

应用 Sinkhorn 距离和图正则约束的高效解混算法

杨露露, 李春芝, 陈晓华, 王丽

湖州师范学院 信息工程学院, 湖州 313000

摘要: 高光谱盲解混是解决混合像元问题的重要技术。其中, 非负矩阵分解凭借其明确的物理意义, 为无监督线性光谱解混的发展奠定了基础。由于传统非负矩阵分解采用欧氏距离度量原始矩阵与重构矩阵之间的误差, 因而不能有效挖掘各维度特征间关系, 影响解混精度。为充分利用高光谱图像中丰富的相关特征, 本研究在地球移动距离的基础上引入熵正则约束, 用 Sinkhorn 距离代替欧氏距离, 建模不同维度特征之间的关系。同时, 为刻画数据的流形结构, 将图正则项作为丰度的约束条件, 提出了一种基于 Sinkhorn 距离和图正则约束的非负矩阵解混算法。本研究采用乘性迭代规则对提出的解混模型进行求解, 在模拟数据集、Urban 数据集以及 Jasper 数据集上进行实验, 实验结果验证了所提出算法的有效性。

关键词: 高光谱解混, 非负矩阵分解, Sinkhorn 距离, 熵正则, 图正则

中图分类号: TP751/P2

引用格式: 杨露露, 李春芝, 陈晓华, 王丽. 2023. 应用 Sinkhorn 距离和图正则约束的高效解混算法. 遥感学报, 27(11): 2603-2616
Yang L L, Li C Z, Chen X H and Wang L. 2023. Efficient unmixing algorithm using Sinkhorn distance and graph regularization constraints. National Remote Sensing Bulletin, 27(11): 2603-2616 [DOI: 10.11834/jrs.20221126]

1 引言

高光谱遥感技术作为一种新型对地观测技术, 提供了丰富的地物光谱信息, 能够对地物目标进行识别 (Zhang 等, 2019) 和精细分类 (Ghamisi 等, 2017; Khan 等, 2018), 逐渐成为当前遥感技术研究前沿。由于受空间分辨率的限制, 高光谱图像中单个像元包含多种地物使得混合像元的现象普遍存在, 成为像元级应用精度难以提高的主要问题 (蓝金辉 等, 2018)。因此, 对混合像元进行分解, 通过提取构成像元的各类基本物质组成成分的光谱特征以及这些物质在像元内所占的比例可以提高高光谱遥感定量应用的精度 (童庆禧 等, 2016; 张兵, 2016)。

现有的光谱解混方法通常基于线性混合模型 (LMM) 或非线性混合模型 (NLMM) (Heylen 等, 2014)。其中, 线性混合模型由于简单、易求解得到广泛应用。高光谱盲解混能够同时进行端元提取以及丰度估计, 本质上属于信号处理领域中的

盲源分离问题 (Yao 等, 2019)。盲源分离的典型方法有独立成分分析 (ICA) (Wang 和 Chang, 2006) 和非负矩阵分解 (NMF) (Lee 和 Seung, 1999)。由于 ICA 对源信号做出的独立性假设与高光谱图像中的丰度和为一约束矛盾, 所以在光谱解混中的应用受到了限制 (Nascimento 和 Dias, 2005)。与 ICA 相比, NMF 能够更好地适应光谱解混的需求 (Tsinos 等, 2017), 但仅有的非负约束易导致 NMF 陷入局部最优解。因此, 需要另外引入合适的约束以获取更好的解混性能。

考虑到 LMM 凸几何的特点, Miao 和 Qi (2007) 引入端元单形体体积约束, 提出最小体积约束 NMF (MVCNMF)。受 Miao 和 Qi 的启发, 后继几种基于几何约束的解混算法被提出 (Yu 和 Sun, 2007; Wang 等, 2013; Zhi 等, 2017)。这些方法首先假设高光谱图像位于一个单形体中, 并且其顶点被认为是所要提取的端元。Marrinan 和 Gillis (2021) 为解决端元的不平衡性问题, 提出一种基于块的 minimaxNMF 模型来处理含有稀少端元的高

收稿日期: 2021-03-11; 预印本: 2022-07-21

基金项目: 国家自然科学基金(编号:61501184, 61771193); 浙江省重点研发计划(编号:2020C02020, 2020C01097)

第一作者简介: 杨露露, 研究方向为高光谱混合像元分解。E-mail: yll_scholar@163.com

通信作者简介: 李春芝, 研究方向为生物特征提取与识别, 遥感图像处理等。E-mail: lichunzhi82@zjhu.edu.cn

光谱图像。此外,由于自然界中地物一般呈现分段的局域同质分布,一个像元不会包含所有端元物质,因此,除了端元的物理约束外,丰度的稀疏性也可以被用于构建NMF解混框架。Qian等(2011)、Yuan等(2015)、Feng等(2018)采用 $L_{1/2}$ -NMF,与 L_1 范数(Bruckstein等,2008)相比,结果表明 $L_{1/2}$ -NMF更能满足和为一约束,并且在保证丰度稀疏的同时,降低了计算复杂度。进一步地,为保持数据的结构信息,He等(2016)施加 $L_{1,2}$ 范数进行联合稀疏约束,解决了 $L_{1/2}$ 范数易受噪声干扰的问题。Li等(2016)考虑到同一个端元仅分布在个别像元中,应用 $L_{2,1}$ 范数对丰度的行和列同时进行稀疏约束。Han等(2020)融合低秩性约束,引入使丰度更稀疏的 $L_{2,p}$ 范数。上述方法虽然采取了相关的约束,但忽略了数据的空间信息。Wang等(2017)利用线性迭代聚类分割技术进行空间群稀疏约束,结合丰度的稀疏性提出群稀疏正则NMF(SGSNMF)。Liu等(2011)融合丰度的分离性和平滑性约束,在保证相同像元中不同端元相关性的同时考虑数据的空间关系。Qin等(2021)引入图全变差约束(gtv)提高丰度的空间平滑度,其采用交替方向乘子法(ADMM)优化求解,并且融合Nyström近似策略和Merriman-Bence-Osher(MBO)方法降低求解复杂度。Wang等(2016)考虑图像的空间和光谱信息,利用超图建模光谱的空间结构以保证相同超边内像元丰度的一致性。此外,由于高光谱数据易受复杂非线性效应影响,Féotte和Dobigeon(2015)提出了鲁棒NMF(rNMF),该算法引入群稀疏离群项克服非线性问题。为挖掘高光谱数据中的非线性结构,Mei等(2016)、甘玉泉等(2019)、Rathnayake等(2020)将图模型理论嵌入到NMF模型中,以保持数据的局部几何结构。Lu等(2013)在 $L_{1/2}$ -NMF的基础上,亦构建了额外的图正则项,保证各端元丰度之间的紧密联系。

现存NMF解混算法针对端元和丰度的物理含义,分别施加相应的约束以获得更精确的解混结果,但大多基于欧氏距离构造目标函数,而高光谱图像内部结构的复杂性导致简单的线性表示不能很好地度量重构误差。Li和Chen(2020)提出相关熵诱导度量代替欧氏距离构造的损失函数,克服了基于欧氏距离的建模难以降低重构误差且极易受异常值影响的弊端。受最优传输思想启发,Rubner等(2000)提出地球移动距离(Earth Mover's

Distance, EMD)计算两个分布之间的距离以反映最小需求量。鉴于该最优传输问题,Sandler和Lindenbaum(2011)提出基于EMD的非负矩阵分解算法(EMDNMF),并证实EMD对不同维度噪声不敏感,因此,基于EMD的NMF算法可以获得比传统基于欧氏距离的NMF算法更鲁棒的性能。

由于高光谱图像内部包含大量不同维度的噪声(Li等,2021),而EMD具有对不同维度之间噪声不敏感的优势,因此,经过初步理论分析,EMD比欧氏距离更适用于处理含有复杂噪声的高光谱数据。由Sandler和Lindenbaum(2011)提出的EMDNMF在计算机视觉中的应用可知,基于EMD的NMF在高光谱数据分析中亦可取得不错的效果。但实际应用中,由于高光谱图像属于复杂大数据,EMDNMF高额的计算代价导致其在大规模高光谱数据分析中存在一定的局限性。Qian等(2016)提出了一种基于Sinkhorn距离的非负矩阵分解方法,可以更简单快速地求解该距离下的分解模型。Zhang等(2020)进一步引入对偶图正则项,同时考虑数据和特征的流形结构。上述基于Sinkhorn距离的非负矩阵分解算法被广泛应用于图像聚类并取得了不错的效果。

本文首次将最优传输技术和图模型理论综合应用于高光谱解混中,提出一种基于Sinkhorn距离和图正则约束的高效解混算法(SDGNMF)。该算法在充分挖掘EMD优点的基础上,对EMD施加熵正则约束,将EMD改进为Sinkhorn距离,并将其作为度量误差的标准,有效降低了计算复杂度。此外,被施加了熵正则约束的EMD,即Sinkhorn距离对模型的表示可以更好地建模不同维度特征之间的关系,特征的相关性得以充分利用。本文在Sinkhorn距离的基础上特别引入图正则约束以进一步刻画数据的流形结构。通过在模拟数据集以及真实数据集上的实验验证,以期有效改善基于NMF的高光谱解混算法性能。

