

密级:

中国科学院研究生院

硕士学位论文

基于凸面几何的光谱解混算法研究

作者姓名: 张明

指导教师: 童庆禧 研究员 中国科学院遥感应用研究所

张霞 副研究员 中国科学院遥感应用研究所

学位类别: 工程硕士

学科专业: 电子与通信工程

培养单位: 中国科学院遥感应用研究所

答辩委员会主席(签字):

2012 年 5 月

Spectral Unmixing of Hyperspectral Data Using Convex
Geometry Concepts

By
Zhang Ming

A Dissertation Submitted to
Graduate University of Chinese Academy of Sciences
In partial fulfillment of the requirement
For the degree of
Master of Engineering

Institute of Remote Sensing Application, Chinese Academy of
Sciences
May, 2012

原创性声明

郑重声明：本人所呈交的学位论文，是在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经明确标注引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或研究成果。与本人合作并对本文研究做出过贡献的同志均已在论文中予以明确说明,并表示了致谢。

申请学位论文与资料若有不实之处，本人承担一切相关责任。

论文作者签名：

日 期：2012 年 5 月

学位论文使用授权说明

本人完全了解中国科学院遥感应用研究所关于收集、保存、使用学位论文的规定：

按照研究所要求提交学位论文的印刷本和电子版本；

研究所有权保存学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务；

研究所可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；

在不以赢利为目的的前提下，研究所可以公布论文的部分或全部内容。

论文作者签名：

日期：2012年5月

导师签名：

日期：2012年5月

摘 要

成像光谱技术将确定地物物理性质的光谱与确定地物空间分布与几何特性的图像有机地结合在一起, 为人类分析地物的几何以及物理特性提供了新的视角。但由于遥感器空间分辨率的限制以及自然界地物的复杂多样性, 成像光谱仪获取的具有丰富信息的高光谱数据, 在应用中一个的突出问题就是混合像元问题。光谱解混为研究混合像元问题提供了重要思路, 也成为了高光谱数据信息提取中的重要方法。

在光谱解混应用中, 利用高光谱数据在特征空间中的凸面几何特征, 已发展了许多优秀的算法, 凸面几何分析也成为了理解和分析高光谱数据的重要工具, 本文就凸面几何应用于光谱解混涉及的问题和关键技术展开了研究, 在系统归纳总结了当前典型的基于凸面几何的光谱解混算法的基础上, 针对当前光谱解混应用中的问题进行了探讨, 具体研究工作体现在以下几个方面:

1. 研究分析了数据降维及维数确定方法。首先对目前典型的数据降维及维数确定方法进行了探讨, 对其中采取的思想进行了详细分析, 并通过将噪声白化引入 HySime (hyperspectral signal identification by minimum error) 算法, 提高了 HySime 算法在不同噪声条件下的稳定性与准确性。实验结果表明改进后的 HySime 与另一自动维数确定方法——NSP (noise subspace projection) 算法在不同情况下所得结果有很好的 consistency。

2. 研究了最小外切单形体分析算法的优化方法。通过引入有向距离来确定点与单形体的位置关系, 由于初始单形体内部的点不影响最小外切单形体分析的最终结果, 因此可以去除已减小计算量, 从而提高算法效率。

3. 提出通过直接求解非线性约束优化问题得到最小外切单形体的思路, 并通过实验验证了该思路的可行性与有效性。由于最小外切单形体的求解问题可以看做是约束条件为两个非线性不等式约束的优化问题, 而非线性约束优化问题的求解已有相应的算法, 如序列二次规划法和信赖域方法等, 实验结果表明, 非线性约束优化应用于最小单形体求解是可行且有效的。

关键词: 高光谱遥感 光谱解混 端元提取 凸面几何 单形体 线性混合模型

Abstract

Imaging spectroscopy combines the spectral signatures of materials with the spatial distribution and geometric characteristics of objects, it opens a new view for us to analyse the geometric and physical characteristics of the objects. However, owing to low spatial resolution of the sensor and the presence of intimate mixtures in the scene, the signals acquired by the sensor are actually mixtures of the spectral signatures of materials that present in the scene. Mixed pixels are a major source of inconvenience in application. Spectral unmixing provides an important approach to solve the problem, and it becomes a major method of information extraction in hyperspectral data.

In the application of spectral unmixing, the convex geometry characteristics of hyperspectral data in the feature space can be used to develop fantastic algorithms as well as be a great tool to understand and analyze the data itself. This paper mainly focus on the relevant issues and key technologies involved in the application of convex geometry in the spectral unmixing, discussing the problems in spectral unmixing based on a systematical summary of typical algorithms using convex geometry concepts. The specific research reflects in the following areas:

Firstly, it analyses the method of data dimensionality reduction and how to determine to dimension. The typical method are analyzed. The robustness and accuracy of HySime (hyperspectral signal identification by minimum error) algorithm are improved through a noise whitening process. The experimental result shows that the improved HySime and another automatic algorithm NSP (noise subspace projection) are in good agreement under different circumstances.

Secondly, an optimization method for minimum circumscribed simplex analysis concepts is proposed. The method adopted is removing the pixels which don't affect the final result of analysis. By introducing the directional distance, the pixels which outside the initial simplex can be found out, as a result, reducing the calculation and improving the efficiency of the algorithm.

Thirdly, the method that solving nonlinear constrained optimization problem directly to get the minimum circumscribed simplex is proposed and it has been proved to be feasible and effective. It can be treated as a optimization problem with two nonlinear inequality constraints. Both sequential quadratic programming (SQP-MinV) and trust-region methods can be the answer to this problem. The result shows that the minimum circumscribed simplexes achieved by these two algorithm are in good agreement and consistent with the true value, and shows a higher efficiency in SQP-MinV. Compared to other typical algorithms using minimum circumscribed simplex concept, SQP-MinV also has good performance in terms of efficiency and accuracy.

Keywords: Hyperspectral Remote Sensing, Spectral Unmixing, Endmember Extraction, Convex Geometry, Simplex, Linear Mixing Model

目 录

摘 要	I
Abstract.....	II
目 录	IV
第 1 章 引言	- 1 -
1.1 研究背景与意义.....	- 1 -
1.2 研究现状.....	- 1 -
1.3 论文研究内容.....	- 3 -
第 2 章 凸面几何与光谱解混技术	- 6 -
2.1 线性光谱混合模型与光谱解混.....	- 6 -
2.2 单形体与凸面几何计算.....	- 8 -
2.3 端元提取.....	- 12 -
2.3.1 最大内接单形体分析算法.....	- 13 -
2.3.2 最小外切单形体分析算法.....	- 18 -
2.4 丰度反演.....	- 23 -
2.4.1 无约束最小二乘法.....	- 24 -
2.4.2 约束最小二乘法.....	- 24 -
第 3 章 数据降维与自动维数确定方法研究	- 25 -
3.1 高光谱数据去相关变换.....	- 25 -
3.1.1 PCA 变换	- 25 -
3.1.2 MNF 变换.....	- 27 -
3.2 噪声估算与噪声白化.....	- 28 -
3.2.1 噪声估算.....	- 29 -
3.2.2 噪声白化.....	- 31 -
3.3 维数确定.....	- 34 -
3.3.1 信号子空间与维数.....	- 34 -
3.3.2 HFC、NWHFC、NSP 算法	- 36 -
3.3.3 HySime 算法	- 38 -
3.3.4 信号子空间维数、本征维数与虚拟维数.....	- 40 -
3.4 HySime 算法的改进与实验	- 41 -
3.4.1 HySime 算法中信号相关矩阵的估算	- 41 -
3.4.2 基于噪声白化的 HySime 算法	- 42 -
3.4.3 模拟数据实验.....	- 43 -
3.4.4 真实数据实验.....	- 47 -
第 4 章 非线性约束优化在最小外切单形体分析中的应用	- 50 -
4.1 最小外切单形体分析算法优化.....	- 50 -
4.1.1 有向距离的“方向”与“大小”.....	- 50 -

4.1.2 初始单形体内部点去除法.....	- 52 -
4.2 最优初始端元集选择方法.....	- 58 -
4.3 非线性约束优化及最小外切单形体求解.....	- 59 -
4.4 基于凸面几何的光谱解混算法的对比实验.....	- 63 -
4.4.1 模拟数据实验.....	- 63 -
4.4.2 真实数据实验.....	- 68 -
第 5 章 总结与展望	- 75 -
5.1 本文总结.....	- 75 -
5.2 研究展望.....	- 75 -
参考文献	- 77 -
致 谢	- 80 -

第1章 引言

1.1 研究背景与意义

遥感对地观测主要为了解决两个重要问题，一是几何问题，二是物理问题，图像为分析地物的几何特性提供了基础，而光谱往往反映了地物所特有的物理性状，因为不同的分子、原子和离子的晶格振动引起不同波长电磁波的发射和吸收，进而导致不同的地物表现出不同的光谱特征[1, 2]。成像光谱仪通过分光技术，将电磁波信号分解为许多相邻窄波段(通常波段宽度小于 10nm)，从而使图像中每个像元都对应一条完整的光谱曲线，这为地物物理特性的分析提供了基础。

随着成像光谱技术(imaging spectroscopy)的不断发展，成像光谱仪(imaging spectrometer)采集得到的图像包含了越来越丰富的空间、辐射和光谱信息，为地表物质的信息提取提供了一个强有力的手段。

成像光谱仪获取的地面光谱信号以像元为单位记录，它是像元所对应的地表物质光谱信号的综合，在高光谱遥感图像中，由于传感器空间分辨率的限制以及自然界地物的复杂多样性，像元所对应的地表往往包含不同的物质类型，使得混合像元普遍存在于高光谱遥感图像中，而混合像元的存在，导致传统的像元级分类方法并不适用于高光谱图像的分析，因为混合像元很难完全归属到某一参考类。因此，为了提高遥感应用的精度，就必须解决混合像元的分解问题，使遥感应用由像元级达到亚像元级，即进入像元内部，将混合像元分解为不同的“基本组分单元”，这就是“光谱解混”过程，这些“基本组分单元”一般被称为端元。

随着高光谱成像系统的深入发展，高光谱数据在民用、军用中快速发展，如岩矿识别、目标探测、精细农业等多方面，都有高光谱遥感的应用，进而也对混合像元分解，尤其是无监督的混合像元分解提出了新的更高的要求。因此，对混合像元分解的研究，有重要的现实意义，光谱解混也成为目前研究的热点和难点。

1.2 研究现状

为了对一幅给定的遥感影像进行模型描述，一般假定其中的地物由少数几种光谱特征相对固定的本征物质(distinct materials)混合而成，根据“混合”方式的不

同, 光谱混合模型分为线性混合和非线性混合两种。线性光谱混合模型假设入射辐射与地表场景中的单种组分相互作用后即被传感器接收, 不同组分之间没有多次散射, 非线性光谱混合模型则考虑了入射辐射与不同地物之间的多次散射。尽管线性光谱混合模型比较简单, 但其对许多真实场景中散射机理的近似已能满足应用需求, 这一点在针对地球和其他行星进行的大量研究工作中已得到证实。非线性光谱混合模型以辐射传输理论为基础, 但由于场景中相关参数的获取十分困难, 使得推断端元光谱特征和物质组分比例的过程成为了一个复杂的病态问题 (ill-posed problem), 因此目前对于光谱解混的研究, 主要基于线性光谱混合模型, 且已发展出了大量的光谱解混算法。

根据是否采用统计手段量化高光谱数据的统计特性, 可以将现有的线性光谱解混算法分为统计和几何两类[3, 4]。具体来说, 统计类方法对混合像元的处理主要通过计算图像数据在特征空间中的一阶、二阶以及更高阶统计特性来进行, 几何类方法把光谱混合模型与空间几何体联系起来, 利用这些几何体的几何特征来进行光谱解混。由于统计类方法涉及较复杂的统计计算, 其执行效率往往较低, 而几何类方法利用高光谱数据在特征空间中的几何特征, 避免了复杂统计特征的计算, 因此国内外学者对几何类方法进行了大量研究。

对于可以用线性光谱混合模型描述的场景, 场景中的混合像元可以看做是端元的线性凸组合, 端元对应了凸面单形体的顶点。(Joseph W. Boardman, 1995) 在详细介绍线性混合与凸面几何关系的基础上, 提出了著名的纯像元指数 (pure pixel index, PPI) 思想, 即如果像元是端元对应的纯像元, 则图像中所有像元投影到空间中任意直线时, 该像元位于投影线段端点的概率越大。作为一种监督的处理方法, PPI 方法与 N 维可视化 (N-d visualization) 技术一起, 在高光谱数据分析处理中得到了广泛应用[5]。(Maurice D. Craig, 1994) 提出了最小体积变换 (minimum volume transform, MVT) 的思想, 认为可以通过确定包络数据的最小体积外切单形体的顶点来确定端元[6]。这两种方法中, PPI 算法假设图像中端元对应的纯像元存在, MVT 算法则无此假设, 两种方法既为基于凸面几何的光谱解混提供了两种思路, 也将基于几何特征的端元提取算法分为了两种类型——有纯像元假设的最大内接单形体分析和无纯像元假设的最小外切单形体分析, 此后, 不同学者在此基础发展了大量算法。

(Michael E. Winter, 1999)提出了寻找最大内接体积单形体的 N-FINDR 算法, 该算法从一个初始端元集合开始, 通过逐像元逐端元的替换过程, 最终找到构成最大体积单形体的像元点, 作为端元[7]。(Jose M. P. Nascimento, Jose M. Bioucas Dias, 2005) 提出了顶点成分分析 (vertex component analysis, VCA)算法, 该算法通过反复寻找正交向量并计算图像矩阵在正交向量上的投影距离逐一提取端元。(耿修瑞, 2005)提出了不需要对数据进行降维的最大体积(maximum volume, MaxV)端元提取算法, 该方法采用逐次搜索策略, 将与当前端元集合构成体积最大的像元点作为新端元, 直到搜索到所需端元个数。这些算法, 都可以归类为有纯像元假设的最大内接单形体分析算法。

(Li Jun, Jose M. Bioucas Dias, 2008)提出了最小体积单形体分析(minimum volume simplex analysis, MVSA)分析算法, 该算法通过逐次二次规划的方法, 对非凸优化问题进行求解[8]。(Tsung-Han Chan 等, 2009)提出了最小体积外包单形体(minimum-volume enclosing simplex, MVES)算法, 该方法采用线性凸优化理论, 通过迭代计算得到最小体积外包单形体[9]。(Jose M. Bioucas Dias, 2009) 提出了分裂增广拉格朗日的单形体确定方法 (simplex identification via split augmented Lagrangian, SISAL) , 采用增广拉格朗日法来求解约束优化问题, 得到最小体积单形体。这些算法, 都可以归类为无纯像元假设的最小外切单形体分析算法。

虽然目前基于凸面几何进行光谱解混已有大量研究成果, 但仍有许多问题值得进一步探讨, 例如:

①现有光谱解混算法中往往将图像中的端元数目作为一个已知量, 但实际中端元数目并非已知, 需要进行估算, 而在缺乏先验知识的条件下对端元数目估算, 尚未形成统一的准则。

②在实际应用中, 相对于最大内接单形体分析算法, 最小外切单形体分析算法的效率问题将变得显著, 如何能在不影响算法结果的基础上, 提高算法的效率, 对于实际应用有重要意义, 值得进一步研究。

1.3 论文研究内容

本文主要包括四个方面:

①介绍凸面几何与高光谱数据光谱解混之间的联系, 归纳总结目前典型的基

于凸面几何的光谱解混算法，并探讨算法的主要思想以及算法之间的联系与区别。

②介绍目前常用的数据降维和维数确定方法，并对现有的维数确定方法进行改进，通过实验验证改进后算法的有效性。

③针对目前寻找最小体积外切单形体的算法执行效率低的问题，探讨了减少最小体积外切单形体分析方法计算量的思路，并通过实验进行了验证。

④提出了直接通过非线性约束优化过程求取最小外切单形体的思想，并通过实验验证了方法的可行性与有效性。

本文章节安排如下：

第一章，引言。介绍本文的研究背景和意义，归纳总结基于凸面几何的光谱解混算法的研究现状，介绍本文的主要研究内容，并对章节做出安排。

第二章，凸面几何与光谱解混技术。在介绍线性光谱混合模型、光谱解混、凸面几何概念的基础上，阐述其中的联系，然后针对光谱解混的两项内容——端元提取和丰度反演，分别进行介绍。端元提取算法被分为最大内接单形体分析算法和最小外切单形体分析算法两类，分类分析算法的主要思想、流程以及算法之间的联系与区别。丰度反演算法主要介绍目前常用的基于最小二乘的丰度反演方法。

第三章，数据降维与自动维数确定方法研究。针对数据降维涉及的去相关方法选择以及维数确定问题，首先介绍目前常用的去相关变换方法——PCA 变换和 MNF 变换，然后探讨噪声估算和噪声白化的方法，最后分析目前常用的维数确定方法的主要思想，并对现有的算法进行改进，通过实验验证改进后算法的性能。

第四章，非线性约束优化在最小外切单形体分析中的应用。首先介绍最小外切单形体分析算法的优化方法，通过引入有向距离来判断点与初始单形体的位置关系，去除位于初始单形体内部的点以提高算法效率。在分析最小外切单形体分析与非线性约束优化过程之间关系的基础上，提出直接通过序列二次规划法求解这一非线性不等式约束优化问题，并通过实验验证该方法的可行性与有效性。最后通过模拟数据和真实数据实验，对当前典型的基于凸面几何的光谱解混方法进行定量分析和比较。

第五章，总结与展望。对全文进行了总结，并对今后进一步工作的内容进行展望。

第2章 凸面几何与光谱解混技术

2.1 线性光谱混合模型与光谱解混

遥感器获取的地面光谱信号以像元为单位记录，它是像元所对应的地表物质光谱信号的综合，在高光谱遥感图像中，由于遥感器空间分辨率的限制以及自然界地物的复杂多样性，像元所对应的地表往往包含不同的物质类型，使得混合像元普遍存在于高光谱遥感图像中。

为了对一幅给定的遥感影像进行模型描述，一般假定其中的地物由少数几种光谱特征相对固定的本征物质(distinct materials)混合而成，也就是说，如果这幅遥感影像中大多数的光谱变化都能够看作是少数几种本征物质（如水、草地等）按照不同比例混合的结果，那么可以通过这些“本征光谱”的某种方式的组合来建立模型，以描述该遥感影像[10]。这些光谱特征相对固定的本征物质被称为端元(endmembers)，混合像元中各种端元所占的比例被称为丰度(fractional abundance)，如果一个像元只由一种端元构成，则称该像元为纯像元。从另一角度，可以这样表达：高光谱影像可以看做由光谱特征相对固定的端元构成，端元在影像中的存在形式有两种，一种是以纯像元形式存在，另一种是以混合像元形式存在。

由于混合像元普遍存在于高光谱遥感图像中，因此光谱解混的目的就是根据图像提供的信息，判断各混合像元是由哪些纯像元、以怎样的方式混合的[2]。判断“由哪些纯像元”的过程一般称为端元提取(endmember extraction 或 endmember determination)，确定“以怎样的方式”的过程一般称为丰度反演(abundance inversion 或 abundance estimation)。

在图 2.1 中，假设遥感探测器观测的地表场景可以采用“棋盘”形状描述。在这种情况下，入射辐射与地表场景中的单种组分相互作用后即被传感器接收（不同组分之间没有多次散射）。如果将地表场景看作是由不同端元按照丰度比例混合而成，那么地表反射辐射将按相同比例传递这种混合特征，也就是说，地表反射辐射光谱与端元光谱之间存在线性关系，用模型来描述这种关系，就是线性光谱混合模型(linear mixing model)，用公式表示为[11]：

$$Y = \sum_{i=1}^p s_i a_i + W = SA + W \quad (2.1)$$

其中, i 为不大于 p 的正整数, p 表示端元数目, Y 表示图像像元光谱矩阵(即模拟高光谱图像), a 、 A 表示丰度信息, s 、 S 表示端元光谱, W 表示加性噪声。

考虑到公式 2.1 中丰度比例的物理意义, 各个端元的丰度还应满足两个约束条件, 用公式表示为:

$$a_i \geq 0 \quad (2.2)$$

$$\sum_{i=1}^p a_i = 1 \quad (2.3)$$

公式 2.2 一般被称为“非负约束条件”(non-negativity condition), 公式 2.3 一般被称为“和为一约束条件”(full additivity condition)。

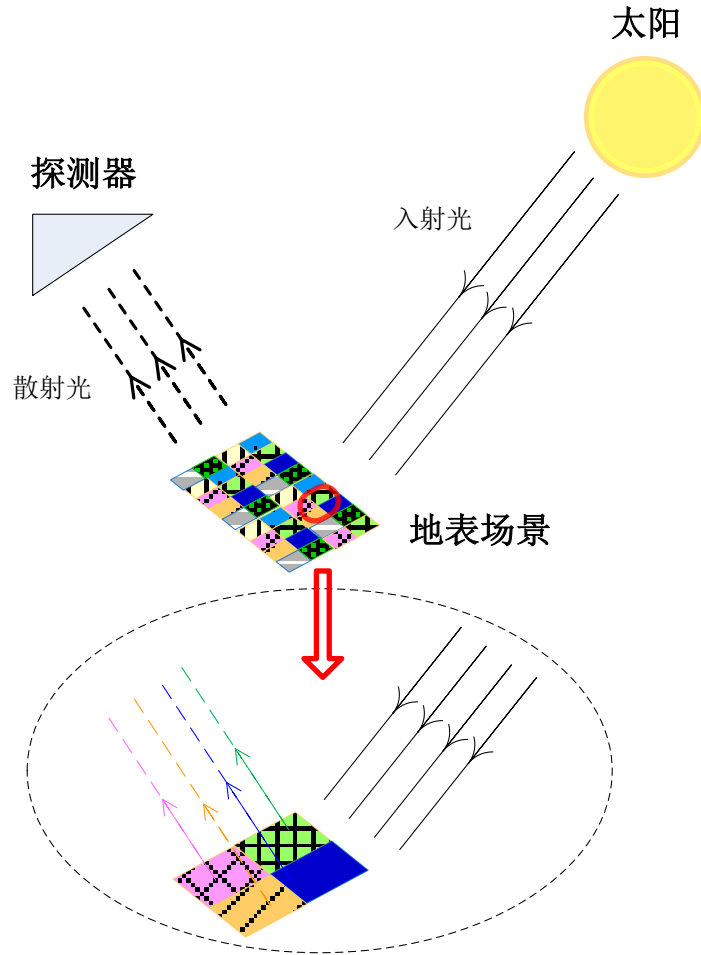


图 2.1 线性混合场景示意图

虽然无论从理论上还是在实际应用中, 线性光谱混合模型都有其缺陷, 但在针对地球和其他行星进行的研究工作中, 线性光谱混合模型得到了大量成功的应

用，逐渐成为了高光谱数据处理中的一个标准部分[11]，现有的光谱解混算法也大都基于此模型。

2.2 单形体与凸面几何计算

如果不考虑公式 2.1 中的误差项，则公式主要表达有两层意思：一是混合像元的光谱由端元光谱线性混合而成；二是线性混合的各比例“非负”且“和为一”。这与 n 维空间中凸集的定义是一致的。凸集中的点可以定义为：由凸包顶点按照“非负”且“和为一”的比例系数线性组合而成的点。两者之间的关系示意图如图 2.2 所示[5]。

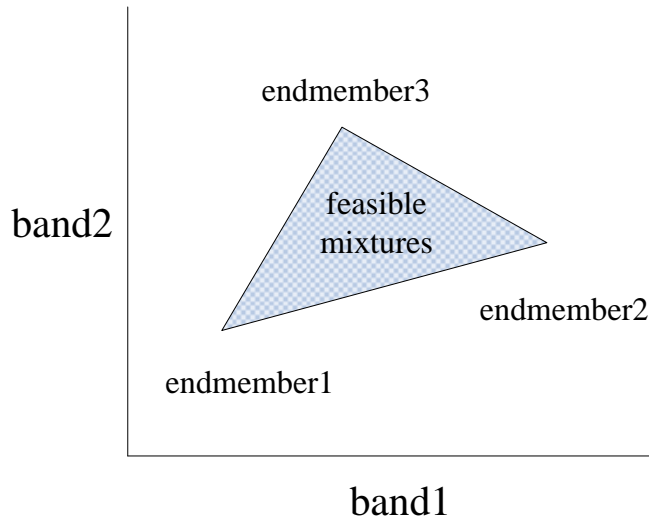


图 2.2 三端元混合，混合像元位于三角形内

对于波段数为 L 的高光谱影像，图像中每个像元可以看做 L 维空间中的一个点，这个 L 维空间的各个分量对应图像的各个波段，一般称此空间为图像的特征空间。如果一幅高光谱影像可以通过线性光谱混合模型进行描述，在忽略误差项的前提下，由于丰度“非负”和“和为一”约束，图像中每个像元均为端元的凸组合，即像元集合与端元集合构成了 L 维空间中的一个凸集(convex set)，这个凸集一般被称为单形体(simplex)。这样，从几何上，端元对应单形体的各顶点，图像中的像元分布在“端元”所围成的凸面体内。高光谱图像波段数 L 往往很大，因此高光谱数据存在于一个“高维”空间中，但由于波段间的相关性很强，实际数据往往存在于比 L 小很多的“低维”空间中。对于可以用线性光谱混合模型描述的高光谱数据，如果影像中端元数目为 p ，则这些端元在空间中围成一个 $(p-1)$ 维的单形体，即该高光谱数据在空间中分布的实际维数为 $(p-1)$ 。高光谱数据的这一几

何特性，被广泛用于数据的分析以及可视化，特别是在光谱解混应用中，凸面几何是理解和分析高光谱数据的重要工具[2, 5]。

对于高光谱影像，一般认为“影像波段数 L 远大于端元数目 p ”是始终成立的，而 p 个端元点在空间中围成一个 $(p-1)$ 维的单形体，因此高光谱数据的波段是明显“过剩”的。这一高光谱数据所独有的特性，是采用凸面几何分析高光谱数据的基础。因为只有“过剩”之后，才能确定获取的已“足够”，如果“不过剩”，就无法保证所有的光谱变化都被捕获了。例如，至少需要三个波段来确定数据正好存在于由三个端元构成的三角形中，因为如果只有两个波段，将无法确定数据在第三维是否是“平”的，即该三角形可能是高维数据在低维空间中的投影。

作为后文应用的参考，这里简单对线性光谱混合模型与凸面几何体——单形体之间重要的四点联系总结如下[5]：①凸集与混合像元有着类似的定义；②混合像元光谱是端元光谱按照“非负”和“和为一”的比例线性混合的结果；③混合像元存在于以端元为顶点的凸包内；④数据分布空间的维数为端元数目减一。

