

Um Novo Método de Fatoração Não Negativa em Modelos Bilineares: Aplicação em Separação de Fontes Espectrais

Alejandra Inga Quezada, Yannick Deville e Leonardo Tomazeli Duarte

Resumo—Em sensoriamento remoto por imagem hiperespectral, sensores coletam dados que contêm pixels mistos, ou seja, regiões com uma mistura de mais de um material puro (*endmembers*). A recuperação dos espectros dos *endmembers* pode ser formulada como um problema de separação cega de fontes, para o qual técnicas de fatoração não negativa de matriz (NMF, *Nonnegative Matrix Factorization*) vêm sendo intensamente empregadas. Extensões não lineares da NMF vêm se mostrando capazes de lidar com aspectos não lineares em certos processos de mistura espectral (imageamento de cenas urbanas). O presente artigo propõe um novo método de fatoração não negativa para modelos de mistura bilinear. Nossa proposta considera um operador de deslocamento que permite manter a não negatividade e simultaneamente preservar o máximo de informações possível. Experimentos numéricos com dois conjuntos de misturas sintéticas de dados hiperespectrais reais indicam que a proposta apresenta um bom desempenho em comparação a outros métodos da literatura.

Palavras-Chave—Imagens hiperespectrais, separação espectral, modelo bilinear, separação cega de fontes.

Abstract—In hyperspectral remote sensing, sensors collect data that contain mixed pixels, which have mixed spectra of more than one pure material (*endmembers*). Recovering the spectra of these *endmembers* can be formulated as a blind source separation problem, for which non-negative matrix factorization (NMF) techniques have been used extensively. Non-linear extensions of NMF have been shown to be capable of dealing with non-linear aspects in certain spectral mixing processes (imaging urban areas). This article proposes a new non-negative factorization method for bilinear mixture models. Our proposal considers a shifting operator that allows non-negativity to be maintained while preserving as much information as possible. Numerical experiments with two sets of synthetic hyperspectral data indicate that the proposal performs better than other methods from the literature.

Keywords—Hyperspectral imaging, unsupervised bilinear spectral unmixing, *endmember* spectra extraction.

I. INTRODUÇÃO

O problema conhecido como separação espectral (SU, *Spectral Unmixing*) é muito relevante em sensoriamento remoto por imagens espectrais. Via de regra, no processo de imageamento, alguns dos pixels coletados abrangem regiões com mais de um material puro (*endmembers*). Em geral, deseja-se identificar individualmente os *endmembers* e suas frações de abundância

Alejandra Inga Quezada, Faculdade de Tecnologia (FT), Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), Limeira-SP, e-mail: alejandra.ingaq@gmail.com; Yannick Deville, UPS, CNRS, CNES, OMP, Université de Toulouse, França, e-mail: ydeville@irap.omp.eu; Leonardo Tomazeli Duarte, Faculdade de Ciências Aplicadas (FCA), Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), Limeira-SP, e-mail: leonardo.duarte@fca.unicamp.br.

correspondentes em um dado pixel. A SU permite realizar a separação dos espectros de cada *endmember* e na instância não supervisionada da SU, o problema resultante pode ser formulado como um problema de separação cega de fontes (BSS, *Blind Source Separation*) [1].

Em imagens hiperespectrais as quantidades de interesse (espectros e abundâncias dos *endmembers*) sempre assumem valores não negativos, neste contexto as técnicas de BSS que vêm sendo mais empregadas se apoiam em uma abordagem conhecida como fatoração não negativa de matrizes (NMF, *Nonnegative Matrix Factorization*) [2]. No processo de otimização, um dos desafios em NMF é lidar com a restrição de não negatividade das variáveis a serem otimizadas. Uma contribuição muito importante foi apresentada no trabalho de Lee e Seung [3], que introduziram os métodos de otimização multiplicativa, nos quais as restrições de não negatividade são garantidas diretamente na regra de atualização.

A respeito da utilização da NMF na SU, há uma limitação de seu uso em algumas situações práticas. Os modelos lineares de mistura considerados nas versões básicas do NMF não representam a realidade quando se trata de um processo de imageamento em superfícies não planas ou quando há heterogeneidade de irradiância na área observada [4]. Portanto, a recuperação dos espectros dos *endmembers* e de suas abundâncias está associada à formulação de um problema de BSS não linear [5]. Em particular, dois modelos não lineares de mistura têm sido considerados no contexto de SU: os modelos bilinear e linear-quadrático [6], [7].