2 理论介绍

2.1 线性光谱混合模型

线性混合模型假设入射光在到达传感器前只与一种地物发生作用,不考虑物质内部反射、散射等作用,混合像元光谱表示为端元光谱与其相应丰度的线性组合,数学表达式定义如下:

$$\mathbf{X} = \mathbf{UV} + \mathbf{E} \quad (1)$$

式中, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ 表示原始图像, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{L \times P}$ 表示端元矩阵, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{P \times N}$ 表示丰度矩阵, $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ 表示重构误差矩阵, 通常被认为是加性噪声 (Akhtar 和 Mian, 2017; Zhang 等, 2018)。 L 为波段数, P 为端元数量, N 为图像中所含像元总数。矩阵 \mathbf{U} , \mathbf{V} , \mathbf{E} 均满足非负性约束 (ANC), 并且丰度 \mathbf{V} 还需满足和为一约束 (ASC)。

2.2 非负矩阵分解

NMF 是由 Lee 和 Seung (1999) 提出的一种无监督特征提取方法。对于给定的非负矩阵 \mathbf{X} , NMF 将其分解成两个非负矩阵 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} , 使得分解后两个矩阵的乘积近似等于原始矩阵, 即 $\mathbf{X} \approx \mathbf{UV}$ 。

为了衡量原始矩阵对分解因子间的重构效果, 需要构造目标函数, 定义如下:

$$\min_{\mathbf{U}, \mathbf{V}} \text{Dist}_{\phi}(\mathbf{X}, \mathbf{UV}) \quad (2)$$

式中, Dist_{ϕ} 表示度量距离, 通常定义为欧氏距离, 基于该距离的目标函数表示为

$$\min J(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{UV}\|_F^2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} (X_{ij} - (UV)_{ij})^2 \quad (3)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{U} \geq 0, \mathbf{V} \geq 0, i = 1, 2, \dots, L, j = 1, 2, \dots, N$$

式中, $J(\cdot)$ 表示度量函数, $\|\cdot\|_F$ 表示 Frobenius 范数。

对于式 (3), 一般采用乘性迭代算法进行更新, 得到 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 如下

$$\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{U} \frac{\mathbf{XV}^T}{\mathbf{UVV}^T}, \mathbf{V} \leftarrow \mathbf{V} \frac{\mathbf{U}^T \mathbf{X}}{\mathbf{U}^T \mathbf{UV}} \quad (4)$$

式中, $(\cdot)^T$ 表示矩阵转置。

3 基于 Sinkhorn 距离和图正则约束的非负矩阵解混模型

高光谱图像内部的复杂性导致数据中相邻元素可能由相似的端元构成, 并且对应的丰度也非常接近, 可见, 高光谱数据中存在着丰富的相关特征。传统解混算法中, 普遍采用欧氏距离构造目标函数, 无法准确描述高光谱图像中各维度特征间关系。为充分利用图像空间中特征的相关性, 本文采用基于 Sinkhorn 距离测量误差的方法。

3.1 Sinkhorn 距离

在本文所提出的 SDGNMF 方法中, 采用改进的 EMD 代替传统欧氏距离构造目标函数。其中, EMD 定义为两个分布直方图之间传输元素的最小代价。高光谱的 EMD 原理详见图 1, 图 1 中, 红框

表示选取图像中某一区域。该区域的直方图表示为 \mathbf{x} ; \mathbf{y} 为经 EMD 处理后同一区域的直方图表示; q 、 p 分别表示直方图 \mathbf{x} 、 \mathbf{y} 中的区段号。选取 Urban 数据集中某一波段的灰度图像, 红框框选其某一区域的直方图表示为 \mathbf{x} ; 假设 \mathbf{x} 分布直方图和 \mathbf{y} 分布直方图均含有 n 个区段数, 从 \mathbf{x} 分布直方图中选取数据组合为 r_1 的元素, 共计 $\Phi_{x_{r_1}}$ 个元素, 产生转移量可表示为 $\sum_{q=1}^n S_q = \Phi_{x_{r_1}}$; 将转移量 $\Phi_{x_{r_1}}$ 运送至 \mathbf{y} 分布直方图的各区段中, 生成数据组合为 r_2 的元素, 即 $\sum_{p=1}^n S_p = \Phi_{y_{r_2}}$, 式中, q 、 p 分别表示 \mathbf{x} 、 \mathbf{y} 分布图中的区段号; 理想情况下 $\Phi_{x_{r_1}} = \Phi_{y_{r_2}}$ 。根据上述传输方案依此反复, 直至 \mathbf{x} 中所有元素被全部分配至 \mathbf{y} 分布直方图中。EMD $d_M(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 计算公式如下 (Rubner 等, 2000):

$$\begin{aligned} d_M(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min \sum_{p, q=1}^n M_{pq} S_{(r_1 \rightarrow r_2)(q \rightarrow p)} \\ \text{s.t. } \sum_{q=1}^n S_q = \Phi_{x_{r_1}}, \sum_{p=1}^n S_p = \Phi_{y_{r_2}}, \forall p, q \end{aligned} \quad (5)$$

式中, $S_{(r_1 \rightarrow r_2)(q \rightarrow p)}$ 表示从 \mathbf{x} 分布直方图中各区段 ($q = 1, 2, \dots, n$) 挑选的 r_1 型数据组合运输到 \mathbf{y} 分布直方图各区段 ($p = 1, 2, \dots, n$) 形成的 r_2 型数据组合产生的总转移量; M_{pq} 表示区段 p 和 q 之间的距离, 由 L_1 距离定义。 L_1 距离为两区段间元素数差值的绝对值, 其表达式如下 (Cuturi 和 Avis, 2014):

$$M_{pq} = \|\Phi_p - \Phi_q\| \quad (6)$$

式中, Φ_p 表示 p 区段内元素数, Φ_q 表示 q 区段内元素数。

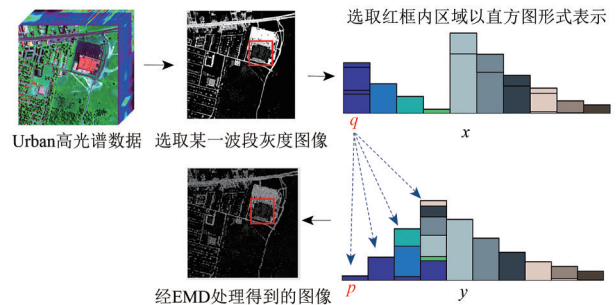


图 1 高光谱图像的 EMD 原理

Fig. 1 EMD principle diagram of hyperspectral image

由于 EMD 计算过程中涉及到线性规划的复杂求解问题, 其计算复杂度高达 $O(n^3 \log n)$, 限制了其在大规模数据分析中的适用性 (Sandler 和

Lindenbaum, 2011)。本文在EMD的基础上引入熵正则项平滑参数化模型。将改进后的EMD距离称为Sinkhorn距离, 定义为

$$d_M^\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min \left(\sum_{p,q} \mathbf{M} \odot \mathbf{S} + \frac{1}{\lambda} H(\mathbf{S}) \right) \quad (7)$$

s.t. $\mathbf{S}\mathbf{1} = \mathbf{x}, \mathbf{S}^T\mathbf{1} = \mathbf{y}$

式中, $\mathbf{1}$ 表示全一向量, \odot 表示逐元素乘法; \mathbf{S}^T 表示矩阵 \mathbf{S} 的转置, $H(\mathbf{S}) = -\sum_{p,q} \mathbf{S} \log \mathbf{S}$ 表示矩阵 \mathbf{S} 的熵, λ 表示正则化参数, 用于控制熵正则化作用的强度, 当 λ 足够大时, 式(7)相当于EMD。

对于上述模型的求解, Cuturi (2013) 提出了一种Sinkhorn-Knopp矩阵缩放算法, 即通过生成一系列行和列被交替归一化的矩阵来进行求解。Genevay等(2019)证明了基于该缩放算法的模型求解复杂度下降为 $O(n^2)$, 因此, 相较于EMD, Sinkhorn距离可以更快速有效地进行大规模数据分析。Sinkhorn-Knopp矩阵 \mathbf{K} 定义为

$$\mathbf{K} = \exp(-\lambda \mathbf{M} - 1) \quad (8)$$

然而, 模型(7)的优化需严格满足归一化条件, 事实上, 在高光谱图像中, 考虑到各像元的不规则性且相邻像元间具有相似性, 输出图像无法被准确表示为归一化的直方图形式, 不能严格满足式(7)中的约束条件。因此, 本文对式(7)进行松弛, 利用KL散度(Kullback-Leibler divergence)对原等式约束进行软惩罚, 将模型简化为一个无约束的问题。上述方法的有效性已在Frogner等(2015)的研究中得到证明, 本文将其推广应用到高光谱解混模型中。Sinkhorn距离最终优化为

$$d_M^{\lambda, \gamma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min \left\{ \sum_{p,q} \mathbf{M} \odot \mathbf{S} + \frac{1}{\lambda} H(\mathbf{S}) + \gamma \left(\widetilde{\text{KL}}(\mathbf{S}\mathbf{1} \parallel \mathbf{x}) + \widetilde{\text{KL}}(\mathbf{S}^T\mathbf{1} \parallel \mathbf{y}) \right) \right\} \quad (9)$$