简单来说， N 维单形体就是空间中 $(N+1)$ 个线性无关的点确定的最简单的体积非零的几何体(例如，两个点确定一维空间中的一条线，三个点确定二维空间中的一个三角形，四点确定三维空间中的一个四面体)，连接任意两点构成一条边，任意三点构成一个面，如此类推。对于高一维的几何体，比其低一维的几何体可以看做是基本构造块，如三角形由三条边围成，四面体由四个三角形围成，同样， N 维单形体可看做由 N 个 $(N-1)$ 维单形体围成[12]。

在三维空间中，三个线性无关的点确定一个平面，同时这三点构成一个三角形，即二维空间中的单形体。若将欧式空间中的点看做向量，则 $(N+1)$ 维空间中 $(N+1)$ 个线性无关的向量 $(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$ 确定一个 N 维超平面，同时这 $(N+1)$ 个点构成一个 N 维几何体，即 N 维单形体。从另一个角度来说，在三维空间中我们把二维单形体看做“平面”，同样，在 N 维空间中我们把 $(N-1)$ 维单形体看做“平面”。这个“平面”可以用公式表示为：

$$\hat{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) = 0 \quad (2.4)$$

公式中 \vec{x}_0 为超平面上已知的任意一点， \hat{n} 为垂直于超平面的单位法向量，符号 \cdot 表示向量的内积。二维空间中，这些概念可用图形表示如下：

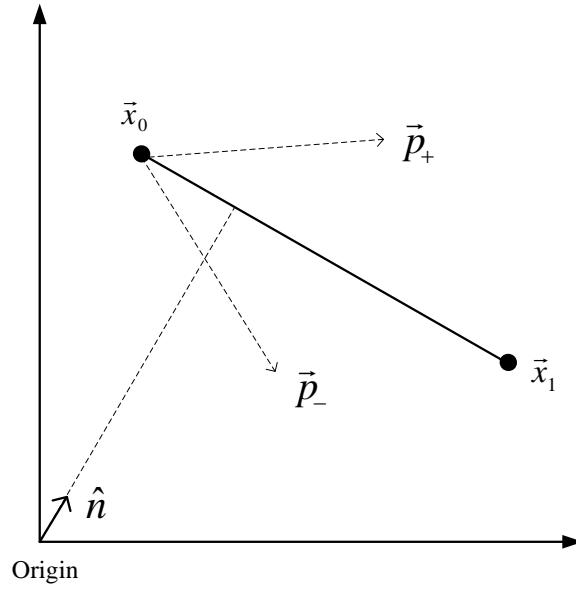


图 2.3 二维空间中, $\hat{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) = 0$ 确定一条直线

图中 \vec{x}_0 、 \vec{x}_1 确定的直线将二维空间分为两部分, 若 \vec{p}_+ 、 \vec{p}_- 为二维空间中与 \vec{x}_0 、 \vec{x}_1 不共线且分居直线两侧的点, 将 \vec{p}_+ 、 \vec{p}_- 代入 $\hat{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)$, 根据符号即可确定点与直线的相对位置关系。对于 N 维空间中的某一 $(N-1)$ 维超平面, 也将 N 维空间分为两部分, 在确定 \hat{n} 和 \vec{x}_0 之后, 同样可以通过检查 $\hat{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)$ 的符号, 确定 \vec{x} 与该超平面的位置关系。

在介绍法向量 \hat{n} 的计算公式之前, 先引入 $(N+1)$ 个点 $(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$ 构成的 N 维单形体体积计算公式[12]:

$$\begin{aligned} V_N &= \frac{1}{N!} \det \begin{bmatrix} \vec{x}_1 & \vec{x}_2 & \cdots & \vec{x}_N & \vec{x}_0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{N!} \det [(\vec{x}_1 - \vec{x}_0) \quad (\vec{x}_2 - \vec{x}_0) \quad \cdots \quad (\vec{x}_N - \vec{x}_0)] \end{aligned} \quad (2.5)$$

其中 \det 代表矩阵的行列式。需要注意的是式 2.5 所表示的体积是有符号的, 类似于三维空间通过右手定则确定三角形方向, N 维空间中也可以采用类似的思想。

对式 2.5 定义的体积, 可以做如下变换:

$$\begin{aligned}
 (V_N)^2 &= \left(\frac{1}{N!}\right)^2 \det(X) \det(X) \\
 &= \left(\frac{1}{N!}\right)^2 \det(X^T) \det(X) \\
 &= \left(\frac{1}{N!}\right)^2 \det(X^T X)
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

式中 $X = [(\bar{x}_1 - \bar{x}_0) \ (\bar{x}_2 - \bar{x}_0) \ \cdots \ (\bar{x}_N - \bar{x}_0)]$ ，变换中利用了行列式的两个性质：正方矩阵和它的转置具有相同的行列式，两个矩阵乘积的行列式等于它们行列式的乘积。

上述变换看起来毫无意义，但实际并非如此。考虑如下情况：

N 维空间中有一个 K 维单形体， $K < N$ ，要求取这个 K 维单形体的体积。此时对于该 K 维单形体， $X_K = [(\bar{x}_1 - \bar{x}_0) \ (\bar{x}_2 - \bar{x}_0) \ \cdots \ (\bar{x}_K - \bar{x}_0)]$ 并不是方阵，故矩阵 X_K 的行列式并无定义。

这里可以利用式 2.6 变一个小“戏法”[12]：

$$\begin{aligned}
 (V_K)^2 &= \left(\frac{1}{K!}\right)^2 \det(X_K^T X_K) \\
 &= \left(\frac{1}{K!}\right)^2 \det \begin{bmatrix} (\bar{x}_1 - \bar{x}_0) \\ (\bar{x}_2 - \bar{x}_0) \\ \vdots \\ (\bar{x}_K - \bar{x}_0) \end{bmatrix} [(\bar{x}_1 - \bar{x}_0) \ (\bar{x}_2 - \bar{x}_0) \ \cdots \ (\bar{x}_K - \bar{x}_0)]
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

由此得到 N 维空间中 K 维单形体的体积计算公式为：

$$|V_K| = \frac{1}{K!} \sqrt{\det(X_K^T X_K)} \tag{2.8}$$

上式中 $K=1$ 时， $|V_1| = (\bar{x}_1 - \bar{x}_0) \cdot (\bar{x}_1 - \bar{x}_0)$ ，即为 N 维空间中的欧式距离的平方。

若记 $W_K = \sqrt{\det(X_K^T X_K)}$ ，则 W_K 代表了 K 维平行体的体积。平行体的体积可以表示为“底面”和“高”的乘积 $W_K = h W_{K-1}$ ，故点到超平面的距离可由下式计算：

$$h = \frac{W_K}{W_{K-1}} = \frac{\sqrt{\det(X_K^T X_K)}}{\sqrt{\det(X_{K-1}^T X_{K-1})}} \tag{2.9}$$

回到求超平面法向量的问题, N 维空间中 N 个点 $(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N-1})$ 确定的 $(N-1)$ 维超平面的法向量可采用“矩阵行列式”表示如下:

$$\begin{aligned}\vec{N} &= N_1 \vec{e}_1 + N_2 \vec{e}_2 + \dots + N_N \vec{e}_N \\ &= \det[(\vec{x}_1 - \vec{x}_0) \ (\vec{x}_2 - \vec{x}_0) \ \dots \ (\vec{x}_{N-1} - \vec{x}_0) \ \vec{e}] \end{aligned} \quad (2.10)$$

上式中 $\vec{e} = [\vec{e}_1 \ \vec{e}_2 \ \dots \ \vec{e}_N]^T$ 代表张成当前 N 维空间中的各单位向量, 系数 $(N_1 \ N_2 \ \dots \ N_N)$ 对应矩阵 $[(\vec{x}_1 - \vec{x}_0) \ (\vec{x}_2 - \vec{x}_0) \ \dots \ (\vec{x}_{N-1} - \vec{x}_0) \ \vec{e}]$ 最后一列的各代数余子式。单位法向量可以通过对 \vec{N} 归一化得到。

比较式 2.5 和式 2.10, 二者在形式上有一定的相似之处, 实际上, 法向量 \vec{N} 的平方和与单形体体积有如下关系:

$$\vec{N} \cdot \vec{N} = ((N-1)! V_{N-1})^2 \quad (2.11)$$

即由式 2.10 定义的法向量 \vec{N} 的方向和长度都有着明确的几何意义, V_{N-1} 可由式 2.8 计算得到。

在确定 N 维空间中 $(N-1)$ 超平面的法向量 \vec{N} 后, 空间中一点 \vec{x} 到超平面 $\vec{N} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) = 0$ 的距离可由下式计算[13]:

$$d = \frac{|\vec{N} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)|}{|\vec{N}|} \quad (2.12)$$

上式中符号 $||$ 为求模运算符。超平面 $\vec{N} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) = 0$ 上距离 \vec{x} 最近的点, 即 \vec{x} 在超平面上的射影点为[13]:

$$\vec{x}_{\min} = \vec{x} - \frac{\vec{N} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)}{|\vec{N}|^2} \vec{N} \quad (2.13)$$

2.3 端元提取

高光谱数据在特征空间中的几何特征, 在端元提取算法设计中有重要应用。

(Joseph W. Boardman, 1995) 在详细介绍线性混合与凸面几何关系的基础上, 提出了纯像元指数 (pure pixel index, PPI) 与 N 维可视化 (N -d visualization) 技术。该方法基于端元位于遥感图像在特征空间中所形成单形体的端点这一特点, 利用降维后的数据, 进行 PPI 计算, PPI 代表了像元纯度的得分, 通过这一

“相对纯度”(relative purity)对图像中的像元进行分级，选取其中“最纯净的像元集”(purest pixels)，在 N 维可视化窗口中进行分析，进而得到所需要的端元[5]。

(Maurice D. Craig, 1994) 采取“包含所有像元点的最小体积单形体的顶点是对端元的准确估计”的思想，提出了最小体积变换 (minimum volume transform, MVT)。通过逐渐收缩包含所有像元点的体积较大的单形体，得到最优单形体和端元估计[6, 9]。

上述两种方法中，PPI 算法假设图像中端元对应的纯像元存在，即所得到的“端点”在图像中有像元与之对应，而 MVT 算法并不需要纯像元存在，但假设像元点在特征空间中的分布“保持了足够的单形体形状”，使得最后确定的单形体唯一。这两种方法，为基于几何特征的端元提取算法提供了两种思路——有纯像元假设的最大内接单形体分析和无纯像元假设的最小外切单形体分析，此后，不同学者在此基础发展了大量算法，下面对其中典型的几种算法进行介绍。

2.3.1 最大内接单形体分析算法

1) VCA 算法

顶点成分分析(vertex component analysis, VCA)算法通过反复寻找正交向量并计算图像矩阵在正交向量上的投影距离逐一提取端元。单形体若干个顶点可以张成一个子空间，选取一个与子空间正交的向量，单形体在该向量上投影的最大值点一定是单形体的顶点。因此先设定一个初始向量，第一次循环寻找一个与该向量正交的单位向量，将所有像元点投影到该单位向量上，并将投影结果最大的记为新端元，加入端元集合，之后的循环中，寻找与已找到的端元所张成的空间正交的单位向量，将像元点投影到该向量上，并将投影结果最大的记为新端元，加入端元集合，直到找到指定个数的端元。VCA 原始算法流程如表 2.1 所示，算法示意图如 2.4 所示[2, 14]。

表 2.1 VCA 原始算法流程

输入：提取的端元数目 p ，图像数据矩阵 $R_{L \times N} = [R_1, R_2, \dots, R_N]$
1：根据影像信噪比不同选取 SVD 或 PCA 算法将数据矩阵降维至 $p \times N$ 维空间，记为 $X_{p \times N}$ 。通过逆变换将 $X_{p \times N}$ 转换到 $L \times N$ 维空间，记为 $R'_{L \times N}$ 。
2：初始化正交矩阵 $A_{p \times p} = [e, 0, \dots, 0]$ ，其中 $e_{p \times 1} = [0, 0, \dots, 1]^T$ ，初始化端元位置

数组 $index_{p \times 1} = []$ 。

3: $j=j+1$ (j 初始为 0) , 如果 $j \leq p$, 则转 4; 否则, 转 5。

4: 生成随机向量 w , 通过 $w = \frac{(I - AA^{\#})w}{\|(I - AA^{\#})w\|}$ 将 w 转换为与 A 正交的单位向量。

计算图像在 w 方向上的投影长度 $v = w^T X$, 找到 v 中最大值的位置 $k = \arg \max(v)$, 更新位置数组 $index = [index, k]$, 更新正交矩阵 $[A]_j = [X]_k$ 。转 2。

5: $index$ 存放端元在图像中的位置, 故端元矩阵为 $E = [R']_{index}$, 算法结束。

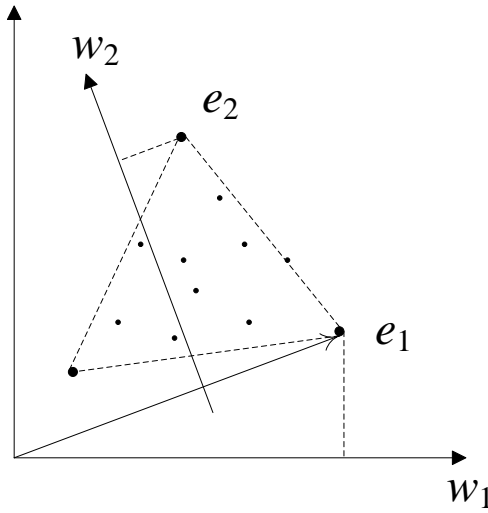


图 2.4 VCA 算法示意图

VCA 算法在提出之后, 算法的作者进一步对算法进行了改进和完善, 主要有以下几个方面[15]:

①VCA 原始算法中, 端元数目 p 由使用者根据先验知识确定, 而端元数目的准确先验知识往往难以获取, 因此导致数据降维过程中维数难以准确确定。为此, 作者引入新的信号子空间确定方法对数据进行预处理, 从数据集中自动估算端元数目, 从而使数据降维更加准确, 使算法性能得到提升。

②VCA 原始算法中, 正交矩阵 A 通过对随机向量进行正交化得到, 对于理想状态下的图像, 这不会影响 VCA 算法的结果, 但实际应用中, 随机向量 w 的选择往往会影响最后的结果。作者对随机向量 w 的取值对结果的影响进行了探讨, 结果表明, 选择数据集中“最亮”的像元用于确定 w 的初始方向, 有助于提高结果精度, 另外, 在每次迭代过程中, 生成多个与 A 正交的向量 w 并计算各自

到当前正交子空间的距离，选取距离最远的作为最优投影向量，也使结果精度有所提高。

③原始 VCA 算法对于由 p 个顶点构成的 $(p-1)$ 维的单形体，只能提取出 $(p-1)$ 个端元[2]，为了弥补这个缺陷，作者进行了改进。采取的方式是在最后一次投影时，将投影结果最大和最小的像元都作为端元，这样得到 p 个端元。

2) N-FINDR 算法

内部最大体积法(N-FINDR)采取思想是：通过不断“扩大”高光谱数据特征空间内单形体的体积，找到构成单形体体积最大的像元点[7]。该方法针对降维后的数据，从一组初始端元集合开始，对数据中每一个像元进行“评估”，不断“优化”端元集合，最终找到“最优”端元集合。“评估”和“优化”的原理和过程如下。

对 k 维空间中一组给定的端元集合 $\{w_1, w_2, \dots, w_{k+1}\}$ ，若记加入全 1 行后构成的矩阵为：

$$W = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ w_1 & w_2 & \cdots & w_{k+1} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

则 $\{w_1, w_2, \dots, w_{k+1}\}$ 构成的单形体体积为：

$$V = \frac{1}{k!} \text{abs}(\det(W)) \quad (2.15)$$

对于端元数为 p 的图像，首先将图像数据降维到 $(p-1)$ 维，然后随机选取 p 个像元作为初始端元集合 E 。对降维后图像中的每个像元，依次替换端元集合 E 中的每个“端元”，如果替换后导致根据式 2.15 计算得到的体积增大，则替换成功并更新端元集合 E 。重复这一过程直到图像中所有像元遍历完毕，这样得到构成单形体体积最大的像元点[2, 11]。N-FINDR 算法流程如表 2.2 所示：

表 2.2 N-FINDR 算法流程

输入：提取的端元数目 p ，图像数据矩阵 $R_{L \times N} = [R_1, R_2, \dots, R_N]$
1：将数据矩阵降维至 $(p-1) \times N$ 维空间(如采用 MNF 变换)，记为 $X_{(p-1) \times N}$ ，从 X 中随机选取 p 个像元构成初始端元矩阵 $E_{p \times p} = [e_1, e_2, \dots, e_p]$ ，记初始端元在 X 中的位置数组为 $\text{index}_{p \times 1}$ 。初始化循环计数变量 $j=0$ 。

2: $j=j+1$; 如果 $j \leq N$, 则初始化循环计数变量 $i=0$, 转 3; 否则, 转 5。
3: $i=i+1$; 如果 $i \leq p$, 则转 4; 否则, 转 2。
4: 将端元矩阵中 e_i 替换为 x_j 得到 E' , 由式 2.15 计算体积 V_E 和 $V_{E'}$, 若 $V_{E'} > V_E$, 则 $E = E'$, 并更新位置数组 $index$ 。转 3。
5: $index$ 存放端元在图像中的位置, 故端元矩阵为 $E = [R]_{index}$, 算法结束。

N-FINDR 算法提出之后, 算法采取的通过不断“扩大”以寻找最大体积单形体的思想, 得到了许多学者的重视, 不同学者从不同方面对 N-FINDR 算法进行了完善和发展:

①(Antonio Plaza, Chein-I Chang, 2005)从两方面对 N-FINDR 算法进行了改进: 一是采用虚拟维数(virtual dimensionality, VD)估算方法进行端元数目估算, 二是采用迭代误差分析方法(iterative error analysis, IEA)进行初始端元选择。即在计算得到 VD 后, 将其作为端元数目的估计, 并在此基础上采用端元初始化算法(endmember initialization algorithm, EIA)获取 N-FINDR 算法的初始端元集合。实验结果表明, 引入 EIA 算法后, N-FINDR 算法的收敛速度更快, 且克服了原始算法由于初始端元集合不同而导致最终端元集合不一致的缺点[16]。

②(Chein-I Chang 等, 2006)提出了 SGA (simplex growing algorithm)方法, 与 N-FINDR 算法同时搜索所有端元不同, 该方法通过逐个搜索新端元的方式来寻找达到最大体积的像元集合, 因此算法效率得到了提高。同时, SGA 算法中采用新的初始端元选择方式, 使 SGA 算法运行的结果始终一致, 从而改善了 N-FINDR 结果不唯一的缺点[17]。

③(Wang Ligu, Zhang Ye, 2008)为了提高 N-FINDR 算法的运行效率, 从两方面对 N-FINDR 算法进行了改进: 一是将 N-FINDR 算法中的体积计算替换为距离计算, 使矩阵行列式的计算简化为向量内积计算, 从计算速度方面提高了算法效率; 二是采用类似 PPI 算法的思想, 将像元点坐标看做在坐标轴上的投影, 则坐标最大、最小值对应的像元点是端元的可能性最大, 因此, 根据像元点坐标值对数据进行重排序, 从而加快算法收敛速度[18]。

3) MaxV 算法

N-FINDR 算法中进行体积计算时受到数据维数限制, 因此首先需要对数据进行降维处理, 为克服这一缺陷, (耿修瑞, 2005)提出最大体积端元提取算法(maximum volume, MaxV)[19]。该算法中, 单形体体积计算公式采用式 2.8, 因此可直接对降维前的数据进行体积计算。算法中端元搜索策略为逐端元搜索, 即依次找到与当前端元集合构成最大体积的像元, 作为端元加入端元集合, 直到达到指定端元数目。MaxV 算法流程如表所示[2, 19]:

表 2.3 MaxV 算法流程

输入: 提取的端元数目 p , 图像数据矩阵 $R_{L \times N} = [R_1, R_2, \dots, R_N]$ 。计算 R 的均值向量 $\bar{R}_{L \times 1}$, 选择距 \bar{R} 最远的像元作为第一个端元 e_1 , 选择距 e_1 最远的像元作为第二个端元 e_2 , 得到初始端元集合 $E_{L \times j} = \{e_j\}_{j=1}^2$, 初始化循环计数器 $j=2$ (记录已生成的端元数目)。
1: $j=j+1$ 。若 $j \leq p$, 则循环计数器 $i=0$, $V_{\max} = 0$, 转 2; 否则, 转 5。
2: $i=i+1$ 。若 $i \leq N$, 转 3, 否则, 转 4。
3: 根据式 2.8 计算 $E \cup \{x_i\}$ 构成的 j 维单形体的体积 V , 若 $V \leq V_{\max}$, 则转 2; 否则, $V_{\max} = V$, $x_{\max} = x_i$, 转 2。
4: $E = E \cup \{x_{\max}\}$, 转 1。
5: 端元矩阵为 $E_{L \times p}$, 算法结束。

MaxV 算法中, 体积计算涉及矩阵行列式的计算, 随着端元数目的增加, 计算效率的问题将凸显出来, 为此, (陶雪涛, 2008)提出了基于数据空间正交基的算法(Orthogonal Bases Approach, OBA), 该算法将基于行列式的单形体体积计算转换为一组正交基模的乘积计算, 进而将寻找最大体积转换为寻找具有最大模的正交基, 从而提高运算效率[20, 21]。

对于 $\{e_0, e_1, \dots, e_k\}$ 围成的单形体, 记 $\alpha_i = (e_i - e_0)$, 其中 i 为不大于 k 的正整数。则该单形体体积可表示为 k 重向量 $\alpha_1 \wedge \alpha_2 \wedge \dots \wedge \alpha_k$ 的模[13]:

$$V = \frac{1}{k!} \text{abs}(|\alpha_1 \wedge \alpha_2 \wedge \dots \wedge \alpha_k|) \quad (2.16)$$

若 $\{\alpha_i\}$ 的一组正交基记为 $\{\beta_i\}$, 则[20]:

$$|\alpha_1 \wedge \alpha_2 \wedge \dots \wedge \alpha_k| = |\beta_1 \wedge \beta_2 \wedge \dots \wedge \beta_k| = |\beta_1| \cdot |\beta_2| \cdot \dots \cdot |\beta_k| \quad (2.17)$$

上式详细证明过程可参考文献[20]附录 1。由此，体积计算被转换为正交基模的运算。

2.3.2 最小外切单形体分析算法

1) MVSA 算法

最小体积单形体分析(minimum volume simplex analysis, MVSA)算法采取最小体积变换(MVT)的思想，即寻找包含所有像元点的体积最小的单形体[8]。

端元数为 p 的高光谱数据，若忽略噪声的影响，则对降维到 R^p 维空间中的数据 $Y_{p \times N}$ ，根据线性光谱混合模型有：

$$\begin{aligned} Y_{p \times N} &= M_{p \times p} S_{p \times N} \\ S &\geq 0, \mathbf{1}_p^T S = \mathbf{1}_N^T \end{aligned} \quad (2.18)$$

上式中 M 为端元向量矩阵， S 为丰度矩阵。则寻找最小体积单形体可以转化为如下优化问题：

$$\begin{aligned} M^* &= \arg \min |\det(M)| \\ QY &\geq 0, \mathbf{1}_p^T QY = \mathbf{1}_N^T \end{aligned} \quad (2.19)$$

定义 $Q \equiv M^{-1}$ ，由于 $\det(M) = 1/\det(Q)$ ，故式 2.19 可以变换为：

$$\begin{aligned} M^* &= \arg \min |\det(M)| \\ QY &\geq 0, \mathbf{1}_p^T QY = \mathbf{1}_N^T \end{aligned} \quad (2.20)$$

由于对于 $Y_{p \times N}$ 中的任意向量 y_i ，必然可以找到 p 个线性无关的列向量构成方阵 $Y_{p \times p}$ ，使 $y_i = Y_{p \times p} \beta_i$ ，且 $\mathbf{1}_p^T \beta_i = 1$ ，于是 $\mathbf{1}_p^T QY = \mathbf{1}_N^T$ 可以转换为 $\mathbf{1}_p^T QY_{p \times p} = \mathbf{1}_N^T$ 或 $\mathbf{1}_p^T Q = \mathbf{1}_N^T (Y_{p \times p})^{-1}$ 。记 $q_m = \mathbf{1}_p^T (Y^*)^{-1}$ ，则 $\mathbf{1}_p^T Q = q_m$ 。故式 2.20 可变换为：

$$\begin{aligned} Q^* &= \arg \max \log |\det(Q)| \\ QY &\geq 0, \mathbf{1}_p^T Q = q_m \end{aligned} \quad (2.21)$$

对于式 2.21 描述的最优化问题，可以通过逐次二次规划方法求解。

采用逐次二次规划方法求解式 2.21 描述的最优化问题时， Q 的初始值对加快算法收敛和防止陷入局部最优解有重要意义，即需要选取合适的初始端元集合 M_0 。通常采用 VCA 算法获取初始端元集合，另外，如果初始端元集合构成的单形体内部的点较少，可对该初始单形体进行扩展。

2) SISAL 算法

分裂增广拉格朗日的单形体确定方法(simplex identification via split augmented Lagrangian, SISAL)计算最小外切单形体所采用的初始优化表达式与 MVSA 算法接近[22], 等价于式 2.20, 其形式如下:

$$\begin{aligned} Q^* = \min \quad & -\log|\det(Q)| \\ \text{s.t.} \quad & QY \geq 0, \mathbf{1}_p^T QY = \mathbf{1}_N^T \end{aligned} \quad (2.22)$$

对于等式约束 $\mathbf{1}_p^T QY = \mathbf{1}_N^T$, 将等式两端同时右乘 $Y^T(YY^T)^{-1}$, 记 $a^T = \mathbf{1}_N^T Y^T(YY^T)^{-1}$, 则式 2.22 可变换为:

$$\begin{aligned} Q^* = \min \quad & -\log|\det(Q)| \\ \text{s.t.} \quad & QY \geq 0, \mathbf{1}_p^T Q = a^T \end{aligned} \quad (2.23)$$

通过引入调整参数 λ , 将上述丰度“非负”的硬约束条件转换为软约束条件, 以增强异常值和噪声存在或给定初始值较差时算法的健壮性。表达式如下:

$$\begin{aligned} Q^* = \min \quad & -\log|\det(Q)| + \lambda \|QY\|_h \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{1}_p^T Q = a^T \end{aligned} \quad (2.24)$$

上式中, $\|X\|_h = \sum_{ij} h([X]_{ij})$, $h(x) = \max\{-x, 0\}$, 即 $\|QY\|_h$ 代表了不满足丰度“非负”的像元数目, 可看做“惩罚函数”, “惩罚”的强度由调整参数 λ 控制。

将矩阵 Q 的各列叠加, 转换为列向量, 记 $q = \text{vec}(Q)$, $f(q) = -\log|\det(Q)|$, 则通过变量替换, 式 2.24 可变换为:

$$\begin{aligned} q^* = \min_q \quad & f(q) + \lambda \|Aq\|_h \\ \text{s.t.} \quad & Bq = a \end{aligned} \quad (2.25)$$