Neste trabalho, propomos um novo método de fatoração matricial bilinear (BMF) [5], [7] com restrições de não negatividade. Nossa motivação é justamente abordar o problema de extração de espectros em processos de mistura não linear. Para tanto, consideramos um método de otimização multiplicativo, motivado pela proposta inicial apresentada em [4]. Um dos desafios abordados em [4] é garantir a restrição de não negatividade ao longo das iterações do processo de otimização. Para tanto, os autores propõem uma aproximação na qual os termos negativos de variáveis que constituem os gradientes obtidos ao longo da otimização são anulados. Tal abordagem, portanto, descarta informações que podem ser úteis na otimização.

Propomos um novo método que desloca os valores negativos destas variáveis para garantir a não negatividade dos espectros dos *endmembers*, ao invés de anular os termos negativos que surgem no processo de otimização. O objetivo é justamente evitar o descarte de informações que podem auxiliar o processo de otimização, uma vez que nossa proposta considera

todos os termos que surgem nos cálculos do gradiente. Cabe destacar também que a abordagem proposta considera uma regra de atualização multiplicativa, que pode ser interpretada como método do gradiente com passos de aprendizado específicas para cada variável e escolhidas automaticamente [8]. São realizados experimentos com base em dados sintéticos realistas, criados de acordo com o modelo de mistura bilinear considerado, e espectros reais, para avaliar o desempenho da abordagem proposta e dos métodos da literatura [4].

O artigo está organizado da seguinte forma. Na Seção II, descrevemos o modelo de mistura tratado. A seção III apresenta as bases do algoritmo multiplicativo para BMF, descreve a função de custo para um modelo de fatoração de matriz bilinear e sua expressão de gradiente. Na Seção IV, motivação para garantir a não negatividade e a metodologia geral proposta são descritas. A Seção V consiste em resultados experimentais utilizando dados sintéticos realistas. Nessa seção, os dados usados são descritos e os resultados obtidos são comparados com os obtidos por meio de três abordagens da literatura. A Seção VI conclui este artigo.

II. MODELO DE MISTURA BILINEAR EM SU

Como descrito em [7], [4] cada vetor espectral observado associado a um pixel em uma imagem hiperespectral é considerado aqui como uma mistura bilinear de diferentes *endmembers*. Matematicamente, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^L$ representa o espectro de refletância não negativo do pixel i da imagem hiperespectral. O modelo de mistura é dado por:

$$\mathbf{x}_i = \sum_{j=1}^M a_j(i) \mathbf{s}_j + \sum_{j=1}^{M-1} \sum_{\ell=j+1}^M a_{j,\ell}(i) \mathbf{s}_j \odot \mathbf{s}_\ell, \quad (1)$$

$$\begin{cases} \mathbf{s}_j \geq 0, & j = 1, \dots, M \\ a_j(i) \geq 0, & j = 1, \dots, M \\ \sum_{j=1}^M a_j(i) = 1, \\ 0 \leq a_{j,\ell}(i) < 0.5, & 1 \leq j < \ell \leq M \end{cases}$$

onde $\mathbf{s}_j \in \mathbb{R}^L$ denota o espectro de refletância do *endmember* j . O operador \odot denota o produto de Hadamard (elemento por elemento) entre os espectros $\mathbf{s}_j \odot \mathbf{s}_\ell$ e está presente no termo não linear da mistura. Os termos $a_j(i)$ e $a_{j,\ell}(i)$ correspondem, respectivamente, às frações de abundância linear e de segunda ordem. As constantes L e M correspondem, respectivamente, ao número de bandas espectrais na imagem hiperespectral considerada e ao número de *endmembers* contidos na área da imagem. Note que os espectros e as abundâncias assumem apenas valores não negativos.