式中, $\widetilde{\text{KL}}(\mathbf{w} \parallel \mathbf{z}) = \mathbf{w}^T \log(\mathbf{w} \odot \mathbf{z}) - \mathbf{1}^T \mathbf{w} + \mathbf{1}^T \mathbf{z}$ 表示 \mathbf{w} 和 \mathbf{z} 之间的广义KL散度, γ 表示松弛参数。

本文以两个直方图之间传输元素的最小成本为原则构造目标函数, 进而采用Sinkhorn距离作为误差的度量标准, 其优势具有如下两方面: 一方面, 基于Sinkhorn距离的模型采用Sinkhorn-Knopp矩阵缩放算法进行求解, 相比于EMD, 可以更快速有效地分析高光谱大规模数据; 另一方面, 考虑到高光谱数据中存在着丰富的相关特征, Sinkhorn距离可以克服噪声影响, 建模不同维度特征之间的关系, 能够充分利用特征间的相关性。因此, 相较于传统基于欧氏距离的NMF, 基于Sinkhorn

距离的NMF模型, 能够更好地提取数据内部结构信息, 提高解混精度。

3.2 光谱特征图正则化

高光谱图像中数据通常位于一个低维子流形上。为考虑空间信息并有效挖掘数据的流形结构, 本文在利用Sinkhorn距离构造目标函数的基础上对丰度矩阵 \mathbf{V} 施加图正则约束, 进一步捕捉数据间的有效特征, 从而增强图正则约束描述几何流形结构的有效性。一般地, 图正则项表述如下:

$$R = \sum_{ij} \mathbf{W}_{ij} \|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j\|^2 \quad (10)$$

式中, \mathbf{W}_{ij} 表示图正则项权重矩阵, 可以通过热核函数计算得到(Lu等, 2013), 具体计算公式如下:

$$\mathbf{W}_{ij} = \exp \left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{\tau} \right) \quad (11)$$

式中, \mathbf{x}_i 和 \mathbf{x}_j 表示数据空间中两个邻近点, τ 表示核参数, 通常取值为 $[0, 1]$ 。

3.3 SDGNMF模型

综合式(9)、(10)、(11), 由Sinkhorn距离构造的解混目标函数定义如下:

$$J(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \sum_{j=1}^N d_M^{\lambda, \gamma}(\mathbf{X}_j, (\mathbf{UV})_j) + \frac{\xi}{4} R = \sum_{j=1}^N d_M^{\lambda, \gamma}(\mathbf{X}_j, (\mathbf{UV})_j) + \frac{\xi}{4} \sum_{ij} \mathbf{W}_{ij} \|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j\|^2 \quad (12)$$

式中, \mathbf{X}_j 表示矩阵 \mathbf{X} 的第 j 列向量; ξ 表示维持特征相关性和数据流形之间平衡的正则化参数。

由式(12)可知, 所提出的模型是非凸问题, 同时优化 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 是一个NP难问题。参考Lee和Seung(2000), Qian等(2016)将乘性迭代算法应用求解Sinkhorn距离并证明了该算法在Sinkhorn距离上的收敛性。为将变量交替最小化, 本文同样采用乘性迭代算法对式(12)进行求解, 当一个变量迭代时, 将其他变量固定为常数, 每个变量在当前固定的变量上有条件地更新, 从而将所提出的模型计算问题分解成两个凸问题。

给定非负矩阵 $\mathbf{\Theta} \in \mathbb{R}^{L \times P}$ 和 $\mathbf{\Psi} \in \mathbb{R}^{P \times N}$ 作为 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 的拉格朗日乘子, 定义拉格朗日函数 Γ 为

$$\Gamma = \sum_{j=1}^N d_M^{\lambda, \gamma}(\mathbf{X}_j, (\mathbf{UV})_j) + \frac{\xi}{4} \sum_{ij} \mathbf{W}_{ij} \|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j\|^2 + \text{Tr}(\mathbf{\Theta} \mathbf{U}^T) + \text{Tr}(\mathbf{\Psi} \mathbf{V}^T) \quad (13)$$

根据Karush-Kuhn-Tucker条件, 即 $\mathbf{\Theta} \times \mathbf{U} = 0$, $\mathbf{\Psi} \times \mathbf{V} = 0$, 可以得出 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 的更新规则:

$$U \leftarrow U \times \frac{V \times (S^* ./ UV)}{V} \quad (14)$$

$$V \leftarrow V \times \frac{U \times (S^* ./ UV) + \xi W V^T}{U + \xi V^T W U^T} \quad (15)$$

式中, S^* 表示最优传输矩阵, 定义为 Sinkhorn-Knopp 矩阵 $K = \exp(-\lambda M - 1)$ 的对角缩放:

$$S^* = \text{diag}(A) K \text{diag}(B) \quad (16)$$

式中, A 和 B 表示两个缩放矩阵, $\text{diag}(\cdot)$ 表示对角矩阵。Frogner 等 (2015) 定义了上述两个缩放矩阵的更新规则, 具体表达式描述如下:

$$A \leftarrow X^{\frac{\gamma\lambda}{\gamma\lambda+1}} \odot (K(UV \odot K^T A)^{\frac{\gamma\lambda}{\gamma\lambda+1}})^{\frac{\gamma\lambda}{\gamma\lambda+1}} \quad (17)$$

$$B \leftarrow (UV)^{\frac{\gamma\lambda}{\gamma\lambda+1}} \odot (K^T A)^{\frac{\gamma\lambda}{\gamma\lambda+1}} \quad (18)$$

3.4 算法流程

本文参照虚拟维度算法 (Bajorski, 2011) 计算端元数量, 同时采用顶点成分分析 (VCA) 初始化端元矩阵 U , 完全约束最小二乘法 (FCLS) 初始化丰度矩阵 V , 为了计算图正则项权重矩阵, 将核参数 τ 设置为 0.2, 并将 K-近邻 (KNN) 的数目设置为 5。本文设置最大迭代次数 I_{\max} , 如果迭代次数大于定义的 I_{\max} , 则迭代结束。具体算法流程如下:

输入: 原始数据矩阵 X , 参数 $\lambda, \gamma, \xi, \tau$, KNN 数目, 最大迭代次数 I_{\max}

步骤 1: 通过 VCA-FCLS 算法初始化 U 和 V

步骤 2: 根据式 (11) 计算权重矩阵 W

步骤 3: 根据式 (6) 计算距离矩阵 M

步骤 4: 根据式 (8) 计算矩阵 K

步骤 5: 循环

根据式 (17) 更新得到 A

根据式 (18) 更新得到 B

根据式 (16) 更新得到 S^*

根据式 (14) 更新得到 U

根据式 (15) 更新得到 V

直到满足停止条件

输出: U 和 V

4 结果与分析

为了证明提出算法的有效性, 本文分别在模拟高光谱数据集和真实高光谱数据集上进行性能验证, 并与 GNMF (Lu 等, 2013), SGSNMF (Wang 等, 2017), rNMF (Févotte 和 Dobigeon, 2015), minimaxNMF (Marrinan 和 Gillis, 2021), gtvMBO (Qin 等, 2021), VCA-FCLS 等 6 种算法进行对比

分析。所有对比算法均设置为原文献中参数。实验平台为 CPU 2.9 GHz, 内存 8 G 的 Windows10 电脑上, 使用 Matlab2019a 进行代码实现。

4.1 选定评价指标

为定量评估所提出 SDGNMF 解混算法的性能, 本文采用高光谱解混评估中常用的两种评价指标, 即光谱角距离 (SAD) 和均方根误差 (RMSE)。SAD 用来评估端元估计值的准确性, RMSE 用来评估丰度估计值的准确性。SAD 和 RMSE 的表达式定义如下:

$$\text{SAD}_i = \cos^{-1} \left(\frac{\mathbf{u}_i^T \hat{\mathbf{u}}_i}{\|\mathbf{u}_i\| \|\hat{\mathbf{u}}_i\|} \right) \quad (19)$$

$$\text{RMSE}_i = \left(\frac{1}{N} \|\mathbf{v}_i - \hat{\mathbf{v}}_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (20)$$

式中, \mathbf{u}_i 和 $\hat{\mathbf{u}}_i$ 分别表示第 i 个端元真实值和估计值; \mathbf{v}_i 和 $\hat{\mathbf{v}}_i$ 分别表示第 i 个端元对应丰度真实值和估计值。

4.2 算法收敛性

对 SDGNMF 算法的收敛性能的验证结果如图 2 所示。可见在所有的测试数据集上, 算法的重构误差随着迭代次数的增加而减小, 当达到一定的迭代次数时, 误差达到一个稳定的值。为了保证一致性, 在所有数据集上迭代次数均设置为 1000 次。

