



## 比較單體基底的高光譜影像端元萃取方法

吳至誠<sup>1\*</sup> 郭純吟<sup>2</sup> 李國雲<sup>3</sup>

1. 國立宜蘭大學土木系副教授
2. 國立宜蘭大學土木系研究生
3. 國立宜蘭大學綠色科技學程碩士在職專班研究生

### 摘要

雖然高光譜影像具有大量的資訊，但影像受空間解析度與地物分布之影響，它存在著混合像元。本文僅針對兩種主要的單體基底(simplicx-based)端元萃取方法(內部最大單體法與最小體積包圍單體法)，於高光譜影像中萃取純端元(單一物質)，並評估其性能。首先參考地面真實地圖於高光譜影像中選取 10 種不同種類的端元；其次於高光譜影像中以兩種單體基底端元萃取方法萃取出七種不同端元位置；接著以完全約束最小二乘法將萃取出之端元製作成不同端元之豐度圖，並比較各豐度圖與地面地質圖以確認各端元名稱；最後以光譜角製圖計算出各萃取出之端元與地面參考地物間之夾角，並分析兩種單體基底端元萃取方法之效能。實驗結果顯示內部最大單體法比較能找到較多不同類別的端元，但其計算非常費時。

**關鍵詞：**高光譜影像、光譜分解、端元萃取

**\*通訊作者 E-mail :** wujc@niu.edu.tw



# Comparison of Simplex-based Endmember Extraction Algorithms for Hyperspectral Image

Jee-cheng Wu<sup>1\*</sup>, Chun-yin Guo<sup>2</sup>, Kuo-yun Li<sup>3</sup>

1. Associate Professor, Department of Civil Engineering, College of Engineering, National Ilan University
2. Graduate Student, Department of Civil Engineering, National Ilan University
3. Graduate Student, Green Technology Program, College of Engineering, National Ilan University

## ABSTRACT

In hyperspectral image, there exist mixed pixels because of the image spatial resolution and ground object distribution. In this paper, we focus on only two major simplex-based endmember extraction methods, i.e. N-findr (or N-FINDR) and Minimum Volume Enclosing Simplex (MVES). We aim at extracting endmember (single material) from hyperspectral image and assessing the performance of the two methods with the following four steps. Firstly ten endmembers from the ground geological map are selected. Then, the two simplex-based endmember extraction methods are used to find out the location of the seven endmembers in hyperspectral image. Thirdly the extracted endmembers using fully constrained least squares method are applied to generate abundance maps. Besides, the abundance maps are compared with the ground geological map to confirm each endmember of the name. Finally we compute spectral angle mapper (SAM) between the extracted endmember and the ground reference endmember to evaluate the performance of the two simplex-based endmember extraction methods. The experimental results showed that more endmembers can be extracted with N-FINDR than with MVES, but N-FINDR calculation is very time-consuming.

**Keywords:** Hyperspectral image, Spectral unmixing, Endmember extraction.

\*Corresponding author E-mail: [wujc@niu.edu.tw](mailto:wujc@niu.edu.tw)

## 一、前言

高光譜遙感探測的影像其波段數不斷增加，除資料量增大外，也提供了更豐富的地物光譜訊息。然而，由於傳感器空間解析度的限制與複雜多樣化的地物，使得遙測影像之各像元普遍存在著包含了許多不同類型的地物，此像元稱為混合像元 (mixed pixel)，而組成這些混合像元的純淨地物被稱為端元 (endmember)。

在傳統的遙測影像執行分類時，通常係將影像上的每個像元都被視為純像元；然而將某一混合像元歸為某一單類後所製作之分類圖，除導致分類誤差外，也不能反映出地物的真實覆蓋狀況。在高光譜遙測影像當中，端元是組成混合像元中各種單一的純淨地物，而混合像元之光譜特徵則係包含多種的地物光譜疊加的結果。因此在混合光譜分解 (spectral unmixing) 過程中，選擇端元是很重要的，因為它會直接影響混合像元分解的精度。如果端元選擇數量太少，就不能涵蓋所有研究區內的端元類型，且會把漏掉的端元類型錯分為其他端元類型；如果端元選擇數量太多，端元之間的相關性就會增強，這使得分解模型對端元選擇非常敏感，容易把相關性強的端元混淆，影響分解模型精度的精確性 (杜培軍等，2012)。

