

知识图谱嵌入的光谱解混算法

吴瑞, 罗文斐, 陈江浩

华南师范大学 地理科学学院, 广州 510631

摘要: 在光谱解混过程中, 在端元集合中选择有效的端元子集进行解混是至关重要的, 但端元子集选择会受到端元光谱变异性的影响, 导致选择的结果以及解混精度具有一定的不确定性。本文提出了一种知识图谱嵌入的光谱解混算法 KGESU (Knowledge Graph Embedding Spectral Unmixing), 在利用光谱特征进行解混的同时, 引入一定的先验知识来进一步提高端元选择的可靠性, 从而提升解混的精度。主要涉及两个核心问题: 一是地学知识图谱的嵌入, 二是引入先验的光谱解混。前者借助了 TransE 模型来实现对地学知识图谱的图嵌入训练; 后者则在知识图谱嵌入的基础上进行知识推理, 并把推理结果融入到光谱解混的过程, 从而实现了一个引入先验知识的光谱解混算法。为了验证算法的有效性, 通过高分五号高光谱相机所采集的真实图像进行实验, 与其他经典算法作对比, 结果表明本文的算法具有更好的解混效果, 证明了在光谱解混过程中使用一定的地学先验知识有助于提升解混精度, KGESU 算法具有一定的应用前景。

关键词: 遥感, 知识图谱, 知识图谱嵌入, 端元子集选择, 光谱解混

中图分类号: P2

引用格式: 吴瑞, 罗文斐, 陈江浩. 2024. 知识图谱嵌入的光谱解混算法. 遥感学报, 28(8): 2073-2088

Wu R, Luo W F and Chen J H. 2024. Knowledge graph embedding spectral unmixing. National Remote Sensing Bulletin, 28(8): 2073-2088 [DOI: 10.11834/jrs.20222253]

1 引言

高光谱遥感图像既包含地物的空间信息, 也提供了详细的光谱特征, 具有光谱分辨率高和图谱合一的特点, 因其能提供丰富的地表信息, 被广泛应用于农业、地物探测和环境监测等领域 (童庆禧等, 2006a)。但由于自然界中地物分布情况复杂以及成像光谱仪空间分辨率低, 导致混合像元普遍存在于高光谱图像中, 限制了高光谱数据的进一步应用 (童庆禧等, 2006b)。光谱解混 (或称混合像元分解) 能够反演出成像区域的详细地物信息, 从一定程度上提高了高光谱图像解译的精度, 为亚像元级别的目标探测与识别提供了技术手段。

光谱解混技术根据基础物质以及空间复杂度大小, 可以分为线性模型和非线性模型 (Bioucas-Dias 等, 2012)。虽然非线性混合模型更接近真实情况, 但通常很难用于信号分析和处理。线性混

合模型具有一定的普适性, 多数情况下可以取得较好的解混结果 (Ma 等, 2014), 故得到广泛的应用和研究。基于线性混合模型的光谱解混方法可以分为: 凸几何分析方法、统计分析方法、稀疏回归方法以及光谱-空间联合分析方法 (童庆禧等, 2016)。凸几何分析方法假设单形体的顶点为端元, 具有明确的几何意义 (Winter, 1999; Nascimento 和 Dias, 2005; Li 等, 2015a)。统计分析基于统计原理, 依据数据的独立性分布, 具有较可靠的解混结果 (Wang 和 Chang, 2006; Dobigeon 等, 2009; Wang 等, 2013)。稀疏回归方法对模型添加稀疏约束, 并在丰度非负性与和为一的驱动下, 实现光谱解混 (Iordache 等, 2011; 张良培和李家艺, 2016)。光谱-空间联合分析方法对像元不再单独处理, 同时考虑高光谱图像的光谱和空间特征 (Xu 等, 2016; 袁博, 2018; Zhang 等, 2018; Zhu 等, 2022b)。Zhang 等 (2018) 在稀疏解混的基础上加入了光谱