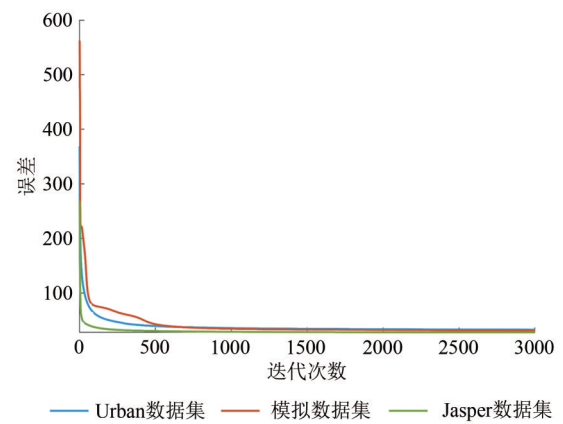


图 2 误差随迭代次数变化

Fig. 2 Figure of error changing with iteration number

4.3 模拟数据集实验

该模拟数据集是根据 Hendrix 等 (2012) 提出的模拟程序生成的, 即从美国地质调查局 (USGS) 光谱库中选择 9 种物质 221 个波段的谱线作为端元, 生成大小为 100×100 的图像, 图 3 展示了 9 种

端元光谱特征曲线。为满足和为一约束以及非负性约束,通过 K 均值聚类和高斯滤波器生成相应的丰度图,每个端元对应的丰度值随机分布范围为0.004—0.900,最大丰度值为0.900。

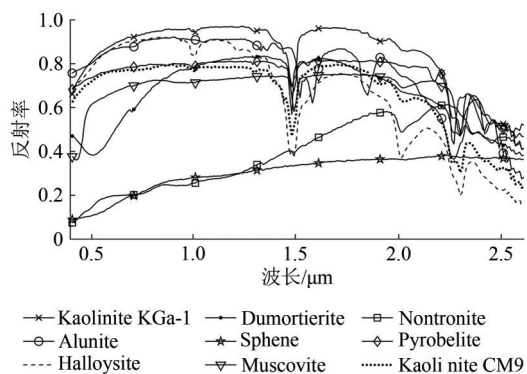
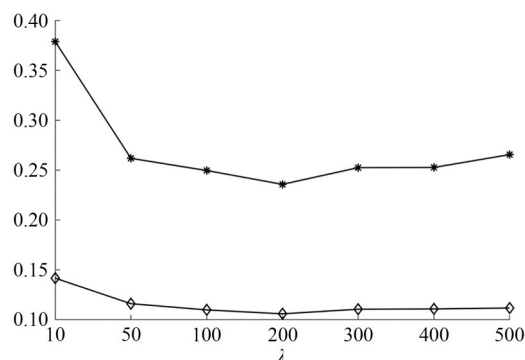


图3 模拟数据端元光谱曲线

Fig. 3 Endmember spectral curve of simulated data

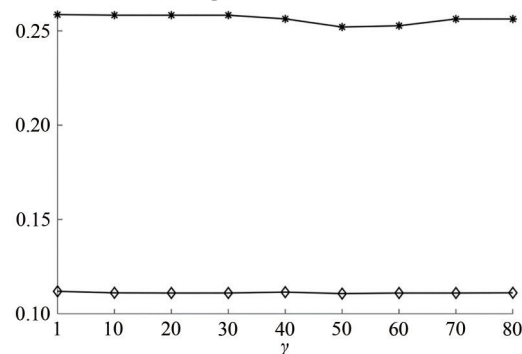
4.3.1 参数选择

参数 λ 、 γ 和 ξ 分别为正则化参数、松弛参数和平衡参数,分别用于调节熵正则作用的强度、调节模型的松弛程度以及维持特征相关性和数据流形之间的平衡。为研究参数 λ 、 γ 和 ξ 对算法性能的影响,在模拟数据集上,采用固定初始化的方式对3个参数进行测试。首先,固定 $\gamma = \xi = 10$ 以测试参数 λ 对算法性能的影响,参考Qian等(2016)的研究,参数 λ 取值从 $[10, 50, 100, 200, 300, 400, 500]$ 中选取,结果见图4(a)。可见,当 λ 从10增加到200时,SAD和RMSE值不断减小并达到最小值,而随着 λ 继续增加,SAD和RMSE值呈上升趋势,因此,设置 $\lambda = 200$ 。其次,固定 $\lambda = 200$, ξ 仍设置为10,设置 γ 取值范围为 $[10, 80]$,步长为10递增,结果见图4(b)。可见,RMSE值在这区间保持稳定,而当 $\gamma = 50$ 时,SAD达最小值,因此,设置 $\gamma = 50$ 。最后,固定 $\lambda = 200$, $\gamma = 50$,设置 ξ 取值为 $[1E-6, 10]$,以10倍步长增加,结果见图4(c)。可见,参数 ξ 在 $1E-6$ — $1E-2$ 变化时,SAD与RMSE值均保持稳定。由于参数 ξ 用于维持特征相关性和数据流形之间的平衡,当 $\xi > 0.1$ 时,重构项过于松弛,SAD和RMSE估计精度呈明显下降趋势。因此,为了获得更精确的解混结果,将 ξ 的最优值设置在 $[1E-6, 1E-2]$ 。在以下模拟数据集实验中,参数 ξ 均设置为 $1E-4$,同时分别设置 $\lambda = 200$ 和 $\gamma = 50$ 。



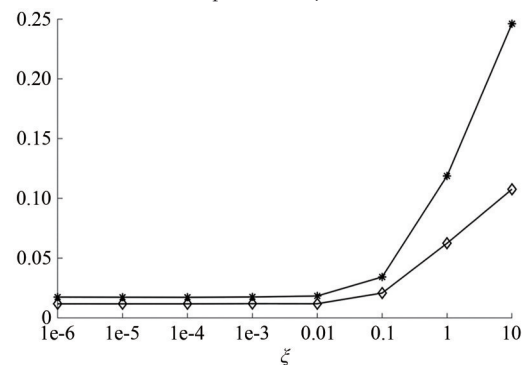
(a) SAD和RMSE值随参数 λ 变化

(a) SAD and RMSE values of SDGNMF with different parameter λ



(b) SAD和RMSE值随参数 γ 变化

(b) SAD and RMSE values of SDGNMF with different parameter γ



(c) SAD和RMSE值随参数 ξ 变化

(c) SAD and RMSE values of SDGNMF with different parameter ξ

—*— SAD —◇— RMSE

图4 SDGNMF在不同参数下的SAD和RMSE值

Fig. 4 SAD and RMSE values of SDGNMF with different parameters

4.3.2 鲁棒性分析

在本实验中,旨在对比和分析噪声对算法的影响。在原始无噪声模拟数据集中加入零均值高斯噪声,信噪比(SNR)定义为

$$\text{SNR} = 10 \lg \left(\frac{E[X^T X]}{E[e^T e]} \right) \quad (21)$$

式中， X 和 e 分别表示原始信号和其相应的噪声， $E[\cdot]$ 表示期望运算符。

为了测试七种算法的鲁棒性，在模拟数据集上添加加性噪声，信噪比分别设置为：10、20、30、40、50、60 dB。每个信噪比下的柱状图从左至右依次为算法 SDGNMF、GNMF、SGSNMF、rNMF、minimaxNMF、gtvMBO 和 VCA，所有方法的 SAD

值和 RMSE 值均取 10 次实验结果的平均值，结果见图 5。可见：随着信噪比的降低，所有算法的解混精度都随之降低；在不同的信噪比情况下，所提出的 SDGNMF 算法获得的 SAD 值和 RMSE 值比其他算法更小。因此，实验结果表明，噪声会导致解混结果变差，但所提出的算法相比于其他算法更具鲁棒性。

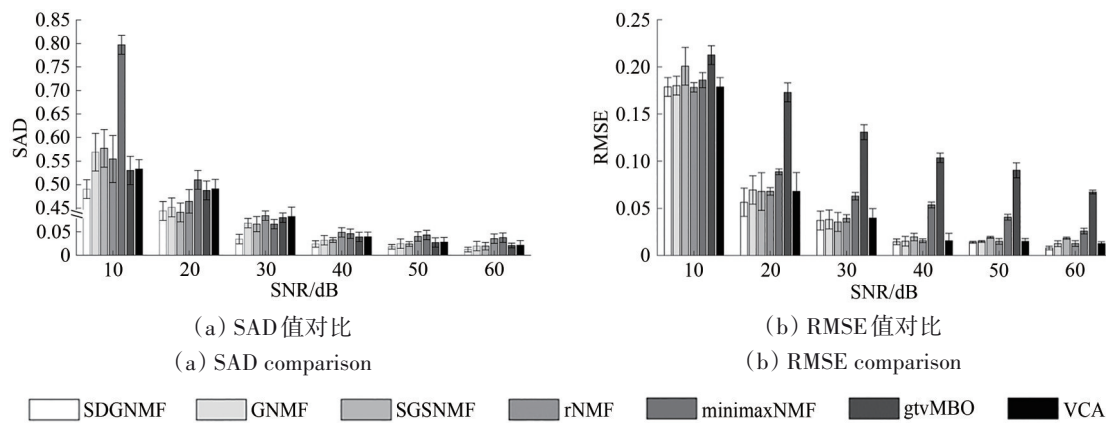


图 5 不同 SNR 下几种算法的 SAD 和 RMSE 对比
Fig. 5 Several algorithms under different SNR with the comparison of SAD and RMSE

