、道路等多种地物的混合, 适用于检验算法对于高混合度数据的适应能力。去除信噪比低和水蒸气吸收波段(1~4, 76, 87, 101~111, 136~153 以及 198~210), 余下 162 个有效波段。图 1 为第 53,35,10 波段图像合成的伪彩色图像。



图 1 Urban 区域的 AVIRIS 数据伪彩色图  
Fig.1 AVIRIS data pseudo-color image of Urban Area

#### 3.2 结果分析

首先设置端元数目为 6, 即  $r=6$ , 分别采用正交非负矩阵分解(ONMF)和非负矩阵分解(NMF), 对 Urban 数据进行高光谱混合像元分解。利用文献[11]给出的有效集型算法求解 NMF 问题模型, ONMF 则采用文献[12]给出的乘性迭代公式进行矩阵更新。图 2 中, 第 1 行的 6 个图像反映了 Urban 区域的真实丰度谱图, 第 1-6 列分别对应路面, 草地, 树木, 屋顶, 金属以及裸地。ONMF 解混结果显示在第 2 行, 第 3 行则是 NMF 实现的解混结果。从图中可以看出, ONMF 有效分离了草地, 树木, 屋顶, 金属以及裸地的丰度谱图, 路面的丰度谱图不理想。采用 NMF 实现的解混结果, 其中仅能有效提取树木, 屋顶, 裸地三者的丰度谱图, 路面、草地、金属的分离效果不明显。

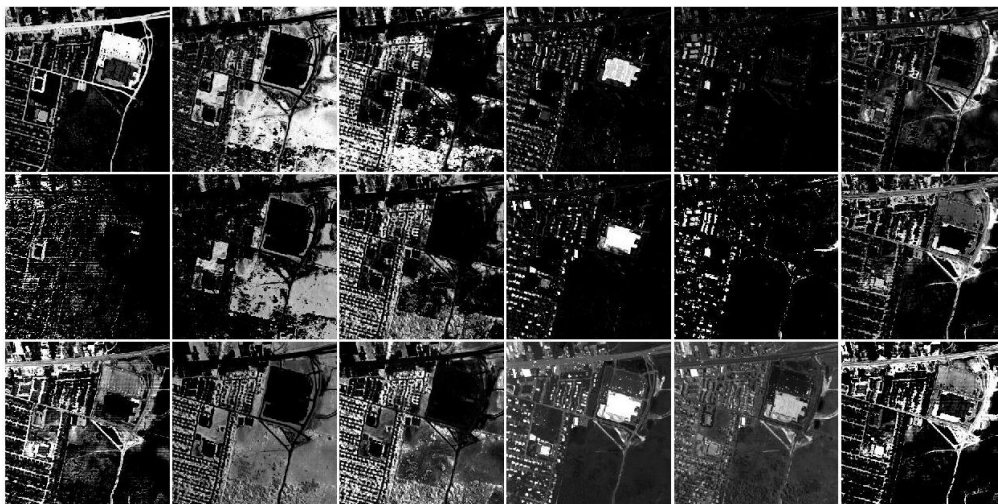


图 2 Urban 区域的 AVIRIS 数据解混后丰度谱图对比  
Fig.2 Comparison of the abundance map obtained by NMF and ONMF

另一方面, 取定类别数为 6, 即  $k=6$ , 利用  $K$ -均值和球形  $K$ -均值算法对上述相同的 162 个波段的高光谱数据进行处理, 可获得 6 个聚类中心(特征光谱信息)。

我们将美国地质调查局(USGS)库中的对应光谱作为参考光谱, 计算 ONMF、NMF、 $K$ -均值、球形  $K$ -均值分离出的特征光谱与真实地物光谱之间的光谱角距离(Spectral Angel Distance, SAD)。通过 SAD 计算出的角度越小代表特征提取出的端元光谱与参考光谱越匹配。光谱角的计算公式为

$A_{SAD}(V_a, V_b) = \arccos\left(\frac{(V_a, V_b)}{\|V_a\| \cdot \|V_b\|}\right)$ , 其中  $V_a, V_b$  表示不同端元的光谱向量。

表 3 AVIRIS 数据 USGS 谱库的真实光谱和估计的端元光谱的 SAD 比较

Table 3 SAD comparison for the real AVIRIS data in USGS and estimated endmember spectrum