目前已有不少混合像元分解的文獻被提出來(Wu and Tsuei, 2013)，主要分成三類。(一) 訊號子空間辨識 (Signal subspace identification) 的端元萃取方法，諸如：自動目標產生過程法 (Automatic Target Generation Process, ATGP) (Ren and Chang, 2003)、VCA (Bioucas-Dias and Nascimento, 2006)。(二) 單體法的端元萃取方法，諸如：內部最大單體法 (N-findr Algorithm, N-FINDR) (Winter, 1999)、最小體積包圍單體法 (Minimum Volume Enclosing Simplex, MVES) (Chan 等人, 2009)。(三) 其他方法，諸如：像元純淨指數法 (Pixel Purity Index Algorithm, PPI) (ENVI, 2008) 等。本研究主要探討於高光譜影像中，採用兩種單體基底 (simplex-based) 端元萃取方法 (即 N-FINDR 與 MVES) 找尋高光譜影像中存在之端元位置，並依據此兩種端元萃取方法所找尋出之端元與已知地物類別計算光譜角製圖 (spectral angle mapper, SAM) 與豐度圖 (abundance map)，以進行相似性比對及評估兩種單體基底端元萃取方法之優劣性。

## 二、高光譜影像之單體基底端元萃取方法

高光譜混解(hyperspectral unmixin) 可採用無雜訊之線性混合模式 (linear mixing model)表示，如(1)式。

$$Y = MA \quad (1)$$

此處  $Y$  係指  $n$  個高光譜影像之像元觀測值； $M$  是具  $p$  個端元 (即純物質)  $L$ -維度之光譜特徵 (spectral signature) 矩陣； $A$  是具  $p$  個端元且含  $n$  個像元之豐度比向量矩陣，此外須滿足  $A \geq 0$  與  $A^T 1_p = 1_n$  (Keshava and Mustard, 2002)。

高光譜影像全部像素在高光譜資料空間中可形成一個凸多面體，每個光譜端元則對應於凸多面體的一個點，在這種情況之下，選擇高光譜資料空間所形成的凸多面體的頂點來作為端元，而此凸多面體的體積計算即以單體法表示。

### 2-1 內部最大單體法 (N-FINDR)

Winter (1999)提出的 N-FINDR 演算法是單形體 (Simplex) 演算法當中較為典型的一種演算法，它係假定高光譜影像中存在純端元，因此可由高光譜影像中直接萃取出端元之影像位置。如下圖 1 所示，可將 N-FINDR 演算法應用在選擇出的波段，以較佳的線性組合來代表全部像元的集合。

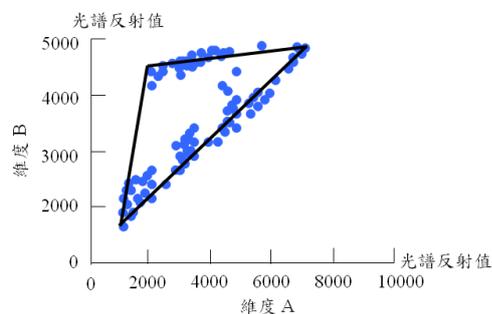


圖 1. 二維波段的凸多面體

即當  $p$  端元之影像光譜值經過(2)式及(3)式之計算，可求出  $p$  維空間之單形體體積(即  $V(E)$ )。

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ e_1 & e_2 & \dots & e_p \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$V(E) = \frac{1}{(p-1)!} \text{abs}(|E|) \quad (3)$$

(2)及(3)式中： $e_i$  為表徵第  $i$  個端元的列向量； $V$  則是由  $p$  個端元所構成的單形體的體積。

此演算法係將影像中的所有像元之特徵向量以疊代方式代入(3)式進行單形體的體積運算，當所獲得之  $V$  是最大時，就表示找到了代表  $p$  個端元所在的像元位置；改良的 N-findr 方法可參考 Xiong 等人(2011)所發表的文獻。通常將 N-findr 方法所萃取出之端元，採用完全約束的最小二乘法(fully constrained least squares, FCLS)進行像元混解以求得各端元之豐度圖。