4.3.3 不同算法丰度图对比分析

在本实验中，设置参数 $\lambda = 200$ 、 $\gamma = 50$ 、 $\xi = 1E-4$ ，

对比分析了模拟数据集上其他几种算法提取的丰度效果图，结果如图 6 所示。

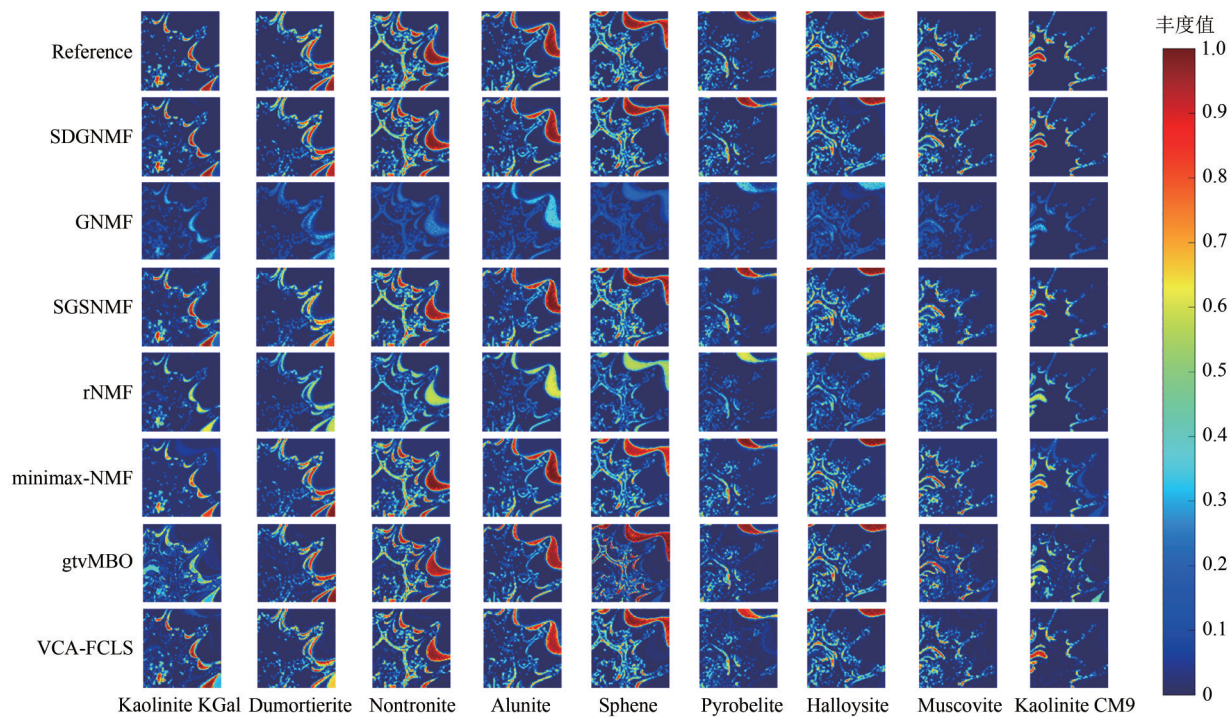


图 6 各算法在模拟数据集上的丰度对比
Fig. 6 Comparison of the abundance maps of each algorithm on simulated dataset

可见,显示SDGNMF、SGSNMF、minimaxNMF以及VCA-FCLS可以较好地恢复丰度。SGSNMF采用超像素分割法实现空间群稀疏约束,可以保留空间局部信息,但由于没有准确考虑相似像元区域内的不同端元结构,SGSNMF在得到Kaolinite Kgal端元的丰度图时,误提取了Dumortierite端元。VCA-FCLS算法也同样存在上述Kaolinite Kgal端元和Dumortierite端元提取不准确的问题。minimaxNMF在Kaolinite CM9丰度图中出现了Dumortierite端元轮廓,且Kaolinite Kgal端元提取精度较低。gtvMBO无法准确区分具有相似结构的端元,导致Kaolinite Kgal和Kaolinite CM9端元提取出现混叠。而本文提出的SDGNMF算法优势在于能够保留迭代后的相似结构,各端元特征之间的相关性得到了充分考虑,因而相邻区域分布的相似物质能够分离出来。相比于其他几种算法,SDGNMF可以更好地展示局部丰度的细节,获得更真实、完善的丰度图。GNMF和rNMF表现欠佳。GNMF由于无法给出正确的稀疏表示,几乎提取不到有价值的丰度信息,rNMF获得的丰度图像素值为0.3—0.5,端元提取不纯。综上,解混结果表明所提出的SDGNMF算法能够更好地恢复模拟数据的丰度图,相比于其他几种对比算法,可以获得更加精确的解混结果。

4.4 真实数据集实验

4.4.1 Urban数据集

Urban数据集是高光谱解混研究中使用最广泛的高光谱数据之一,可以在网站(<http://lesun.>

weebly.com/hyperspectral-data-set.html [2021-03-11])上下载。其子图像大小为307×307,共包含210个波段,波段范围为400—2500 nm,空间分辨率和光谱分辨率分别为2 m和10 nm。考虑到密集水蒸气和大气效应的影响,去除波段1—4、76、87、101—111、136—153和198—210后,保留了162个波段进行解混。根据实际地面参考图,选取数据集中的6种端元进行实验,分别是沥青、草地、树木、屋顶、金属和土壤。Urban数据立方体和6种端元光谱曲线如图7所示。

在本实验中,设置参数 $\lambda=300$ 、 $\gamma=40$ 、 $\xi=1E-4$,得到的丰度图和地面参考丰度图如图8所示,表1列出了所有方法的SAD值,其中粗体表示最优值,下划线表示次优值。从图中可以看出,对比参考丰度图,本文提出的算法恢复了几乎所有的端元成分。VCA-FCLS、gtvMBO均在沥青丰度图中出现了小范围的草地轮廓,并且VCA-FCLS未提取到较纯的草地丰度图。GNMF仅提取到了泥土,其他5种端元显示的丰度图颜色均为绿色,即提取纯度较低。对比GNMF,rNMF丰度颜色值更小,位于0.2—0.3,可见,端元提取很不准确。相较于上述几种对比算法,SGSNMF和minimaxNMF得到了相对较好的丰度图,但均由于提取金属时像素值太小,导致准确识别该端元无法实现。此外,表1还表明,SDGNMF估计出的大部分端元的SAD值最优,虽然个别提取端元的SAD值次优,但平均SAD比其他算法都低。因此,从纯度和准确性的角度来看,本文提出的算法较其余算法能够取得更精确的解混效果。