$f(q)$ 采用二项式近似, 则 q^* 可通过迭代过程求解凸优化子问题而得到其近似解。流程如下:

表 2.4 SISAL 算法流程

1: 给定初始值 q_0 , 设置 $\mu > 0$, 设置循环计数器 $k = 0$ 。
2: $l_k = f(q_k) + \lambda \ Aq_k\ _h$, $g = -\text{vec}(Q^{-1})$

3: $q_{k+1} \in \arg \min_q g^T q + \mu \ q - q_k\ ^2 + \lambda \ Aq\ _h \quad s.t. \quad Bq = a$
4: 如果 $f(q_{k+1}) + \lambda \ Aq_{k+1}\ _h > l_k$, 则求取 $q \in \{\beta q_{k+1} + (1-\beta)q_k : 0 < \beta < 1\}$ 使 $f(q) + \lambda \ Aq\ _h \leq l_k$, $q_{k+1} = q$, $k = k+1$, 若不满足终止条件, 则转 2; 否则算法结束。

上述第 3 步中的最优化问题, 等价于如下优化问题:

$$\begin{aligned} \min_{q,z} \quad & E(q,z) \\ s.t. \quad & Bq = a, Aq = z \end{aligned} \quad (2.26)$$

上式中, $E(q,z) = g^T q + \mu \|q - q_k\|^2 + \lambda \|z\|_h$, 其中 $\|q - q_k\|^2$ 这一项, 是为了约束 $\|q_{k+1} - q_k\|^2$ 。这一优化问题, 可以采用增广拉格朗日法 (augmented Lagrangian, AL) 求解, 拉格朗日函数如下:

$$\begin{aligned} L(q,z,d,\tau) &= E(q,z) + \alpha^T (Aq - z) + \tau \|Aq - z\|^2 \\ &= E(q,z) + \tau \|Aq - z - d\|^2 + c \end{aligned} \quad (2.27)$$

上式中 α 为拉格朗日乘子, $d = -\alpha / (2\tau)$, c 为一常数。增广拉格朗日法寻求使函数 L 达到最小值的 (q,z) , 并不断更新 α (等价项 d), 流程如下:

表 2.5 增广拉格朗日法流程

1: 给定初始 (q_0, z_0) 、 α_0 , 设置 $\tau > 0$, 设置循环计数器 $t = 0$ 。
2: $(q_{t+1}, z_{t+1}) \in \arg \min L(q,z,d_t,\tau) \quad s.t. \quad Bq = a$
3: $d_{t+1} = d_t - (Aq_{t+1} - z_{t+1})$, $t = t+1$, 若不满足终止条件, 转 2; 否则算法结束。

由于上面第 2 步中的优化过程仍然复杂, 为了提高效率, 引入分裂增广拉格朗日法 (split AL), 流程如下:

表 2.6 分裂增广拉格朗日法流程

1: 给定初始 (q_0, z_0) 、 α_0 , 设置 $\tau > 0$, 设置循环计数器 $t = 0$ 。
2: $q_{k+1} \in \arg \min_q g^T q + \frac{\mu}{2} \ q - q_k\ ^2 + \frac{\tau}{2} \ Aq - z_t - d_t\ ^2 \quad s.t. \quad Bq = a$

$$3: z_{k+1} \in \arg \min_z \frac{1}{2} \|Aq - z_t - d_t\|^2 + \frac{\lambda}{\tau} \|z\|_h$$

4: $d_{t+1} = d_t - (Aq_{t+1} - z_{t+1})$, $t = t + 1$, 若不满足终止条件, 转 2; 否则算法结束。

上面第 2 步为线性等式约束下的二次规划问题, 可求得解析解, 第 3 步的解可由下式得到:

$$z_{t+1} = \text{soft}_{-}(Aq_{t+1} - d_t, \mu/\tau) \quad (2.28)$$

上式中 $\text{soft}_{-}(x, \beta) = (\max\{|x + \beta/2| - \beta/2, 0\})(x/|x|)$, 对于矩阵 X , $\text{soft}_{-}(X, \beta)$ 通过逐分量求取 $\text{soft}_{-}(\square, \beta)$ 得到。

相对于增广拉格朗日法, 分裂增广拉格朗日法通过计算解析解和 $\text{soft}_{-}(x, \beta)$ 即得到优化问题的解, 因此计算效率更高。采用表 2.6 中的算法替换表 2.4 中的第三步, 即得到最终的 SISAL 算法。

3) MVES 算法

最小体积外包单形体(minimum-volume enclosing simplex, MVES)算法同样寻找包含所有像元点的体积最小的单形体[9], 有别于 MVSA 和 SISAL 算法, 若高光谱数据的端元数为 p , 该算法首先将数据降维到 R^{p-1} 维空间。

对于降维后的 R^k 空间中的高光谱数据 $X_{k \times N}$, 记端元矩阵为 $E = \{e_0, e_1, \dots, e_k\}$, 则在不考虑噪声影响的情况下, 由线性光谱混合模型, 某一像元 X_n 可表示为:

$$X_n = EA \quad (2.29)$$

$$s.t. \quad A \geq 0 \quad \mathbf{1}_{k+1}^T A = 1$$

上式中 $A = [A_0 \ A_1 \ \dots \ A_k]^T$ 为各端元的丰度, $\mathbf{1}_{k+1}^T$ 为全 1 行向量。

若记 $M = [e_1 - e_0 \ e_2 - e_0 \ \dots \ e_k - e_0]$, $A' = [A_1 \ A_2 \ \dots \ A_k]^T$, 则最小体积外切单形体的求取可表示为如下优化过程实现:

$$\min \quad \text{abs}(\det(M)) \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} s.t. \quad & A' \geq 0 \\ & \mathbf{1}_k^T A' \leq 1 \\ & X_n = e_0 + MA' \end{aligned}$$

令 $H = M^{-1}$, $g = M^{-1}e_0$, 有:

$$A' = M^{-1}(X_n - e_0) = HX_n - g \quad (2.31)$$

故式 2.30 可以变换为:

$$\begin{aligned} \max_{H, g} \quad & \text{abs}(\det(H)) \\ s.t. \quad & HX_n - g \geq 0 \\ & \mathbf{1}_k^T (HX_n - g) \leq 1 \end{aligned} \quad (2.32)$$

此时, 两个约束条件都是关于 H 和 g 的线性约束, 但目标函数 $\text{abs}(\det(H))$ 为非凸函数, 为此, 对行列式 $\det(H)$ 进行余子式展开:

$$\det(H) = \sum_{j=1}^k (-1)^{i+j} h_{ij} \det(H_{ij}) \quad (2.33)$$

上式中, h_{ij} 为矩阵 H 位置 (i, j) 处的值, 在 H_{ij} 固定的情况下, $\det(H)$ 可看做 h_{ij} 的线性函数, 若 H 的第 i 行记为 h_i^T , g 的第 i 个元素记为 g_i , 则式 2.32 可以由关于 H 和 g 的最优化变换为关于 h_i^T 和 g_i 的部分最优化:

$$\begin{aligned} \max_{h_i^T, g_i} \quad & \left| \sum_{j=1}^k (-1)^{i+j} h_{ij} \det(H_{ij}) \right| \\ s.t. \quad & 0 \leq h_i^T X_n - g_i \leq 1 - \sum_{j \neq i} (h_i^T X_n - g_i) \end{aligned} \quad (2.34)$$

上述问题, 可以分解为两个线性规划问题:

$$\begin{aligned} p^* = \max_{h_i^T, g_i} \quad & \sum_{j=1}^k (-1)^{i+j} h_{ij} \det(H_{ij}) \\ s.t. \quad & 0 \leq h_i^T X_n - g_i \leq 1 - \sum_{j \neq i} (h_i^T X_n - g_i) \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$q^* = \min_{h_i^T, g_i} \sum_{j=1}^k (-1)^{i+j} h_{ij} \det(H_{ij}) \quad (2.36)$$

$$s.t. \quad 0 \leq h_i^T X_n - g_i \leq 1 - \sum_{j \neq i} (h_j^T X_n - g_j)$$

式 2.34 的最优解 $((h_i^T)^*, g_i^*)$ 从两个子问题的解中选取, 如果 $|p^*| > |q^*|$, 则取式 2.35 的解, 如果 $|p^*| < |q^*|$, 则取式 2.36 的解。这一逐行优化的过程循环进行, 直到满足终止条件。

在得到最优解 (H^*, g^*) 后, R^k 空间中的端元矩阵可以 E 可通过如下过程求得:

$$e_0 = (H^*)^{-1} g^* \quad (2.37)$$

$$[e_1 \quad e_2 \quad \cdots \quad e_k] = e_0 \mathbf{1}_k^T + (H^*)^{-1}$$

同时, 在 R^k 空间中, 由式 2.31, 像元的丰度可通过如下过程求得:

$$A = \begin{bmatrix} A_0 \\ A' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \mathbf{1}_k^T (H^* X_n - g^*) \\ H^* X_n - g^* \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

2.4 丰度反演

上述基于几何的端元提取算法在确定最优单形体后, 单形体内各像元点的丰度通过重心坐标(barycentric coordinates)变换即可求得[5, 6], 重心坐标变换过程可参考[12]。另外, (耿修瑞, 2005)提出了一种基于单形体体积的线性光谱解混算法, 算法中将丰度比例的计算转换为体积比的计算[19]。

特别地, 最小外切单形体分析算法中, 对降维后的 R^k 空间中的高光谱数据, 可采用类似 MVES 算法中的思想, 在 R^k 空间中计算各象元的丰度, 计算得到的丰度比例将满足“非负”和“和为 1”约束条件。

实际应用中, 在得到端元光谱集合后, 丰度反演广泛采用的是最小二乘法, 根据丰度约束条件的程度, 可以分为[2, 23, 24]: 无约束最小二乘法(unconstrained least squares, UCLS)、“和为 1”约束最小二乘法(sum-to-one constrained least squares, SCLS)、“非负”约束最小二乘法(nonnegatively constrained least squares, NCLS)以及全约束最小二乘法(fully constrained least squares, FCLS)。

2.4.1 无约束最小二乘法

式2.1表示的线性光谱混合模型公式中，如果不考虑丰度 A 的两个约束条件，则在得到端元光谱矩阵 S 之后，丰度 A 的最小二乘估计由下式给出：

$$\hat{A}_{UCLS} = (S^T S)^{-1} S^T Y = S^{\#} Y_0 \quad (2.39)$$

上式中 $S^{\#} = (S^T S)^{-1} S^T$ 为广义逆矩阵。

2.4.2 约束最小二乘法

若只考虑丰度的“和为 1”约束，此时称为“和为 1”约束最小二乘法。由拉格朗日乘数法，可建立如下拉格朗日方程：

$$L(A, \lambda) = (Y - SA)^T (Y - SA) + \lambda(1 - j^T S) \quad (2.40)$$

上式中 j 为 $p \times 1$ 维全 1 向量。 $L(A, \lambda)$ 分别对 A 和 λ 求导，有：

$$\begin{cases} -2Y^T S + 2A^T S^T S - \lambda j^T = 0 \\ 1 - j^T A = 0 \end{cases} \quad (2.41)$$

上式为 A 、 λ 的二元一次方程组，求解并整理可得丰度的估计为：

$$\hat{A}_{SCLS} = \left[I - \frac{(S^T S)^{-1} j j^T}{j^T (S^T S)^{-1} j} \right] \hat{A}_{UCLS} + \frac{(S^T S)^{-1} j}{j^T (S^T S)^{-1} j} \quad (2.42)$$

若考虑丰度的“非负”约束，此时约束条件为不等式，因此无法得到丰度估计的解析表达式，“非负”约束最小二乘法和全约束最小二乘法都属于这种情况，此时最优解的求取可以通过迭代方法实现[2, 23]。实际应用中，约束最小二乘法的求解可以通过一些优化函数实现，如Matlab环境下可以利用lsqlin函数。

对于全约束最小二乘法，也可以考虑采用如下方式实现：首先得到无约束条件下的丰度值，将所有负值置为0，再对丰度值归一化，这样得到满足“非负”和“和为1”的丰度值。该方法会在一定程度降低精度，但算法计算效率会更高[24]。

第3章 数据降维与自动维数确定方法研究

高光谱数据相邻波段间往往存在很强的相关性,通过光谱维去相关变换,可以使大部分图像信息在变换后集中在前几个对应特征值较大的成分上,而后面应对特征值较小的成分主要为图像噪声成分,这样通过选取低维数据来表达高维数据的信息,既减小了处理的数据量,也削弱了噪声的影响。上一章介绍的端元提取算法中,大都利用了这一思想,但数据降维的过程中,有两点同等重要:一是选择合适的去相关方法,二是准确确定所需低维数据的维数。目前,数据去相关方面,已有相对成熟和稳定的方法并已得到广泛应用,但数据维数的确定还处在研究阶段,实际应用中往往需要研究者根据个人经验进行选择。本章在介绍常用的去相关方法的基础上,对目前典型的维数确定方法进行探讨,进行算法改进,并通过实验进行验证。

3.1 高光谱数据去相关变换

去相关变换,顾名思义,就是去除高光谱数据波段间相关性的变换,即变换以后,数据波段间不再相关。目前常用的变换方法主要有两种:主成分变换(principal components analysis, PCA)和最大噪声分数变换(maximum noise fractions, MNF)。

3.1.1 PCA 变换

PCA 变换的目的是通过一种线性变换,将一个多维随机向量中的元素变成不相关的随机变量,并且按照变量方差的大小排列。作为一种常用的多维向量变换方法,PCA 变换在多元统计分析、数字图像处理等领域都有广泛应用,该方法又被称为协方差主成分分析(Covariance PCA, CPCA)、K-L 变换(Karhunen-Loeve)、霍特林(Hotelling)变换。

若高光谱图像数据记为 $R_{L \times N} = [R_1, R_2, \dots, R_N]$, 其中 L 为波段数, N 为像素数。主成分变换即寻求一正交矩阵 $A = [a_1, a_2, \dots, a_L]$, 使变换结果 $Z = A^T Y$ 满足[25]:

$$\begin{aligned} a_i^T \Sigma a_i &= \max & (i=1, 2, \dots, L) \\ a_i^T \Sigma a_j &= 0 & (i \neq j) \end{aligned} \quad (3.1)$$

上式中 Σ 表示 R 的协方差矩阵。为了解上述条件极值问题，运用拉格朗日乘数法构造函数：

$$f(a_i) = a_i^T \Sigma a_i - \lambda_i (a_i^T a_i - 1) \quad (3.2)$$

则 a_i 应使：

$$\frac{Df}{Da_i} = 2\Sigma a_i - 2\lambda_i a_i = 0 \quad (3.3)$$

由此得到 $\Sigma a_i = \lambda_i a_i$ ，即所求的 A 为 Σ 的特征值所对应的单位化特征向量。

PCA 变换的步骤如下：

表 3.1 PCA 变换流程

输入：图像数据矩阵 $R_{L \times N} = [R_1, R_2, \dots, R_N]$
1：求数据各波段的均值 $u = E[R]$ ，并对数据进行中心化，即 $Y = R - u$ 。
2：计算数据的协方差矩阵 $\Sigma = \frac{YY^T}{N-1}$ 。
3：计算协方差矩阵 Σ 的特征值和特征向量，并按照特征值由大到小对特征向量进行排序，得到特征值矩阵 Λ 和特征向量矩阵 A 。
4：进行变换，得到变换结果 $Z = A^T Y$ 。

主成分变换所得到的结果 Z 的方差为：

$$\text{var}(Z) = \text{var}(A^T Y) = A^T \Sigma A = \Lambda \quad (3.4)$$

而原始数据方差之和为：

$$\text{tr}(\Sigma) = \text{tr}(A \Lambda A^T) = \text{tr}(\Lambda A A^T) = \text{tr}(\Lambda) \quad (3.5)$$

故可以根据特征值矩阵 Λ 计算主成分变换后各分量的方差贡献率以及累加方差贡献率，并以此为依据选取“主要”的分量。

由于上述主成分变换容易受数据尺度缩放的影像，(Ashbinsu Singh, Ansrew Harrison, 1985)提出了标准化的主成分分析(Standardized PCA, SPCA)，该方法中采用相关系数矩阵 Ω 来代替 CPCA 中的协方差矩阵 Σ ，若数据标准差矩阵记为 σ ，则 $\Omega = \sigma^{-1} \Sigma \sigma^{-1}$ 。如果相关系数矩阵 Ω 的特征向量按特征值 Ψ 由大到小排列得到的矩阵为 F ，则[26]：

$$\Psi = F^T \Omega F = F^T \sigma^{-1} \Sigma \sigma^{-1} F \quad (3.6)$$

类比式 3.4，SPCA 的变换形式为：

$$Z = F^T \sigma^{-1} X \quad (3.7)$$

3.1.2 MNF 变换

当图像中出现噪声方差大于信号方差或噪声在图像各波段分布不均匀时, 基于方差最大化的 PCA 变换无法保证变换后图像质量随着主成分的增大而降低, 因此, (Andrew A. Green 等, 1988)提出了 MNF 变换方法, 使变换所得分量按信噪比大小排列[27]。随后, (James B. Lee 等, 1990)提出了 NAPC 变换方法 (noise-adjusted principal component, NAPC)[28], 一般认为 MNF 和 NAPC 算法等价, 称呼起来也一般将两者等同[29]。实际应用中, 往往按照 NAPC 方法的思路来实现。

信号处理时, 一般将观测数据表示为信号与噪声之和, 并认为噪声与信号不相关, 此时观测数据的协方差矩阵 Σ 、信号的协方差矩阵 Σ_s 以及噪声的协方差矩阵 Σ_n 关系如下:

$$\Sigma = \Sigma_s + \Sigma_n \quad (3.8)$$

NAPC 变换的目的就是求取变换向量 b_i , 使当前成分在剩余所有成分中信噪比最大, 且与其他成分正交, 信噪比 SNR 表示为:

$$SNR = \frac{b_i^T \Sigma_s b_i}{b_i^T \Sigma_n b_i} = \frac{b_i^T \Sigma b_i}{b_i^T \Sigma_n b_i} - 1 \quad (3.9)$$

若噪声矩阵的特征值和特征向量分别记为 Λ_n 和 E , 则:

$$\begin{aligned} E^T \Sigma_n E &= \Lambda_n \\ E^T E &= I \end{aligned} \quad (3.10)$$

若令 $F = E \Lambda_n^{-1/2}$, 则有:

$$\begin{aligned} F^T \Sigma_n F &= I \\ F^T F &= \Lambda_n^{-1} \end{aligned} \quad (3.11)$$

若记 $v_i = F^{-1} b_i$, 则式 3.9 可以改写为:

$$SNR + 1 = \frac{v_i^T F^T \Sigma F v_i}{v_i^T v_i} \quad (3.12)$$

为了得到以 SNR 大小为指标且相互正交的成分序列, 基于 $F^T \Sigma F$ 对数据进行主成分变换即可。

综上所述, NAPC 变换可看作两次层叠的主成分变换。算法首先估算影像的噪声协方差, 以此协方差为基础, 进行“第一次主成分变换”, 对噪声数据进行去

相关，且噪声协方差被单位化，这一过程一般称为噪声白化(对“白化”的介绍详见 3.2.2 节)，接下来就是对上述处理所得的新数据进行“第二次主成分变换”。这样，大特征值对应的主成分以信号为主，小特征值对应的成分以噪声为主。

MNF 变换的步骤如下：

表 3.2 MNF 变换的流程

输入：图像数据矩阵 $R_{L \times N} = [R_1, R_2, \dots, R_N]$
1: 估算影像噪声的协方差矩阵 Σ_n 。
2: 计算噪声协方差矩阵 Σ_n 的特征值和特征向量，并按照特征值由大到小对特征向量进行排序，得到特征值矩阵 Λ_n 和特征向量矩阵 E 。
3: 构造矩阵 $F = E\Lambda_n^{-1/2}$ (这里要求 Λ_n 存在逆矩阵，即要求 Σ_n 非奇异、正定)，从而 $F^T \Sigma_n F = I$ ，利用 F 对总体协方差矩阵 Σ 进行变换，得到噪声调整后的总体协方差矩阵 $\Sigma_{adj} = F^T \Sigma F$ 。
4: 计算协方差矩阵 Σ_{adj} 的特征值和特征向量，并按照特征值由大到小对特征向量进行排序，得到特征值矩阵 Λ_{adj} 和特征向量矩阵 G 。
5: 构造变换矩阵 $A = FG$ ，对输入数据进行变换，得到变换结果 $Z = A^T (R - E[R])$ 。

MNF 变换得到的结果是按照图像质量顺序排列的各成分，通过检查各特征值及其对应的图像，即可确定所需要的维数。

3.2 噪声估算与噪声白化

无论是评估影像质量，还是应用遥感影像，图像噪声的影响都是不容忽视的，为此往往需要进行噪声估算，例如 MNF 变换中，就需要估算影像的噪声协方差矩阵。目前，遥感影像噪声估计主要有三种方法：试验室法、暗电流法和图像法。试验室法和暗电流法由于都需要特定的试验支持，在实际应用中较难实现，而图像法通过直接对遥感影像进行分析来估算噪声，因此得到了广泛应用[2]。针对高光谱影像，直接从图像进行噪声估计主要利用两方面的相关性：一是在空间域利用图像同质性区域像元的相关性；二是在光谱域利用高光谱数据波段间的相关性。

3.2.1 噪声估算

由于高光谱数据波段间具有很强的相关性，噪声估算时往往以此为基础，通过多元线性回归去除波段间的相关性，并将残差作为噪声的估计。目前常用的方法有(Roger, 1996)提出的全图光谱维去相关法[30-32]和(Roger, Arnold, 1996)提出的空间、光谱维去相关法[33]。

1) 全图光谱维去相关法

对于波段数为 L ，像素数为 N 的数据矩阵 $Y_{L \times N}$ ，记 $Z = Y^T$ ，则 $z_i = [Z]_{:,i}$ 代表了第 i 波段的图像。假设 z_i 可以看做其他 $(L-1)$ 个波段的线性组合，则：

$$z_i = Z_{\partial i} \beta_i + \varepsilon_i \quad (3.13)$$

上式中 $Z_{\partial i} = [z_1, \dots, z_{i-1}, z_{i+1}, \dots, z_L]$ ， β_i 为 $(L-1) \times 1$ 维向量， ε_i 为拟合误差。由最小二乘原理，有：

$$\hat{\beta}_i = (Z_{\partial i}^T Z_{\partial i})^{-1} Z_{\partial i}^T z_i \quad (3.14)$$

则噪声估计为：

$$\hat{\varepsilon}_i = z_i - Z_{\partial i} \hat{\beta}_i \quad (3.15)$$

由于上述过程中对各波段噪声的估算都涉及广义逆 $Z_{\partial i}^\# = (Z_{\partial i}^T Z_{\partial i})^{-1} Z_{\partial i}^T$ 的计算，为此，(Jos é M. Bioucas-Dias, Jos é M. P. Nascimento, 2008)在分析矩阵 $Z_{\partial i}$ 和 Z 之间关系的基础上，给出了快速计算各波段广义逆的优化算法[31]。

若 $L \times L$ 维对称正定矩阵 R 及其逆矩阵 R^{-1} 可以分块表示如下：

$$R = \begin{bmatrix} A & b \\ b^T & c \end{bmatrix} \quad R^{-1} = \begin{bmatrix} \tilde{A} & \tilde{b} \\ \tilde{b}^T & \tilde{c} \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

其中 A 、 \tilde{A} 为 $(L-1) \times (L-1)$ 维矩阵， b 、 \tilde{b} 为 $(L-1) \times 1$ 维向量， c 、 \tilde{c} 为常数。

由于 $RR^{-1} = I_L$ ，故：

$$A\tilde{A} + b\tilde{b}^T = I_{L-1} \quad (3.17)$$

$$A\tilde{b} + b\tilde{c} = 0_{L-1} \quad (3.18)$$

由式 3.18 可得， $A^{-1}b = -\frac{\tilde{b}}{\tilde{c}}$ ，代入式 3.17，即可得：

$$A^{-1} = \tilde{A} - \frac{\tilde{b}\tilde{b}^T}{\tilde{c}} \quad (3.19)$$

由上述关系，则广义逆中 $(Z_{\hat{\alpha}i}^T Z_{\hat{\alpha}i})^{-1}$ 的求取，可直接在求取 $(Z^T Z)^{-1}$ 之后，移出其中的第 i 行第 i 列，然后由式 3.19 得到。

在求得所有波段的噪声 $\hat{\varepsilon}_i$ 之后，记 $\hat{\varepsilon} = [\hat{\varepsilon}_1, \dots, \hat{\varepsilon}_L]$ ，则噪声协方差矩阵为

$\hat{R}_n = \frac{\hat{\varepsilon}^T \hat{\varepsilon}}{N}$ 。另外，由于 $\hat{\varepsilon}$ 是针对每个像素的噪声估计，故信号真值的估计可表示为 $(Z - \hat{\varepsilon})$ 。

2) 空间、光谱维去相关法

(Roger, Arnold, 1996)提出了一种用于高光谱图像噪声评估的方法，称为“空间、光谱维去相关法”(Spectral and Spatial Decorrelation method, SSDC)。SSDC 方法利用高光谱图像像元在相邻空间域和光谱域的相关性，通过多元线性回归去除具有高相关性的信号，并利用得到的残差进行噪声估计。该方法受地物覆盖类型影响小，可以自动执行，是目前最稳定的高光谱图像噪声评估方法[34]。

SSDC 方法实现过程如下[33]：

①对数据进行均匀块划分，块大小记为 $w \times h$ 。

数据分块要求数据块连续且不重叠，同时为了使回归分析结果具有统计意义，块大小不能太小。

②对各数据块进行多元线性回归，求取回归参数，并计算噪声方差。

记当前数据块中第 k 波段位于 (i, j) 点的像素值为 $x_{i,j,k}$ ，其中 $1 \leq i \leq w$ ，

$1 \leq j \leq h$ ，回归方程为：

$$\hat{x}_{i,j,k} = a + bx_{i,j,k-1} + cx_{i,j,k+1} + dx_{p,k} \quad (3.20)$$

上式中：

$$x_{p,k} = \begin{cases} x_{i-1,j,k} & i > 1 \\ x_{i,j-1,k} & i = 1, j > 1 \end{cases} \quad (3.21)$$

计算过程中， $x_{1,1,k}$ 始终不参与拟合。

残差计算公式为：

$$r_{i,j,k} = x_{i,j,k} - \hat{x}_{i,j,k} \quad (3.22)$$

根据最小二乘原理，使残差平方和 S^2 最小的系数 a, b, c, d 即为所求。 S^2 由下式给出：

$$S^2 = \sum_{i=1}^w \sum_{j=1}^h r_{i,j,k} \quad (i, j) \neq (1,1) \quad (3.23)$$