## 2-2 最小體積包圍單體法 (Minimum Volume Enclosing Simplex, MVES)

MVES 無需假定高光譜影像中存在純端元，它計算最小體積的概念係基於單體的體積( $S_M$ )是按比例於行列式的絕對值(即  $|\det M|$ )，此  $M$  是凸包(convex hull)的頂點即光譜特徵。令  $Q = M^{-1}$ ，MVES 方法根據(4)式準則，它採用了一種不同的優化策略，但不考慮約束  $Y^T Q^T 1_p = 1_n$  到  $Q^T 1_p = q$  的簡化。此約束簡化是很重要的，因為實際上  $Y^T Q^T 1_p = 1_n$  是一組  $n$  個純量約束，而  $Q^T 1_p = q$  是一組  $p$  個純量約束，並且通常  $n$  比  $p$  大非常多。基於輔因子擴展的行列式之循環方法，對於每個中間的優化問題採用等量於一對線性規劃求解，更多細節可參考 Chan 等人(2009)。

$$\max_Q |\det Q|, \text{ 目標函數: } QY \geq 0 \text{ 且 } Y^T Q^T 1_p = 1_n \quad (4)$$

在此  $QY \geq 0$  代表以矩陣元素為單元之不等式，以軟約束(5)式容納雜訊與分離點。

$$\max_Q (\log |\det Q| - \lambda \cdot 1_p^T \text{hinge}(QY) 1_n), \text{ 目標函數: } Q^T 1_p = q \quad (5)$$

此  $\lambda$  是規則化參數； $\text{hinge}(\cdot)$  為單元不等式且  $\text{hinge}(x) = \max\{-x, 0\}$ 。

### 三、實驗方法與成果分析

#### 3-1 實驗測試區資料

測試區係 1997 年於美國內華達州 Cuprite 地區所拍攝之 AVIRIS (Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer) 高光譜影像，此測試區包括不同礦物，具有 224 波段，光譜區間 0.4-2.5  $\mu\text{m}$ ，空間解析度為 20 公尺。本研究截取部份影像具有 350\*350 像元，選取光譜區間 2008-2467nm (即波段數：174-220，共 47 個波段) 進行礦物研究，如圖 2 所示。地面參考資料 cuprite95.tgif.2.2um\_map.gif 由 [http://speclab.cr.usgs.gov/cuprite95.tgif.2.2um\\_map.gif](http://speclab.cr.usgs.gov/cuprite95.tgif.2.2um_map.gif) 網址下載，經截取所對應之測試區，如圖 3 所示。



圖 2. Cuprite 地區之 RGB 影像(波長 2008 nm)