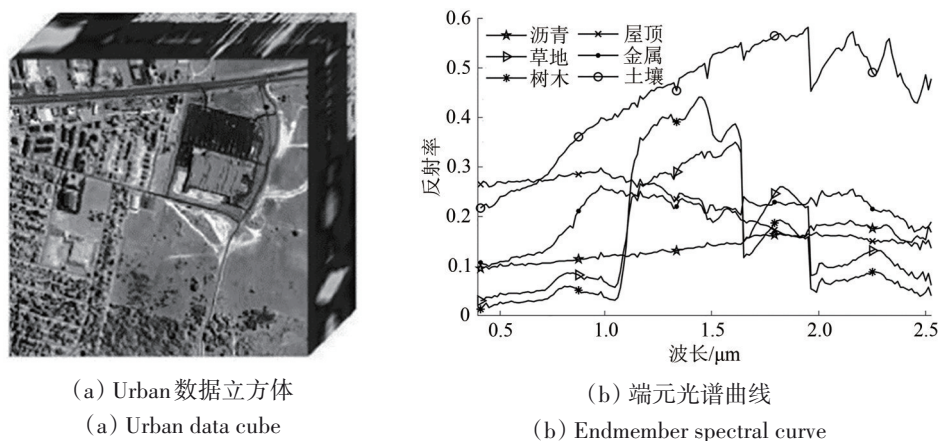


图7 Urban 高光谱数据

Fig. 7 Urban hyperspectral data

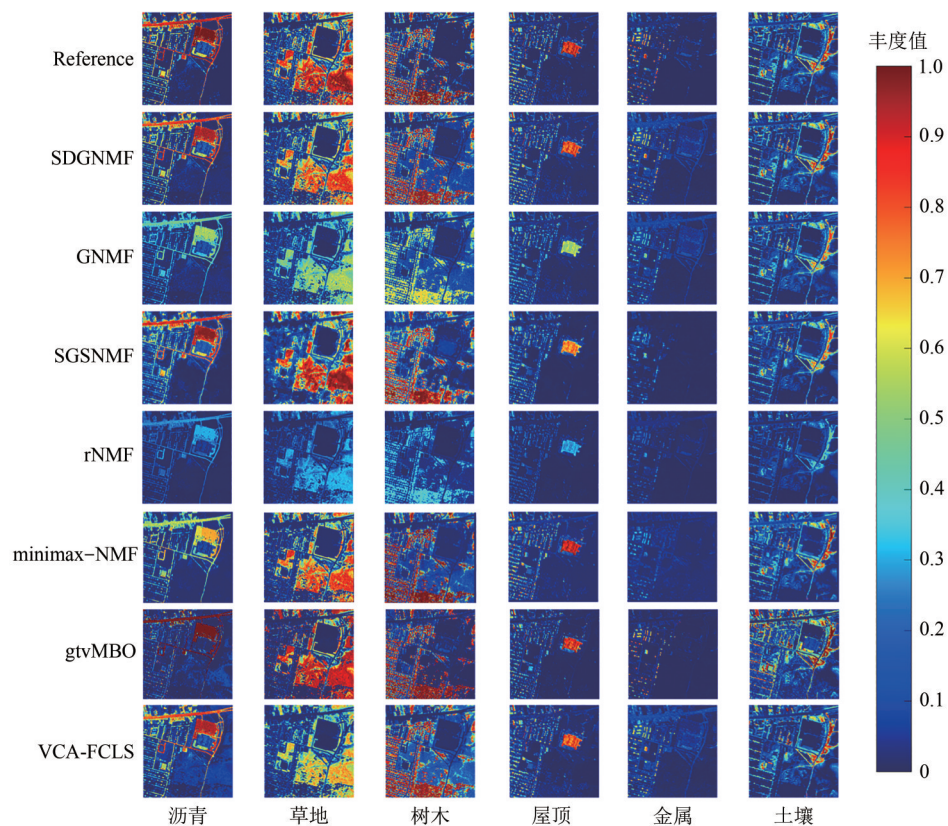


图8 各算法在 Urban 数据集上的丰度对比

Fig. 8 Comparison of abundance maps of each algorithm on Urban dataset

表1 Urban 数据集各算法的 SAD 对比值

Table 1 SAD ratio of algorithms in Urban dataset

端元	SDGNMF	GNMF	SGSNMF	rNMF	minimaxNMF	gtvMBO	VCA-FCLS
沥青	0.1112	0.2018	0.0489	<u>0.0646</u>	0.1338	0.2463	0.2345
草地	0.0339	0.0625	<u>0.0339</u>	0.1026	0.0446	0.0736	0.0561
树木	0.0093	<u>0.0118</u>	0.0150	0.0697	0.0372	0.0437	0.0382
屋顶	<u>0.0512</u>	0.0881	0.0574	0.0828	0.0419	0.1030	0.1194
金属	0.0856	0.2245	0.1817	0.1144	0.4833	<u>0.0900</u>	0.0966
土壤	0.0204	0.0391	<u>0.0233</u>	0.1159	0.0442	0.0599	0.0620
平均值	0.0519	0.1046	<u>0.0601</u>	0.0917	0.1308	0.1028	0.1011

注：黑体数据为最优值，加下划线数据为次优值。

4.4.2 Jasper 数据集

Jasper 数据集可以在网站 (<http://lesun.weebly.com/hyperspectral-data-set.html> [2021-03-11]) 上下载。其图像大小为 512×614，共包含 224 个波段，范围为 380—2500 nm。数据集中含 4 种端元，即树木，水，土壤和道路。考虑到水汽波段的影响，去除波段 1—3、108—112、154—166 和 220—224 之后，保留了 198 个通道来进行光谱解混。由于此高光谱图像的复杂性，无法精确获取地面实际情况，因此本文采用 100×100 大小的子图像进行实验。

Jasper 数据立方体和 4 种端元光谱曲线如图 9 所示。

设置参数 $\lambda = 300$ 、 $\gamma = 10$ 、 $\xi = 1E - 4$ ，实验得到的丰度图和地面参考丰度图如图 10 所示，表 2 列出了所有方法的 SAD 值，其中粗体表示最优值，下划线表示次优值。从图中可以看出，本文提出的算法比其他方法更好地恢复了丰度图，与参考地物分布十分吻合。VCA-FCLS 和 SGSNMF 算法均在泥土丰度图中错误地提取了道路，导致道路无法准确被识别。minimaxNMF 在提取水流端元时不准确，丰度图中出现了道路的轮廓。而其他

几种算法均存在无法识别端元，提取精度不纯的问题。此外，如表2所示，SDGNMF大多可以获得比其他方法更小的SAD值，且平均SAD值最

小。上述结果表明，本文提出的算法可以更准确地提取端元，并且获得的丰度图精度高于其他方法。

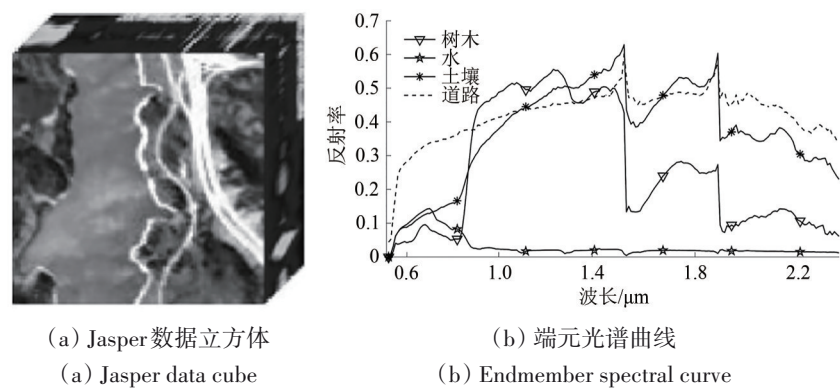


图9 Jasper 高光谱数据
Fig. 9 Jasper hyperspectral data

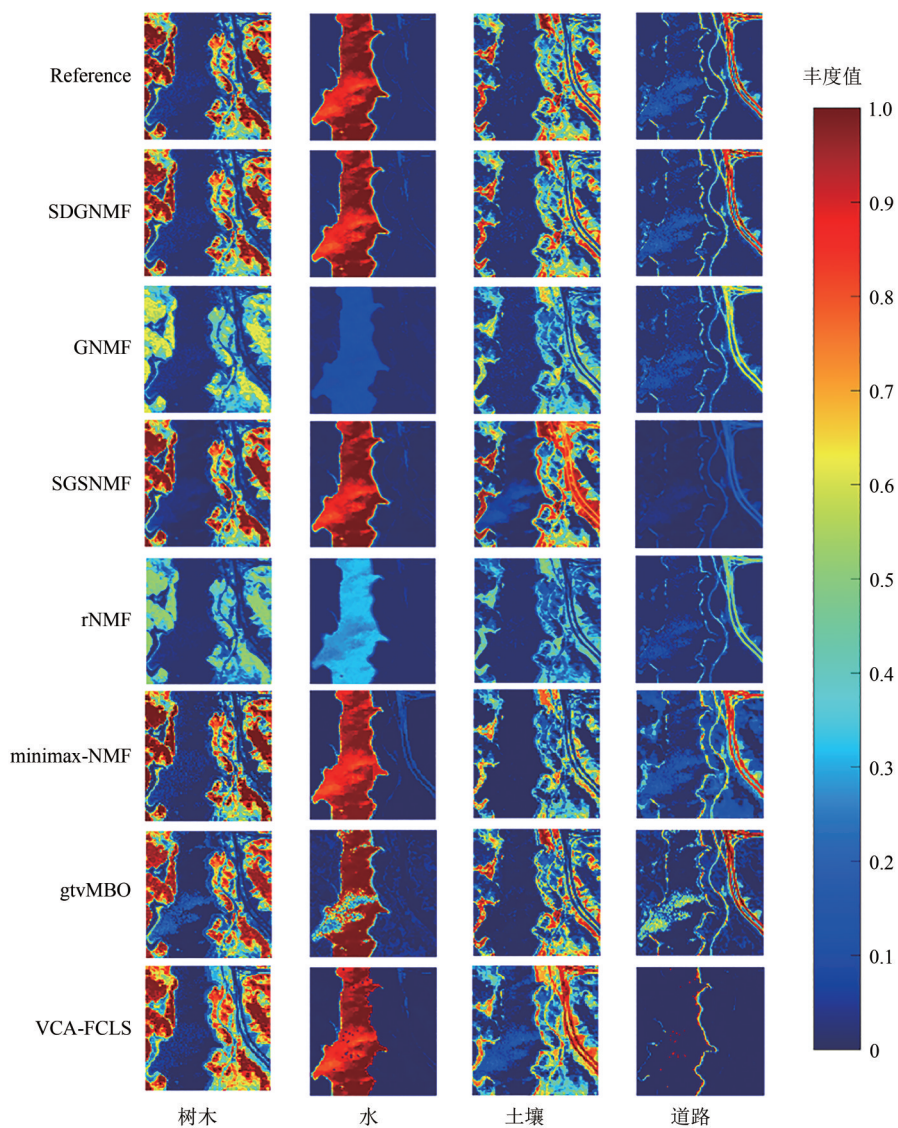


图10 各算法在Jasper数据集上的丰度对比
Fig. 10 Comparison of abundance maps of each algorithm on Jasper dataset