É possível representar o modelo de mistura expresso em (1) por meio de uma representação matricial. De fato, considerando P observações (que correspondem ao número de pixels da imagem), (1) pode ser escrita da seguinte forma [8], [4]:

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{A}_a \mathbf{S}_a + \mathbf{A}_b \mathbf{S}_b, \quad (2)$$

onde $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_P]^T \in \mathbb{R}^{P \times L}$ (matriz de espectros de pixels observados) e $(\cdot)^T$ denota a matriz transposta, $\mathbf{A} = [\mathbf{A}_a \quad \mathbf{A}_b]$ (matriz de fração de abundância linear e

de segunda ordem), e $\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_a \\ \mathbf{S}_b \end{bmatrix}$ (matriz de espectros do *endmember* e de *pseudo-endmembers* obtidos pelo produto de Hadamard de dois espectros). Tais matrizes são dadas por:

$$\mathbf{A}_a = \begin{bmatrix} a_1(1) & \dots & a_M(1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_1(P) & \dots & a_M(P) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$\mathbf{A}_b = \begin{bmatrix} a_{1,2}(1) & a_{1,3}(1) & \dots & a_{M-1,M}(1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,2}(P) & a_{1,3}(P) & \dots & a_{M-1,M}(P) \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$$\mathbf{S}_a = [\mathbf{s}_1 \quad \dots \quad \mathbf{s}_M]^T, \quad (5)$$

$$\mathbf{S}_b = [\mathbf{s}_1 \odot \mathbf{s}_2 \quad \mathbf{s}_1 \odot \mathbf{s}_3 \quad \dots \quad \mathbf{s}_{M-1} \odot \mathbf{s}_M]^T. \quad (6)$$

Na instância não supervisionada de SU, o problema consiste em obter estimativas $\tilde{\mathbf{A}}$ e $\tilde{\mathbf{S}}$ para as matrizes \mathbf{A} e \mathbf{S} , respectivamente. No caso do modelo bilinear expresso em (2), a matriz \mathbf{S} é estruturalmente restrita, pois somente os vetores das M linhas superiores são livres (representado em (5)), uma vez que estes contêm os espectros dos *endmembers*, que são os sinais fontes a serem estimados no problema em questão. Por outro lado, os vetores das linhas subsequentes de \mathbf{S} , representados em (6), que contêm os espectros dos *pseudo-endmembers*, são produtos dois a dois dos espectros dos *endmembers*, e, são, portanto, variáveis dependentes das M primeiras linhas de $\tilde{\mathbf{S}}$.

III. MÉTODO PROPOSTO: FUNÇÃO DE CUSTO E GRADIENTE

É possível estimar os espectros e as abundâncias por meio da minimização, em relação a $\tilde{\mathbf{A}}$ e $\tilde{\mathbf{S}}$ da seguinte função de custo [7]:

$$J_1 = \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{S}}\|_F^2, \quad (7)$$

onde $\|\cdot\|_F$ denota a norma de Frobenius. Uma estratégia [4], [7] para obter uma função de custo em função apenas de $\tilde{\mathbf{S}}$ é considerar que uma solução particular para $\tilde{\mathbf{A}}$, expressa por $\tilde{\mathbf{A}}_{opt}$, se relaciona com $\tilde{\mathbf{S}}$ por meio de um processo de estimação de mínimos quadrados, de modo que $\tilde{\mathbf{A}}_{opt} = \mathbf{X}\tilde{\mathbf{S}}^T(\tilde{\mathbf{S}}\tilde{\mathbf{S}}^T)^{-1}$. A aplicação de tal estratégia em (7) permite a obtenção de uma nova função objetivo, dada por:

$$J_2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{X}\tilde{\mathbf{S}}^T(\tilde{\mathbf{S}}\tilde{\mathbf{S}}^T)^{-1}\tilde{\mathbf{S}}\|_F^2, \quad (8)$$

onde $(\cdot)^{-1}$ denota a matriz inversa. Assim, $\tilde{\mathbf{A}}$ e J_2 são definidos por expressões de forma fechada que permitem o cálculo do gradiente para a função de custo J_2 com relação à parte principal da matriz $\tilde{\mathbf{S}}$. O método de gradiente pode então ser utilizado para o estágio de extração de espectros de *endmembers*. De acordo com [4], o gradiente de J_2 em relação a um elemento \tilde{s}_{ml} (da linha m entre as M linhas livres de $\tilde{\mathbf{S}}$) é dado por:

$$\frac{\partial J_2}{\partial \tilde{s}_{ml}} = \text{Tr} \left((\mathbf{X}\tilde{\mathbf{S}}^+ \tilde{\mathbf{S}} - \mathbf{X})^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+ \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right) \right), \quad (9)$$

onde $\text{Tr}(\cdot)$ denota o traço de uma matriz e a pseudo-inversa de Moore-Penrose da matriz $\tilde{\mathbf{S}}$ é denotada por $\tilde{\mathbf{S}}^+$. Assim, a expressão de (9) pode ser calculada derivando-se a expressão de $\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}}$. Esta é uma matriz com $\left[M + \frac{M(M-1)}{2} \right]$ linhas e L colunas. O valor de um elemento $\left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right]_{pq}$ dessa matriz na posição (p, q) é igual a:

$$\begin{cases} 1 & \text{se } p = m \text{ e } q = \ell \\ \tilde{s}_{m'\ell} & \text{se } \exists m' \in \{1, \dots, M\}, m' \neq m / \\ & p = M + B(m, m') \text{ e } q = \ell \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (10)$$

onde $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ é uma matriz simétrica, com diagonal principal nula. Cada elemento $[B]_{rt}$ que corresponde à posição (r, t) com $t > r$ refere-se ao *pseudo-endmember* $\mathbf{s}_r \odot \mathbf{s}_t$ e é igual ao índice da linha dentro de \mathbf{S}_b . Os valores em $[B]_{rt}$ são armazenados da esquerda para a direita e de cima para baixo na parte superior de \mathbf{B} como números inteiros em ordem crescente, ou seja, de 1 a $(M-1)$ na primeira linha, de M a $(2M-3)$ na segunda linha e assim por diante [4].

Para otimização (8), uma regra iterativa, multiplicativa e de projeção é proposta em [4] para atualizar $\tilde{\mathbf{S}}$. Tal regra, pode ser entendida como uma regra baseada no cálculo do gradiente [9], porém com um passo de adaptação escolhido diferentemente para cada variável escalar \tilde{s}_{ml} . Por tanto, o gradiente (9) com relação a \tilde{s}_{ml} pode ser escrito como a diferença de dois termos, dados por:

$$\frac{\partial J_2}{\partial \tilde{s}_{ml}} = \frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}} - \frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}} \quad (11)$$

onde $\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ e $\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ são obtidos pelos termos precedidos por positivos e negativos, respectivamente de (9). Aplicando então a escolha do passo apresentada em [4], obtém-se a seguinte regra multiplicativa de atualização:

$$\tilde{s}_{ml} \leftarrow \frac{\tilde{s}_{ml} \times \frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}}{\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}} + \epsilon}, \quad (12)$$

onde ϵ é um valor mínimo e positivo adicionado para evitar uma possível divisão por zero. Além disso, $\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ e $\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ são representados por:

$$\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}} = \text{Tr} \left(\tilde{\mathbf{S}}^+ \tilde{\mathbf{S}} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+ \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right) \right) \quad (13)$$

$$\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}} = \text{Tr} \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+ \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right) \right), \quad (14)$$

IV. GARANTIA DE NÃO NEGATIVIDADE

A. Solução baseada em projeção

Para garantir que \tilde{s}_{ml} permaneça não negativo com a regra de atualização (12), $\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ e $\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ devem ser não negativos. Essa condição é atendida para outras abordagens de SU da literatura [4], ao definir $\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ e $\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ conforme explicado depois (11). No entanto, há também, em tais expressões, uma matriz que não é necessariamente não negativa, dada

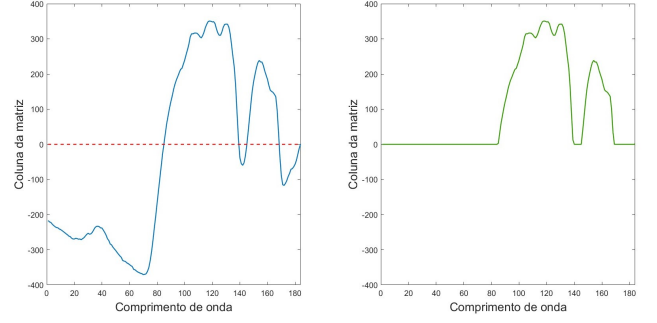


Fig. 1. Uma coluna da matriz não projetada (13) (esquerda) e da matriz projetada (15) (direita).