收稿日期: 2022-05-23; 预印本: 2022-12-16

基金项目: 高分辨率对地观测系统重大专项 (编号: 11-Y20A40-9002-15/17)

第一作者简介: 吴瑞, 研究方向为高光谱遥感信息提取、光谱解混。E-mail: wurui@m.scnu.edu.cn

通信作者简介: 罗文斐, 研究方向为高光谱遥感信息提取、光谱解混及其应用。E-mail: luowenfei@m.scnu.edu.cn

和空间权重,同时对稀疏解进行约束,进一步提高了解的稀疏性。Zhu等(2022b)在隐含稀疏先验约束的主题模型基础上,利用稀疏特性捕捉光谱的语义表示,并通过超像素分割获取空间分布信息,通过空间和光谱信息的融合,进一步提升了解混性能。随着计算机技术和可用数据资源的增长,深度学习技术在遥感领域得到广泛应用,基于深度学习的光谱解混算法可利用基于模型和基于学习方法的优点,从数据中提取特征并结合解混模型,实现光谱解混(Bhatt和Joshi, 2020; Han等, 2021; Xiong等, 2021; Shi等, 2022)。基于深度学习的方法能取得较好的解混效果,但受深度学习黑盒子的影响,算法的普适性和可解释性仍是研究重点。

在光谱解混过程中,选择最优的端元组合子集是一个容易忽略但很重要的问题。目前,主要有两类方法,一是多端元选择方法,该方法对混合像元穷举所有可能的端元组合,通过最优端元判断准则,挑选出适合每个混合像元的端元组合进行解混(Roberts等, 1998)。该方法符合复杂的地表实际覆盖情况,对于提升解混精度有较大的帮助。但穷举法计算复杂度很高,在端元种类复杂的情况下难以实现。另一类是通过稀疏回归的方法,以稀疏性约束实现对端元光谱可变和混合像元的端元组合可变的有效限制,自动根据混合像元的光谱特征筛选最优端元子集(张良培和李家艺, 2016),最终实现光谱解混,但受光谱变异性的影响,端元选择结果具有一定的不确定性。

然而,仅从数据本身提取信息,获取的信息仍然有限(张继贤等, 2021)。事实上,我们拥有很多的地物先验知识,这些知识有助于提升地物识别能力。例如,选取高程、坡度、坡向3个地学特征,发现地形特征数据与土地利用存在着密切的关系(贾宁凤等, 2007; 哈凯等, 2015)。Li等(2015b)通过归一化植被指数NDVI(Normalized Difference Vegetation Index)发现植被的物候特征可以极大程度地提高土地利用分类的精度。Li等(2021)通过手动构建遥感知识图谱,并以知识图谱表示学习的方式,自动提取遥感场景类别的语义信息,实现了零样本场景分类。Li等(2022)以迭代的方式将深度学习和本体推理相结合,实现了基于遥感知识引导的遥感图像语义分割。Zhu等(2022a)提出了一种知识引导的土地模式描述框

架,以不同土地覆盖类型布局作为知识驱动,进一步提高了分类精度。

从上述研究可以看出,适当引入地物的先验知识,能够提高地物的识别能力。王志华等(2021)进一步提出充分利用非结构化的地学知识和遥感图像来模拟地学专家解译,以补充遥感解译算法不足之处的地学思维方式。非结构化的地学知识是指深度解析多源地学数据,从非结构化的地学数据中获得的地学知识。例如从海量的文本、图片、数据表格、地图等非结构化的文本资料中获取的地图符号的地理意义、各地类的空间关系等。而通过知识图谱能够将多源数据中提取的地学知识转化为一种结构化表达的形式(周成虎等, 2021),对归纳、整理以及推理地学知识起着重要的作用。并且知识图谱可进一步作为遥感解译的先验知识,有效地表达遥感影像中地理实体之间的时空关系,从而提高地理实体在影像中的辨识度(王志华等, 2021)。因此如果将知识图谱引入光谱解混过程中,以提高对端元的辨识度,将有望进一步提高端元选择以及光谱解混的精度。

