

## 基于流形学习的混合光谱解混分析

丁 玲<sup>1,2</sup>, 唐 婷<sup>1</sup>, 李宏益<sup>1</sup>

(1. 中国科学院遥感与数字地球研究所, 北京 100101;  
2. 中国科学院大学, 北京 100049)

**摘 要:** 光谱解混分析的重要研究内容是计算分析各地物类别成分在混合像素内所占的比例技术。文中以实测高光谱数据为研究对象, 针对高光谱数据具有高维数据、严重的光谱混合等特点, 基于流形学习中局部线性嵌入(LLE)算法的思想, 提出了一种约束最小乘方局部线性加权回归(CLS-LLWR)建模方法。通过 4 种典型地物的光谱吸收特征差异分析, 从它们不同比例组合下的实测混合光谱中选取了不同波段范围, 分别对该模型预测覆盖度信息能力进行了验证分析。最后, 将 CLS-LLWR 模型与主成分回归(PCR)和偏最小二乘回归(PLSR)模型, 通过计算预测标准误差(SE)进行了对比分析。结果表明, CLS-LLWR 模型有较好的预测能力。这为流形学习在高光谱遥感图像信息提取方面进行了有意的探索。

**关键词:** 光谱解混; 流形学习; 局部线性加权回归; 覆盖度

**中图分类号:** TP79 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2276(2013)09-2421-05

## Analysis on spectral unmixing based on manifold learning

Ding Ling<sup>1,2</sup>, Tang Ping<sup>1</sup>, Li Hongyi<sup>1</sup>

(1. Institute of Remote Sensing and Digital Earth, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China;  
2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

**Abstract:** The main study on spectral unmixing is to develop a regression between mixed spectral features of main land-cover types and their responding fractional cover. Studying on in situ spectral reflectance data, based on one of the best known algorithms of manifold learning, locally linear embedding (LLE), a new modeling method named constrained least squares locally linear weighted regression (CLS-LLWR) was proposed. Spectral reflectance of four kinds of the mixed land-cover types in different percentages was measured and preliminarily analyzed. The model CLS-LLWR was verified by predicting fractional cover of main land-cover types. Compared with principal component regression (PCR) and partial least squares regression (PLSR), through comparison and analysis of the standard error of prediction(SE), the result shows that the CLS-LLWR has better predictability. This study indicates that manifold study has the potential for the information extraction of mixed land cover types in hyperspectral image.

**Key words:** spectral unmixing; manifold learning; locally linear weighted regression; fractional cover

收稿日期: 2013-01-04; 修订日期: 2013-02-15

基金项目: 国家 863 计划(2009AA122002)

作者简介: 丁玲(1983-), 女, 博士生, 主要从事遥感图像处理方面的研究。Email: xiaodingdj@126.com

导师简介: 唐婷(1968-), 女, 博士生导师, 主要从事遥感图像处理与医学图像处理方面的研究。Email: tangping@irsa.ac.cn

## 0 引言

混合像元分解问题是遥感科学研究中的热点问题<sup>[1]</sup>,从混合像元中分解得到地物光谱信号(端元)及其空间分布(覆盖度)估计是遥感反演的重要内容。目前,国内外已发展了不少光谱解混算法,主要包括线性混合模型、神经网络、模糊模型等<sup>[2-3]</sup>,并在很多领域得到成功的应用<sup>[4]</sup>。在这些模型中,线性光谱混合模型(LSMM)通过一组特定的光谱向量和相应的混合比例来描述图像中的光谱混合情况。LSMM 具有构模简单,易于处理,物理意义明确等优点,得到了广泛应用<sup>[5]</sup>。不足的是,传统 LSMM 属于全局线性关系,求解过程中采用迭代方式,复杂度较高。并且,LSMM 中采用固定的光谱端元进行光谱解混,解混时引入了无关量,降低了算法的解混效果。

Roweis, Tenenbaum 等<sup>[6-7]</sup>基于流形的思想提出了流形学习新的机器学习算法,基于这样一种假设:从全局看,处于同一流形结构上的点属于同一类。由于这些流形算法用来分析高维、复杂数据方面具有独特作用,从而被广泛应用到机器学习领域。同时,为人们处理高维度复杂的数据提供了新的研究方向。