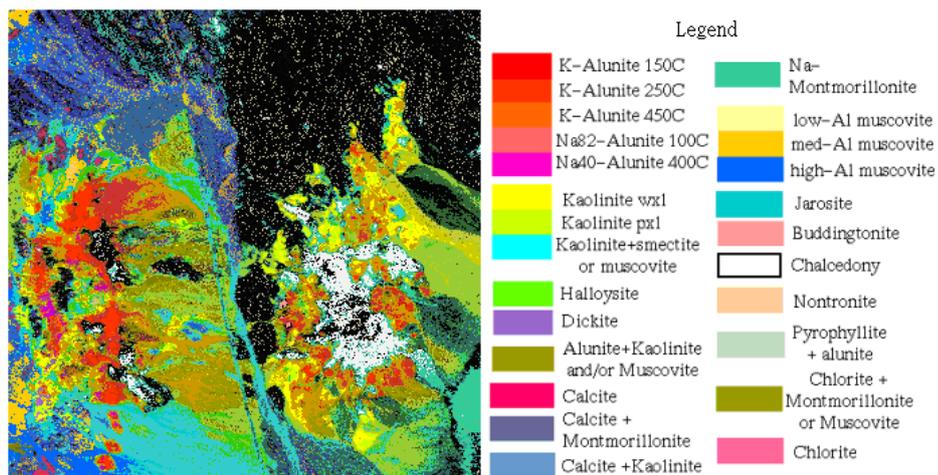


圖 3. Cuprite 影像之地面參考資料

### 3-2 實驗步驟

1. 依據地面參考資料設定高光譜影像中已知的 10 種端元種類及其像元坐標：Alunite (62,161)、Buddingtonite (209,234)、Calcite (30,347)、Kaolinite (22,298)、Muscovite (33,271)、Chalcedony (247,201)、Dickite (24,293)、Halloysite (175,324)、Jarosite (19,25) 與 Montmorillonite (347,303)；前五種為純端元種類與像元坐標，後五種為比例較高之端元種類與像元坐標。
2. 本文採用 NWHFC (Chang and Du, 2004) 與 Hysime (Bioucas-Dias and Nascimento, 2008) 方法計算出此研究區內之高光譜影像具有 7 種端元；因此以兩種單體基底端元萃取方法 (N-FINDR 及 MVES) 於高光譜影像中尋找 7 種端元種類與位置。
3. N-FINDR 可直接由高光譜影像中萃取出端元之像元位置；但是 MVES 無法直接由高光譜影像中萃取出端元之像元位置。因此由 MVES 所萃取出之端元須先採用完全約束的最小二乘法計算出各種端元之豐度圖，再從豐度圖中比較地面參考資料以確定端元類別，並由各豐度圖中找尋最大強度 (intensity) 之像元，此像元即稱該豐度圖之比例較高之 (相似) 端元。
4. 計算已知的端元光譜特徵值與萃取出之端元光譜特徵值間的光譜角製圖，以分析其相似性及比較兩種端元萃取方法之性能。光譜角製圖係計算出兩光譜向量間的夾角，夾角越小則光譜越相似，如圖 4。

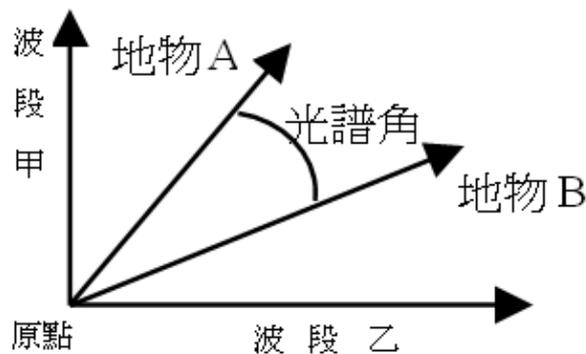


圖 4. 二維空間的光譜角製圖

### 3-3 實驗成果

1. N-FINDR 直接由高光譜影像中萃取出之端元光譜特徵值與已知的端元光譜特徵值之光譜角製圖，如表 1 所示（已知的 10 種（礦物）端元種類以英文字母前三個字表示）。此外，萃取出之端元光譜特徵值經完全約束的最小二乘法計算出各種端元之豐度圖，如圖 5 所示。

表 1：N-FINDR 萃取出之 7 種端元與已知的 10 種端元其光譜特徵之光譜角製圖

端元 No.	Alu	Bud	Cal	Kao	Mus	Cha	Dic	Hal	Jar	Mon
1	8.82	7.24	3.60	10.75	5.94	4.10	7.75	4.82	3.58	3.56
2	9.57	4.24	4.83	12.37	6.71	3.08	8.90	6.40	3.75	<b>2.53</b>
3	8.22	<b>0.81</b>	7.01	13.70	8.83	5.90	10.13	7.66	6.10	4.79
4	10.13	7.81	<b>1.64</b>	10.55	6.14	3.38	7.63	5.64	3.47	4.20
5	6.95	9.70	6.58	4.72	2.56	5.87	<b>1.97</b>	2.72	5.25	6.62
6	10.17	3.21	5.82	14.10	8.80	4.90	10.53	8.02	5.31	3.94
7	8.50	9.96	5.51	6.38	<b>2.35</b>	5.19	4.10	2.60	4.43	5.91