为此,本文提出了一种知识图谱嵌入的光谱解混算法,通过知识图谱嵌入的方式,将地学知识有效地融入到光谱解混过程中,提高对端元的辨析能力,从而提高解混精度。

2 知识图谱嵌入的光谱解混算法

2.1 地学知识图谱的表达

知识图谱(Knowledge Graph)一词最早是由Google于2012年提出(Singhal, 2012),旨在描述现实世界知识的数据图,记为 $G = G(V, E)$,其中 V 为节点集表示实体、概念或值, E 为边集表示概念之间、实体与概念之间、实体之间的关系或实体的各种属性类型。

利用地学先验知识创建地学知识图谱主要包括知识获取、知识提取、知识融合以及知识加工4个过程(张继贤等, 2021),地学知识图谱承载的知识可划分为:数据性知识、概念性知识以及规律性知识,其中地学数据性知识是指对某一区域内的地理实体的实例化认知或属性度量的结果(王志华等, 2021)。利用上述方法,可构建如图1所示的对地理实体创建的土地利用地表覆盖知识图谱示意图。

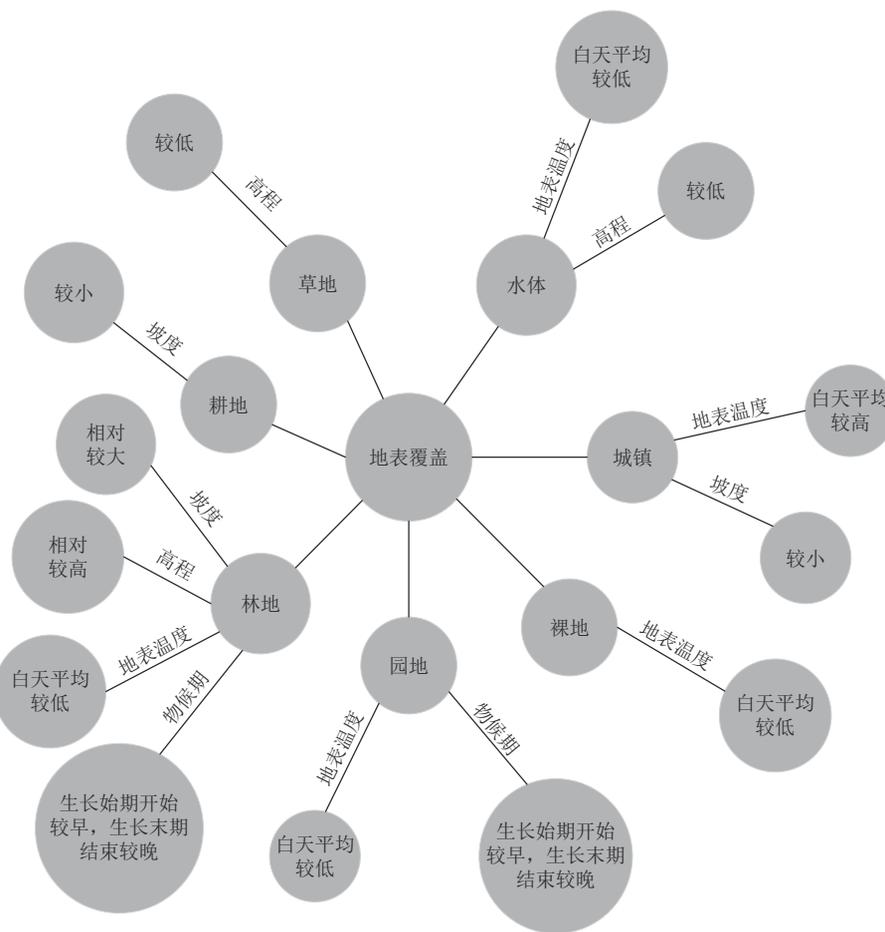


图1 地表覆盖知识图谱示意图

Fig. 1 A schematic diagram of knowledge graph for land cover

事实上，本文从一些非结构化的数据中可抽取大量非结构化的地学知识，例如从地学文本资料中获取地物的一些物候信息，植被的物候特征可以通过NDVI值来反映（刘啸添等，2018；项铭涛等，2018；王敏钰等，2022）；从数据表格中获取了不同植被的NDVI的大致取值范围等。