第 k 波段当前数据块噪声方差的无偏估计为:

$$\sigma_x^2 = (M-4)^{-1} S^2, \quad M = w \times h - 1 \quad (3.24)$$

③通过方差检验选择均匀子块。

记数据分块后得到的子块数为 N ，则每一波段将得到 N 个方差估计值，用于估算方差的残差值个数为 $T = NM$ 。假定零假设为“方差相等”，给定的显著性水平为 $(1-\alpha)$ ，则方差检验可以通过计算近似服从 F 分布的检验统计量 W 来进行。如果 $W > F_{N-1, T-N}(1-\alpha)$ ，则拒绝零假设。检验统计量 W 由下式给出：

$$W = \frac{T-N}{N-1} \frac{M^{-1} \left(\sum_{n=1}^N S_n^2 \right) - T^{-1} S_t^2}{\left(\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M r_{nm}^2 \right) - M^{-1} \left(\sum_{n=1}^N S_n^2 \right)} \quad (3.25)$$

上式中， $S_t = \sum_{n=1}^N S_n$ ， $S_n = \sum_{m=1}^M |r_{nm}|$ 。

对于给定的 N ， T 和 $(1-\alpha)$ ，还需要计算对应的 F 值，这可以由 $(1-\alpha) - Q(F, N, T) = 0$ 求解得到。

实际应用中，由于分块得到的 N 个子块并不总是均匀的，因此可以只选取其中合理的子集进行方差检验。子集的选取可以通过对方差进行排序，然后前后各去掉 15% 来实现。

④估算影像噪声方差。

在得到均匀子块后，噪声方差的最佳估计就是所有均匀子块方差的均值。

3.2.2 噪声白化

3.1.2 小节中介绍 MNF 变化时提到了噪声白化的概念，在得到噪声协方差矩阵之后，白化的目的就是使噪声协方差矩阵变为单位阵。接下来，我们将进一步讨论“白化”。

若 a 为 $m \times 1$ 维随机向量序列，均值为 0，则其协方差 $C_a = E\{aa^T\}$ 。如果 $m \times m$ 维协方差矩阵 C_a 非奇异，且不为单位矩阵，则称随机向量 a 为有色(或非白)随机

向量。令协方差矩阵特征值分解为 $C_a = VDV^T$ ，且 $W = VD^{-\frac{1}{2}}V^T = C_a^{-\frac{1}{2}}$ ，记变换 $b = Wa = C_a^{-\frac{1}{2}}a$ ，则 b 的协方差矩阵为[35]：

$$C_b = E\{bb^T\} = WC_aW^T = C_a^{-\frac{1}{2}}C_a\left[C_a^{-\frac{1}{2}}\right]^T = I \quad (3.26)$$

上式表明，变换之后，随机向量 b 是标准白色随机向量，换言之，有色的随机向量 a 经过线性变换 Wa 后，变成了白色随机向量。一般称线性变换矩阵

$W = VD^{-\frac{1}{2}}V^T = C_a^{-\frac{1}{2}}$ 称为随机向量 a 的白化矩阵。

回顾 3.1.2 小节 MNF 变换中噪声白化的过程，当时采用的变化矩阵为

$F^T = (E\Lambda_n^{-1/2})^T$ ，将该变化矩阵应用于随机变量 a ，记 $b = F^T a = \left(VD^{-\frac{1}{2}}\right)^T a$ ，此时， b 的协方差矩阵为：

$$C_b = E\{bb^T\} = \left(VD^{-\frac{1}{2}}\right)^T C_a \left(VD^{-\frac{1}{2}}\right) = \left(VD^{-\frac{1}{2}}\right)^T VDV^T \left(VD^{-\frac{1}{2}}\right) = I \quad (3.27)$$

从上面的分析可知，对于随机变量 a ，变换矩阵 $W = VD^{-\frac{1}{2}}V^T = W^T$ 和变换矩阵 $F^T = \left(VD^{-\frac{1}{2}}\right)^T$ 都可以使其“白化”，即对数据进行白化的变换矩阵并不唯一

[36]，采用不同的变换结果，所得结果 b 并不一样，以变换矩阵 W 和 F^T 为例，通过如下实验说明：

分别生成 N 个 $m \times 1$ 维服从均一分布的变量序列 a_1 、服从指数分布的随机变量序列 a_2 和服从高斯分布的随机变量序列 a_3 ，并将 a_1 、 a_2 和 a_3 中心化，即减去均值。对 a_1 、 a_2 和 a_3 分别都采用变换矩阵 W 和 F^T 进行变换，得到变换结果 b_1^W 、 $b_1^{F^T}$ 、 b_2^W 、 $b_2^{F^T}$ 以及 b_3^W 、 $b_3^{F^T}$ 。

分析比较 a_1 、 b_1^W 、 $b_1^{F^T}$ 在各维的直方图，可以发现 a_1 与 b_1^W 的直方图一致，而 $b_1^{F^T}$ 呈高斯分布(如图 3.5 所示)，对于 a_2 、 b_2^W 、 $b_2^{F^T}$ ，同样如此(如图 3.6 所示)。 a_3 、 b_3^W 、 $b_3^{F^T}$ 都呈高斯分布(如图 3.7 所示)。

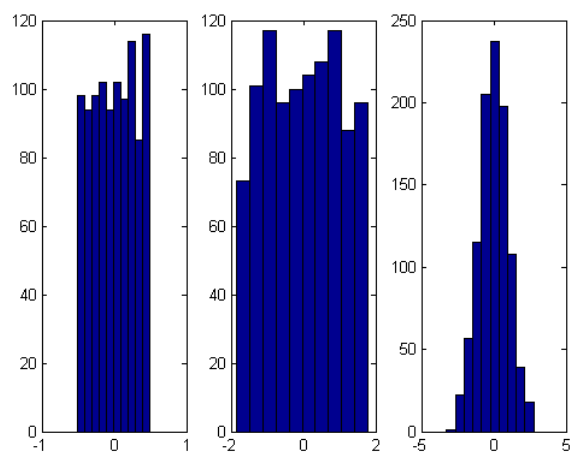


图 3.5 依次为 a_1 、 b_1^w 、 $b_1^{F^T}$ 第一维的直方图

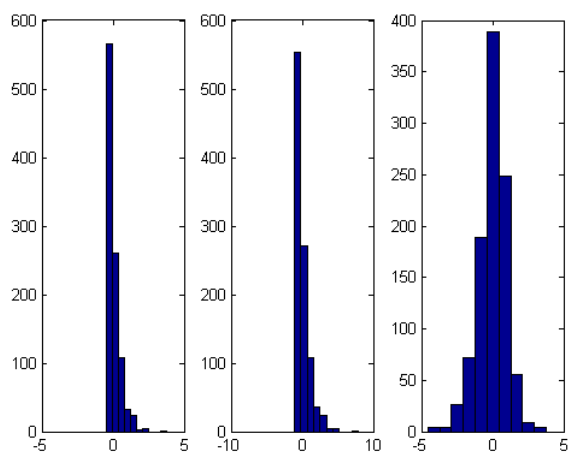


图 3.6 依次为 a_2 、 b_2^w 、 $b_2^{F^T}$ 第一维的直方图，指数分布参数取值为 0.5

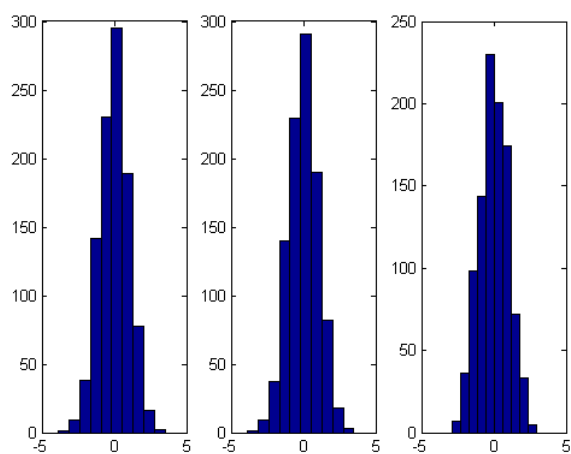


图 3.7 依次为 a_3 、 b_3^w 、 $b_3^{F^T}$ 第一维的直方图

从上面的实验和结果可知，变换矩阵 $W = VD^{-\frac{1}{2}}V^T = W^T$ 和变换矩阵

$F^T = \left(VD^{-\frac{1}{2}} \right)^T$ 都可以使随机变量 a “白化”，但白化矩阵 W 不改变变量 a 的分布

特征，而白化矩阵 F^T 使变量 a 呈高斯分布。

在对高光谱数据进行噪声白化时，如果认为高光谱数据噪声之间不相关，即噪声协方差矩阵为对角阵，此时噪声白化矩阵 F^T 可表示为

$$F^T = \left(E\Lambda_n^{-1/2} \right)^T = \Lambda_n^{-1/2}, \text{ 文献中有时采用这一表达形式[32]。}$$

3.3 维数确定

PCA 和 MNF 变换方法，在变换之后都有同一个问题需要解决，即“选取多少个主分量”，换句话说，就是低维数据究竟选多少维来代表高维数据才合适。3.1 小节中将这一问题留给人来解决，这使得维数的确定有很强的主观性和盲目性，而维数选取的正确与否，将直接影响后续数据分析和处理的精度，因此，选用合适的准则和方法确定最优的维数，对数据分析和处理有着重要意义。

3.3.1 信号子空间与维数

假设观测数据矩阵 Y 可以表示为：

$$Y = X + W = [y_1, y_2, \dots, y_n] \in C^{L \times N} \quad (3.28)$$

其中， X 为真实数据矩阵， W 为误差矩阵， $y_i \in C^{L \times 1}$ 。观测数据的列空间 $Span(Y) = Span(y_1, y_2, \dots, y_N)$ 称为观测数据空间。

定义相关矩阵：

$$R_Y = E\{YY^T\} = E\{(A+W)(A+W)^T\} \quad (3.29)$$

假设 $rank(A) = p$ ，误差矩阵 W 与真实数据矩阵 A 统计不相关，且各观测噪声相互统计不相关并具有相同的方差 σ_w^2 ，则：

$$\begin{aligned} R_Y &= E\{AA^T\} + E\{WW^T\} \\ &= R_X + R_W \\ &= U(\Sigma + \sigma_w^2 I)U^T \end{aligned} \quad (3.30)$$

其中， $\Sigma = diag(\sigma_1^2, \dots, \sigma_p^2, 0, \dots, 0)$ ，且 $\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq \dots \geq \sigma_p^2$ 为真实数据自相关矩阵 R_X 的非零特征值。

进一步，将观测数据相关矩阵 R_Y 表示为：

$$\begin{aligned} R_Y &= [S, G] \begin{bmatrix} \Sigma_s & 0 \\ 0 & \Sigma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^T \\ G^T \end{bmatrix} \\ &= S \Sigma_s S^T + G \Sigma_n G^T \end{aligned} \quad (3.31)$$

式中 $\Sigma_s = \text{diag}(\sigma_1^2 + \sigma_w^2, \sigma_2^2 + \sigma_w^2, \dots, \sigma_r^2 + \sigma_w^2)$, $\Sigma_n = \text{diag}(\sigma_w^2, \sigma_w^2, \dots, \sigma_w^2)$, $S = [u_1, u_2, \dots, u_p]$, $G = [u_{p+1}, u_{p+2}, \dots, u_L]$ 。 $L \times p$ 标准正交矩阵 S 和 $L \times (L-p)$ 标准正交矩阵 G 分别是 R_Y 的前 p 个特征值和后 $(L-p)$ 个特征值对应的特征向量构成的矩阵。将列空间 $\text{Span}(S) = \text{Span}\{u_1, u_2, \dots, u_p\}$ 称为观测数据空间的信号子空间，列空间 $\text{Span}(G) = \text{Span}\{u_{p+1}, u_{p+2}, \dots, u_L\}$ 称为观测数据空间的噪声子空间[35]。

定义信号子空间上的投影矩阵 P_s 和噪声子空间上的投影矩阵 P_n ：

$$\begin{aligned} P_s &= S(S^T S)^{-1} S^T = SS^T \\ P_n &= G(G^T G)^{-1} G^T = GG^T \end{aligned} \quad (3.32)$$

式中由于 S 和 G 都为标准正交矩阵，故 $S^T S = I$, $G^T G = I$ 。由于式(3.30)中矩阵 U 也为标准正交矩阵，即：

$$UU^T = [S, G] \begin{bmatrix} S^T \\ G^T \end{bmatrix} = SS^T + GG^T = I$$

因此，有：

$$P_n = I - P_s \quad (3.33)$$

一般也将 P_n 称为信号子空间的正交投影矩阵。除了上面的关系式外，投影矩阵自身还有两点重要的性质：幂等性和对称性。以投影矩阵 P_s 为例，幂等性和对称性用公式表示如下：

$$\begin{aligned} P_s^2 &= (SS^T)(SS^T) = S(S^T S)S^T = SS^T = P_s \\ P_s^T &= (SS^T)^T = (S^T)^T S^T = SS^T = P_s \end{aligned} \quad (3.34)$$

高光谱影像中每个像元可以用欧式空间 R^L 中的一个向量表示， L 为影像波段数，每个波段对应欧式空间中的一维。同时，对于线性混合的场景，每个像元的光谱向量看做是端元光谱向量根据丰度比例的线性混合。由于场景中的端元数目往往远小于波段数 L ，因此，高光谱影像往往存在于一个低维的线性子空间中，对应地，可以将该低维子空间称为高光谱影像的信号子空间。从另一个角度来说，

如果场景中端元数目为 p ，则高光谱影像的最佳信号子空间的维数为 p ，即对高光谱数据进行去相关变化后，所需要的低维数据的最佳维数为 p ，因为如果维数小于 p ，则信息会出现丢失，如果维数大于 p ，则噪声的影响会增强。

假设波段数为 L 的高光谱影像上像元光谱可以表示为：

$$y = x + n \quad (3.35)$$

其中 y 、 x 、 n 都为 L 维向量，可以将 y 、 x 、 n 分别看做信号观测值、信号真实值以及加性噪声。

如果噪声 n 为高斯白噪声，各波段噪声方差为 σ_w^2 ，则此时 y 的相关矩阵 R_y 大于 σ_w^2 的特征值对应的特征向量所张成的空间就是信号子空间的估计，但实际场景中，信号子空间的估计往往比较复杂，主要原因如下[31]：

①高光谱影像中的噪声往往不是高斯白噪声，因此，最大的 p 个特征值对应的特征向量所张成的空间，并不能准确描述信号子空间。

②即使噪声是高斯白噪声，由于估计 σ_w^2 和特征值的过程中存在随机扰动和误差，也可能导致错误。

3.3.2 HFC、NWHFC、NSP 算法

在没有先验知识的情况下，为了从遥感影像中确定未知信号源数目，(Chein-I Chang, Qian Du, 2004)基于 Neyman-Pearson 探测理论的特征阈值分析方法，提出了三种虚拟维数(virtual dimensionality, VD)估算方法：HFC (Harsanyi-Farrand-Chang)、NWHFC (noise-whitened HFC)、NSP (noise subspace projection)[32]。

HFC 算法是基于 Neyman-Pearson 探测理论的特征阈值分析方法，该方法首先计算数据的相关矩阵 $R_{L \times L}$ 和协方差矩阵 $K_{L \times L}$ ，然后比较它们的特征值之间的差异。假设相关矩阵和协方差矩阵对应的特征值分别为 $\{\hat{\lambda}_1 \geq \hat{\lambda}_2 \geq \dots \geq \hat{\lambda}_L\}$ 和 $\{\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_L\}$ ，噪声是均值为 0 的高斯白噪声，各波段噪声方差为 σ_{nl}^2 ，则：

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}_l &> \lambda_l > \sigma_{nl}^2 & l=1, \dots, VD \\ \hat{\lambda}_l &= \lambda_l = \sigma_{nl}^2 & l=VD+1, \dots, L \end{aligned} \quad (3.36)$$

式中 VD 被定义为：从分类和目标探测角度，能够表征高光谱数据的具有明显差异的最小光谱数目。这有别于本征维数(intrinsic dimensionality, ID)的定义，

本征维数由场景中端元个数决定[32]。实际应用中，一般将 VD 作为端元数目的一种估计。

由式 3.36 建立二元假设：

$$\begin{aligned} H_0 : z_l &= \hat{\lambda}_l - \lambda_l = 0 \\ H_1 : z_l &= \hat{\lambda}_l - \lambda_l > 0 \end{aligned} \quad l=1,2,\dots,L \quad (3.37)$$

在 H_0 、 H_1 假设下， z_l 的条件概率密度函数为：

$$\begin{aligned} p_0(z_l) &= p(z_l | H_0) \cong N(0, \sigma_{z_l}^2) \\ p_1(z_l) &= p(z_l | H_1) \cong N(\mu_l, \sigma_{z_l}^2) \end{aligned} \quad l=1,2,\dots,L \quad (3.38)$$

上式中 μ_l 为未知量， $\sigma_{z_l}^2$ 由下式给出：

$$\sigma_{z_l}^2 = \text{Var}[\hat{\lambda}_l - \lambda_l] = \text{Var}[\hat{\lambda}_l] + \text{Var}[\lambda_l] - 2\text{Cov}(\hat{\lambda}_l, \lambda_l) \quad (3.39)$$

如果样本数目 N 足够大，有 $\text{Var}[\hat{\lambda}_l] \cong \frac{2\hat{\lambda}_l^2}{N}$ ， $\text{Var}[\lambda_l] \cong \frac{2\lambda_l^2}{N}$ 。当 $N \rightarrow \infty$ ，有：

$$\sigma_{z_l}^2 \cong \frac{2\hat{\lambda}_l^2}{N} + \frac{2\lambda_l^2}{N} \quad l=1,2,\dots,L \quad (3.40)$$

定义虚警概率和探测概率函数：

$$P_F = \int_{\tau_l}^{\infty} p_0(z) dz \quad (3.41)$$

$$P_D = \int_{\tau_l}^{\infty} p_1(z) dz \quad (3.42)$$

式 3.41 和 3.42 中， τ_l 为阈值。 $z_l = \hat{\lambda}_l - \lambda_l > \tau_l$ 时， H_1 为真，即认为第 l 个特征值中除了噪声外信号能力也有贡献。实际应用中，可以通过将虚警概率 P_F 设定为固定值，然后求取 τ_l 。

HFC 算法中，由于式 3.39 中 $\text{Cov}(\hat{\lambda}_l, \lambda_l)$ 的值不一定为 0，这将导致 $\sigma_{z_l}^2$ 估算出现误差，最终导致式 3.41 和 3.42 中阈值 τ_l 的估算出错。为此，在使用 HFC 算法之前，首先进行噪声白化，通过噪声白化，减小 $\text{Cov}(\hat{\lambda}_l, \lambda_l)$ 的值，这一改进后的 HFC 算法被称为 NWHFC。噪声白化的过程可参考 3.2 节。

对于 HFC 和 NWHFC 算法，当样本数目较少的时候， $\text{Cov}(\hat{\lambda}_l, \lambda_l)$ 的值无法趋近于 0，NSP 算法正是为解决这一问题而设计。

若数据协方差矩阵记为 $K_{L \times L}$ ，噪声协方差矩阵记为 K_n ，协方差矩阵白化后记为 $\bar{K} = K_n^{-\frac{1}{2}} K K_n^{-\frac{1}{2}}$ ， \bar{K} 的特征值和对应的特征向量分别记为 $\{\bar{\lambda}_l\}_{l=1}^L$ 和 $\{u_l\}_{l=1}^L$ ，则 \bar{K} 可展开为：

$$\bar{K} = \sum_{l=1}^{VD} \bar{\lambda}_l u_l u_l^T + \sum_{l=VD+1}^L \bar{\lambda}_l u_l u_l^T \quad (3.43)$$

上式中，向量 $\{u_l\}_{l=1}^{VD}$ 和 $\{u_l\}_{l=VD+1}^L$ 分别张开信号子空间和噪声子空间，且 $\bar{\lambda}_l = 1 (l=1, \dots, VD)$ ， $\bar{\lambda}_l > 1 (l=VD+1, \dots, L)$ 。由此，可以建立二元假设：

$$\begin{aligned} H_0 : y_l &= \bar{\lambda}_l = 1 \\ H_1 : y_l &= \bar{\lambda}_l > 1 \end{aligned} \quad l=1, 2, \dots, L \quad (3.44)$$

在 H_0 、 H_1 假设下， y_l 条件概率密度为：

$$\begin{aligned} p_0(y_l) &= p(y_l | H_0) \cong N(0, \sigma_{yl}^2) \\ p_1(y_l) &= p(y_l | H_1) \cong N(\mu_l, \sigma_{yl}^2) \end{aligned} \quad l=1, 2, \dots, L \quad (3.45)$$

上式中 μ_l 为未知量， $\sigma_{yl}^2 = \text{Var}[\bar{\lambda}_l] \cong \frac{2\bar{\lambda}_l^2}{N}$ ，在满足假设 H_0 时， σ_{yl}^2 可进一步简化为 $\sigma_{yl}^2 \cong \frac{2}{N}$ 。接下来，同样采用 Neyman-Pearson 确定 VD。

3.3.3 HySime 算法

(Jos é M. Bioucas-Dias, Jos é M. P. Nascimento, 2008) 根据最小二乘原理，在估算信号与噪声相关矩阵的基础上，提出了使观测数据与噪声的投影误差之和最小化的准则，算法命名为 HySime (hyperspectral signal identification by minimum error) [31]。

假设观测值由信号和加性噪声组成，用向量表示为 $y = x + n$ ，假设信号相关矩阵的估计值为 \hat{R}_x ，并假设噪声的均值为 0，协方差为 \hat{R}_n (噪声估算方法见 3.2.1 节)。信号相关矩阵 $\hat{R}_x = \frac{[\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N][\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N]^T}{N}$ 特征值分解为：

$$\hat{R}_x = E \Sigma E^T \quad (3.46)$$

类比 3.3.1 节中对信号子空间和噪声子空间的描述，上式中 $E = [e_1, \dots, e_L]$ 所张成的 L 维空间可以分解为两个互相正交的子空间 $\langle E_k \rangle$ 和 $\langle E_k \rangle^\perp$ ，对应的特征向量

分别记为 $E_k = [e_{i_1}, \dots, e_{i_k}]$ 和 $E_k^\perp = [e_{i_{k+1}}, \dots, e_{i_L}]$, $\pi = \{i_1, i_2, \dots, i_L\}$ 用于记录特征向量的排列顺序。

若子空间 $\langle E_k \rangle$ 上的投影矩阵记为 $U_k = E_k E_k^T$, 则 y 在 $\langle E_k \rangle$ 上的投影为 $\hat{x}_k = U_k y$ 。 \hat{x}_k 与真值 x 的均方误差为:

$$\begin{aligned} mse(k) &= E[(x - \hat{x}_k)^T (x - \hat{x}_k)] \\ &= tr(E[(x - \hat{x}_k)(x - \hat{x}_k)^T]) \\ &= tr\left(E\left[\left(\underbrace{x - x_k}_{b_k} - U_k n\right)\left(\underbrace{x - x_k}_{b_k} - U_k n\right)^T\right]\right) \\ &= tr(E[b_k b_k^T] + E[(U_k n)(U_k n)^T]) \end{aligned} \quad (3.47)$$

对于任一投影矩阵 U , 由 3.3.1 节中对投影矩阵性质的介绍可知 $U^\perp = I - U$, 因此, 上式中 $b_k = x - x_k = U_k^\perp x$ 。故:

$$\begin{aligned} mse(k) &= tr\left(E[(U_k^\perp x)(U_k^\perp x)^T] + E[(U_k n)(U_k n)^T]\right) \\ &= tr\left(U_k^\perp R_x (U_k^\perp)^T + U_k R_n U_k^T\right) \\ &= tr(U_k^\perp R_x) + tr(U_k R_n) \\ &= tr(U_k^\perp R_y) + 2tr(U_k R_n) + c \end{aligned} \quad (3.48)$$

式 3.48 中 $R_y = \frac{YY^T}{N}$, 即样本相关矩阵, c 为常数。上述过程中, 利用到投

影矩阵的另外两个性质 $U = U^2$, $U = U^T$, 以及矩阵迹的两个性质,

$$tr(A+B) = tr(A) + tr(B), \quad tr(AB) = tr(BA)。$$

信号子空间的最佳估计准则可表示为: 寻找最优特征向量排列顺序 $\pi = \{i_1, i_2, \dots, i_L\}$ 以及 k 值, 使 $mse(k)$ 最小化。用公式表示如下:

$$(k, \pi) = \arg \min_{k, \pi} \{tr(U_k^\perp R_y) + 2tr(U_k \hat{R}_n)\} \quad (3.49)$$

上式中等号右侧的两项都有明确的意义: 第一项表示投影误差能量, 随着 k 值的增大, 该项减小; 第二项表示噪声能量, 随着 k 值的增大, 该项增大。

由于 $U_k = E_k E_k^T$, $U_k^\perp = I - U_k$, 进一步, 将式 3.48 表示如下:

$$(k, \pi) = \arg \min_{k, \pi} \left\{ c + \sum_{j=1}^k \left(\underbrace{-p_{i_j} + 2\sigma_{i_j}^2}_{\delta_{i_j}} \right) \right\} \quad (3.50)$$

其中, c 为常数, p_{i_j} 、 $\sigma_{i_j}^2$ 可用二项式表示为:

$$\begin{aligned} p_{i_j} &= e_{i_j}^T R_y e_{i_j} \\ \sigma_{i_j}^2 &= e_{i_j}^T \hat{R}_n e_{i_j} \end{aligned} \quad (3.51)$$

由此, 式 3.50 等号右侧最小值的求取, 只需找出 δ_i 的所有负值即可, 这样, 对应的 (k, π) 即为所求。

3.3.4 信号子空间维数、本征维数与虚拟维数

前面对维数的介绍中, 提到了三个维数的概念——信号子空间维数、本征维数(ID)以及虚拟维数(VD)。针对光谱解混, 文献中往往将这三个概念直接与端元数目对应起来[31, 32, 37], 并不做区分, 为此, 对这三者之间的关系进行探讨。

本征维数, 也称为有效维数(effective dimensionality, ED), 代表了准确描述数据集中所有数据所需要的最小变量数目, 对于采用线性光谱混合模型描述的影像, 如果端元数目为 p , 则 $(p-1)$ 即为该影像的本征维数[32, 38, 39]。对本征维数的估计, 一般通过分析数据进行 PCA 变换后的特征值来实现[32, 39]。

(Jos é M. Bioucas-Dias, Jos é M. P. Nascimento, 2008)在介绍 HySime 算法时, 将端元数目估算过程与信号子空间的确定联系起来, 通过确定最优子空间, 使得在该空间中能最近似地表达所有信号信息, 该子空间的维数即对应端元数目。

有别于本征维数, 虚拟维数从目标探测和分类的角度来定义, 因此关注的是光谱的差异性。实际应用中, 往往直接将虚拟维数作为本征维数的估计。(Peter Bajorski, 2009)对虚拟维数进行了深入探讨, 指出 HFC 算法计算得到的虚拟维数并不一定能作为本征维数的估计[38]。原因是相关矩阵 R 和协方差矩阵 K 存在如下关系:

$$R = K + \bar{u}\bar{u}^T \quad (3.52)$$

上式中 \bar{u} 为数据均值构成的向量。(Peter Bajorski, 2009)指出 R 并没有包含比 K 更多的“维数”信息, 而且 R 中的信息还受均值 \bar{u} 的影响, 因此在估算数据维数时该算法不一定有效[38]。