文中以实测高光谱数据为研究对象,首先探讨了流形学习在高光谱数据分析与建模中的应用。在简述了流形学习基本理论的基础上,依据流形学习中代表算法,即局部线性嵌入(LLE)的思想,提取出了一种约束最小平方局部线性加权回归(CLS-LLWR)建模方法,运用约束最小乘方法得出权重系数,从而建立混合光谱和端元覆盖度之间的回归模型。最后,利用野外便携式光谱仪,测量了复合地物的混合光谱,利用同步拍摄的照片提取地物的覆盖度,同时,依据光谱特征分析与选择,对该模型进行了验证和说明。

## 1 理论

### 1.1 流形和流形学习

流形是微分几何和拓扑学中的概念。一个流形简单说法就是一个拓扑空间,它在局部上是欧氏的。有了对流形的定义,就可以形式化地概括流形学习这一维数约简过程。流形学习就是要根据有限的离

散样本学习和发现嵌入在高维空间中的低维光滑流形,揭示隐藏在高维数据集中的内在低维结构,重构并进行非线性降维或者可视化。基于流形学习的思想人们提出了许多流形学习算法,Roweis S.T 和 Saul L.K 在 2000 年提出的局部线性嵌入是其中典型的算法之一,他们认为在局部意义下,数据的结构是线性的,或者说局部意义下的点在一个超平面。局部线性嵌入算法思想简单,只定义了唯一的参数,即邻域数,并且求解过程简单。其算法步骤如图 1 所示。

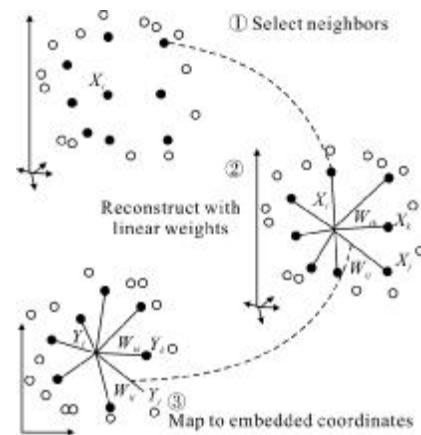


图 1 局部线性嵌入算法步骤

Fig.1 Steps of locally linear embedding

### 1.2 高光谱数据流形特征分析

高光谱数据量很大,存在数据冗余和维数灾难问题,并且通常具有较严重的光谱混合。对于高光谱数据,尽管波段数比较多,对于不同单一地物光谱来说,由于其结构和组成成分不同,具有不同的光谱响应特征;而对于由不同光谱特征的地物或地物成分组成的混合像元,光谱特征主要取决于所混合的成分及相对含量(所覆盖的相对面积)。同时,根据流形学习的基本思想,在流形意义下,处于同一流形上样本光谱属于同一类别。依据 LLE 算法假设前提:处在同一流形上观测数据集位于或近似位于高维空间中的低维嵌入流形上,所嵌入的低维流形是保持原数据局部邻域内各点是线性的,特别地,假定观测的高维空间中的每一个点可以使用它的邻近点的加权线性组合来表示。因此可以认为,在高维空间中,具有不同比例组合下复合地物的混合光谱数据集所嵌入的低维流形局部邻域内各点是局部线性的。

### 1.3 约束最小乘方局部加权回归模型

局部加权回归<sup>[9]</sup>主要利用局部观测数据对欲拟合点进行多项式加权拟合。本模型基于混合光谱的局部信息建立回归模型,并用于预测混合光谱的未知覆盖度信息。

假设混合光谱数据集为 $(X_i, Y_i), i=1, 2, \dots, N$ , 其中 $X_i \in R^D$ 是 $D$ 维的光谱数据, $Y_i$ 是对应的端元覆盖度。因此,每一个光谱数据都是 $D$ 维空间中的一个点。又设待预测混合光谱 $X_s \in R^D$ , 其对应的端元覆盖度为 $Y_s$ 。在 $D$ 维空间内,设 $X_s$ 点的最邻近点 $X_t (t=1, 2, \dots, K)$ ,  $K$ 为邻近点的个数。求取 $X_s$ 与各个最邻近点 $X_t$ 的相似度 $S(X_s, X_t)$ , 求得相似度一般常用欧式距离。通过定义一个权值误差函数 $W_s(S(X_s, X_t))$ , 得到 $X_s$ 和 $X_t$ 之间的权重系数 $w_s^t$ 。最后,待预测混合光谱的 $X_s$ 中端元覆盖度 $Y_s$ 可以用 $K$ 个最临近点的端元覆盖度 $Y_t$ 的线性组合估计:

$$Y_s = \sum_{i=1}^K w_s^t Y_t \quad (1)$$

由以上的分析可以看出,权值误差函数的选择直接影响了模型的预测能力。文中结合高光谱数据的特点和LLE算法思想,定义一个权值误差函数如下式所示:

$$\min \varepsilon(W_s) = \left\| X_s - \sum_{i=1}^K w_s^t X_t \right\|^2 \quad (2)$$

$$\text{s.t. } \sum_{i=1}^K w_s^t = 1 \quad (3)$$

其中, $\|\cdot\|$ 是欧式范数。显然,对于待测点的权值误差函数的值越小,说明局部权值矩阵重建得越好,也就说明 $X_s$ 越接近其邻近点的线性组合的点。最优化问题公式(2)采用最小乘方方法求解。同时,约束条件保证了权值系数对于预测点和它的邻近点具有平移不变性。当 $\varepsilon(W_s)$ 取最小时的 $W_s$ 记为 $W_s^*$ 。

由以上分析可知,对于混合光谱样本集 $(X_i, Y_i)$ 和预测样本 $X_s$ , 约束最小乘方局部加权回归(CLS-LLWR)模型可以归纳为以下3步:

- (1) 计算预测样本 $X_s$ 的 $K$ 个最邻近点集合;
- (2) 依据LLE原理,通过最小乘方求解公式(2),计算 $X_s$ 与 $K$ 个最邻近点局部权重系数矩阵 $W_s^*$ ;
- (3) 用公式(1)预测待测混合光谱的端元覆盖度 $Y_s$ 。

其中,特别指出的是邻近数 $K$ 是模型唯一的参数。其邻近点的选择、相似度的求得采用针对地物光谱波形相似性的光谱角度量指标。

## 2 实验

### 2.1 实验设计和数据获取

实验光谱测量采用美国SVC HR-1024便携式地物光谱仪,其光谱范围350~2500 nm,通道数1024。选取绿色植被(PV)、干枯植被(NPV)、土壤(soil)、岩石(rock)4种典型地物复合地物进行了混合光谱测量,总共得到有效样本30个。

测量4种典型地物的平均光谱作为端元光谱。具体测量方法如图2所示,混合光谱的测量仪视场角为 $25^\circ$ ,视场范围为半径为33 cm的圆,探头的高度为1.5 m。为了保证准确测量,根据设定的视场角,每次测量时在地面放置66 cm×66 cm铁框确定测量范围,同时,用标杆标定探头的高度。每次测量光谱之后,照相机垂直拍摄铁框,利用Adobe Photoshop剪取铁框内视场范围大小,利用ENVI遥感图像处理软件进行K-mean非监督分类,再利用IDL计算视场内4种地物的覆盖度。

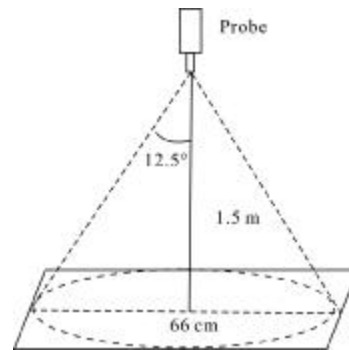


图2 光谱测量示意图

Fig.2 Illustration of spectral measurement

### 2.2 数据处理与分析

实验测得有效混合光谱样本30个,从中随机选择20个样本作为训练样本,10个样本作为验证样本,评价模型精度。由于SVC HR-1024光谱仪的探测器在波长1000 nm和1850 nm附近材料变化,产生波段重叠。因此,对于测量的光谱数据,利用光谱仪自带软件消除重叠波段;波长大于2400 nm的波段,由于信噪比较低而舍弃。

绿色植被具有明显的光谱特征,不同于其他典型地物(见图 3),在可见光波段内,在中心波长 450 nm 和 650 nm 的两个叶绿素吸收带之间,由于吸收作用较小,在 540 nm 附近形成一个反射峰。在可见光波段和近红外波段之间,即 760 nm 附近,形成明显的“红边”效应。干枯植被由于含有木质素、纤维素等干物质,在 2100 nm、2300 nm 附近形成较强的吸收特征。土壤由于含水量较高,在 1450 nm、1950 nm 附近有明显的吸收峰值。由于侵蚀的岩石含有丰富的土壤粘粒,在 2200 nm 附近形成双吸收峰,同时,在 2330 nm 附近形成明显的碳酸盐物质吸收特征。