以林地为例，与其他植被类别相比，林地具有冠层和林下地表两层活动面，白天平均地表温度较低；植被的物候特征主要是通过绿叶期来表现的，林地平均生长始期相对其他地类较早，生长末期相对较晚；主要分布在山地地区，高程明显高于其他地类且坡度相对较大。因此，可得到如图2（a）所示知识图谱。因为植被物候是周期性变化的，无法实例化为单个数据性知识来反映，需通过多时相知识才能体现植被物候特征。为此，利用多种遥感数据源，可把这些知识实例化为如图2（b）所示的样本知识。

通常认识一种地类是综合与其相关的多条知识的结果，因此对于某一地类的多条知识可以在

图谱表示中的实体和其多种属性值之间抽象出一个综合多条知识的隐藏节点，隐藏节点的值 Y 可看作是該实体多种属性值组合而成的一个属性值向量，如图3所示。如此抽象得到的隐藏节点將一种地类的多条知识综合为一条知识表达，便于在知识图谱嵌入过程中使用高斯模型定义嵌入空间以及后续知识推理。

图3中 $Y = \{15, 18, 300, 0.28, 0.38, 0.43, 0.33\}$ 。但这种形式的图数据不便于直接存储，通常將图谱中的每一条知识都转换为一个三元组：

$$(h, r, t) \tag{1}$$

式中， $h, t \in V$ 分别表示头部实体和尾部实体， $r \in E$ 表示关系。將图结构转变为三元组的形式，便于存储以及计算机程序的读取和理解，因此可將图3中的知识进一步转换为（实体，实体属性，属性值）的形式，其中实体对应式（1）中的 h ，实体属性对应 r ，实体属性值对应 t ，即（林地，林地属性， $\{15, 18, 300, 0.28, 0.38, 0.43, 0.33\}$ ）。