回顾 3.3.2 节中介绍的 NSP 算法, 该算法对虚拟维数的估计只基于样本的协方差矩阵。通过对白化后的样本协方差矩阵进行特征值分解, 得到特征向量张成的信号子空间和噪声子空间, 然后采用 Neyman-Pearson 探测理论确定阈值, 选取最优子空间。因此, 可以认为, Hysime 算法和 NSP 算法都是通过确定最优信号子空间来确定维数。NSP 算法得到的虚拟维数, 与 HySime 算法中确定的信号子空间有类似含义。

结合前面对信号子空间维数、本征维数、虚拟维数的介绍以及三者之间关系的分析, 进一步有如下结论:

虽然信号子空间维数、本征维数、虚拟维数定义的侧重点不同, 但对于线性混合的场景, 这三者将与场景中的端元数目有较好的一致性。如果场景中地物混合采用线性光谱混合模型描述时误差较大, 即地物混合中“非线性”因素影响显著, 此时计算得到的信号子空间维数和虚拟维数将大于实际端元数目。尽管如此, 信号子空间维数及虚拟维数计算得到的结果仍有一定的指示意义[31]。

3.4 HySime 算法的改进与实验

3.4.1 HySime 算法中信号相关矩阵的估算

分析式 3.50 和式 3.51 可知, Hysime 算法中, 除了噪声相关矩阵 \hat{R}_n 的估算(由于假设噪声均值为 0, 因此噪声协方差矩阵与相关矩阵一致), 还有很重要的一步是估算信号的相关矩阵 \hat{R}_x , 因为 \hat{R}_x 的特征向量也直接影响着最终的结果。原始 Hysime 算法中, 噪声估算采用 3.2.1 节中的全图光谱维去相关法得到逐像元的噪声估计值, 在此基础上, 通过数据观测值减去噪声估计值后得到信号的估计值, 进而可以计算信号相关矩阵的估计值[31]。也就是说, 原始 HySime 算法中处理噪声采取的策略是“去除”[40], 这在准确估计噪声的情况下是可行的, 但实际应用中, 由于全图光谱维去相关法得到的各像元的噪声估计值往往并不准确[34], 因此, 原始 HySime 算法得到的结果可能并不理想。

事实上，为了得到信号相关矩阵的估计值 \hat{R}_x ，进行逐像元的噪声“去除”并不是必须的，由于假设信号与噪声不相关，有 $R_y = R_x + R_n$ ，即信号相关矩阵的估计值 \hat{R}_x 可以通过样本相关矩阵 R_y 减去噪声相关矩阵估计值 \hat{R}_n 得到。实际应用中，虽然很难准确获取每个像元的噪声估计值，但准确获取噪声的协方差矩阵的估计值是可能的，如利用前面提到的 SSDC 算法，因此，通过 $\hat{R}_x = R_y - \hat{R}_n$ 进行信号相关矩阵的估算，将有助于 Hysime 算法精度的提高。

3.4.2 基于噪声白化的 HySime 算法

若噪声为白噪声，记噪声协方差矩阵为 $R_n = \sigma^2 I$ ，则信号相关矩阵 R_x 的特征值 λ 及对应的特征向量 x 满足：

$$(R_x - \lambda I)x = (R_y - R_n - \lambda I)x = (R_y - (\sigma^2 + \lambda)I)x = 0 \quad (3.53)$$

从式 3.53 可以看出，若噪声为白噪声，即使噪声能量变化，HySime 算法所求得特征向量仍保持不变，即特征向量所确定的子空间 $\langle E_k \rangle$ 和 $\langle E_k \rangle^\perp$ 保持不变。因此，如果噪声为有色噪声，通过噪声白化，将使算法对噪声变化的适应性更强。

如果得到了噪声的协方差矩阵估计值 \hat{R}_n ，对其进行特征值分解，得到特征值和特征向量分别记为 Λ_n 和 A ，则有：

$$\begin{aligned} A^T \hat{R}_n A &= \Lambda_n \\ A^T A &= I \end{aligned} \quad (3.54)$$

若原始数据为 y ，则可以通过 $F = A\Lambda_n^{-1/2}$ 对数据进行噪声白化，记为：

$$y_w = Fy \quad (3.55)$$

若将 y_w 作为原始 Hysime 算法的输入数据，则此时噪声协方差矩阵为

$\hat{R}_{nw} = I$ ，记观测数据相关矩阵记为 R_{yw} ，则信号相关矩阵为

$$\hat{R}_{xw} = R_{yw} - \hat{R}_{nw} = R_{yw} - I。$$

参照原始 Hysime，记 \hat{R}_{xw} 的特征向量为 $E = [e_1, \dots, e_L]$ ，记排列 $\pi = \{i_1, i_2, \dots, i_L\}$ ，此时由于 $\sigma_{i_j}^2 = e_{i_j}^T \hat{R}_{nw} e_{i_j} = 1$ ，故式 3.50 可表示为：

$$(k, \pi) = \arg \min_{k, \pi} \left\{ c + \sum_{j=1}^k (2 - p_{i_j}) \right\} \quad (3.56)$$

即噪声白化之后, $(2-p_{i_j})$ 的所有负值对应的 (k, π) 即为所求。

3.4.3 模拟数据实验

实验所用模拟数据由信号加上噪声构成。信号数据由端元光谱矩阵与丰度矩阵相乘得到, 端元光谱从 USGS 光谱库中随机选择, 并基于 AVIRIS 的光谱响应函数和中心波长将光谱重采样到 224 个波段。丰度数据按照 Dirichlet 分布随机生成, Dirichlet 分布的概率密度函数为:

$$f(P, \alpha) = \frac{\Gamma(\sigma)}{\prod_{i=1}^k \Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^k P_i^{\alpha_i - 1} \quad (3.57)$$

上式中 $\sigma = \sum_{i=1}^k \alpha_i$, $\Gamma(\bullet)$ 代表 gamma 函数, $P_i > 0$ 且 $\sum_{i=1}^k P_i = 1$ 。Dirichlet 分布

除了能保证丰度数据的“非负”和“和为一”特性, 通过改变 Dirichlet 分布的参数, 还可以方便地改变分布的形状, 这使得模拟数据的生成有很强的灵活性[14, 31]。

在获得信号数据之后, 噪声数据根据给定的信噪比随机生成。信噪比采用如下定义:

$$SNR = \frac{P_{signal}}{P_{noise}} = \left(\frac{A_{signal}}{A_{noise}} \right)^2 \quad (3.58)$$

上式中, P 表示平均能量 (average power), A 表示均方根 (root mean square, RMS), 对于离散数据, 对应的能量(强度)通过求平方和得到, 即:

$$SNR = \frac{E[x^T x]}{E[n^T n]} \quad (3.59)$$

若信噪比采用分贝 (decibel, dB) 来描述, 则:

$$SNR_{dB} = 10 \log_{10} SNR \quad (3.60)$$

为了描述非白噪声的影响, 各波段噪声方差按下式计算:

$$\sigma_i^2 = \sigma^2 \frac{e^{-\frac{(i-L/2)^2}{2\eta^2}}}{\sum_{j=1}^L e^{-\frac{(j-L/2)^2}{2\eta^2}}} \quad (3.61)$$

上式中, L 为波段数, σ^2 对应噪声能量, η 反映噪声在各波段的不均一性, 当 $\eta \rightarrow \infty$ 时, 噪声为白噪声, 当 $\eta \rightarrow 0$ 时, 噪声为单波段噪声。

另外，为模拟端元对应的纯像元不存在的高光谱数据，可通过设置最大丰度比例 ρ 来控制像元“纯度”，即在得到服从 Dirichlet 分布的丰度样本后，根据需要对所得候选样本进行筛选。有文献中采用的方法是首先生成大量的候选样本（如 10 倍于所需样本的数目），然后随机从中选择样本并判断所选样本是否符合要求，不合要求则舍去，直到达到所需样本数[9]。举例来说，如果需要模拟结果中某一端元最大丰度比例为 $\rho = 0.75$ ，则随机得到的丰度样本中，该端元丰度比例大于 0.75 则舍去。

以上模拟数据生成方法在文献[9, 14, 31]中均有介绍，这里进行实验时，参数的取值大致参照文献[31]，端元数取值为 5、10、15、20，信噪比为 15dB、25dB、35dB，记 $\eta = 1/\eta$ ， η 取 0、1/18， ρ 取 1，每种组合都生成 100 组模拟数据，采用这些数据，对 HySime 算法和 NSP 算法进行测试。噪声估算方法参照文献[31]采用 3.2.1 节中的全图光谱维去相关法。为了方便表述，这里将利用 $\hat{R}_x = R_y - \hat{R}_n$ 估算信号相关矩阵的 HySime 算法记为 HySime_Minus，将基于噪声白化的 HySime 算法记为 HySime_White，将虚警概率取值为 $10e-3$ 的 NSP 算法记为 NSP_10e-3，将虚警概率取值为 $10e-4$ 的 NSP 算法记为 NSP_10e-4。

针对每种参数组合下生成的 100 组模拟数据，分别采用 HySime、HySime_White、HySime_Minus、NSP_10e-3、NSP_10e-4 进行信号子空间估计，并计算 100 组结果的均值和标准差作为结果评价的指标。均值越接近真实值，标准差越小，表明算法结果更准确且更稳定。所得结果如表 3.3 所示。

表 3.3 不同参数取值条件下针对 100 组数据不同算法所得结果的统计均值和方差

			White Noise($\eta=0$)				Color Noise($\eta=1/18$)			
SNR	Method		p=5	p=10	p=15	p=20	p=5	p=10	p=15	p=20
15dB	HySime:	(mean)	4.75	6.7	7.62	8.02	4.73	6.68	7.24	7.69
		(std)	0.435	0.659	0.749	0.568	0.51	0.777	0.78	0.615
	HySime_White:	(mean)	4.98	8.28	9.63	10.81	5	10	15	20.14
		(std)	0.141	0.712	0.706	0.631	0	0	0	0.899
	HySime_Minus:	(mean)	4.98	8.28	9.63	10.81	4.52	6.27	6.85	7.47
		(std)	0.141	0.712	0.706	0.631	0.577	0.737	0.672	0.658
	NSP_10e-3:	(mean)	4.95	8.13	9.67	11.01	5	10	15	20
		(std)	0.219	0.706	0.667	0.577	0	0	0	0
25dB	HySime:	(mean)	4.95	8.18	9.71	11.07	5	10	15	20
		(std)	0.219	0.702	0.686	0.573	0	0	0	0
25dB	HySime:	(mean)	5	9.64	12.35	13.65	5	9.51	12.37	14.18
		(std)	0	0.482	0.845	0.657	0	0.577	0.872	0.821

	HySime _White:	(mean)	5	10	13.92	16.28	5	10	15	20
		(std)	0	0	0.598	0.653	0	0	0	0
	HySime _Minus:	(mean)	5	10	13.92	16.27	5	9.38	11.77	13.43
		(std)	0	0	0.598	0.649	0	0.565	0.737	0.7
	NSP_ 10e-3:	(mean)	5	9.94	13.73	16.32	5	10	15	20
		(std)	0	0.239	0.633	0.618	0	0	0	0
35dB	NSP_ 10e-4:	(mean)	5	9.94	13.75	16.34	5	10	15	20
		(std)	0	0.239	0.626	0.623	0	0	0	0
	HySime:	(mean)	5	10	14.99	19.13	5	10	15	19.41
		(std)	0	0	0.1	0.506	0	0	0	0.621
	HySime _White:	(mean)	5	10	15	20	5	10	15	20
		(std)	0	0	0	0	0	0	0	0
	HySime _Minus:	(mean)	5	10	15	20	5	10	14.98	19.05
		(std)	0	0	0	0	0	0	0.141	0.626
	NSP_ 10e-3:	(mean)	5	10	15	19.89	4.99	10	15	20
		(std)	0	0	0	0.314	0.1	0	0	0
	NSP_ 10e-4:	(mean)	5	10	15	19.9	4.99	10	15	20
		(std)	0	0	0	0.302	0.1	0	0	0

为了更直观地表达结果，将端元数为 10、信噪比为 25dB，噪声分别为白噪声和有色噪声时所得结果绘制成直方图，如下所示。

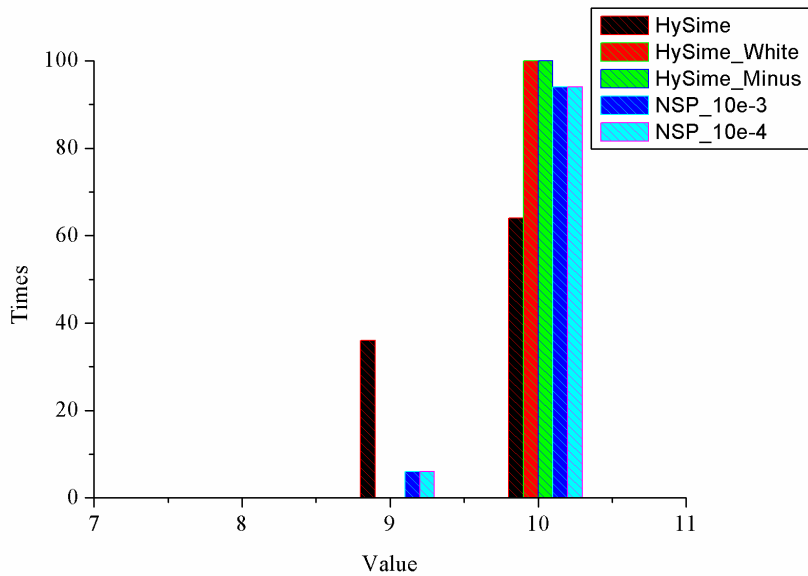


图 3.8 端元数 10、信噪比 25dB、白噪声，不同算法所得结果

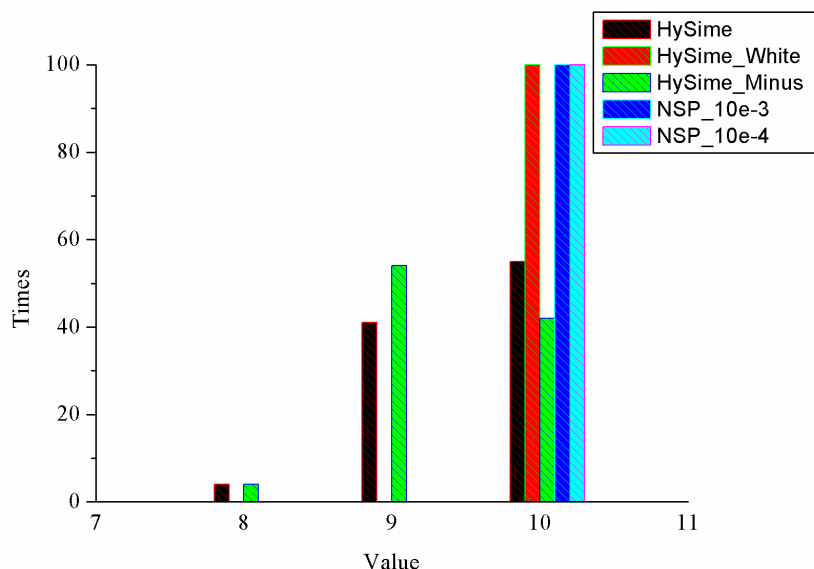


图 3.9 端元数 10、信噪比 25dB、有色噪声，不同算法所得结果

结合上述直方图，并分析表 3.3，有如下结论：

①Hysime_White 与 NSP 在不同参数条件下所得结果更接近真值，稳定性也更强。

②当噪声为高斯白噪声时，HySime_White、HySime_Minus 所得结果一致，但噪声为有色噪声时，HySime_White 明显优于 HySime_Minus，这与 3.4.2 节中的分析一致。

③Hysime_White 与 NSP 在不同参数条件下所得结果基本一致，这与 3.3.4 节中的分析吻合。两算法都是通过噪声白化后确定最优子空间，只是二者确定最优子空间时采取的策略不同。

④高斯白噪声情况下，如果信噪比较低，各算法对信号子空间维数估计的精度将随着“真实维数”的增大而降低，这也与实际情况相符。因为信噪比越低，能准确分离的独立信号个数越少，而信号子空间维数反映的是独立信号的个数。

⑤在低信噪比条件下，噪声为有色噪声时 Hysime_White 与 NSP 算法所得结果与真实值吻合更好。因为当噪声趋向于单波段噪声(如实验中 $\eta=1/18$)时，噪声主要存在于图像的少数几个波段，此时噪声更容易与信号“分离”[27]，因而估计的信号子空间也更准确。

3.4.4 真实数据实验

真实数据为为 1997 年 6 月 AVIRIS 获取的 Nevada 州 Cuprite 采矿区数据，从 USGS 网站获取。数据为反射率数据，包括 224 个波段(0.4—0.25 μm)。选取其中 350 \times 350 像素大小的区域作为研究区域，同时由于水汽吸收和信噪比较低，去掉波段 1—3、107—114、153—169 和 221—224，仅使用余下的 192 个波段。

Cuprite 采矿区有详细的地面调查数据及背景资料。(Gregg Swayze 等,1992)利用 1990 年 AVIRIS 获取的数据，从中确定了 18 种矿物类型，并通过对采样样本进行 X 射线衍射 (X-Ray Diffraction, XRD) 分析，验证了分析结果[41]。此后，(Gregg Swayze, 1997)利用 1995 年 AVIRIS 获取的数据，分析了 25 中矿物的分布情况，并对 23 种矿物进行了矿物填图[42]。

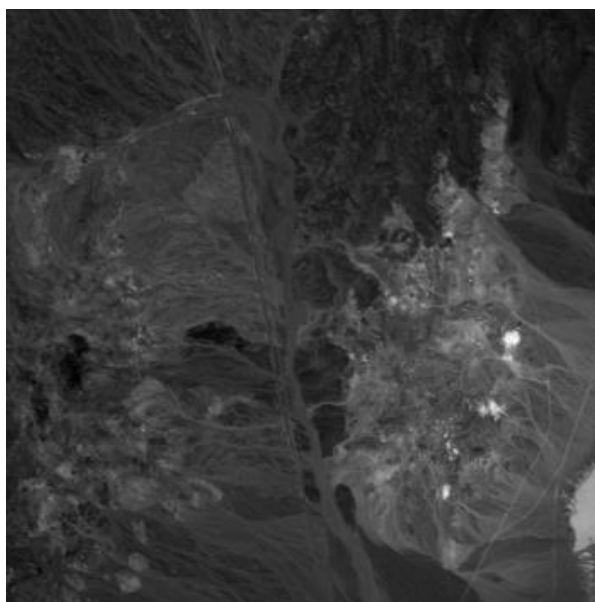


图 3.10 所选 Nevada 州 Cuprite 采矿区区域 AVIRIS 第 30 波段(波长 655.84nm)图像

已有研究中，对该图 3.10 所示的研究区域进行“维数估算”所得结果不尽相同，但大致在 18—30 之间[31, 37, 40]。分别采用 HySime、HySime_White、HySime_Minus、NSP_10e-3、NSP_10e-4 对该研究区域进行“维数估算”，其中噪声估算分别采用全图光谱维去相关法和 SSDC 两种方法进行，所得结果如下：

表 3.4 Cuprite 区域维数估算结果

维数估算方法 噪声估算方法	HySime	HySime_minus	HySime_white	NSP_10e-3	NSP_10e-4
全图光谱维去相关法	20	24	27	27	27
SSDC 方法	-	23	26	26	26

上述实验结果与文献[31, 37]中所得结果有很大的一致性, 由于地物混合中非线性因素的影响、未知地物类型的存在以及光谱变异[31], 以上结果比目前地面调查所得结果要大, 这与 3.3.4 中的分析一致。

通过检查 MNF 变化后的影像, 第 40 分量所含有的信息已十分有限, 即主要体现为噪声。第 40 分量图像如图 3.11 所示。

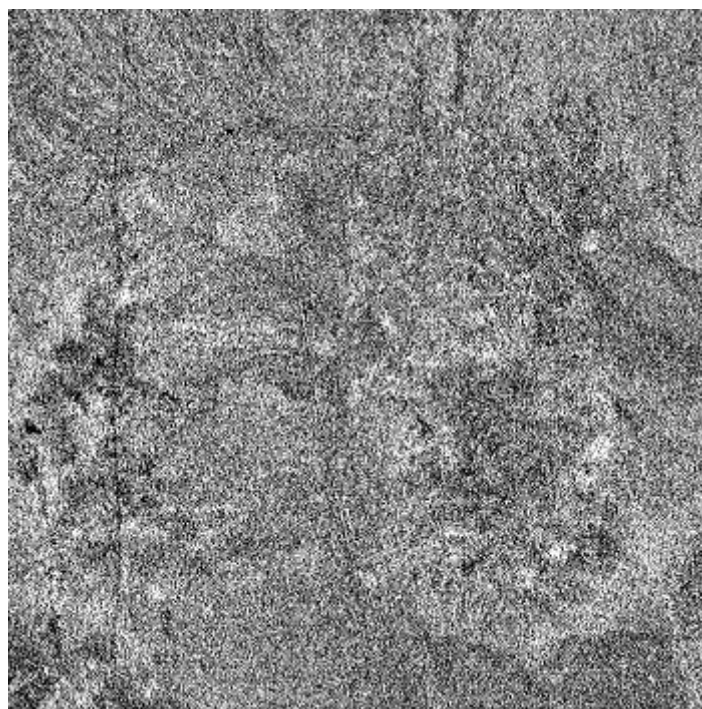


图 3.11 Cuprite 采矿区数据 MNF 变化后第 40 分量影像

为了评估维数估算结果的有效性, 这里分别选取 MNF 变换后影像的前 10、20、26、30、40、50 个分量(波段), 进行 PPI 指数计算, 投影次数(迭代次数)设置为 50000, 阈值系数设置为 2, 统计 PPI 指数大于 1 的像元数, 结果如下:

选择的波段数	10	20	26	30	40	50
所得像元数	638	873	1002	1061	1172	1355

PPI 指数较大的区域, 对应了光谱信息“丰富”的区域。比较不同情况下 PPI 指数大于 1 的像元数目, 波段数为 26、30、40 时, 像元数目比较接近。由于第 MNF 变化所得影像第 40 波段之后主要为噪声, 因此前 40 波段是信号集中的波段, 此时选取前 26、30、40 个波段进行分析所得像元数目比较接近, 说明这三种情况下所选波段子集对影像信息的表达有较好的一致性和完整性。波段数为 10、20 时, 像元数较少, 表明此时选择的波段子集过小, 导致信息表达不完全。由于 40 波段之后主要为噪声信息, 因此波段数为 50 时, 像元数的增多可能更多是由于噪声的影响。

为了进一步阐明上述分析, 选取上述 6 种情况下所得像元集合的交集, 得到的像元数为 475, 这 475 个像元, 受噪声的影响较小, 同时也最具有代表性, 记这一集合为 Φ 。对于不属于集合 Φ 的像元, 可分析其与 Φ 中各像元的光谱夹角, 选取夹角最小的作为“相似光谱”, 如果夹角值很小, 则对于集合 Φ , 该像元并非“典型光谱”, 否则, 表明该像元“独立”于集合 Φ 。因此, 可以通过计算光谱角来分析像元相对于集合 Φ 的“独立性”, 光谱夹角越大, 表明像元越“独立”于集合 Φ , 上述 6 种情况下, 光谱夹角的最大值如下, 单位为度:

选择的波段数	10	20	26	30	40	50
光谱夹角最大值	2.7559	3.7128	4.1138	4.1138	4.1138	4.1883

由上表可知, 波段数为 26、30、40 时, 光谱夹角最大值有很好的 consistency。波段数为 10、20 时, 光谱夹角最大值偏小, 而波段数为 50 时, 光谱夹角最大值偏大。

从上面的分析可知, 波段数为 26、30、40 时所得结果有很好的 consistency, 这表明维数估算方法得到的信号子空间能很好地表达信息, 也表明估算得到的维数应用于数据分析是有效的。

第4章 非线性约束优化在最小外切单形体分析中的应用

回顾第二章中介绍的基于凸面几何的端元提取算法，根据是否“有纯像元假设”，算法被分为两种类型——最大内接单形体分析和最小外切单形体分析。由于实际高光谱影像中，端元对应的纯像元往往并不存在，或者部分端元对应的纯像元并不存在，因此，不需要“纯像元假设”的最小外切单形体分析方法受到了广泛关注[8, 9, 22, 43-45]。由于最小外切单形体分析方法往往涉及最优化计算，因此算法应用于较大图像时，算法的效率将是一大障碍，而且，最小外切单形体分析方法求取最优解往往通过迭代过程实现，因此合理的初始值有利于加快算法的收敛速度并降低算法陷入局部最优解的可能性。针对上述两个问题，本章将给出解决方案。另外，在分析最小外切单形体求解与非线性约束优化之间关系的基础上，本章提出直接通过非线性不等式约束条件下的最优化过程求取最小外切单形体，并通过模拟数据和实际数据实验，对这一方法以及其他基于凸面几何的端元提取方法进行定量分析和比较。

4.1 最小外切单形体分析算法优化

对于最小外切单形体分析算法，由于优化过程计算量较大，因此，这些算法应用于较大的图像时，算法的效率将是首要考虑的问题。这里介绍两种减少计算的数据量而提高算法效率的方法——初始单形体内部点去除法和冗余像元去除法。在此之前，先介绍“有向距离”的概念，为介绍初始单形体内部点去除法做铺垫。

4.1.1 有向距离的“方向”与“大小”

回顾 2.2 节中点到超平面的距离公式 2.12，如果去掉分子中的求模(此处即绝对值)运算符，则可以得到点到超平面的有向距离计算公式：

$$d = \frac{\vec{N} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)}{|\vec{N}|} \quad (4.1)$$

之所以称为有向距离，是因为该距离 d 既表示了“大小”，也表示了“方向”。参考 2.2 节中的描述可知，“方向”体现的是 \vec{x} 与该超平面的位置关系。

这里考虑如下问题：

如图 4.1 所示, 散点为端元数目为 3 的高光谱数据在二维空间中的投影, 绿色圆点所围成的三角形为得到的最大内接单形体, 该单形体由 VCA 算法得到。由于噪声等的影响, 有部分点分布在所求得单形体外部, 需要确定分布于单形体外的点。