表 2 Jasper 数据集各算法的 SAD 对比值
Table 2 SAD ratio of algorithms in Jasper dataset

端元	SDGNMF	GNMF	SGSNMF	rNMF	minimaxNMF	gtvMBO	VCA-FCLS
树木	0.0035	0.0202	0.0081	0.0355	0.0121	<u>0.0043</u>	0.0060
水	<u>0.0136</u>	0.0932	0.0126	0.0188	0.0409	0.0257	0.0464
土壤	<u>0.0033</u>	0.0748	0.0068	0.0671	0.0183	0.0027	0.0144
道路	0.0320	<u>0.0329</u>	0.0674	0.0456	0.0550	0.0542	0.0341
平均值	0.0131	0.0553	0.0237	0.0418	0.0316	<u>0.0217</u>	0.0252

注：黑体数据为最优值，加下划线数据为次优值。

最后，表 3 给出了本文算法以及其他几种对比算法在两种真实数据集上的运行时间。尽管根据 3.1 节中理论分析可知，本文提出的 SDGNMF 相比于 EMD，一定程度上减少了时间复杂度。但从表 3 中可以看出 SDGNMF 相对于其他解混算法并不是最节省时间的算法。这是因为 SDGNMF 相对于

SGSNMF、rNMF、minimaxNMF 这 3 种算法，额外引入的图正则项对图的构造付出了很高的计算成本，而对于同样需要构造图的 GNMF 和 gtvMBO 算法，额外的缩放矩阵迭代求解使得算法迭代次数增大，也在一定程度上降低了计算效率。

表 3 真实数据集上各算法运行时间比较
Table 3 Runtime of algorithms on real datasets

数据集类型	SDGNMF	GNMF	SGSNMF	rNMF	minimaxNMF	gtvMBO	/s
Urban 数据集	363.77	185.9	74.27	31.84	93.31	198.78	
Jasper 数据集	71.4	9.92	13.1	3.29	24.16	32.14	

5 结 论

本文提出一种新的光谱解混模型，即 SDGNMF。在模拟数据集、Urban 数据集以及 Jasper 数据集上的实验结果均表明所提出方法的有效性和优越性。不同于传统解混模型，SDGNMF 模型能够有效克服噪声，并同时考虑特征间的相关性以及数据间的流形结构。与传统的欧氏距离、EMD 相比较，SDGNMF 模型采用 Sinkhorn 距离来度量重构误差具有如下优势：（1）相比于 EMD，Sinkhorn 距离可以更有效更快地分析高光谱图像中的大规模数据；（2）相比于欧氏距离，Sinkhorn 距离对高光谱数据中的噪声相对不敏感，同时对不同维度上的特征能够分别进行有效建模，特征间的相关性被充分挖掘利用。此外，鉴于 SDGNMF 模型的低维表示空间，图正则约束进一步增强了对数据几何流形结构的有效描述。

但是，本文所提出的算法仍然存在计算复杂度较高的问题，因此，后续工作将尝试融合丰度以及端元相关的先验信息于同一框架下，开发更

高效的光谱解混算法。

参考文献 (References)

Akhtar N and Mian A. 2017. RCMF: robust constrained matrix factorization for hyperspectral unmixing. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 55(6): 3354-3366 [DOI: 10.1109/TGRS.2017.2669991]

Bajorski P. 2011. Second moment linear dimensionality as an alternative to virtual dimensionality. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 49(2): 672-678 [DOI: 10.1109/TGRS.2010.2057434]

Bruckstein A M, Elad M and Zibulevsky M. 2008. On the uniqueness of nonnegative sparse solutions to underdetermined systems of equations. IEEE Transactions on Information Theory, 54(11): 4813-4820 [DOI: 10.1109/TIT.2008.929920]

Cuturi M. 2013. Sinkhorn distances: Lightspeed computation of optimal transport//Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems. Lake Tahoe: Curran Associates Inc.: 2292-2300

Cuturi M and Avis D. 2014. Ground metric learning. The Journal of Machine Learning Research, 15(1): 533-564

Feng X R, Li H C, Li J, Du Q, Plaza A and Emery W J. 2018. Hyper-

- spectral unmixing using sparsity-constrained deep nonnegative matrix factorization with total variation. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 56(10): 6245-6257 [DOI: 10.1109/TGRS.2018.2834567]
- Févotte C and Dobigeon N. 2015. Nonlinear hyperspectral unmixing with robust nonnegative matrix factorization. *IEEE Transactions on Image Processing*, 24(12): 4810-4819 [DOI: 10.1109/TIP.2015.2468177]
- Frogner C, Zhang C Y, Mobahi H, Araya-Polo M and Poggio T. 2015. Learning with a Wasserstein loss//*Proceedings of the 28th International Conference on Neural Information Processing Systems*. Montreal: MIT Press: 2053-2061.
- Gan Y Q, Liu W H, Feng X P, Yu T, Hu B L and Wen D S. 2019. A sparse constrained graph regularized nonnegative matrix factorization algorithm for hyperspectral unmixing. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 39(4): 1118-1127 (甘玉泉, 刘伟华, 冯向朋, 于涛, 胡炳樑, 汶德胜. 2019. 一种稀疏约束的图正则化非负矩阵光谱解混方法. *光谱学与光谱分析*, 39(4): 1118-1127) [DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)04-1118-10]
- Genevay A, Chizat L, Bach F, Cuturi M and Peyré G. 2019. Sample complexity of sinkhorn divergences//*Proceedings of the 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. Naha: PMLR: 1574-1583.
- Ghamisi P, Plaza J, Chen Y S, Li J and Plaza A J. 2017. Advanced spectral classifiers for hyperspectral images: a review. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine*, 5(1): 8-32 [DOI: 10.1109/MGRS.2016.2616418]
- Han H W, Wang G X, Wang M Z, Miao J Q, Guo S, Chen L, Zhang M Y and Guo K. 2020. Hyperspectral unmixing via nonconvex sparse and low-rank constraint. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 13: 5704-5718 [DOI: 10.1109/JSTARS.2020.3021520]
- He W, Zhang H Y and Zhang L P. 2016. Sparsity-regularized robust non-negative matrix factorization for hyperspectral unmixing. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 9(9): 4267-4279 [DOI: 10.1109/JSTARS.2016.2519498]
- Hendrix E M T, Garcia I, Plaza J, Martin G and Plaza A. 2012. A new minimum-volume enclosing algorithm for endmember identification and abundance estimation in hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 50(7): 2744-2757 [DOI: 10.1109/TGRS.2011.2174443]
- Heylen R, Parente M and Gader P. 2014. A review of nonlinear hyperspectral unmixing methods. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 7(6): 1844-1868. [DOI: 10.1109/JSTARS.2014.2320576]
- Khan M J, Khan H S, Yousaf A, Khurshid K and Abbas A. 2018. Modern trends in hyperspectral image analysis: a review. *IEEE Access*, 6: 14118-14129. [DOI: 10.1109/ACCESS.2018.2812999]
- Lan J H, Zou J L, Hao Y S, Zeng Y L, Zhang Y Z and Dong M W. 2018. Research progress on unmixing of hyperspectral remote sensing imagery. *Journal of Remote Sensing*, 22(1): 13-27 (蓝金辉, 邹金霖, 郝彦爽, 曾溢良, 张玉珍, 董铭巍. 2018. 高光谱遥感影像混合像元分解研究进展. *遥感学报*, 22(1): 13-27) [DOI: 10.11834/jrs.20186502]
- Lee D D and Seung H S. 1999. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. *Nature*, 401(6755): 788-791 [DOI: 10.1038/44565]
- Lee D D and Seung H S. 2000. Algorithms for non-negative matrix factorization//*Proceedings of the 13th International Conference on Neural Information Processing Systems*. Denver: MIT Press: 535-541
- Li C Z and Chen X H. 2020. Error approximation of hyperspectral unmixing via correntropy-induced metric. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 17(2): 282-286 [DOI: 10.1109/LGRS.2019.2920687]
- Li C Z, Gu Y G, Chen X H, Zhang Y and Ruan L J. 2021. Hyperspectral unmixing via latent multiheterogeneous subspace. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 59(1): 563-577 [DOI: 10.1109/TGRS.2020.2996249]
- Li J, Bioucas-Dias J M, Plaza A and Liu L. 2016. Robust collaborative nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 54(10): 6076-6090 [DOI: 10.1109/TGRS.2016.2580702]
- Liu X S, Xia W, Wang B and Zhang L M. 2011. An approach based on constrained nonnegative matrix factorization to unmix hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 49(2): 757-772 [DOI: 10.1109/TGRS.2010.2068053]
- Lu X Q, Wu H, Yuan Y, Yan P K and Li X L. 2013. Manifold regularized sparse NMF for hyperspectral unmixing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 51(5): 2815-2826 [DOI: 10.1109/TGRS.2012.2213825]
- Marrinan T and Gillis N. 2021. Hyperspectral unmixing with rare endmembers via minimax nonnegative matrix factorization//*Proceedings of the 28th European Signal Processing Conference*. Amsterdam: IEEE: 1015-1019 [DOI: 10.23919/Eusipco47968.2020.9287456]
- Mei S H, Bi Q Q, Ji J Y, Hou J H and Du Q. 2016. Spectral variation alleviation by low-rank matrix approximation for hyperspectral image analysis. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 13(6): 796-800 [DOI: 10.1109/LGRS.2016.2545341]
- Miao L D and Qi H R. 2007. Endmember extraction from highly mixed data using minimum volume constrained nonnegative matrix factorization. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 45(3): 765-777 [DOI: 10.1109/TGRS.2006.888466]
- Nascimento J M P and Dias J M B. 2005. Does independent component analysis play a role in unmixing hyperspectral data? *IEEE*

- Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 43(1): 175-187 [DOI: 10.1109/TGRS.2004.839806]
- Qian W, Hong B, Cai D, He X F and Li X L. 2016. Non-negative matrix factorization with sinkhorn distance//Proceedings of the 25th International Joint Conference on Artificial Intelligence. New York: AAAI Press: 1960-1966
- Qian Y T, Jia S, Zhou J and Robles-Kelly A. 2011. Hyperspectral unmixing via $L_{1/2}$ sparsity-constrained nonnegative matrix factorization. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 49(11): 4282-4297 [DOI: 10.1109/TGRS.2011.2144605]
- Qin J, Lee H, Chi J T, Drumetz L, Chanussot J, Lou Y F and Bertozzi A L. 2021. Blind hyperspectral unmixing based on graph total variation regularization. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 59(4): 3338-3351 [DOI: 10.1109/TGRS.2020.3020810]
- Rathnayake B, Ekanayake E M M B, Weerakoon K, Godaliyadda G M R I, Ekanayake M P B and Herath H M V R. 2020. Graph-based blind hyperspectral unmixing via nonnegative matrix factorization. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 58(9): 6391-6409 [DOI: 10.1109/TGRS.2020.2976799]
- Rubner Y, Tomasi C and Guibas L J. 2000. The earth mover's distance as a metric for image retrieval. International Journal of Computer Vision, 40(2): 99-121 [DOI: 10.1023/A:1026543900054]
- Sandler R and Lindenbaum M. 2011. Nonnegative matrix factorization with earth mover's distance metric for image analysis. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 33(8): 1590-1602 [DOI: 10.1109/TPAMI.2011.18]
- Tong Q X, Zhang B and Zhang L F. 2016. Current progress of hyperspectral remote sensing in China. Journal of Remote Sensing, 20(5): 689-707 (童庆禧, 张兵, 张立福. 2016. 中国高光谱遥感的前沿进展. 遥感学报, 20(5): 689-707) [DOI: 10.11834/jrs.20166264]
- Tsinos C G, Rontogiannis A A and Berberidis K. 2017. Distributed blind hyperspectral unmixing via joint sparsity and low-rank constrained non-negative matrix factorization. IEEE Transactions on Computational Imaging, 3(2): 160-174 [DOI: 10.1109/TCI.2017.2693967]
- Wang J and Chang C I. 2006. Applications of independent component analysis in endmember extraction and abundance quantification for hyperspectral imagery. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 44(9): 2601-2616 [DOI: 10.1109/TGRS.2006.874135]
- Wang N, Du B and Zhang L P. 2013. An endmember dissimilarity constrained non-negative matrix factorization method for hyperspectral unmixing. IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing, 6(2): 554-569 [DOI: 10.1109/JSTARS.2013.2242255]
- Wang W H, Qian Y T and Tang Y Y. 2016. Hypergraph-regularized sparse NMF for hyperspectral unmixing. IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing, 9(2): 681-694 [DOI: 10.1109/JSTARS.2015.2508448]
- Wang X Y, Zhong Y F, Zhang L P and Xu Y Y. 2017. Spatial group sparsity regularized nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 55(11): 6287-6304 [DOI: 10.1109/TGRS.2017.2724944]
- Yao J, Meng D Y, Zhao Q, Cao W F and Xu Z B. 2019. Nonconvex-sparsity and nonlocal-smoothness-based blind hyperspectral unmixing. IEEE Transactions on Image Processing, 28(6): 2991-3006 [DOI: 10.1109/TIP.2019.2893068]
- Yu Y and Sun W D. 2007. Minimum distance constrained non-negative matrix factorization for the endmember extraction of hyperspectral images//Proceedings of SPIE 6790, MIPPR 2007: Remote Sensing and GIS Data Processing and Applications; and Innovative Multispectral Technology and Applications. Wuhan: SPIE Press: 679015 [DOI: 10.1117/12.748379]
- Yuan Y, Fu M and Lu X Q. 2015. Substance dependence constrained sparse NMF for hyperspectral unmixing. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 53(6): 2975-2986 [DOI: 10.1109/TGRS.2014.2365953]
- Zhang B. 2016. Advancement of hyperspectral image processing and information extraction. Journal of Remote Sensing, 20(5): 1062-1090 (张兵. 2016. 高光谱图像处理与信息提取前沿. 遥感学报, 20(5): 1062-1090) [DOI: 10.11834/jrs.20166179]
- Zhang B, Chen Z C, Peng D L, Benediktsson J A, Liu B, Zou L, Li J and Plaza A. 2019. Remotely sensed big data: evolution in model development for information extraction [point of view]. Proceedings of the IEEE, 107(12): 2294-2301 [DOI: 10.1109/JPROC.2019.2948454]
- Zhang X R, Zhang J Y, Li C, Cheng C, Jiao L C and Zhou H Y. 2018. Hybrid unmixing based on adaptive region segmentation for hyperspectral imagery. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 56(7): 3861-3875 [DOI: 10.1109/TGRS.2018.2815044]
- Zhang Y M, Shu Z Q, Zhang J, You C Z, Weng Z H, Fan H H and Ye F Y. 2020. Dual graph regularized NMF with sinkhorn distance//Proceedings of the 19th International Symposium on Distributed Computing and Applications for Business Engineering and Science. Xuzhou: IEEE: 146-149 [DOI: 10.1109/DCABES50732.2020.00046]
- Zhi T X, Yang B, Chen Z and Wang B. 2017. Nonnegative matrix factorization with constraints on endmember and abundance for hyperspectral unmixing//Proceedings of 2017 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium. Fort Worth: IEEE: 1149-1152 [DOI: 10.1109/IGARSS.2017.8127161]

Efficient unmixing algorithm using Sinkhorn distance and graph regularization constraints

YANG Lulu, LI Chunzhi, CHEN Xiaohua, WANG Li

School of Information Engineering, Huzhou University, Huzhou 313000, China

Abstract: Hyperspectral remote sensing technology, as a new type of earth observation technology, provides rich spectral information of features and can identify and finely classify feature targets. A single pixel in hyperspectral images contains multiple features as limited by the spatial resolution. As a result, the mixed pixels become widespread. Ultimately, the accuracy of pixel-level applications is difficult to improve. Nonnegative Matrix Factorization (NMF), with its clear physical meaning, lays the foundation for the development of unsupervised linear spectral unmixing. Thus, traditional NMF often uses Euclidean distance as a similarity measure method. On the one hand, hyperspectral data have manifold distribution. Thus, simple linear measurement between two points cannot accurately represent the distance between data. This problem makes the sample internal features weakly correlated, which results in the NMF algorithm having an inaccurate prediction of the high-dimensional spatial inaccuracy prediction of the translational noise in high-dimensional space. On the other hand, the objective function constructed based on this method ignores the correlation characteristics in the image space, which inhibits the performance of the algorithm.

Method Considering the correlation between data manifolds and features, this study proposes a nonnegative matrix factorization unmixing algorithm based on Sinkhorn distance and graph regularization constraint (SDGNMF). On the basis of fully exploiting the advantages of EMD, the algorithm imposes entropy regularization constraint on EMD, improves EMD to Sinkhorn distance, and takes it as the standard of measuring error, which effectively reduces the computational complexity. In addition, EMD with entropy regularization constraint, that is, the representation of the model by Sinkhorn distance, can better model the relationship between different dimensional features and fully utilize the correlation of features. In particular, this study introduces the graph regularity constraint based on the Sinkhorn distance to further characterize the manifold structure of data. Compared with the unmixing model constructed by Euclidean distance, SDGNMF is relatively insensitive to the noise in hyperspectral data and can better extract the internal structural information of the data, which improves the unmixing accuracy.

Result An experiment was conducted on simulated and real datasets. Experimental results prove that the proposed algorithm proposed has achieved excellent subspace learning results and has good robustness. Compared with several other algorithms, SDGNMF can retain the similar structure after iteration. The correlation between the endmember features is also fully considered in SDGNMF. Thus, the similar substances distributed in adjacent regions can be separated. Therefore, SDGNMF can better display the details of local abundance and obtain a more realistic and perfect abundance map.

Conclusion In general, the proposed unmixing model can overcome noise and consider the correlation of features and data manifold structure simultaneously. Experimental results show that the proposed algorithm can effectively improve the unmixing accuracy of most hyperspectral remote sensing data, especially those with high feature correlation. However, the proposed algorithm has high computational complexity. In addition, the algorithm only considers the prior knowledge of abundance. Therefore, future work will focus on solving these problems.

Key words: hyperspectral unmixing, nonnegative matrix factorization (NMF), Sinkhorn distance, entropy regularization, graph regularization

Supported by National Natural Science Foundation of China (No. 61501184, 61771193); Zhejiang Key Research and Development & D Plan Project (No. 2020C02020, 2020C01097)