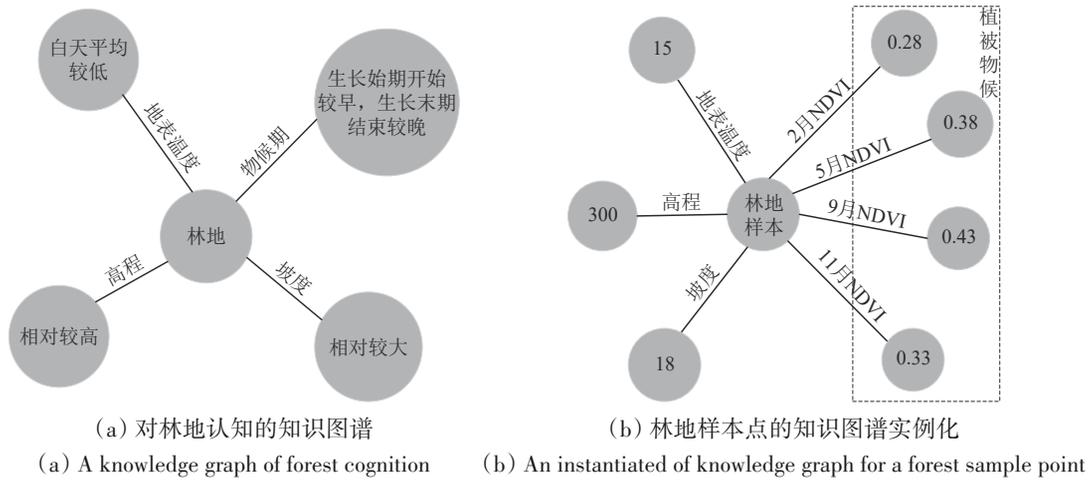


图2 知识图谱的表达

Fig. 2 The representation of knowledge graph

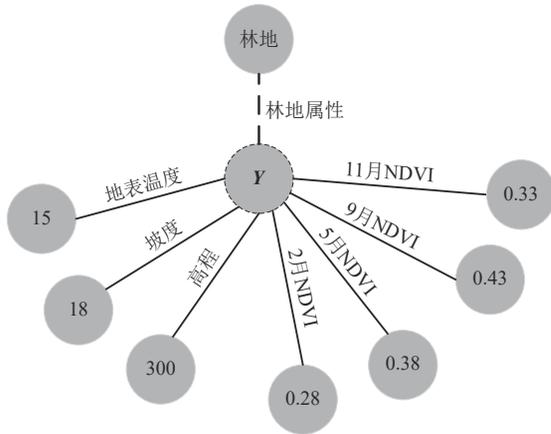


图3 隐藏节点的表示

Fig. 3 The representation of hidden nodes

2.2 知识图谱嵌入

知识图谱存储采用三元组表示方式，这是一种基于离散符号的文本表示，难以在计算机中表达相应语义层面的信息，使得知识图谱的后续操作难以进行 (Wang 等, 2017; Sun 等, 2019)。为了能更好地与遥感图像相结合，以及后续知识推理，本文采用 Bordes 于 2013 年提出的知识图谱嵌入 KGE (Knowledge Graph Embedding) 模型——TransE 翻译模型 (Bordes 等, 2013)，对地学知识图谱进行嵌入训练。TransE 模型主要思想是将三元组中的实体和关系映射到一个低维连续的向量空间中，同时保留了知识图谱原有的结构特征。在该模型中，三元组 (h, r, t) 中 h, r, t 均被表示为同一空间中的嵌入向量，关系 r 被描述为头实体 h 和尾实体 t 之间的翻译，即：

$$h + r \approx t \quad (2)$$

在嵌入向量训练过程中，由知识图谱中知识转化而来的正例三元组 (h, r, t) 应满足式 (2)，同时为验证嵌入训练的准确性而生成的负例三元组 (h', r', t') (通常是通过替换正例三元组的头实体或尾实体来创建)，应满足：

$$h' + r' \neq t' \quad (3)$$

在嵌入空间中，实体 (关系) 的嵌入向量之间的距离可用来衡量实体 (关系) 之间的相似度，基于此定义得分函数为

$$f(h, r, t) = \|h + r - t\|_{L1/L2} \quad (4)$$

式中， $L1/L2$ 表示使用 $L1$ 或 $L2$ 范数，为了便于后续知识推理过程中的距离计算，本文选用 $L2$ 范数形式的得分函数。得分越小，对正例三元组越有利；反之，对负例三元组越有利。为了尽可能地将正负三元组分开，定义损失函数为

$$L = \sum_{(h,r,t) \in S} \sum_{(h',r',t') \in S'} [\gamma + f(h,r,t) - f(h',r',t')]_+ \quad (5)$$

式中， S 表示正例三元组集合， S' 表示负例三元组集合， $[x]_+$ 表示正值函数， γ 表示间隔参数，是大于零的边缘超参数，表示正例和负例三元组之间的间隔修正，即 γ 为正例和负例三元组得分之间的最大距离，确保负例三元组的得分不会无限大，根据文献 (Bordes 等, 2013) 将 γ 设置为 1。

2.3 光谱解混算法

稀疏解混方法充分利用了光谱特征实现端元的选择，然而，由于端元存在光谱变异性，端元的光谱扰动在一定程度上影响了端元选择的结果，使其精度具有不确定性。为了解决这一问题，本文将先验知识与稀疏解混相结合，在利用光谱特

征同时，引入一定的先验知识来进一步提高端元选择的可靠性。

具体而言，当像元中某一端元的先验知识越大时，对应端元存在的可能性越大，被选择的概率也将越大，而最终的选择结果仍需要结合端元的光谱特征来决定。为此，定义一个平衡参数 c ，用于平衡先验知识和端元光谱在解混过程中所起的效果，从而构建权重参数 ω ：

$$\omega_i = \frac{(c+1) \cdot \max(p_i)}{p_i + c \cdot \max(p_i) + \varepsilon} \quad (6)$$