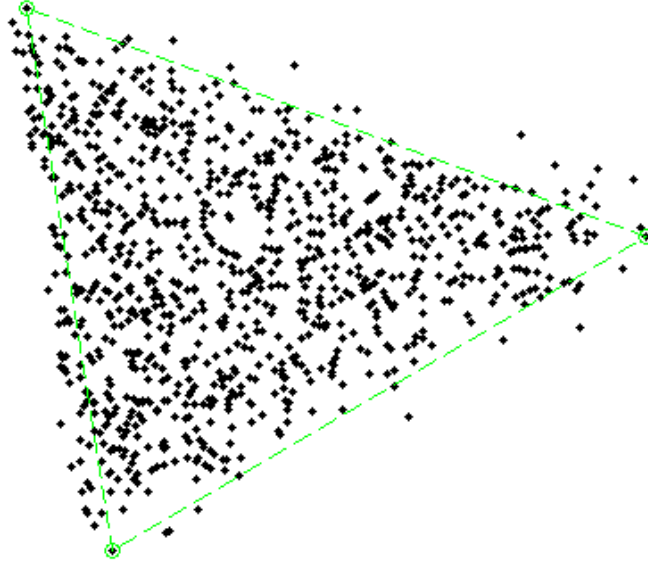


图 4.1 数据散点图与最大内接单形体

上述问题, 通过引入有向距离, 可以快速得到解决。

对于得到的单形体(此处即三角形), 记三个顶点为 p_1 、 p_2 、 p_3 , 选取 p_1 、 p_2 两顶点, 则这两点确定一条直线且该直线将二维空间分为两个部分, 若记 p_3 所在部分为“正”, 则另一部分为“负”。若记 p_3 到直线 p_1p_2 的距离为 d_3 , “散点”中任意一点 x 到直线 p_1p_2 的距离为 d , 如果 $d \cdot d_3 < 0$, 则点 x 位于单形体外。同理, 对于直线 p_2p_3 和 p_1p_3 , 也可采用上述方法, 最终确定所有位于单形体外的点。

考虑一般情况, N 维空间中 $(N+1)$ 个顶点围成的 N 维单形体, 任意选取其中的 N 个顶点, 则这些顶点确定 N 维空间中的一个 $(N-1)$ 维超平面, 同样, 该超平面将 N 维空间分为“正”、“负”两部分。采取与二维空间中同样的思想, 即可确定单形体外的点。

以上介绍了有向距离“方向”的作用, 对于光谱解混应用, 距离的“大小”与丰度比例直接有着直接联系。

记最大内接单形体某一顶点 p 到其余顶点构成的超平面的距离为 d_p ，任意像元点 x 到超平面的距离为 d_x ，若 $\frac{d_x}{d_p} \geq 0$ ，则该比值反映了点 x 对应的像元中 p 点对应的端元所占的丰度比例[2]，但 $\frac{d_x}{d_p} < 0$ 对于丰度的概念来说是无意义的值。分析 $\frac{d_x}{d_p} < 0$ 出现的原因，主要有三种：噪声的影响、端元对应的纯像元不存在、提取的端元数少于实际端元数。因此，实际应用中， $\frac{d_x}{d_p} < 0$ 可作为评价端元提取结果的指示性指标。考虑噪声的影响， $\frac{d_x}{d_p}$ 出现某一容许范围内的负值是可能的，但如果超出了容许范围，则说明有端元对应的纯像元不存在或当前提取的端元数少于实际端元数。

4.1.2 初始单形体内部点去除法

如图 4.2 所示，展示了最大内接单形体分析方法(VCA 算法)与最小外接单形体分析方法(MVSA 算法)得到的单形体之间的差异(从图中可见，“大”与“小”是相对而言的，最小的外接单形体比最大的内接单形体要大)。

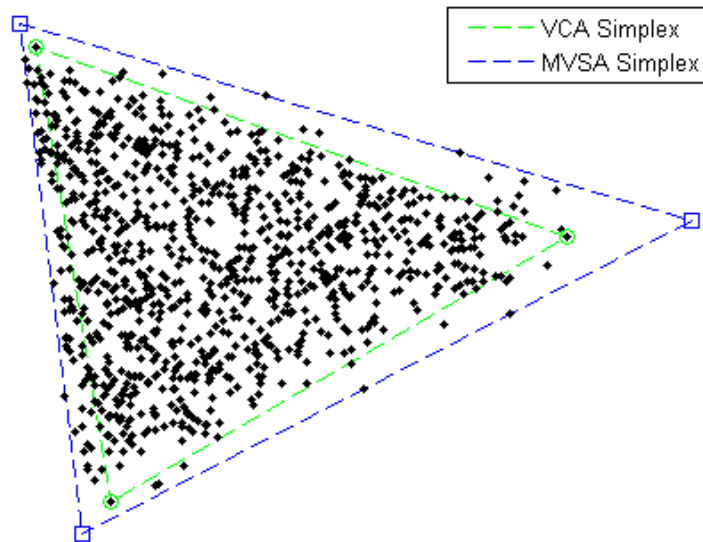


图 4.2 VCA、MVSA 算法得到的单形体

以 MVSA 算法为例，该算法通过 VCA 算法获得初始端元矩阵以加快收敛速度并降低陷入局部最优解的可能性，从图 4.2 中可见，MVSA 算法寻找最优解

的过程中，实际上并不需要对所有像元进行计算，在得到初始端元构成的单形体后，找出位于单形体外的点，对这些点进行计算即可。因此，将“有向距离”引入最小外切单形体分析算法，找出位于初始单形体外的点，以提高算法效率。

在得到初始端元集合之后，采用 4.1.1 节中的思想确定位于初始单形体外的点，优化流程如表 4.1 所示：

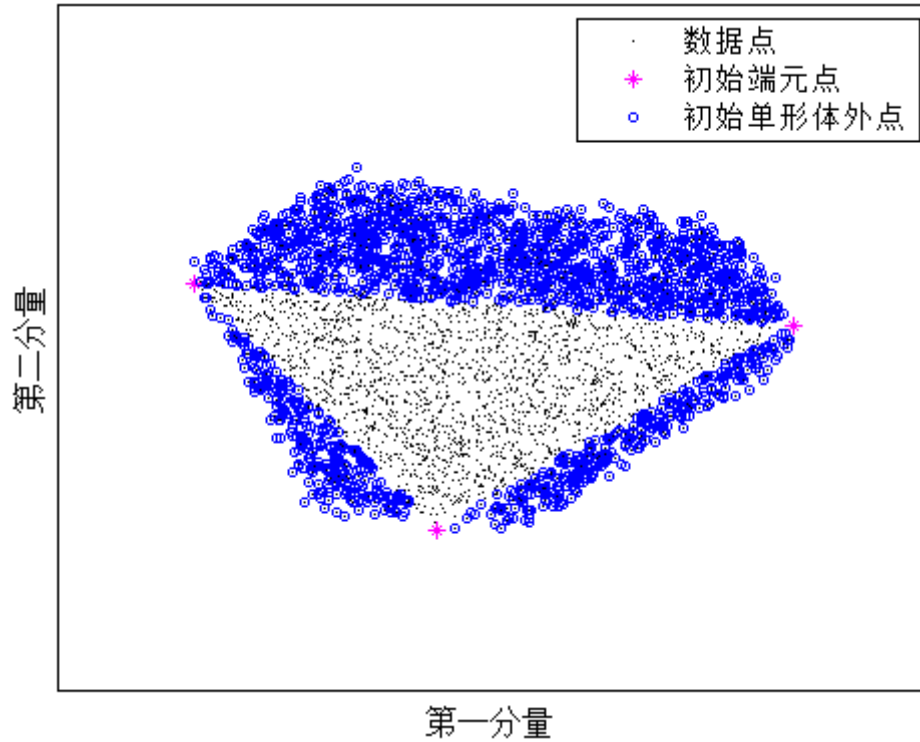
表 4.1 确定初始单形体外的点算法流程

输入：端元数目 p ，图像数据矩阵 $R_{L \times N} = [R_1, R_2, \dots, R_N]$
1：采用 MNF 变换将数据矩阵降维至 $(p-1) \times N$ 维空间，记为 $X_{(p-1) \times N}$ 。
2：采用 OBA 算法得到初始端元集合 $\{e_1, e_2, \dots, e_p\}$ 。初始化循环计数器 $j=0$ ，位于单形体外的数据集 $X' = []$ 。
3： $j=j+1$ ，如果 $j \leq p$ ，则由式 2.10 求端元集合 $\{e_k\}_{k \neq j}$ 确定的超平面 H_j 的法向量 \vec{N} ，初始化循环计数器 $i=0$ ，转 4；否则，转 5。
4： $i=i+1$ ，如果 $i \leq N$ ，则由式 4.1 计算像元点 X_i 到超平面 H_j 的有向距离 d_x 以及 e_j 到超平面 H_j 的有向距离 d_e ，且当 $d_x \cdot d_e \leq 0$ 时将 X_i 从 X 中移除并加入数据集 X' ；否则，转 3。
5： X' 中存放的即为位于初始单形体外的数据点，算法结束。

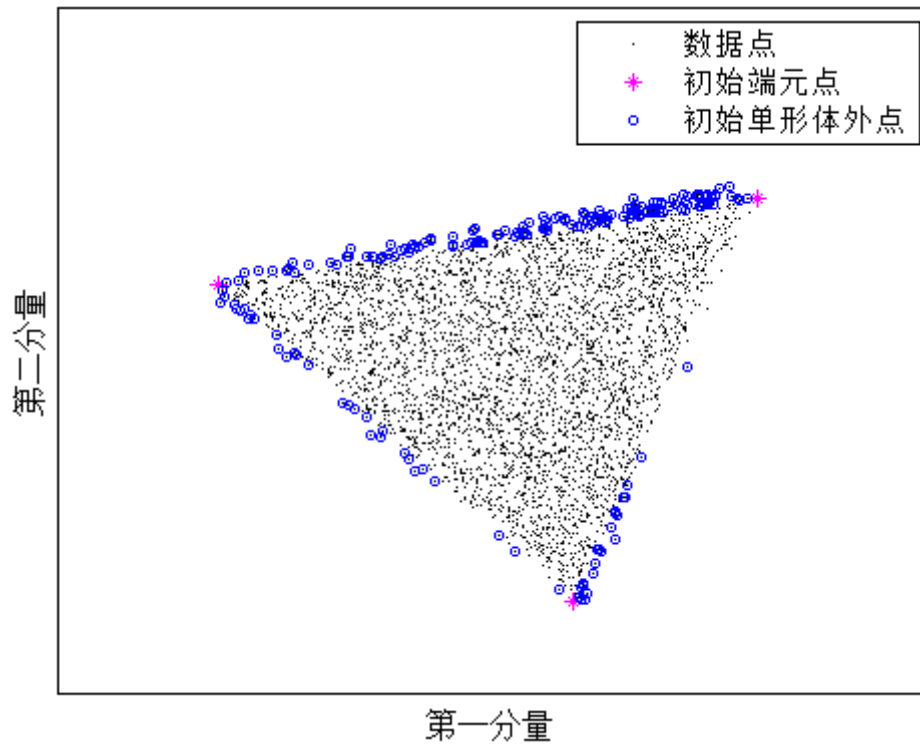
更进一步，对最小外切单形体分析算法结果造成影响的实际上只是位于数据集“外围”的点，因此，如果能确定数据集“最外围”的点，则最小外切单形体分析算法中对这些点进行计算即可。这一问题，一般被称为“凸包问题”，“Quick Hull”算法为解决这一问题提供了思路[46]。按照“Quick Hull”算法的思路，数据集“最外围”点确定的步骤如下：

- ①对降维后的数据，采用 OBA 算法得到初始端元集合 $\{e_1, e_2, \dots, e_p\}$ ；
- ② $(p-1)$ 个端元点 $\{e_k\}_{k \neq j}$ 构成的超平面，将 $(p-1)$ 维空间分为两部分，若 e_j 到超平面的距离记为“正”，则“负”方向对应了凸包的扩展方向，且“负”的最大距离对应的点 e 即为所求凸包上的一个点。
- ③用得到的点 e 替换端元集合中的 e_j ，对步骤②中位于“负”方向的数据集，递归执行上述扩展过程，直到没有点可以扩展为止。
- ④对每一个初始端元 e_j 执行步骤②和③之后，即得到最终凸包顶点集合。

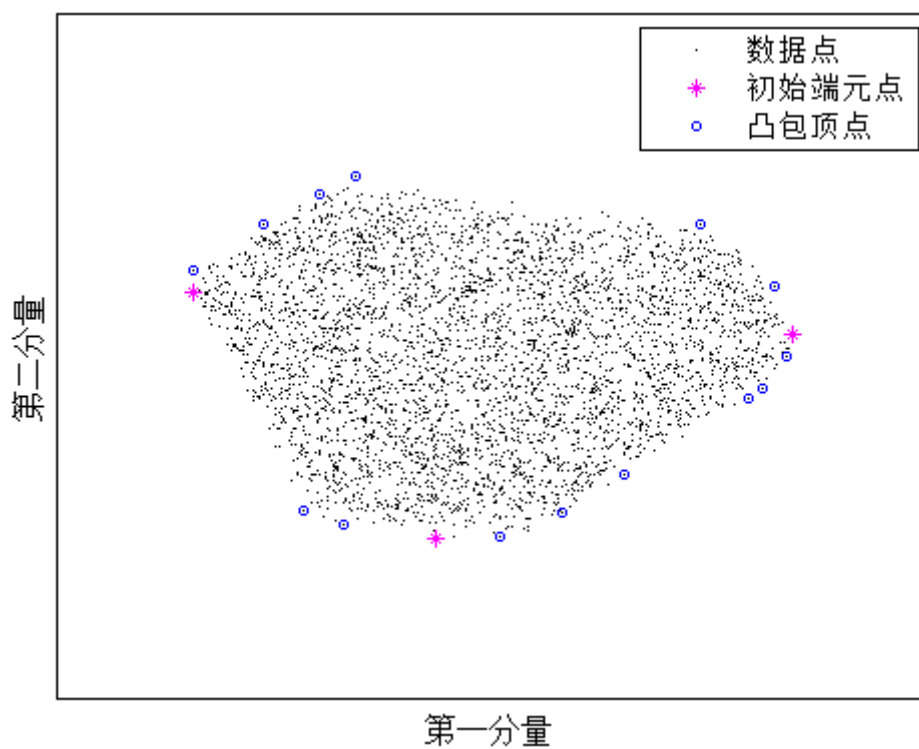
采用 3.4.3 节中的模拟数据生成方法，端元数取值为 3，信噪比为 25dB， ρ 取值 0.75、1，生成两组模拟数据，对数据进行 MNF 变换，并选取前两个波段采用 OBA 算法得到初始端元集合，然后采用上述方法确定初始单形体外的点以及凸包顶点集合，实验结果如下：



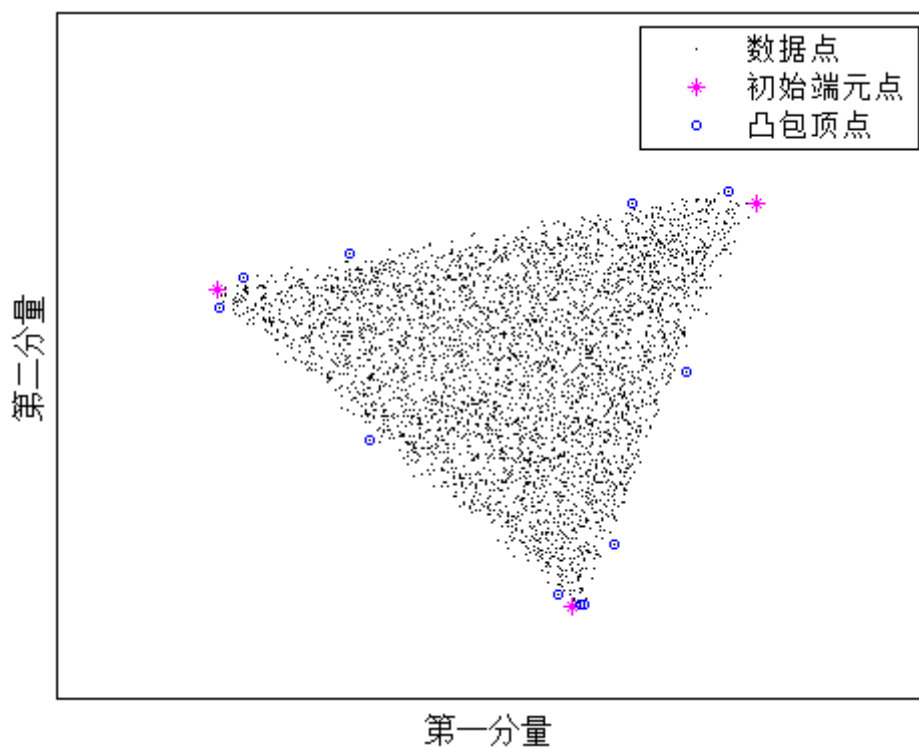
(a) $\rho = 0.75$ ，得到的初始单形体外点



(b) $\rho = 1$ ，得到的初始单形体外点



(c) $\rho = 0.75$ ，得到的凸包顶点

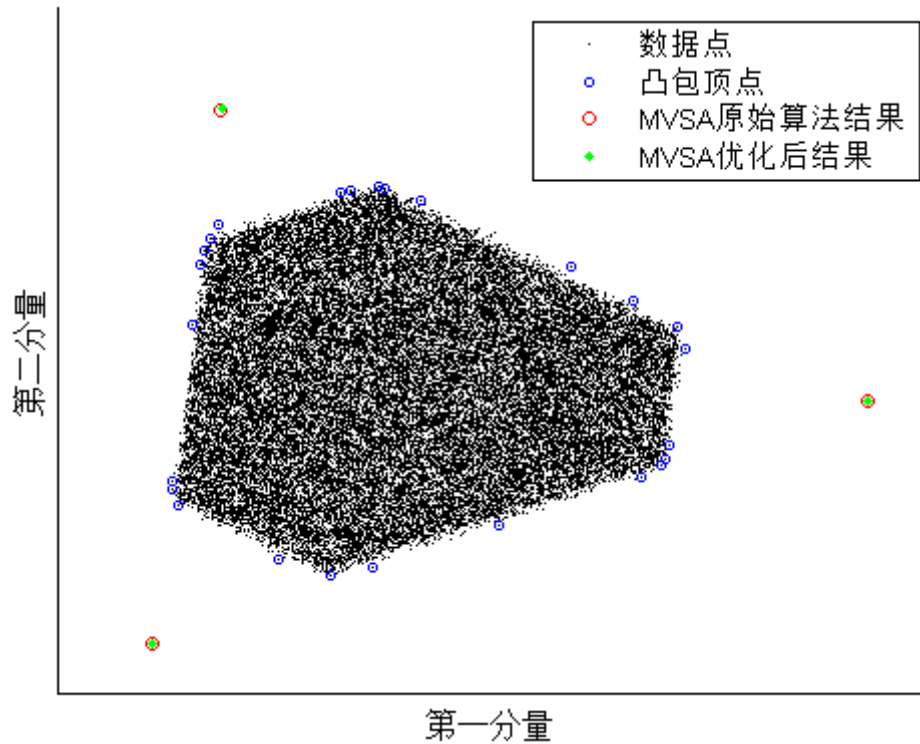


(d) $\rho = 1$ ，得到的凸包顶点

图 4.3 初始单形体外点确定以及凸包顶点确定结果

从图 4.3 所示的结果可知, 外围少数的凸包顶点, 即可很好地描述数据点在特征空间中的分布情况, 最小外切单形体分析算法只对这些凸包顶点(包括初始端元点)进行分析, 即可得到最优结果, 这将使算法效率得到很大提高。

为了验证上面的分析, 采用 3.4.3 节中的模拟数据生成方法, 端元数取值为 3, 信噪比为 25dB, ρ 取值 0.75、1, 生成两组样本数目为 40000 的模拟数据, 并采用 MVSA 算法对优化前的数据集和优化后的凸包顶点分别进行计算, 所得结果如下:



(a) $\rho = 0.75$, 样本数 40000

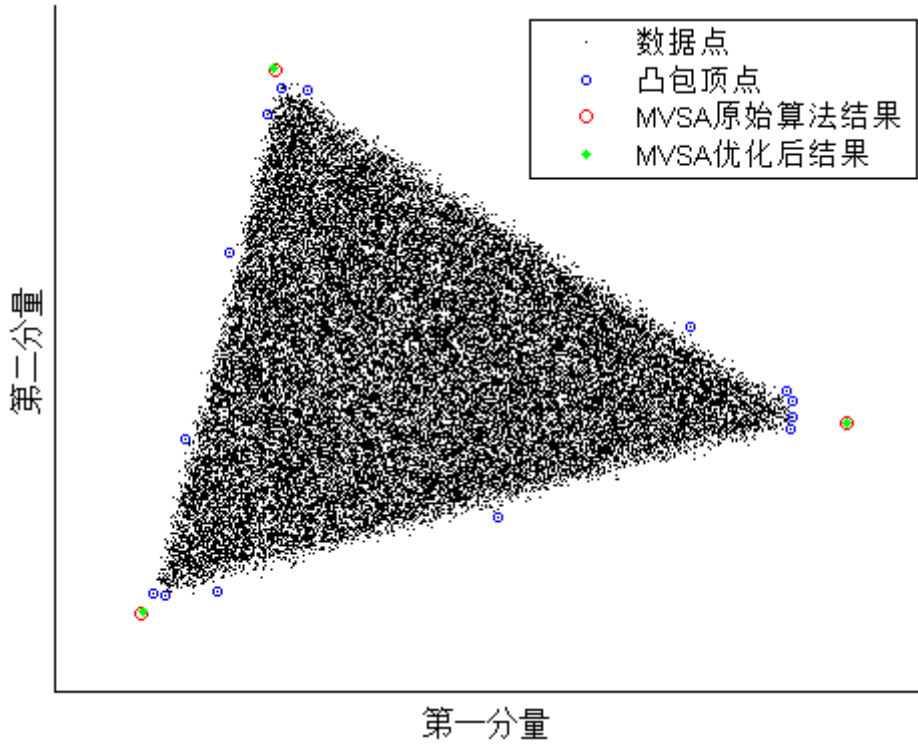
(b) $\rho = 1$, 样本数 40000

图 4.4 MVSA 算法优化前后所得结果比较

图 4.4 的结果表明, 优化前后 MVSA 算法所得结果有很好的 consistency, 表中给出了 MVSA 算法优化前和优化后对上述两组数据进行计算所需的时间, 计算环境为: CPU 2.83GHz, Memory 4GB, Windows 7, Matlab7.10.0。

表 4.2 MVSA 算法优化前后运算时间对比

	优化后	优化前
$\rho = 0.75$	0.7488(s)	4.4616(s)
$\rho = 1$	0.5304(s)	5.1168(s)

表 4.2 中算法优化后所用的时间为凸包顶点求取和 MVSA 计算总共所用时间, 从表中可以看出, 优化后算法在效率上有明显提高。

随着端元数目的增多, 凸包顶点的求取过程将变得复杂, 求取凸包顶点可能无法保证最终效率的提高。同时, 由于初始单形体是内接单形体, 因此随着端元数目的增多, 位于初始单形体外的点所占的比例将逐渐减少, 当端元数目较多时, 可以采用 PPI 算法, 通过设置 PPI 大于某一阈值来获取数据集的“边界”和“顶点”。

4.2 最优初始端元集选择方法

对于最小外切单形体分析方法, 初始端元集的选取对加快算法的收敛速度以及防止算法陷入局部最优解有重要意义, 而为了得到最优的初始端元集, 选取合适的初始端元提取算法至关重要。初始端元算法选择主要考虑的因素有: 算法的效率、算法的稳定性以及算法的有效性。算法的效率指算法能高效地得到初始端元集合, 算法的稳定性指算法对不同的数据集有较好的适应性, 算法的有效性指算法得到的端元集合能加快最小外切单形体分析方法的收敛速度并降低其陷入局部最优解的可能性。

鉴于以上原因, 目前最小外切单形体分析方法中, 通常采用效率较高的最大内接单形体分析方法来获取初始端元集合。如 MVSA、SISAL、RMVES 算法中, 初始端元集选择都采用 VCA 算法, 原因是 VCA 算法效率更高[8, 22, 43]。事实上, 初始端元集选择算法中, 除了对算法效率的考虑, 算法的稳定性和有效性同样重要。本文 2.3.1 节介绍的当前主要的最大内接单形体分析算法中, 效率较高的是 VCA 算法[14]和 OBA 算法(改进的 MaxV 算法) [20], 对于端元数为 p , 像素数为 N 的图像, 二者的计算复杂度(运算次数)分别为 $2p^2N$ 和 $4p(p-2)N$, 因此, 这里主要对 VCA 算法和 OBA 算法进行比较。

为了加快最小外切单形体分析方法的收敛速度并降低其陷入局部最优解的可能性, 所选择的初始端元集合围成的单形体体积应尽可能大, 且初始端元提取算法对不同信噪比、不同端元数目的数据集应有较好的适应性。因此, 将初始端元提取算法所获得的单形体与真实单形体体积之比作为衡量算法稳定性和有效性的指标, 比值越大, 表明得到的初始端元集合越有效。

为了对 VCA 算法和 OBA 算法进行比较, 采用 3.4.3 节中的方法生成模拟数据。实验中, 端元数取值为 3, 信噪比为 15dB、25dB、35dB, η 取 0、1/18, ρ 取值 0.75、0.85、1, 每种组合都生成 100 组模拟数据。针对每种参数组合下生成的 100 组模拟数据, 分别采用 VCA、OBA 获取初始端元集合, 并计算初始端元集合构成的单形体与真实端元构成的单形体的体积比, 将 100 组结果的均值作为衡量算法的指标。均值越大, 表明该最大内接单形体分析方法更有利于加快最小外切单形体分析方法的收敛速度和防止其陷入局部最优解。由于最小外切单形体分析方法都针对降维后的数据进行分析, 因此端元集合构成的单形体体积也在

降维后的数据空间中计算，这里，采用 MNF 变换得到降维后的数据集。另外，OBA 算法的输入数据即可以是降维后的数据，也可以是原始数据，因此对两种情况都进行实验，记输入数据为降维后数据的 OBA 算法为 OBA_MNF。实验所得结果如表 4.3 所示：

表 4.3 端元数为 3，不同算法在不同情况下所得初始单形体与真实单形体比值

SNR	ρ	White Noise(eta=0)			Color Noise(eta=1/18)		
		VCA	OBA	OBA_MNF	VCA	OBA	OBA_MNF
15dB	0.75	0.312	0.205	0.37	0.611	0.397	0.669
	0.85	0.498	0.305	0.589	0.813	0.614	0.843
	1	0.832	0.675	0.969	1.171	1.055	1.309
25dB	0.75	0.339	0.348	0.371	0.372	0.392	0.431
	0.85	0.529	0.557	0.585	0.579	0.614	0.67
	1	0.916	0.935	0.97	0.935	0.98	1.003
35dB	0.75	0.374	0.371	0.37	0.375	0.381	0.379
	0.85	0.569	0.583	0.587	0.576	0.599	0.599
	1	0.957	0.964	0.963	0.951	0.97	0.967

分析表 4.3 中数据，可得如下结论：

①在信噪比较高时，VCA、OBA、OBA_MNF 三种算法所得结果接近。对于纯像元存在的情况，这反映的是三种算法所得到的端元集合有很好的 consistency。