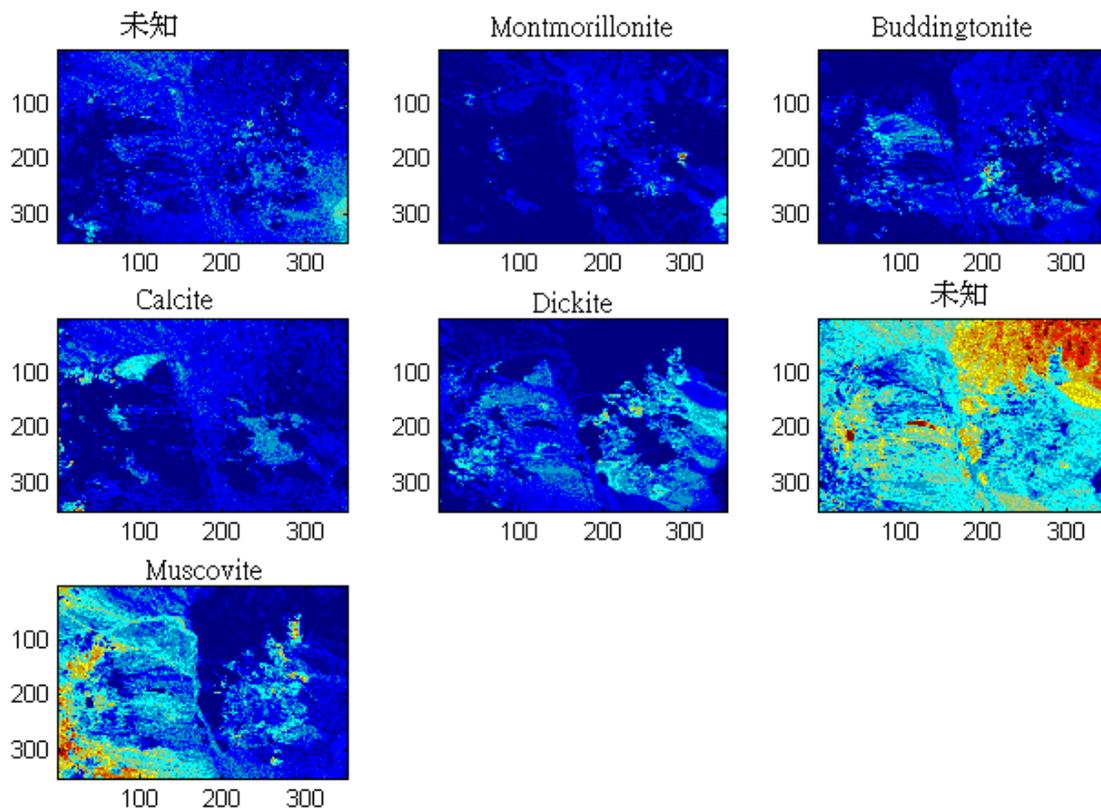


圖 5. N-FINDR 萃取出之端元以完全約束的最小二乘法產生的豐度圖

2. MVES 所萃取出之端元光譜特徵值，經完全約束的最小二乘法計算出各種端元之豐度圖，如圖 6 所示。再由各豐度圖比較地面參考資料並設定萃取出之端元類別，並由各豐度圖中找尋最大強度之像元，即該豐度圖之端元。計算此萃取出之端元光譜特徵值與已知的端元光譜特徵值之光譜角製圖，如表 2 所示。