端元 Endmember	光谱角 Spectrum angel			
	K-均值	球形 K-均值	NMF	ONMF
屋顶	0.4377	0.0964	0.4267	0.0966
路面	0.1124	0.0720	0.2414	0.0782
裸地	0.0876	0.1266	0.3683	0.2972
金属	0.1372	0.3808	0.3883	0.2162
树木	0.1006	0.0671	0.1883	0.0565
草地	0.0393	0.0517	0.3831	0.0468

数值结果表明, ONMF 提取出的端元光谱与参考光谱之间的夹角接近于 0, 较之 NMF 更接近真实端元光谱。通过 ONMF 进行端元提取的精度与球形 K-均值相当, 较之 K-均值和 NMF 实现的端元提取, 精度明显提高。

#### 4 结 语

非负矩阵分解和基于线性光谱混合模型的混合像元分解相符合, 通过 NMF 分解所得的  $U$  和  $V$  分别对应丰度矩阵和端元矩阵。利用 NMF 处理高光谱数据, 可同时实现端元提取和混合像元分解工作。由于局部最优解的限制, NMF 应用于高光谱数据时效果不佳。通过对 NMF 问题模型增加特定的约束条件, 在一定程度上可以提高分解结果的有效性。

在非负矩阵分解模型中加入正交性约束, 称之为正交非负矩阵分解。从高光谱数据处理的角度看, 正交性约束保证了分解矩阵中端元光谱的独立性。数值结果表明, ONMF 与球形 K-均值实现的端元提取精度相当, 比通过 NMF 和 K-均值提取的端元光谱更接近真实端元光谱。同时, 与球形 K-均值相比, ONMF 分解获得的矩阵  $U$  同时给出了每个端元的空间分布。本文方法较好改善了 NMF 的处理效果, 为高光谱混合像元分解提供了有效手段。

数值测试过程中, 求解 NMF 的有效集型算法较之其它求解算法, 数值结果更好, 我们将进一步研究有效集指标与光谱解混相关指标的对应关系, 并设计求解 ONMF 问题的有效集型算法。

#### 参考文献

- [1] Sajda P, Du S, Parra L. Recovery of constituent spectra using non-negative matrix factorization[C]. Proc. SPIE: The International Society for Optical Engineering, 2003,5207:321-331
- [2] Pauca VP, Piper J, Plemmons RJ. Nonnegative matrix factorization for spectral data analysis[J]. Linear Algebra Appl., 2006,416(1):29-47
- [3] Jia S, Qian Y. Constrained nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing[J]. IEEE Trans. Geosci. Remote Sens., 2009,47(1):161-173
- [4] Miao L, Qi H. Endmember extraction from highly mixed data using minimum volume constrained nonnegative matrix factorization[J]. IEEE Geosci. Remote Sens., 2007,45(3):765-777
- [5] 吴 波,赵银娣,周小成.端元约束下的高光谱混合像元非负矩阵分解[J].计算机工程,2008,34(22):229-230,233
- [6] 赵春晖,成宝芝,杨伟超.利用约束非负矩阵分解的高光谱解混算法[J].哈尔滨工程大学学报,2012,33(3):377-382
- [7] 杨秀坤,王东辉.利用独立性约束非负矩阵分解的高光谱解混算法[J].哈尔滨工程大学学报,2014,35(5):637-641
- [8] Ding C, Li T, Peng W, et al. Orthogonal nonnegative matrix t-factorizations for clustering[C]. In: KDD'06: Proc.12<sup>th</sup> ACM SIGKDD Internet. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. ACM, 2006:126-135
- [9] Yang Z, Oja E. Linear and nonlinear projective nonnegative matrix factorization[J]. Trans. Neural Netw., 2010(21):734-749
- [10] Pompili F, Nicolas G, Absil P, et al. Two algorithms for orthogonal nonnegative matrix factorization with application to clustering[J]. Neurocomputing, 2014(141):15-25
- [11] Kim J, Park H. Fast nonnegative matrix factorization: an active-set-like method and comparisons[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2011,33(6):3261-3281
- [12] Li Z, Wu XD, Peng H. Nonnegative matrix factorization on orthogonal subspace[J]. Pattern Recognition Letters, 2010(31):905-911