por $\tilde{\mathbf{S}}^+$. Sendo assim, para garantir que \tilde{s}_{ml} permaneça não negativo, [4] propõe uma heurística que substitui os termos $\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ e $\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ por:

$$\left[\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right]_p = \text{Tr} \left(\left[\tilde{\mathbf{S}}^+ \tilde{\mathbf{S}} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+ \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right) \right]_+ \right), \quad (15)$$

$$\left[\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right]_p = \text{Tr} \left(\left[\mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+ \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right) \right]_+ \right), \quad (16)$$

onde $[\beta]_+ = \max(\epsilon, \beta)$, onde ϵ é um valor positivo mínimo. As expressões (13) e (14) são, portanto, projetadas em \mathbb{R}_+ antes de calcular o $\text{Tr}(\cdot)$, como em (16) e (15), e depois usar essas quantidades completamente projetadas em (12). Embora a não negatividade seja garantida, a quantidade de informações perdidas por esse método pode acarretar alguns erros em potencial.

B. Método proposto baseado no deslocamento de dados

Conforme descrito anteriormente, a projeção realizada no Multi-NS-LS-BMF para garantir a não negatividade dos termos $\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ e $\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ é ilustrada na Figura 1. Tal figura considera os valores dentro de uma coluna na matriz representada em (13) antes de sua projeção, onde alguns valores negativos estão presentes. A linha vermelha representa a projeção que corta a curva; portanto, todos os valores negativos são atribuídos a um valor positivo mínimo. Note que a forma da curva inicial muda (curva verde na Figura 1), ou seja, há informações que são descartadas. É válido presumir que, se essa situação ocorrer para uma única coluna dentro da matriz, o mesmo processo pode ocorrer para toda a matriz. De modo a evitar perda de informação, propomos uma nova abordagem para evitar a presença de possíveis valores negativos que, ao invés de considerar uma anulação dos termos negativos, desloca as curvas associadas aos elementos $\frac{\partial J_2^+}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ e $\frac{\partial J_2^-}{\partial \tilde{s}_{ml}}$ para que todos os valores sejam não negativos. Este novo método, que será chamado Shift-Multi-BMF (*shifting multiplicative bilinear matrix factorization*) foi desenvolvido para o modelo de mistura bilinear. A Figura 2 mostra a representação gráfica do nosso método (curva verde) que desloca os elementos da matriz para \mathbb{R}_+ em vez de cortar informações valiosas. Em nossa proposta, o processo de deslocamento se inicia com a

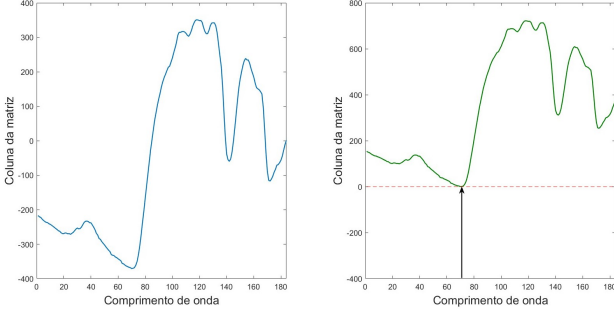


Fig. 2. Uma coluna da matriz não projetada (13) (esquerda) e da matriz deslocada pelo método Shift-Multi-BMF (22) (direita).