②在信噪比较低时，由于 OBA_MNF 直接在特征空间中搜寻构成最大体积单形体的像元点，故最后计算得到的比值更大，这一结果，与实际吻合。

③当信噪比较低时，OBA 算法由于未对数据进行降维处理，噪声的影响将变得显著，在表中体现为 OBA 与 OBA_MNF 所得的结果相差较大。

④相比 VCA 和 OBA 算法，OBA_MNF 算法有更好的健壮性，因此，可以选择 OBA_MNF 算法作为初始端元提取算法，为最小外切单形体分析算法提供初始端元集合。

4.3 非线性约束优化及最小外切单形体求解

对于降维后的 R^k 空间中的高光谱数据 $X_{k \times N}$ ，记端元矩阵为

$E = \{e_0, e_1, \dots, e_k\}$ ，则在不考虑噪声影响的情况下，由线性光谱混合模型，有：

$$X = EA \quad (4.2)$$

$$s.t. \quad A \geq 0 \quad \mathbf{1}_{k+1}^T A = 1$$

上式中 $A = \{A_0, A_1, \dots, A_k\}$ 为丰度矩阵, $\mathbf{1}_{k+1}^T$ 为全 1 行向量。

若记 $M = [e_1 - e_0 \quad e_2 - e_0 \quad \dots \quad e_k - e_0]$, $A' = \{A_1, \dots, A_k\}$, 则最小体积外切单形体的求取可表示为如下优化过程实现:

$$\begin{aligned} \min \quad & \text{abs}(\det(M)) \\ s.t. \quad & A' \geq 0 \\ & \mathbf{1}_k^T A' \leq 1 \\ & X_i = e_0 + MA' \end{aligned} \tag{4.3}$$

由于矩阵 M 可逆, 故由上式中的等式约束有:

$$A' = M^{-1}(X_i - e_0) \tag{4.4}$$

故, 式 4.3 可变化为:

$$\begin{aligned} \min \quad & \text{abs}(\det(M)) \\ s.t. \quad & M^{-1}(X_i - e_0) \geq 0 \\ & \mathbf{1}_k^T M^{-1}(X_i - e_0) \leq 1 \end{aligned} \tag{4.5}$$

上式中, 目标函数和约束条件都可以看做是端元矩阵 E 的非线性函数, 为求解这一非线性约束优化问题, (Tsung-Han Chan 等, 2009) 首先通过变量替换将约束条件转换为线性约束, 然后将目标函数中的行列式进行余子式展开, 进而将原问题转换为两个线性规划问题来求解(详细过程见 2.3.2 节中对 MVES 算法的介绍)[9]。

事实上, 式 4.5 所描述的优化问题, 可看做如下非线性约束优化问题:

$$\begin{aligned} \min_E \quad & f(E) \\ & C(E) \leq 0 \end{aligned} \tag{4.6}$$

对于式 4.6 描述的非线性约束优化问题, 在非线性最优化计算中已有大量研究, 求解这一问题比较典型的方法有序列二次规划法(Sequential Quadratic Programming)[47]、信赖域方法(Trust-region methods)[48]等。Matlab 提供了 `fmincon` 函数以求取多变量有约束非线性函数的最小值, 在该函数中, 可以通过设置不同的参数来指定优化过程所采用的算法。

实际应用中, 降维后 R^k 空间中的高光谱数据可通过 MNF 变化得到, 初始端元矩阵可采用 4.2 节中的 OBA 算法得到, 在此基础上, 通过序列二次规划法或信赖域方法求解式 4.5 中的最优化问题, 即可得到 R^k 空间中构成最小外切单形体的端元矩阵 E , 对 E 进行 MNF 逆变换, 即可得到最终的端元光谱矩阵。当然, 算法的效率是实际应用中不容忽视的问题, 可以通过 4.1 节中的优化算法来减小计算的数据量。

采用 3.4.3 节中的模拟数据生成方法, 端元数取值为 5, 信噪比为 35dB, ρ 取值 0.75, 生成样本数为 2000 的模拟高光谱数据, 分别采用序列二次规划法(SQP)和信赖域方法(TR)求解式 4.5, 所得结果如下:

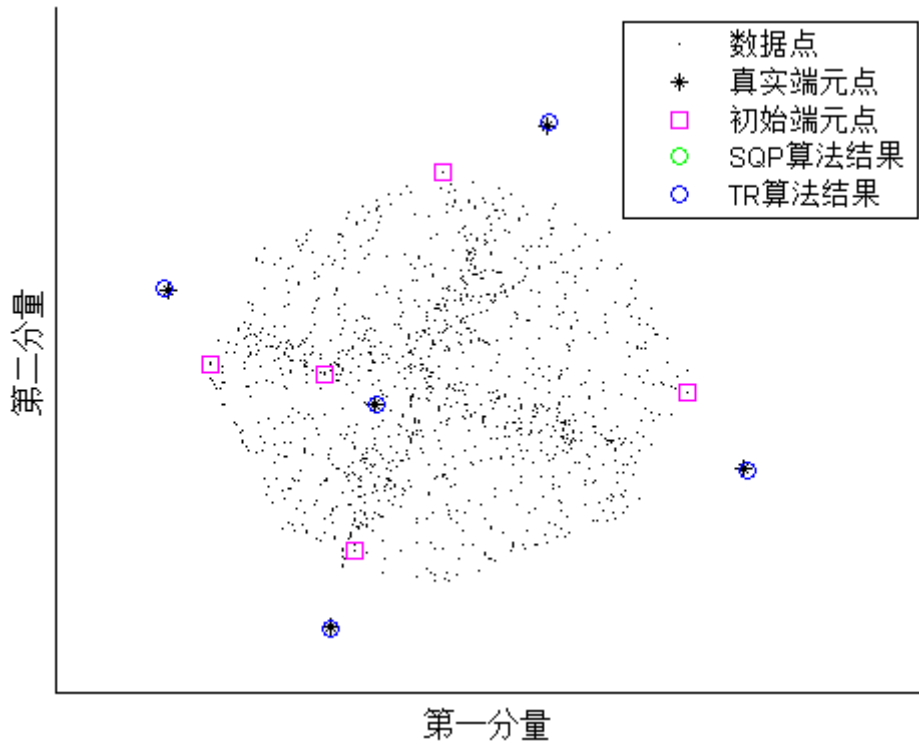


图 4.5 序列二次规划法(SQP)和信赖域方法(TR)所得端元位置

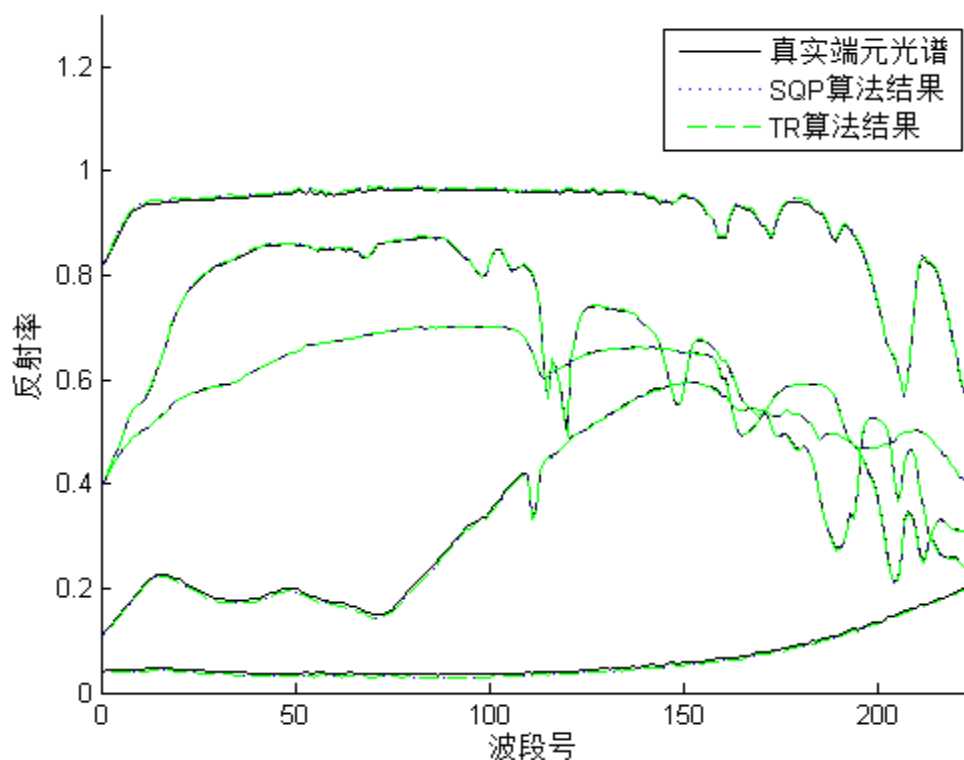


图 4.6 序列二次规划法(SQP)和信赖域方法(TR)所得端元光谱曲线

从图 4.5 和图 4.6 中的结果可以看出, 序列二次规划法和信赖域方法的结果一致, 且都能很好地与真实值吻合。另外, 二者所用时间分别为 1.28(s)和 4.68(s), 计算环境为: CPU 2.83GHz, Memory 4GB, Windows 7, Matlab7.10.0。多次实验结果表明, 序列二次规划法相比信赖域方法收敛速度更快, 效率更高, 因此后面讨论中将采用序列二次规划法, 并称之为 SQP_MinV(SQP minimum volume)。

有一点需要说明的是, 2.3.2 节介绍的 MVSA 算法中, 也用到了序列二次规划法, 但 MVSA 算法中采取的思路是避免约束条件出现非线性约束, 即通过变量替换, 将约束条件转换为线性约束, 最终约束条件包括一个线性等式约束和一个线性不等式约束, 而这里采用序列二次规划法解决的是 4.5 所描述的约束条件为两个非线性不等式约束的优化问题, 上面实验的结果表明, 直接对这一问题进行求解是可行的, 同时表明了非线性约束优化应用于求解最小外切单形体的有效性。

4.4 基于凸面几何的光谱解混算法的对比实验

回顾 2.3 节中介绍的基于凸面几何的端元提取算法，当时对当前典型的算法进行了详细介绍，但并未对这些算法进行实验比较，为此，分别采用模拟数据和真实数据，对这些算法进行定量分析和比较，分析和比较的算法包括：

①最大内接单形体分析算法：N-FINDR 算法、VCA 算法、OBA 算法；

②最小外切单形体分析算法：SISAL 算法、MVSA 算法、MVES 算法以及本节中介绍的序列二次规划法 (SQP-MinV)。

对于 N-FINDR、VCA、OBA 算法，在得到端元集合后，丰度反演采用 2.4 节介绍的 FCLS 算法实现，分别记为 N-FINDR-FCLS、VCA-FCLS、OBA-FCLS。对于 SISAL、MVSA、MVES、SQP-MinV 算法，采用类似 MVES 算法中的思想进行丰度计算，同时也采用 FCLS 算法计算丰度比例，分别记为 SISAL-FCLS、MVSA-FCLS、MVES-FCLS、SQP-MinV-FCLS。

4.4.1 模拟数据实验

1) 算法效率比较

采用 3.4.3 节中的模拟数据生成方法，端元数 p 取值为 3、5、8，信噪比为 45dB， ρ 取值 0.75、0.85、1，样本数 N 为 2000、10000，对每种参数组合下生成 10 组模拟高光谱数据，分别采用 N-FINDR、VCA、OBA(针对降维后的数据进行端元提取)、SISAL、MVSA、MVES 以及 SQP-MinV 进行端元提取，求取算法 10 次所用时间的平均值，作为衡量算法效率的指标，实验结果如下：

表 4.4 不同算法计算所用平均时间(secs)对比

	Methods	VCA	OBA	N-FINDR	SISAL	MVSA	MVES	SQP-MinV
	N							
$p = 3$ $\rho = 0.75$	2000	0.39	0.98	1.21	1.92	0.61	0.56	1.50
	10000	0.89	1.30	1.91	4.53	1.87	0.61	2.51
$p = 3$ $\rho = 0.85$	2000	0.35	0.93	1.07	1.35	0.49	0.72	1.21
	10000	1.18	1.38	1.98	4.58	1.92	0.91	2.90
$p = 3$ $\rho = 1$	2000	0.32	0.82	1.07	0.93	0.39	0.46	1.03
	10000	1.04	1.49	2.07	3.66	1.71	0.70	2.08

$p = 5$ $\rho = 0.75$	2000	0.45	0.89	1.28	1.69	1.38	6.62	1.96
	10000	0.95	1.32	2.14	5.27	6.00	7.66	5.35
$p = 5$ $\rho = 0.85$	2000	0.41	0.86	1.19	1.33	1.24	5.29	1.72
	10000	0.98	1.31	2.22	5.38	5.75	9.65	4.84
$p = 5$ $\rho = 1$	2000	0.44	0.79	1.08	1.21	0.74	5.29	1.39
	10000	0.95	1.33	2.02	4.57	3.05	8.70	3.80
$p = 8$ $\rho = 0.75$	2000	1.11	1.10	1.61	2.19	31.81	132.52	11.05
	10000	1.51	1.41	2.87	9.35	117.51	248.98	53.69
$p = 8$ $\rho = 0.85$	2000	1.08	0.85	1.43	1.72	28.78	103.94	11.25
	10000	1.57	1.41	2.68	10.04	84.48	225.85	32.17
$p = 8$ $\rho = 1$	2000	1.04	0.80	1.33	1.94	5.44	88.27	5.26
	10000	1.49	1.34	2.41	9.99	23.28	169.12	26.79

表 4.4 只是 10 次平均得到的结果，因此有一定的随机因素，这样选择的原因主要有三点：一是端元数较多、样本量较大时，MVSA、MVES、SQP-MinV 效率下降明显[22]，执行次数太多过于耗时；二是 N-FINDR、VCA、OBA 的计算复杂度已有明确结论，无需做过多比较[20]；三是 SISAL、MVSA、MVES、SQP-MinV 算法由于涉及迭代过程，算法自身就有较大的随机性，更多次平均得到的结果也只是“指示性”的，而不是“结论性”的。对表 4.4 中“指示性”的结果，分析如下：

①SISAL、MVSA、MVES、SQP-MinV 作为最小外切单形体分析方法，其中的核心步骤都是迭代优化过程，而 N-FINDR、VCA、OBA 作为最大内接单形体分析方法，不涉及上述迭代过程，因此效率要高。随着端元数目的增多、样本量的增大，这一优势变得更明显。

②最大内接单形体分析方法中，VCA 与 OBA 算法计算效率比较接近，理论上 VCA 算法略优，但 OBA 算法实现时通过递推的方式进行正交基计算，一定程度上提高了计算效率，因此会出现 OBA 算法执行效率优于 VCA 算法。相比采取逐端元提取策略的 VCA、OBA 算法，N-FINDR 由于采取同时提取所有端元的策略，因此效率要低。

③最小外切单形体分析方法中, SISAL 算法效率较高, 随着端元数目的增多、样本量的增大, 这一优势更明显。MVSA、MVES、SQP-MinV 算法中, MVES 在端元数增多、样本量增大时效率下降最明显, SQP-MinV 算法比 MVSA、MVES 算法效率更高。端元数为 3 时, SISAL 算法效率相对较低的原因是: SISAL 最优化求解过程中, 需要计算解析解中的参数, 对于迭代优化过程, 这是一“轻量级”问题, 但这一优势只有在多次迭代过程中才更明显。

④端元数目固定时, 象元“纯度”越高, SQP-MinV 算法的执行速度越快, 这是由于象元“纯度”越高, 则采用最大内接单形体分析方法得到的初始单形体体积越大, 因而加快了 SQP-MinV 算法的收敛速度。

当端元数目 $p > 8$ 时, MVES 算法的执行效率更低, 文献[22]中尝试取 $N=10000$ 进行算法比较, 最终没有得到结果。这里 N 取 2000, ρ 取 0.85, p 取 10、15, 信噪比为 45dB, 生成两组数据, 不同算法所用时间如下:

表 4.5 端元数目较多时算法所用时间对比

Methods p	VCA	OBA	N-FINDR	SISAL	MVSA	MVES	SQP-MinV
10	1.09	1.05	1.23	3.12	58.45	288.81	18.95
15	1.59	0.76	1.65	3.60	265.11	852.58	186.42

表 4.5 中的结果进一步表明, 随着端元数目的增多, SISAL 的优势更明显, 同时, 相对于 MVSA 和 MVES 算法, SQP-MinV 算法的效率更高。

2) 算法结果精度比较

算法结果的精度评价包括两个方面——端元提取精度和丰度反演精度。参考文献[14]和[9]中采用的精度评价方法, 这里也采用均方根误差作为评价标准。

对一端元数为 p , 象元数为 N 的高光谱影像, 记真实端元光谱为 $\{a_1, a_2, \dots, a_p\}$, 对应的丰度为 $\{s_1, s_2, \dots, s_p\}$, 其中 $s_i = [s_i[1] \ s_i[2] \ \dots \ s_i[N]]^T$, 记计算得到的端元光谱为 $\{\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_p\}$, 对应的丰度为 $\{\hat{s}_1, \hat{s}_2, \dots, \hat{s}_p\}$, 端元光谱估计值与真实值之间的差异通过光谱角距离的均方根来衡量:

$$\phi_{en} = \min_{\pi} \sqrt{\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \left[\arccos \left(\frac{a_i^T \hat{a}_{\pi_i}}{\|a_i\| \|\hat{a}_{\pi_i}\|} \right) \right]^2} \quad (4.7)$$

上式中 $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_p)$ 为排列矩阵。同样，丰度估计值与真实值之间的差异采用下式衡量：

$$\phi_{ab} = \sqrt{\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \left[\arccos \left(\frac{s_i^T \hat{s}_{\pi_i}}{\|s_i\| \|\hat{s}_{\pi_i}\|} \right) \right]^2} \quad (4.8)$$

ϕ_{en} 与 ϕ_{ab} 的值越小，表明算法的精度越高。排列矩阵 π 的求解过程为一优化分配问题，可采用匈牙利算法(Hungarian algorithm)解决[9]。

采用 3.4.3 节中的模拟数据生成方法，端元数取 5，信噪比取 20dB、30dB、40dB， η 取 0、1/18， ρ 取值 0.75、0.85、1，每种参数组合都生成 20 组样本数为 10000 的模拟高光谱数据，分别采用 N-FINDR、VCA、OBA、SISAL、MVSA、MVES 以及 SQP-MinV 算法得到端元光谱向量，并计算丰度比例，求取 20 次所得 ϕ_{en} 与 ϕ_{ab} 的均值，作为精度衡量的指标，单位为度，实验结果如下：

表 4.6 不同算法所得端元光谱与真实光谱差异指标 ϕ_{en} 实验结果

Methods	ρ	White Noise($\eta=0$)			Color Noise($\eta=1/18$)		
		SNR(dB)			SNR(dB)		
		20	30	40	20	30	40
VCA	0.75	7.52	6.79	5.40	7.64	5.70	6.88
	0.85	4.88	5.56	4.00	5.98	5.30	5.19
	1	4.05	3.24	2.77	4.68	2.70	2.88
OBA	0.75	6.84	7.58	5.50	6.98	5.63	7.47
	0.85	5.36	5.26	3.92	4.32	5.33	5.14
	1	3.55	3.27	2.73	3.02	2.90	3.06
N-FINDR	0.75	6.93	7.38	5.30	6.77	5.71	6.97
	0.85	4.76	5.28	3.56	4.13	5.22	4.89
	1	3.82	3.17	2.52	2.89	2.59	2.78
SISAL	0.75	18.09	7.24	1.22	24.06	7.59	1.52
	0.85	21.09	7.86	0.88	21.73	6.80	1.16
	1	18.11	7.81	0.96	18.96	3.53	1.36

MVSA	0.75	20.24	9.35	1.73	29.73	8.59	1.99
	0.85	21.11	9.35	0.98	25.18	7.97	1.31
	1	19.47	8.65	1.34	22.18	4.21	1.88
MVES	0.75	19.62	8.66	2.92	26.32	8.96	1.97
	0.85	26.15	8.98	1.62	24.40	7.43	1.46
	1	18.79	9.77	2.05	22.25	5.89	4.39
SQP-MinV	0.75	20.70	9.50	1.82	0.47	0.14	0.05
	0.85	24.94	9.86	1.06	0.44	0.15	0.05
	1	19.56	9.41	1.49	0.40	0.13	0.05

表 4.7 不同算法所得丰度值与真实丰度值差异指标 ϕ_{ab} 实验结果

Methods	ρ	White Noise(eta=0)			Color Noise(eta=1/18)		
		SNR(dB)			SNR(dB)		
		20	30	40	20	30	40
VCA-FCLS	0.75	20.36	22.88	20.71	24.80	24.75	22.94
	0.85	15.94	19.05	12.21	23.74	18.05	14.66
	1.00	14.97	8.84	6.71	20.54	9.75	7.03
OBA-FCLS	0.75	20.70	17.73	15.61	18.33	16.36	16.77
	0.85	18.72	10.34	9.56	13.18	9.60	10.01
	1.00	15.33	7.34	5.58	10.13	7.64	5.76
N-FINDR-FCLS	0.75	17.40	13.42	13.84	15.99	13.98	13.69
	0.85	14.25	8.29	7.55	11.35	8.42	7.69
	1.00	13.63	6.57	4.30	9.79	5.28	4.07
SISAL	0.75	14.40	5.16	2.10	20.53	6.31	1.78
	0.85	15.52	5.14	1.73	21.67	5.97	1.61
	1.00	14.86	6.46	1.88	20.40	5.25	1.43
SISAL-FCLS	0.75	14.39	5.16	2.10	20.53	6.31	1.78
	0.85	15.52	5.14	1.73	21.67	5.97	1.61
	1.00	14.86	6.46	1.88	20.40	5.25	1.42
MVSA	0.75	15.05	5.61	2.29	21.66	6.99	1.96
	0.85	16.27	5.48	1.91	21.90	6.41	1.79
	1.00	15.58	6.87	2.09	20.43	5.71	1.61
MVSA-FCLS	0.75	15.05	5.61	2.29	21.66	6.99	1.96
	0.85	16.27	5.48	1.91	21.90	6.41	1.79
	1.00	15.58	6.87	2.09	20.43	5.71	1.61
MVES	0.75	15.25	5.94	2.60	21.32	7.11	2.27
	0.85	16.54	6.27	2.22	22.63	6.85	2.15
	1.00	15.95	7.80	2.44	21.69	6.38	2.24
MVES-FCLS	0.75	15.25	5.94	2.60	21.32	7.11	2.27
	0.85	16.54	6.27	2.22	22.63	6.85	2.15
	1.00	15.95	7.80	2.44	21.69	6.38	2.24

SQP-MinV	0.75	15.98	6.04	2.75	0.07	0.06	0.03
	0.85	18.06	5.66	2.06	0.07	0.05	0.03
	1.00	17.17	7.82	2.32	0.07	0.05	0.03
SQP-MinV-FCLS	0.75	15.61	5.86	2.60	8.59	3.78	1.21
	0.85	17.58	5.58	2.00	8.93	3.63	1.10
	1.00	16.56	7.42	2.24	9.07	3.11	0.99

针对表 4.6 和表 4.7 中的数据，分析如下：

①信噪比较低时，最小外切单形体分析方法得到的端元光谱与真实光谱差异较大，最大内接单形体分析方法得到的结果反而“更优”，即使在端元对应的纯象元不存在的情况下。这是由于最小外切单形体分析方法寻求的是外包单形体，噪声影响较大时，求得的单形体将“过大”。虽然最大内接单形体分析方法得到的端元光谱“更优”，但这只是“表象”，从丰度反演结果可以看出，不同方法得到的结果差异并不大。信噪比较高时，最小外切单形体分析方法的得到的结果将更优。

②最小外切单形体分析方法中，白噪声条件下 SISAL 算法所得结果最优，而有色噪声条件下 SQP-MinV 方法所得结果最优，这是由于 SQP-MinV 算法通过 MNF 变换进行数据降维，较好地对信号和噪声进行了分离。SISAL、MVSA、MVES 算法中数据降维采用的方法类似 PCA 变换，理论上，白噪声条件下 MNF 变换与 PCA 变换等效，但由于白噪声的影响减弱了波段间的相关性(信号与噪声并非完全不相关)，因此噪声估算准确性降低，进而导致 MNF 变换出现误差。

③MVSA、SISAL、MVES 算法中，两种丰度反演方法得到的结果一致，而 SQP-MinV 算法并不一致，这是由于 PCA 变换并不改变数据的空间分布特征，而 MNF 变换则会改变。有色噪声条件下，MNF 变换得到的低维空间，很好地减弱了噪声的影响，因此丰度反演得到的精度更高。

4.4.2 真实数据实验

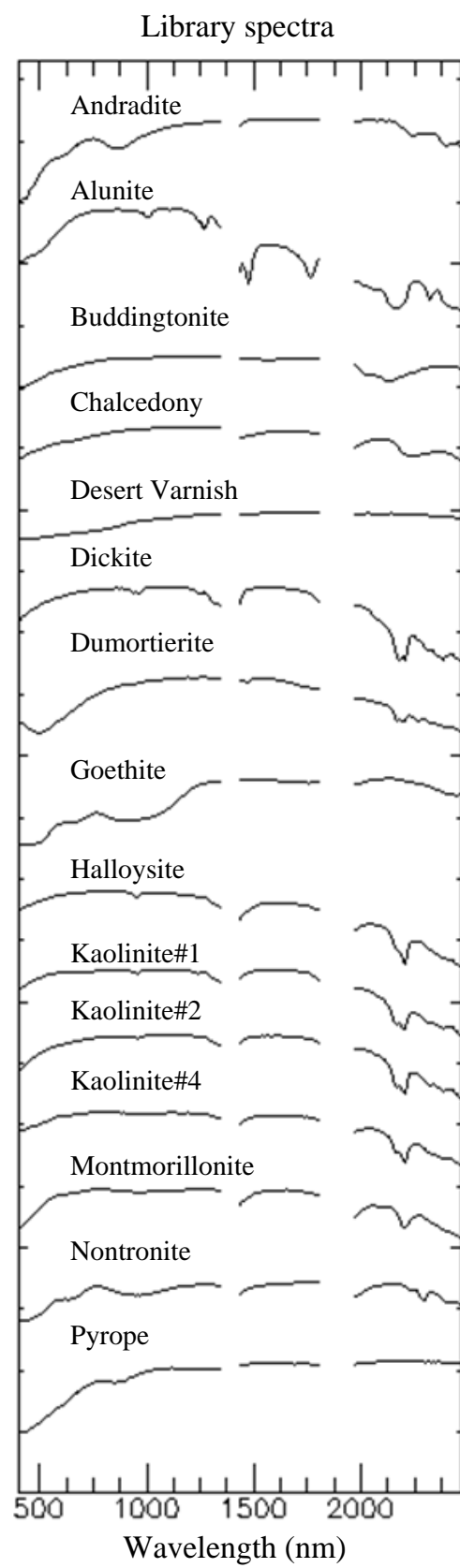
真实数据采用 3.4.4 节中的 Cuprite 采矿区数据。文献[44]中对该区域进行了研究，端元数目取值为 14。参考文献[44]中的描述，这里端元数目取值为 14。