式中， p 为知识推理得到的先验知识， c 为非负的平衡参数， ε 是一个极小的正数。可见，当 c 的值越小时，调整得到的 ω 类似于对 p 中的元素值进行归一化处理，说明先验知识在解混过程中所起的引导作用越大；当 c 的值越大时，调整得到的 ω 中各元素值相近，效果越接近于等概率，说明先验知识在解混过程中所起的引导作用越小，效果将接近于传统的稀疏解混。对于先验知识 p 而言，当固定其他参数时， p 越大得到的 ω 越小，通过小的权重值抑制大的稀疏系数；同理，用大的权重值抑制小的稀疏系数，从而增强了稀疏表达。若先验知识中，所有端元具有等概率的先验时，计算得到的权重参数 ω 中各元素的值为 1，对稀疏系数的抑制作用相同，此时算法就等效于传统的稀疏解混算法 (SUnSAL)。

利用式 (6)，得目标函数：

$$\min_x \frac{1}{2} \|y - Ax\|_2^2 + \lambda \|\omega \odot x\|_1 \quad \text{s.t. } x \geq 0 \quad (7)$$

式中， λ 为正 regularization 参数，符号 \odot 表示点乘，即对应位置的元素相乘。

式 (7) 可采用交替方向乘子法 (ADMM) 进行求解。此时，对应的增广拉格朗日函数为

$$\begin{aligned} L(x, u_1, u_2, d_1, d_2) = & \min_x \frac{1}{2} \|y - u_1\|_2^2 + \lambda \|\omega \odot u_2\|_1 + \\ & \frac{\mu}{2} \|Ax - u_1 - d_1\|_2^2 + \frac{\mu}{2} \|x - u_2 - d_2\|_2^2 \quad (8) \\ \text{s.t. } & u_1 = Ax, u_2 = x, x \geq 0 \end{aligned}$$

式中， μ 为惩罚参数。根据 ADMM 算法可得以下的更新迭代规则：

$$x^{i+1} \leftarrow \arg \min_x \frac{\mu}{2} \|Ax - u_1 - d_1\|_2^2 + \frac{\mu}{2} \|x - u_2 - d_2\|_2^2 \quad (9)$$

$$u_1^{i+1} \leftarrow \arg \min_{u_1} \frac{1}{2} \|y - u_1\|_2^2 + \frac{\mu}{2} \|Ax - u_1 - d_1\|_2^2 \quad (10)$$

$$u_2^{i+1} \leftarrow \arg \min_{u_2} \lambda \|\omega \odot u_2\|_1 + \frac{\mu}{2} \|x - u_2 - d_2\|_2^2 \quad (11)$$

$$d_1^{i+1} \leftarrow \arg \min_{d_1} \frac{\mu}{2} \|Ax - u_1 - d_1\|_2^2 \quad (12)$$

$$d_2^{i+1} \leftarrow \arg \min_{d_2} \frac{\mu}{2} \|x - u_2 - d_2\|_2^2 \quad (13)$$

分别对式 (9)–(13) 进行求导，得到各参数的迭代公式为

$$x^{i+1} \leftarrow (A^T A + I)^{-1} (A^T (u_1^i + d_1^i) + (u_2^i + d_2^i)) \quad (14)$$

$$u_1^{i+1} \leftarrow \frac{1}{\mu + 1} (y + \mu (Ax^{i+1} - d_1^i)) \quad (15)$$

$$u_2^{i+1} \leftarrow \text{soft}(x^{i+1} - d_2^i, \frac{\lambda}{\mu} \omega) \quad (16)$$