identificação dos termos de $\frac{\partial J_2}{\partial \tilde{s}_{ml}}^+$ e $\frac{\partial J_2}{\partial \tilde{s}_{ml}}^-$, onde a presença da matriz pseudo-inversa $\tilde{\mathbf{S}}^+$, podem culminar em valores negativos. Esses termos são dados por: $\mathbf{P}^+ = \tilde{\mathbf{S}}^+ \tilde{\mathbf{S}} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+$ e $\mathbf{P}^- = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+$. Os valores mínimos de cada coluna em \mathbf{P}^+ e \mathbf{P}^- serão expressos matematicamente como:

$$v_{P_j^+} = \min_i p_{ij}^+ \quad (17)$$

$$v_{P_j^-} = \min_i p_{ij}^-, \quad (18)$$

onde $\mathbf{P}^+ = [p_{ij}^+]$ e $\mathbf{P}^- = [p_{ij}^-]$ são duas matrizes do mesmo tamanho e $v_{P_j^+}$ e $v_{P_j^-}$ são os valores mínimos para cada j -ésima coluna em \mathbf{P}^+ e \mathbf{P}^- . Assim, buscamos encontrar o valor mínimo absoluto entre os $v_{P_j^+}$ e $v_{P_j^-}$ para cada j -ésima coluna (se pelo menos um deles for negativo). Isso resulta em:

$$d_j = \left| \min(v_{P_j^+}, v_{P_j^-}, 0) \right|, \quad (19)$$

onde d_j é zero se $v_{P_j^+}$ e $v_{P_j^-}$ forem não negativos. Além disso, uma nova matriz \mathbf{D} é criada com todas as suas linhas sendo iguais a d_j para cada coluna j , de modo que seu tamanho seja compatível com \mathbf{P}^+ e \mathbf{P}^- . A representação matricial de \mathbf{D} é a seguinte:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & \dots & d_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_1 & d_2 & \dots & d_m \end{bmatrix}. \quad (20)$$

A matriz \mathbf{D} tem L linhas e $[(M + M(M - 1))/2]$ colunas e tem o mesmo tamanho de \mathbf{P}^+ e \mathbf{P}^- . Então, seguindo o mesmo princípio de (11), a matriz \mathbf{D} é usada para deslocar \mathbf{P}^+ e \mathbf{P}^- para \mathbb{R}_+ . Assim, o gradiente J_2 em relação a um elemento \tilde{s}_{ml} é reescrito como:

$$\frac{\partial J_2}{\partial \tilde{s}_{ml}} = g_{ml}^+ - g_{ml}^-. \quad (21)$$

Essa nova expressão não modifica a estrutura de (11), pois cada termo em (21) é definido como:

$$g_{ml}^+ = \text{Tr} \left[\left(\tilde{\mathbf{S}}^+ \tilde{\mathbf{S}} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+ + \mathbf{D} \right) \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right) \right] \quad (22)$$

$$g_{ml}^- = \text{Tr} \left[\left(\mathbf{X}^T \mathbf{X} \tilde{\mathbf{S}}^+ + \mathbf{D} \right) \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}}{\partial \tilde{s}_{ml}} \right) \right]. \quad (23)$$

Dessa forma, o método proposto garante a presença de valores não negativos em g_{ml}^+ e g_{ml}^- sem descartar nenhuma informação. A regra de atualização do Shift-Multi-BMF para cada elemento \tilde{s}_{ml} é dada por:

$$\tilde{s}_{ml} \leftarrow \frac{\tilde{s}_{ml} \times g_{ml}^-}{g_{ml}^+ + \epsilon}. \quad (24)$$

As variáveis secundárias de $\tilde{\mathbf{S}}$ são atualizadas junto com as principais. A adaptação de todas as variáveis principais é interrompida quando o número de iterações atinge um valor máximo predefinido.

V. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

A. Dados utilizados nos experimentos e métricas de desempenho

Dois conjuntos de oito espectros hiperespectrais de *endmembers* são selecionados de bibliotecas espectrais, contendo 184 bandas espectrais na região de 0,4 a 2,5 μm . O primeiro conjunto de dados possui oito espectros selecionados aleatoriamente da biblioteca espectral compilada pelo *United States Geological Survey* (USGS) [10]. O segundo conjunto de dados, com oito espectros de materiais usados em áreas urbanas, foi selecionado da biblioteca espectral compilada pela Universidade Johns Hopkins (JHU) [11]. Esses conjuntos de dados são utilizados para criar dois conjuntos de imagens hiperespectrais sintéticas realistas. Elas consistem em 100×100 pixels cada e são geradas de acordo com o modelo bilinear considerado em (1). As frações de abundância linear são criadas pela média dos valores da classificação dos pixels em uma janela móvel não sobreposta de 4×4 pixels para uma classificação real da superfície da terra. O modelo de Fan [12] é considerado para gerar as abundâncias quadráticas a partir das abundâncias lineares.