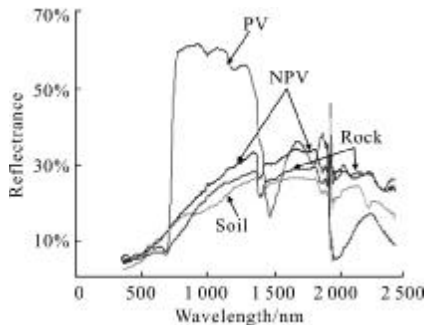


图 3 PV、NPV、Soil、Rock 的光谱反射率曲线

Fig.3 Spectral reflectance of PV, NPV, Soil and Rock

通常情况下,某一地物所占覆盖度越高,则混合光谱越可能接近该地物的光谱,其该地物的光谱吸收特征越明显。经过以上 4 种地物光谱变量特征分析,笔者针对不同地物光谱吸收特征差异,在混合光谱波段中选取了不同波段范围用来对模型计算验证。对于绿色植被覆盖度的预测,选择的波段范围为 515.3~565.1 nm 和 734.8~785.3 nm,干枯植被覆盖度的预测,选取的波段范围为 2062.1~2138.1 nm 和 2226.7~2340.0、2226.7~2340.0 nm。土壤覆盖度的预测,选取的波段范围为 1400.2~1500.8 nm 和 1901.5~2000.4 nm。岩石覆盖度的预测,选取的波段范围为 2166.4~2232.2 nm 和 2301.3~2359.1 nm。

### 3 结果分析

依据上述分析,分别计算了不同波段范围下预测模型与相应地物的覆盖度关系,并用预测的标准误差(SE)对文中模型的预测能力进行评价分析。对于 CLS-LLWR,邻域数  $K$  的大小采用残差方法<sup>[9]</sup>来选择,求得  $K=10$ ;同时,再分别采用了主成分回归

(PCR)和偏最小二乘回归(PLSR)<sup>[10]</sup>定量模型进行了比较分析,实验中对于 PCR 与 PLSR,分别取 10 个主成分数建立回归模型进行预测。

图 4 给出了邻域数  $K=10$  下预测的结果,从图 4 中预测的标准误差 SE 的值可以看出,文中所建的 CLS-LLWR 模型对地物的覆盖度的预测能力较好,从

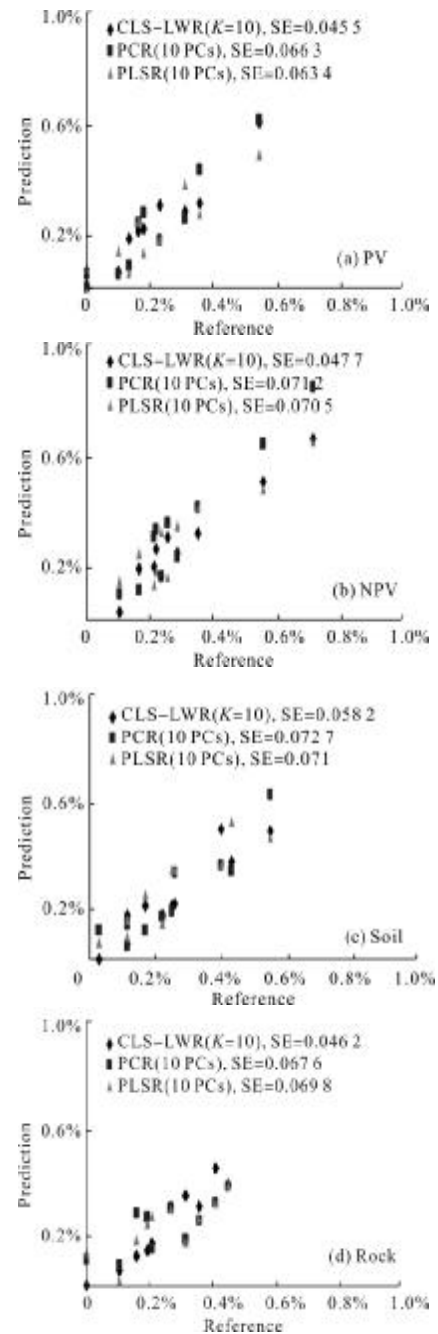


图 4 CLS-LLWR、PCR、PLSR 预测 PV、NPV、Soil、Rock 的覆盖度对比

Fig.4 Comparisons of prediction results with CLS-LLWR, PCR and PLSR on fractional cover of PV, NPV, Soil and Rock