$$d_1^{i+1} \leftarrow d_1^i - Ax^{i+1} + u_1^{i+1} \quad (17)$$

$$d_2^{i+1} \leftarrow d_2^i - x^{i+1} + u_2^{i+1} \quad (18)$$

式中， $\text{soft}(\cdot)$ 为软阈值函数：

$$\text{soft}(a, b) = \text{sign}(a) \cdot \max\{|a| - b, 0\} \quad (19)$$

$\text{sign}(a)$ 为符号函数，用来控制矩阵所有元素的正负，即 $a > 0$ 时，值为 1； $a < 0$ 时，值为 -1。

综上所述，光谱解混算法的流程如算法 1 所示。

算法 1：光谱解混算法

输入：待解混图像 $y \in \mathbf{R}^{L \times k}$ ，光谱库 $A \in \mathbf{R}^{L \times m}$ ，先验知识 p

1. 初始化：

2. 迭代次数 $i = 0$

3. 初始参数 $\mu > 0$ ， $x^0, d_2^0 \in \mathbf{R}^{m \times N}$ ， $d_1^0 \in \mathbf{R}^{L \times k}$

4. 迭代过程：

5. 更新迭代 $i = i + 1$

6. 根据式 (14) 更新丰度矩阵 x^i

7. 根据式 (15) 更新参数 u_1^i

8. 根据式 (16) 更新参数 u_2^i

9. 根据式 (17) 更新参数 d_1^i

10. 根据式 (18) 更新参数 d_2^i

11. 终止条件 $\|x^{i+1} - x^i\|_2 \leq \delta$ 或达到最大迭代次数 N

12. 输出：

13. 最优丰度矩阵 x^{i+1}

2.4 具体实现

综合前 3 节的方法，得到知识图谱嵌入的光谱解混算法 KGESU (Knowledge Graph Embedding Spectral Unmixing)。其实现主要分为 4 个步骤：地学知识图谱的表达、知识图谱的嵌入训练、知识推理以及引入先验知识的光谱解混，如图 4 所示。

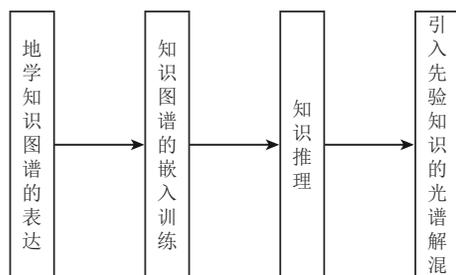


图4 KGESU算法流程

Fig. 4 The process of KGESU algorithm

(1) 地学知识图谱的表达。为了将现有的先验知识融入到解混过程中，首先在多源数据中选取明显地物特征的少量样本。再通过分类与回归树 CART (Classification And Regression Trees) 算法建立决策树 (De' Ath 和 Fabricius, 2000)，并从决策树中选取纯度很高的若干个结点样本，由于纯度高的结点，对应的样本可靠性高，由此可扩充一批很高质量的样本。最后采用 2.1 节中式 (1) 将每个样本转化为三元组表示，从而实现地学知识图谱的表达。

(2) 知识图谱的嵌入训练。若直接使用式 (2)—(5) 对地学知识图谱的三元组表示进行嵌入训练，将存在以下问题：

1) TransE 模型是用于文本知识的嵌入训练，即模型将三元组中的头实体、关系和尾实体所表示的内容视为是各自的“名字”，不能体现内容所代表的具体含义。例如，对于实例三元组 (林地, 林地属性, {15, 18, 300, 0.28, 0.38, 0.43, 0.33})，其中尾部实体中的 15 表示的是林地的一个实例化的地表温度，18 对应的是坡度，300 为高程，0.28、0.38、0.43、0.33 分别为该实例的 2 月、5 月、9 月以及 11 月的 NDVI 值，这些属性值共同组成了一个林地实例化的属性值向量，通过对属性值向量的认知从而进一步认识地物。然而在训练过程中，模型将属性值向量视为是尾实体的名字即字符串的形式，忽略了其所表示的数值信息。