B. Métricas de desempenho

Para avaliar o desempenho dos métodos testados, são consideradas as seguintes métricas [4]: o mapeador de ângulo espectral (SAM, *spectral angle mapper*), o erro quadrático médio normalizado espectral (NMSE $_{\lambda}$, *spectral normalized mean square error*) e a divergência de informações espectrais (SID, *spectral information divergence*) entre os espectros de *endmembers* originais e estimados. Um valor menor desses critérios indica uma melhor extração de um dado *endmember*.

C. Resultados

A nossa proposta (Shift-Multi-BMF) e um conjunto de métodos da literatura são aplicados às imagens descritas anteriormente. Consideramos os seguintes métodos da literatura: o VCA combinado com o FCLS, NMF linear [3] e o Multi-NS-LS-BMF [4]. Vale ressaltar, que nossos experimentos usam dois métodos de inicialização: para os *endmembers*, o análise de componentes de vértices (VCA, *Vertex Component Analysis*) [13] e para as frações de abundância, o mínimos quadrados com restrições totais (FCLS, *Fully Constrained Least Squares*) [14]. Foram realizados 10 corridas para minimizar o efeito aleatório da inicialização do VCA, com um máximo

TABELA I

VALOR MÉDIO DAS MÉTRICAS PARA O CONJUNTO DE DADOS USGS.

	SAM (°)	NMSE (%)	SID
Shifting-Multi-BMF	7,8	18,5	4,1
Multi-NS-LS-BMF	8,2	18,9	4,3
NMF	10,2	28,7	11,9
VCA+FCLS	9,0	21,7	6,4

TABELA II

VALOR MÉDIO DAS MÉTRICAS PARA O CONJUNTO DE DADOS JHU.

	SAM (°)	NMSE (%)	SID
Shifting-Multi-BMF	6,1	28,7	2,1
Multi-NS-LS-BMF	6,8	29,9	2,3
NMF	7,9	27,5	4,5
VCA+FCLS	6,3	29,4	2,3

de 1000 iterações cada um. A média dos valores obtidos para os critérios de desempenho considerados é fornecida na Tabela I e na Tabela II. Para oito espectros selecionados aleatoriamente na biblioteca da USGS, o método Shift-Multi-BMF atingiu uma média de 7,8° para o critério SAM e uma média de 18,5% para o critério NMSE, enquanto os métodos VCA+FCLS e NMF atingem uma média entre 9,0° e 10,2° para o critério SAM e uma média entre 21,7% e 28,7% para o critério NMSE. Nosso método também alcançou uma média de 4,1 para o critério SID. No entanto, o método Multi-NS-LS-BMF também supera os outros métodos da literatura em cada critério; porém, seu desempenho não supera o do método proposto, conforme Tabela I. A Figura 3 mostra que o espectro fornecido pelo método Shifting-Multi-BMF é muito mais suave do que com o Multi-NS-LS-BMF. Portanto, ele é muito mais consistente com o espectro real. Para os espectros de materiais urbanos na biblioteca da JHU (Tabela II), o melhor desempenho de SAM médio foi da nossa proposta de 6,1°. O melhor NMSE médio entre todos os métodos avaliados é obtido pelo método linear NMF com 27,5%, seguido pelo Shift-Multi-BMF com 28,7%.

VI. CONCLUSÕES

Neste artigo propomos um novo método de fatoração não negativa em modelos bilineares para extrair espectros de *end-members* hiperespectrais denominada Shift-Multi-BMF. Em comparação com três métodos estabelecidos na literatura, e de acordo com os resultados obtidos, a proposta apresenta um melhor desempenho. No primeiro conjunto de espectros, nosso método proposto apresenta melhor desempenho para todos os critérios. No segundo conjunto de espectros, nossa abordagem supera todos os outros métodos para os valores SAM e SID, enquanto a NMF linear produz um NMSE ligeiramente melhor. No entanto, a NMF linear não é robusta, pois fornece um NMSE muito maior do que o nosso método para o primeiro conjunto de espectros. Além disso, nosso método supera o Multi-NS-LS-BMF em ambos os conjuntos de espectros, o que confirma que uma quantidade maior de informações é preservada com nosso procedimento de deslocamento.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil

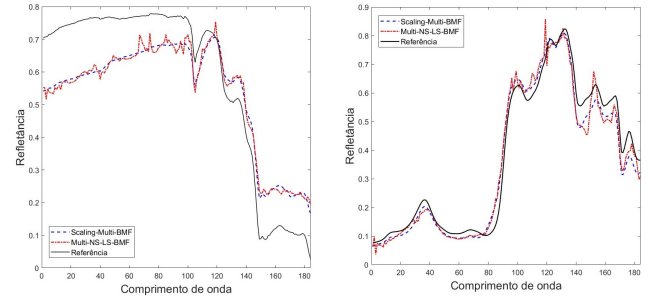


Fig. 3. Referência de dois espectros e suas estimativas.

(CAPES) - Código de Financiamento 001. Os autores agradecem o CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo apoio financeiro para a realização desta pesquisa e o apoio do BIOS – Brazilian Institute of Data Science, apoiado pelo processo nº 2020/09838-0, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

REFERÊNCIAS

- [1] P. Comon and C. Jutten, *Handbook of Blind Source Separation*, Academic press, 2010.
- [2] X. Fu, K. Huang, N. D. Sidiropoulos, and W. Ma, "Nonnegative matrix factorization for signal and data analytics," *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 36, no. 2, pp. 59–80, 2019.
- [3] D. Lee and H. Seung, "Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization," *Nature*, vol. 401, no. 6755, pp. 788–791, 1999.
- [4] F. Z. Benhalouche, Y. Deville, M. S. Karoui, and A. Ouamri, "Hyperspectral unmixing based on constrained bilinear or linear-quadratic matrix factorization," *Remote Sensing*, vol. 13, no. 11, pp. 2132, 2021.
- [5] Y. Deville and L. T. Duarte, "An overview of blind source separation methods for linear-quadratic and post-nonlinear mixtures," in *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, Emmanuel Vincent, Arie Yeredor, Zbyněk Koldovský, and Petr Tichavský, Eds. 2015, pp. 155–167, Springer International Publishing.
- [6] Y. Deville, L. T. Duarte, and S. Hosseini, *Nonlinear Blind Source Separation and Blind Mixture Identification: Methods for Bilinear, Linear-quadratic and Polynomial Mixtures*, Springer Nature, 2021.
- [7] Y. Deville, "Matrix factorization for bilinear blind source separation: Methods, separability and conditioning," in *2015 23rd European Signal Processing Conference (EUSIPCO)*, 2015, pp. 1900–1904, IEEE.
- [8] I. Meganem, Y. Deville, S. Hosseini, P. Déliot, and X. Briottet, "Linear-quadratic blind source separation using NMF to unmix urban hyperspectral images," *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 62, no. 7, pp. 1822–1833, 2014.
- [9] F. Z. Benhalouche, Y. Deville, M. S. Karoui, and A. Ouamri, "Bilinear matrix factorization using a gradient method for hyperspectral endmember spectra extraction," in *2016 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, Beijing, China, 2016, IEEE, pp. 6565–6568.
- [10] R. N. Clark, G. A. Swayze, R. A. Wise, K. E. Livo, T. M. Hoefen, R. F. Kokaly, and S. J. Sutley, "USGS digital spectral library splib06a," Tech. Rep., US Geological Survey, Reston, VA, 2007.
- [11] A.M. Baldridge, S.J. Hook, C.I. Grove, and G. Rivera, "The ASTER spectral library version 2.0," *Remote Sensing of Environment*, vol. 113, no. 4, pp. 711–715, 2009.
- [12] W. Fan, B. Hu, J. Miller, and M. Li, "Comparative study between a new nonlinear model and common linear model for analysing laboratory simulated-forest hyperspectral data," *International Journal of Remote Sensing*, vol. 30, no. 11, pp. 2951–2962, 2009.
- [13] Nascimento J. M. P. and Bioucas-Dias J. M., "Vertex component analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 43, no. 4, pp. 898–910, 2005.
- [14] D.C. Heinz and Chein-I-Chang, "Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 39, no. 3, pp. 529–545, 2001.