整体看,CLS-LLWR的预测结果优于PCR与PLSR,特别是绿色植被,CLS-LLWR预测的标准误差SE为0.045 5,其可决系数 $R^2$ 达到0.941 1,主要因为绿色植被的特殊光谱吸收特征曲线决定了这些模型,可以很好反映植被信息。对于NPV和Rock,用来描述各自光谱特征波段范围下的CLS-LLWR模型的预测标准误差也相对较低,其可决系数 $R^2$ 分别达到0.937 6和0.917 6,可以利用这些波段建立模型估算它们各自覆盖度。对于Soil,选取影响土壤光谱特征的因素是含水量,在用来描述土壤中水份光谱吸收特征波段范围中,植被也形成了明显的强吸峰,导致了利用水份吸收特征波段预测裸土率的困难。因而,CLS-LLWR模型预测土壤覆盖度的标准误差相对较高为0.058 2,可决系数 $R^2$ 为0.886。相比之下,可以用来提供一定的土壤裸露率信息。

#### 4 结论

流形学习作为一种新的机器学习方法,旨在挖掘已知高维复杂数据的内在关系和规则,提取重要的特征信息。文中探讨了流形学习算法在高光谱数据中的应用,同时,基于流形学习中局部线性嵌入(LLE)算法的想法,提出了约束最小乘方局部加权回归(CLS-LLWR)模型。通过实测高光谱数据和已知的端元地物覆盖度,在分析典型地物的光谱特征差异的基础上,通过不同波段范围的选择,使用该模型预测了混合光谱中端元覆盖度,同时也进行了验证和比较,文中的模型有很好的预测典型地物覆盖度能力,特别是对绿色植被覆盖度预测能力相对较好。这成为流形学习在高光谱数据分析应用中的有益探索。下一步的工作将进一步对地物光谱变量进行分析,改善预测模型,将其应用到高光谱遥感影像地表覆盖信息提取中。

#### 参考文献:

- [1] Tong Qingxi, Zhang Bing, Zheng Lanfen. Hyperspectral Remote Sensing Principle, Technique and Application [M]. Beijing: Higher Education Press, 2006. (in Chinese)
- [2] Atkinson P M, Cutler M E J, Lewis H. Mapping sub-pixel proportional landcover with AVHRR imagery [J]. International Journal of Remote Sensing, 1997, 18 (4): 917-935.
- [3] Marsh S E, Switzer P, Kowalik W S. Resolving the percentage of component terrains within single resolution elements [J]. Photogrammetric Engineering and Remote Sensing, 1980, 46(8): 1079-1086.
- [4] Xu Jun, Hu Bingliang, Feng Dazheng, et al. Decoding method for the spectral mixing pixels in Hadamard transform spectral imager [J]. Infrared and Laser Engineering, 2012, 41(6): 1528-1531. (in Chinese)  
徐君, 胡炳樑, 冯大政, 等. 哈达玛变换成像光谱仪中光谱混合像素点的解码方法 [J]. 红外与激光工程, 2012, 41(6): 1528-1531
- [5] Wang Qunming, Wang Liguang, Liu Danfeng, et al. Sub-pixel mapping for land class with linear features using least square support vector machine [J]. Infrared and Laser Engineering, 2012, 41(6): 1670-1675. (in English)  
王群明, 王立国, 刘丹丹, 等. 基于最小二乘支持向量机的线性特征地物亚像元定位 [J]. 红外与激光工程, 2012, 41(6): 1670-1675.
- [6] Roweis S, Saul L. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding [J]. Science, 2000, 290: 2323-2326.
- [7] Tenenbaum J B, Silva V D, Langford J C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. Science [J]. Science, 2000, 290: 2319-2322.
- [8] William S Cleveland, Susan J Devlin. Locally weighted regression: An approach to regression analysis by local fitting [J]. Journal of the American Statistical Association, 1988, 83(403): 596-610.
- [9] Zhang Zhenyue, Zha Hongyuan. Principal manifolds and nonlinear dimensionality reduction Via tangent space alignment [J]. SIAM Journal of Scientific Computing, 2004, 26(1): 313-338.
- [10] Xu Lu, Shao Xueguang. Methods of Chemometrics [M]. Beijing: Science Press, 2004.  
许祿, 邵学广. 化学计量学方法 [M]. 北京: 科学出版社, 2004.