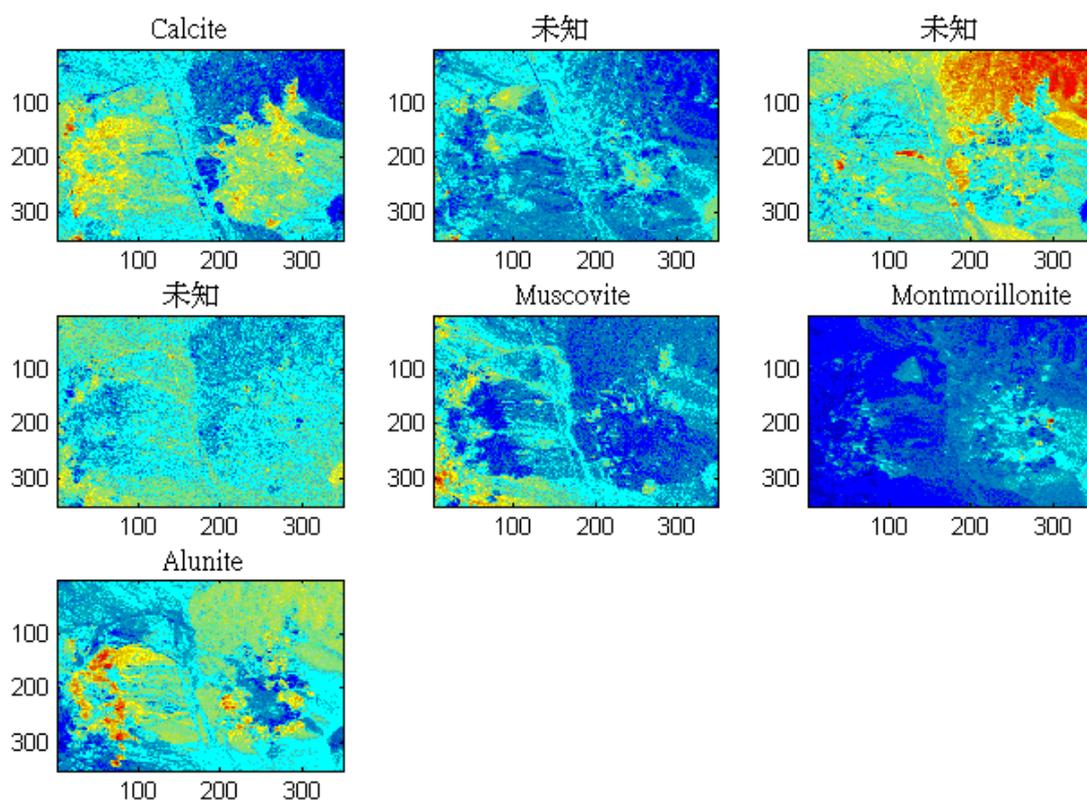


圖 6. MVES 萃取出之端元以完全約束的最小二乘法產生的豐度圖

表 2：MVES 萃取出之 7 種端元與已知的 10 種端元其光譜特徵之光譜角製圖

端元 No.	Alu	Bud	Cal	Kao	Mus	Cha	Dic	Hal	Jar	Mon
1	10.01	7.81	<b>1.40</b>	10.53	6.20	3.46	7.62	5.59	3.50	4.22
2	10.30	8.50	1.79	10.16	6.00	3.72	7.41	5.56	3.67	4.64
3	9.27	3.47	4.67	12.73	7.50	3.60	9.19	6.71	4.06	2.89
4	9.61	7.14	4.31	12.08	7.08	4.85	8.99	5.94	4.22	3.69
5	9.31	11.04	6.65	5.76	<b>2.87</b>	6.19	4.18	3.78	5.49	7.08
6	9.57	4.24	4.83	12.37	6.71	3.08	8.90	6.40	3.75	<b>2.53</b>
7	<b>0.00</b>	8.37	9.52	8.86	7.95	8.85	6.48	6.26	8.31	8.68

3. 本文中 N-FINDR 與 MVES 各萃取 7 種端元，係採用個人電腦硬體 Intel Core(TM)2 Q9500 2.83-GHz processor 與 2G RAM，所須的計算時間如表 3 所示。

表 3：N-FINDR 與 MVES 萃取 7 種端元所須之計算時間

萃取方法	N-FINDR	MVES
計算時間		
秒	114.28	13.44

本次實驗，單體基底端元萃取方法(N-FINDR、MVES)與 FCLS 程式係在 MATLAB® 環境下執行。

### 3-4 成果分析與討論

1. 本研究中兩種不同的單體基底端元萃取方法雖然具有不同的假設條件(N-FINDR 為具有存在純端元於影像中的假設；MVES 為無須具有純端元於影像中的假設)，實驗結果顯示由 N-FINDR 與 MVES 所萃取的 7 種端元皆無法全部對應到 5 個純端元或 5 個比例較高(相似)端元。