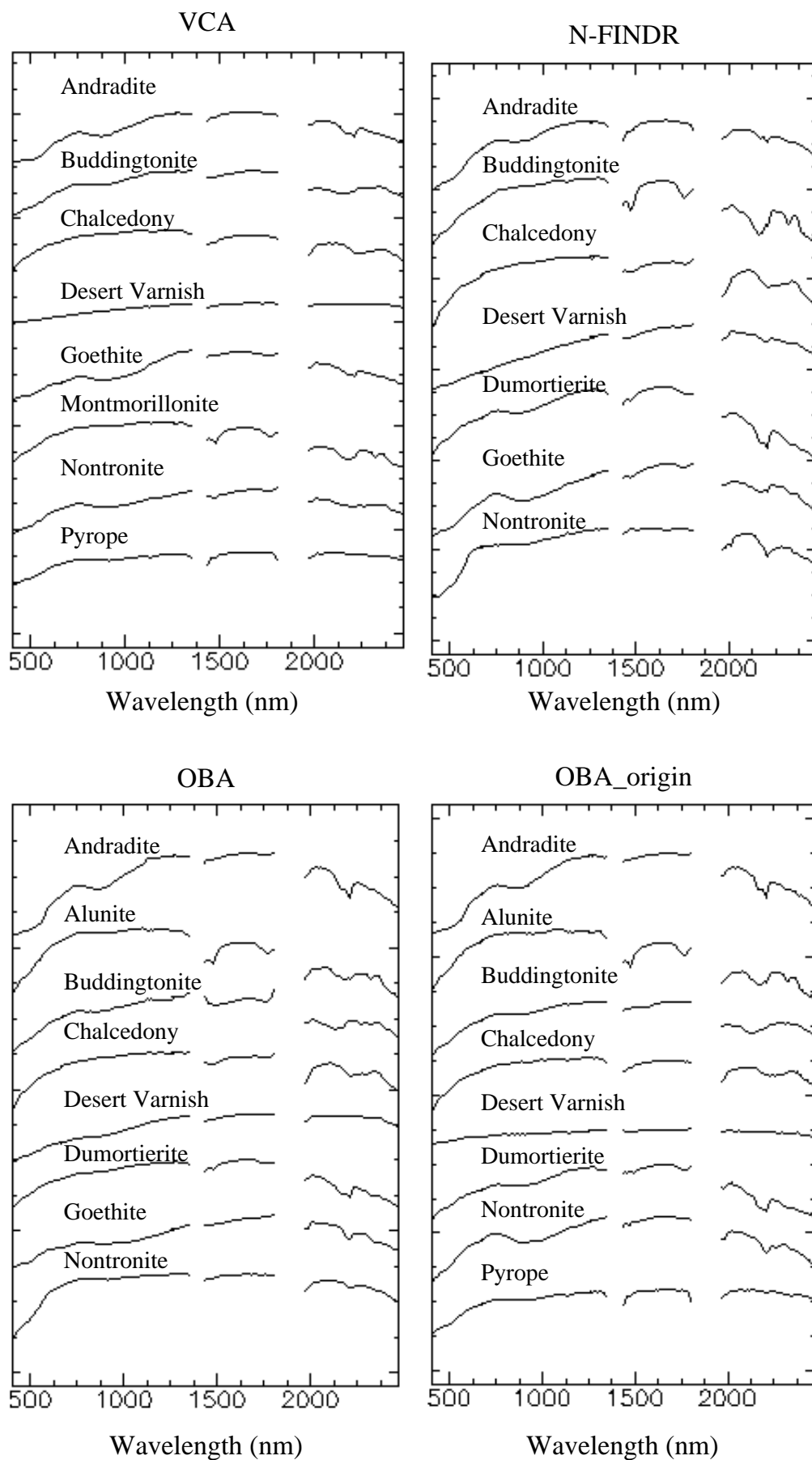
分别采用 VCA、N-FINDR、OBA、MVSA、SQP_MinV、MVES、SISAL 进行端元提取，其中 OBA 算法同时对未降维的数据进行端元提取，记为 OBA_origin。得到端元光谱后，与 USGS 光谱库中光谱进行对比，采用式 4.9 定义的光谱角来评估光谱差异，单位为度。

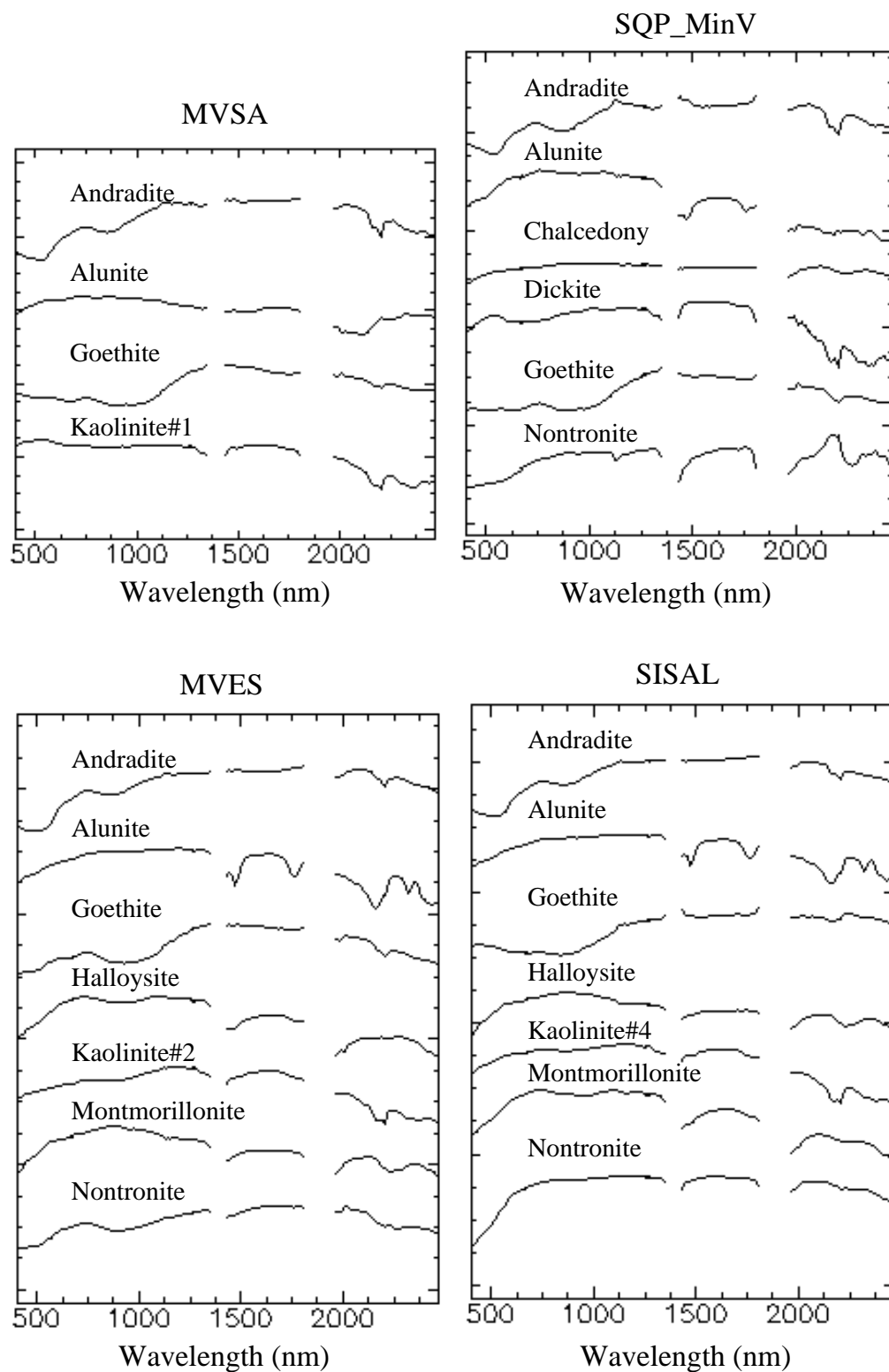
$$\phi = \arccos \left(\frac{(a - m(a))^T (\hat{a} - m(\hat{a}))}{\|a - m(a)\| \|\hat{a} - m(\hat{a})\|} \right) \quad (4.9)$$

上式中 $m(a)$ 代表向量 a 的均值。

通过计算不同算法得到的端元光谱与光谱库中光谱的夹角 ϕ ，并结合矿物典型光谱特征的分析，将端元光谱与光谱库中的矿物对应起来，不同算法所得端元光谱曲线与 USGS 光谱库光谱对应如下：







端元光谱与光谱库中光谱的夹角 ϕ 如下:

表 4.8 不同算法所得端元光谱与光谱库中光谱的比较

	VCA	N-FINDR	OBA	OBA_ origin	MVSA	SQP_ MinV	MVES	SISAL
Andradite	21.68	18.69	23.51	23.65	25.37	27.29	17.13	19.27
Alunite			24.85	21.72	31.86	8.61	20.73	23.01
Buddingtonite	27.88	29.75	24.34	20.74				
Chalcedony	15.12	22.87	22.87	30.24		26.27		
Desert Varnish	8.34	11.45	10.62	24.27				
Dickite						16.10		
Dumortierite		21.23	18.66	21.06				
Goethite	33.08	31.26	26.87		33.57	34.49	34.95	25.07
Halloysite							28.62	38.67
Kaolinite#1					15.31			
Kaolinite#2							15.73	
Kaolinite#4								10.76
Montmorillonite	18.56						32.61	25.77
Nontronite	24.35	20.41	21.06	27.50		35.66	29.08	22.95
Pyrope	16.45			16.52				
Average	20.68	22.24	21.60	23.21	26.53	24.74	25.55	23.64

上述实验中不同算法得到的端元光谱与光谱库中的光谱比对,最终光谱匹配的对数并非 14 对,虽然匹配的对数因算法不同而有所差异,但都小于 14,造成这一结果的原因有:

①现有的基于凸面几何的光谱解混算法都采用线性光谱混合模型描述地表场景,由于噪声以及场景中非线性因素的影响,采用线性光谱混合模型描述真实场景往往存在误差。这一误差的存在,导致提取得到的端元光谱与真实端元光谱出现较大差异,最终导致光谱匹配失败。

②对于最大内接单形体分析方法,由于真实场景中端元对应的纯像元并不一定存在,因此提取得到的“端元光谱”实际是端元与其他端元混合后的光谱,进而导致光谱匹配失败。

③对于最小外切单形体分析方法,由于“生成”的端元的有效性很大程度上依赖于高光谱数据在空间中的几何特征,而噪声和非线性因素的影响都会“破坏”这一几何特征,因此,最小外切单形体分析方法得到的某些端元可能无效。

④由于噪声以及场景中非线性因素的影响,非端元点可能被视为端元点,即端元提取出现误差,最终导致实际的端元点遗漏。这也是不同端元提取算法得到的端元类型存在差异的原因。

分析表 4.8 中的数据，有如下结论：

①VCA、N-FINDR、OBA 算法得到的结果在精度上有较好的一致性。OBA 算法精度略优于 OBA_origin 是由于 OBA 对数据降维后在一定程度上减弱了噪声的影响。

②MVSA、SQP_MinV、MVES、SISAL 算法得到的结果差别较大，这是由于真实高光谱数据在空间中的几何特征相对复杂，且受到噪声等因素影响，因此最小外切单形体分析得到的单形体差别较大，最终导致端元光谱差别较大。

③由于最小外切单形体分析方法受噪声影响显著，对于相对复杂的真实场景，最大内接单形体分析方法往往能得到更稳定的结果。

第5章 总结与展望

随着高光谱遥感技术的发展，高光谱遥感应用逐渐广泛，进而对高光谱数据分析的方法提出了新的更高的要求。混合像元的普遍存在，很大程度上限制了高光谱遥感在高精度定量研究中的应用，因此对光谱解混算法的研究，一直是国内外研究的热点。本文着重讨论了光谱解混中端元自动提取方面的关键技术。

5.1 本文总结

本文的主要内容以及研究结论可以概括为以下几个方面：

1.归纳总结了基于凸面几何的光谱解混算法的两种主要思想——最大内接单形体分析和最小外切单形体分析，分类阐述了当前典型算法的主要思想，并论述了算法的发展及算法之间的联系。

2.对数据降维中涉及的去相关方法以及自动维数确定方法进行了介绍，并探讨了应用中作为端元数目估计值的信号子空间维数、本征维数与虚拟维数等概念之间的联系与区别，同时，对 Hysime 算法进行了改进，通过引入噪声白化的过程，提高了算法对非白噪声的适应性。

3.介绍了一种最小外切单形体分析算法优化方法——初始单形体内部点去除法。通过引入有向距离来判断点与初始单形体的位置关系，去除位于初始单形体内部的点，即删除不影响最小外切单形体分析结果的“冗余”像元，减小计算量，从而提高算法效率。

4.将最小外切单形体求解转换为自变量为端元矩阵的非线性不等式约束优化过程，提出直接通过序列二次规划法(SQP_MinV)求解这一非线性不等式约束优化问题，并通过实验验证了该方法的可行性与有效性。

5.2 研究展望

针对研究中涉及到或未涉及到的问题，以下几个方面可作为下一步的研究重点：

1.目前光谱解混算法的研究，大都基于线性光谱混合模型，一方面由于部分场景能很好地采用该模型进行描述，另一方面，也由于线性模型更容易求解且模型中各项的物理含义也更明确。而对于非线性混合占主导的场景，直接采用线性

光谱混合模型进行光谱解混将带来较大误差，下一步研究中，需要发展有效的方法，在保持线性模型简明性的同时，提高结果精度。

2.光谱变异作为影响光谱解混结果的重要因素，是实际应用中必然面临却又难于解决的重要问题。光谱解混的两个过程——端元提取和丰度反演，都受光谱变异的影响，下一步研究中，需要重点考虑光谱变异的影响。

3.针对是否需要“纯象元”假设，基于凸面几何的光谱解混分别发展出最大内接单形体分析方法和最小外切单形体分析方法，而纯象元的“存在与否”，往往很难先验获取，为此，纯象元存在性的判断方法可作为进一步研究的内容。

参考文献

1. 童庆禧, 张兵, 郑兰芬. 高光谱遥感——原理、技术与应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006.6.
2. 张兵, 高连如. 高光谱图像分类与目标探测[M]. 北京: 科学出版社, 2011.
3. Keshava, N., J. Kerekes, D. Manolakis, et al. Algorithm taxonomy for hyperspectral unmixing. in Algorithms for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery VI, April 24, 2000 - April 26, 2000. 2000. Orlando, FL, USA: Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers.
4. Martinez, P.J., R.M. Perez, A. Plaza, et al. Endmember extraction algorithms from hyperspectral images[J]. Annals of Geophysics, 2006, 49(1): 93-101.
5. Boardman, J.W. Analysis, understanding and visualization of hyperspectral data as convex sets in n-space[J]. Imaging Spectrometry, 1995, 2480: 14-22.
6. Craig, M.D. Minimum-Volume Transforms for Remotely-Sensed Data[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1994, 32(3): 542-552.
7. Winter, M.E. N-FINDR: an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data. in Proceedings of the 1999 Imaging Spectrometry V, July 19, 1999 - July 21, 1999. 1999. Denver, CO, USA: Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers.
8. Li, J., J.M. Bioucas-Dias. Minimum volume simplex analysis: A fast algorithm to unmix hyperspectral data. in 2008 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium - Proceedings, July 6, 2008 - July 11, 2008. 2008. Boston, MA, United states: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.
9. Chan, T.-H., C.-Y. Chi, Y.-M. Huang, et al. A convex analysis-based minimum-volume enclosing simplex algorithm for hyperspectral unmixing[J]. IEEE Transactions on Signal Processing, 2009, 57(11): 4418-4432.
10. Keshava, N., J.F. Mustard. Spectral unmixing[J]. Ieee Signal Processing Magazine, 2002, 19(1): 44-57.
11. Chang, C.-I. Hyperspectral Data Exploitation: Theory and Applications[M]. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2007.
12. Hanson, A.J.: Geometry for n-dimensional graphics, Graphics gems IV: Academic Press Professional, Inc., 1994: 149-170.
13. 沈文选. 单形论导引——三角形的高维推广研究[M]. 长沙: 湖南师范大学出版社, 2000.4.
14. Nascimento, J.M.P., J.M.B. Dias. Vertex component analysis: A fast algorithm to unmix hyperspectral data[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2005, 43(4): 898-910.
15. Nascimento, J.M.P., J.M. Bioucas-Dias. New developments on VCA unmixing algorithm. in Image and Signal Processing for Remote Sensing XIV, September 15, 2008 - September 18, 2008. 2008. Cardiff, Wales, United kingdom: SPIE.
16. Plaza, A. An improved N-FINDR algorithm in implementation[J], 2005, 5806: 298-306.
17. Chang, C.I., C.C. Wu, W.M. Liu, et al. A new growing method for simplex-based endmember extraction algorithm[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2006, 44(10): 2804-2819.

18. Wang, L.-G.,Y. Zhang. Speed-up for N-FINDR algorithm[J]. Journal of Harbin Institute of Technology (New Series), 2008, 15(1): 141-144.
19. 耿修瑞. 高光谱遥感图像目标探测与分类技术研究[M]. 中国科学院遥感应用研究所: 博士论文, 2005.
20. 陶雪涛. 线性模型下多通道遥感图像混合像元分解方法研究[M]. 复旦大学: 硕士论文, 2008.
21. Tao, X., B. Wang,L. Zhang. A new approach based on orthogonal bases of data space to decomposition of mixed pixels for hyperspectral imagery[J]. Science in China Series F: Information Sciences, 2009, 52(5): 843-857-857.
22. Bioucas-Dias, J.M. A variable splitting augmented Lagrangian approach to linear spectral unmixing. in WHISPERS '09 - 1st Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing, August 26, 2009 - August 28, 2009. 2009. Grenoble, France: IEEE Computer Society.
23. Heinz, D.C.,C.I. Chang. Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2001, 39(2): 529-545.
24. Settle, J.J.,N.A. Drake. Linear mixing and the estimation of ground cover proportions[J]. International Journal of Remote Sensing, 1993, 14(6): 1159-1177.
25. 袁志发,周静芋. 多元统计分析[M]. 北京: 科学出版社, 2002.
26. Singh, A.,A. Harrison. Standardized principal components[J]. International Journal of Remote Sensing, 1985, 6(6): 883-896.
27. Green, A.A., M. Berman, P. Switzer, et al. A TRANSFORMATION FOR ORDERING MULTISPECTRAL DATA IN TERMS OF IMAGE QUALITY WITH IMPLICATIONS FOR NOISE REMOVAL[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1988, 26(1): 65-74.
28. Lee, J.B., A.S. Woodyatt,M. Berman. Enhancement of high spectral resolution remote-sensing data by a noise-adjusted principal components transform[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1990, 28(3): 295-304.
29. Chang, C.-I. Interference and noise-adjusted principal components analysis[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1999, 37(5 II): 2387-2396.
30. Roger, R.E. Principal Components transform with simple, automatic noise adjustment[J]. International Journal of Remote Sensing, 1996, 17(14): 2719-2727.
31. Bioucas-Dias, J.M.,J.M.P. Nascimento. Hyperspectral subspace identification[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2008, 46(4): 2435-2445.
32. Chang, C.-I.,Q. Du. Estimation of number of spectrally distinct signal sources in hyperspectral imagery[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2004, 42(3): 608-619.
33. Roger, R.E.,J.F. Arnold. Reliably estimating the noise in AVIRIS hyperspectral images[J]. International Journal of Remote Sensing, 1996, 17(10): 1951-1962.
34. 高连如. 高光谱遥感目标探测中的信息增强与特征提取研究[M]. 中国科学院遥感应用研究所: 博士论文, 2007.
35. 张贤达. 矩阵分析与应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2004.9.
36. Eldar, Y.C.,A.V. Oppenheim. MMSE whitening and subspace whitening[J]. IEEE Transactions on Information Theory, 2003, 49(7): 1846-1851.

-
37. Chang, C.-I., W. Xiong, W. Liu, et al. Linear spectral mixture analysis based approaches to estimation of virtual dimensionality in hyperspectral imagery[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2010, 48(11): 3960-3979.
 38. Bajorski, P. Does virtual dimensionality work in hyperspectral images? in Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery XV, April 13, 2009 - April 16, 2009. 2009. Orlando, FL, United states: SPIE.
 39. Uman-Diaz, A.,M. Velez-Reyes. Determining the Dimensionality of Hyperspectral Imagery for Unsupervised Band Selection. in Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery IX, April 21, 2003 - April 24, 2003. 2003. Orlando, FL, United states: SPIE.
 40. Cawse, K., A. Robin,M. Sears. The effect of noise whitening on methods for determining the intrinsic dimension of a hyperspectral image. in 3rd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing, WHISPERS 2011, June 6, 2011 - June 9, 2011. 2011. Lisbon, Portugal: IEEE Computer Society.
 41. Swayze, G., R.N. Clark, F. Kruse, et al. Ground-Truthing AVIRIS Mineral Mapping at Cuprite, Nevada. Summaries of the Third Annual JPL Airborne Geosciences Workshop. AVIRIS Workshop: JPL Publication 92-14, 1992: 47-49.
 42. Swayze, G. The hydrothermal and structural history of the Cuprite Mining District, Southwestern Nevada: an integrated geological and geophysical approach[M]. University of Colorado, Boulder, Colorado: Ph. D. Dissertation, 1997.
 43. Ambikapathi, A., T.-H. Chan, W.-K. Ma, et al. A robust minimum volume enclosing simplex algorithm for hyperspectral unmixing. in 2010 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, ICASSP 2010, March 14, 2010 - March 19, 2010. 2010. Dallas, TX, United states: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.
 44. Ambikapathi, A., T.-H. Chan, W.-K. Ma, et al. Chance-Constrained Robust Minimum-Volume Enclosing Simplex Algorithm for Hyperspectral Unmixing[J], 2011(Compendex).
 45. Hendrix, E.M.T., I. Garcia, J. Plaza, et al. Minimum volume simplicial enclosure for spectral unmixing of remotely sensed hyperspectral data. in 2010 30th IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium, IGARSS 2010, July 25, 2010 - July 30, 2010. 2010. Honolulu, HI, United states: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.
 46. Barber, C.B., D.P. Dobkin,H. Huhdanpaa. Quickhull algorithm for convex hulls[J]. ACM Transactions on Mathematical Software, 1996, 22(4): 469-483.
 47. 张光澄, 王文娟, 韩会磊, et al. 非线性最优化计算方法[M]. 北京: 高等教育出版社, 2005.
 48. Yuan, Y. A review of trust region algorithms for optimization. Proceedings of the Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics. Edinburgh: Oxford University Press, 2000: 271-282.

致 谢

衷心感谢童庆禧院士和郑兰芬研究员。童老师渊博的知识、敏锐的思维以及广阔的视野，给我留下了深刻的印象，也潜移默化地影响着我，先生对我们高屋建瓴的指导更让我受益匪浅。郑老师和蔼可亲的笑容、平易近人的话语，亲切又温暖，也鼓舞着我，让我坚定信心，不断前进。两位老师既是中国高光谱遥感科技领域的开拓者，又是卓越的学者和师者，那一份开拓创新的精神与忘我投入的热情，永远都是我学习的榜样！

衷心感谢王晋年研究员。王老师豁达干练、待人宽和、工作热情极高且有丰富的领域经验，在繁忙的行政与科技工作之中，多次抽时间指导我们的学习和科研，让我们十分受益。有幸多次在与其他单位的交流中领略王老师的风采，王老师的那份担当、那份豪情以及那份对后辈的关爱，深深地感染了我，也将不断激励我！

衷心感谢张立福老师、张霞老师和方俊永老师。张立福老师饱满的热情、平和的态度给课题组营造了一个轻松愉快的科研氛围，让我们快乐学习、笑对科研。张霞老师严谨的风格、直爽的性格让我受益良多，激励我在学习中用心思考、不断完善，在生活中保持乐观、积极向上。方俊永老师专业知识积淀深厚、分析问题眼光敏锐，他谦和的品格以及那一种无形的亲和力，让我非常钦佩，也鼓舞着我努力完善自己。三位老师对我学习上的指导，对我生活上的关心，将是我硕士生活中一份温暖的回忆！

衷心感谢刘学师兄、张晓红师姐、王潇师姐、杨杭师兄。刘学师兄爽朗的性格、张晓红和王潇师姐愉快的笑声、杨杭师兄朴实的笑容，亲切且温暖，都“润物细无声”地感染着我，使我在碰到困难时勇于面对、笑傲江湖。特别感谢赵冬师兄一直以来在生活和学习上的帮助和照顾，赵冬师兄谦逊的品格，让我们平时的交流讨论轻松且愉快，并让我获益良多。

感谢王树东老师和吴太夏师兄的帮助，衷心感谢孙韬师兄、张学文师兄以及胡顺石师兄的关心和帮助，特别感谢王倩师姐和陈小平师姐的鼓励和帮助，让我在失落时能笑对困难，更加自信，特别感谢黄长平师兄的帮助，多次与黄师兄的交流，让我十分受益，黄师兄勤奋踏实的科研态度、幽默得体的言谈表达以及细致周密的办事风格，都是我学习的榜样。

衷心感谢兰穹穹、覃环虎、尚坤、帅通、谢一淞的帮助与支持，同窗的时间虽然短暂，但同窗的情谊却是珍贵的，我会好好珍藏这份记忆。衷心感谢众师弟师妹们的帮助与支持，他们是：丰明博、刘凯、孙雪剑、张旭凯、赵恒谦、朱海涛、张楠、韩冰、李雪珂、余晓君、王晶、张艮中、庄智、高应波、李瑶、王桂珍，特别感谢石婷婷在毕业论文资料整理上的细心帮助，特别感谢姜高珍在论文排版上的大力帮忙，特别感谢童晓伟在论文校稿方面的帮助。

感谢周丽萍女士、龚正女士和王畅给予的帮助，点点滴滴，我会铭记于心。感谢研究生处的吴晓清、刘戈平两位老师，两位老师耐心且细心，让我们感到特别亲切。

衷心感谢高光谱研究室全体成员一直以来的帮助与支持，有幸在这个集体里学习和生活，既是缘分，也是恩赐，虽然融入这个集体的时间短暂，但这份记忆，将是我永远珍视的财富！

最后，感谢父母对我的抚育之恩，你们给了我健康的体魄，并鼓励我不断向前攀登，感谢我的姐姐一直以来关心我、帮助我、监督我、引导我，你们无私的关爱，让我体会到亲情的可贵，也加大了我前行的动力，我会再接再厉，更上一层楼！

张明

2012 年 5 月 8 日