2. 由表 1 及表 2 得知，僅有一個純端元係由 MVES 所萃取出來，其餘萃取出的端元為比例較高(相似)端元或未知端元。就已知之 5 種純端元，N-FINDR 可萃取出 3 個比例較高(相似)端元(即 Buddingtonite、Calcite 與 Muscovite)；MVES 可萃取出 1 個純端元(Alunite) 與 2 個比例較高(相似)端元(Calcite、Muscovite)。就比例較高之 5 種(相似)端元，N-FINDR 可萃取出 2 個比例較高(相似)端元(Dickite 與 Montmorillonite)；MVES 可萃取出 1 個比例較高(相似)端元(Montmorillonite)。

3. N-FINDR 萃取方法須先選取起始值以計算單體之體積，然後再進行疊代以找尋出端元。因此每次執行 N-FINDR 會因為所選取之起始值不同，導致萃取出之端元不一致，而且由表 3 可知它所須的計算時間較 MVES 長許多。

## 四、結論與建議

本文比較兩種單體基底端元萃取方法(N-FINDR 與 MVES)找尋高光譜影像中端元位置。實驗成果顯示 N-FINDR 與 MVES 所萃取的 7 種端元皆無法全部對應到純端元或比

例較高（相似）端元；N-FINDR 能找到五個比例較高（相似）端元，MVES 能找到一個純端元及三個比例較高（相似）端元。未來研究方向可包括有(1)如何決定高光譜影像中存在多少端元數？(2)採用其他光譜區間對單體基底端元萃取方法之影響，(3)其他萃取端元的方法(如 ATGP、PPI 等)與單體基底端元萃取方法之效能比較。

## 參考文獻

- 杜培軍、譚琨、夏俊士，2012，“高光譜遙感影像分類與支援向量機應用研究”，科學出版社，北京，中國。
- Bioucas-Dias, J.M., Nascimento, J., 2006, “Vertex component analysis: a geometric-based approach to unmix hyperspectral data,” in *Signal and Image Processing for Remote Sensing*, C.H. Chen, Ed. CRC Press.
- Bioucas-Dias, J.M., Nascimento, J.M.P., 2008, “Hyperspectral subspace identification,” *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, Vol. 46, No. 8, pp. 2435-2445.
- Chan, T.H., Chi, C.Y., Huang, Y.M., Ma, W.K., 2009, “A convex analysis-based minimum-volume enclosing simplex algorithm for hyperspectral unmixing,” *IEEE Transactions on Signal Processing*, Vol. 57, No. 11, pp. 4418-4432.
- Chang, C.I., Du, Q., 2004, “Estimation of Number of Spectrally Distinct Signal Sources in Hyperspectral Imagery,” *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, Vol. 42, No. 6, pp. 608-619.
- Boulder, CO., 2008, “ITT Visual Information Solutions,” *User’s Guide*, ENVI 4.6.
- Keshava, N., Mustard, J.F., 2002, “Spectral Unmixing,” *IEEE Signal Processing Magazine*, Vol. 19, pp. 44-57.
- Ren, H., Chang, C.I., 2003, “Automatic spectral target recognition in hyperspectral imagery,” *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*, Vol. 39, pp. 1232-1249
- Winter, M.E., 1999 “N-FINDR: An algorithm for fast autonomous spectral endmember determination in hyperspectral data,” *Proceedings of SPIE*, Vol. 3753, pp. 266-275.
- Wu, J., Tsuei, G., 2013, “Comparison of hyperspectral endmember extraction algorithms,” *Journal of Applied Remote Sensing*, Vol. 7, 073525.
- Xiong, W., Chang, C., Wu, C., Kalpakis, K., Chen, H., 2011, “Fast algorithm to implement N-FINDR for hyperspectral endmember extraction,” *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, Vol. 4, No. 3, pp. 545-564.