2) 通过采样方式构建的图谱中隐藏节点的属性值 Y 是由离散数据组合而成的向量，无法充分体现先验知识所表达的一类实体属性值的连续。并且不同属性值存在不同量纲问题，无法进行后续代数运算。

为解决上述问题，本文通过高斯模型对采样数据进行建模，高斯模型能在数据完备的前提下，拟合出数据的分布情况 (Dempster 等, 1977)，从

而将离散数据连续化。使用高斯模型对同一地类的所有采样数据的不同属性的属性值进行训练，拟合出各类属性值的分布情况。为了在嵌入训练过程中考虑知识中所包含的数值信息，以高斯模型拟合的数据分布情况作为嵌入空间中的特定维度，即嵌入空间维数等于实体属性值向量 Y 中元素的个数，每一类属性对应嵌入空间的一个维度。计算组成向量 Y 的每类属性值在其对应分布情况中的概率，以此概率值作为原有属性值嵌入空间中对维度的嵌入值，从而构成了隐藏节点在嵌入空间中的嵌入向量 t ，实现了对不同量纲数据的归一化。例如，对于实例化三元组 (林地, 林地属性, {15, 18, 300, 0.28, 0.38, 0.43, 0.33})，利用高斯模型建模得到林地的实例化地表温度的均值为 14.76，方差为 1.45，因此该三元组中地表温度 15 在嵌入空间中的嵌入值为 0.98，以此类推计算得到的实体属性值的嵌入向量 t 可表示为 {0.98, 0.80, 0.77, 0.63, 0.53, 0.69, 0.76}。然后，采用 2.2 节式 (2)—(5) 进行嵌入训练，以上述方法计算得到的向量 t 作为模型训练过程中的属性值嵌入向量的初始化向量，并在训练过程中保持不变，从而训练得到每种地类的实体嵌入向量 h 和实体属性嵌入向量 r ，以此作为后续知识推理过程中的标准实体嵌入向量 \bar{h} 和标准实体属性嵌入向量 \bar{r} ，嵌入训练流程如图 5 所示。

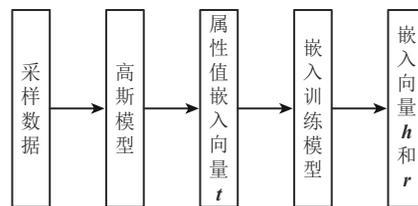


图5 地学知识图谱的嵌入流程

Fig. 5 The process of geoscientific knowledge graph embeddings

(3) 知识推理。在 TransE 模型中，是通过距离进行相似性度量的，因此进行知识推理获取先验知识的关键在于计算向量间的距离。

计算研究区中某一像元与标准地类实体的相似性时，从遥感影像数据中获取与该像元相关知识，然后利用高斯模型计算其嵌入向量 t_0 ，因为不同地类构建知识图谱的采样数据拟合的高斯模型不同，因此需要将获取的知识分别与不同地类拟合的高斯模型计算得到不同的向量 t_0 ，然后依据式 (2) 计算像元的属性嵌入向量 r_0 ，即：

$$r_0 = t_0 - \bar{h} \quad (20)$$

在 TransE 模型的嵌入空间中，向量间距离越大，其相似度越小，像元与对应标准地类间的相似度可用其属性嵌入向量之间的欧式距离表示，即： $\|\bar{r} - r_0\|_2$ ，记为 d 。得到的距离无法直接作为先验知识用于光谱解混，借助采样数据进行处理。计算各地类采样数据属性嵌入向量与其对应标准嵌入向量之间的距离，得到的是一个距离区间，

考虑到不同样本的纯度不同，选取距离区间的中间值作为参考距离记为 \bar{d} 。采用反距离权重的思想（贾悦等，2016；陆帆等，2019）对距离进行处理，计算每个 d 与 \bar{d} 之间的差值，差值越小所对应的先验知识值越大，然后对计算得到的差值利用最大最小值进行归一化处理，将归一化结果作为解混的先验知识 p 融入光谱解混过程，知识推理估算先验知识流程如图 6 所示。

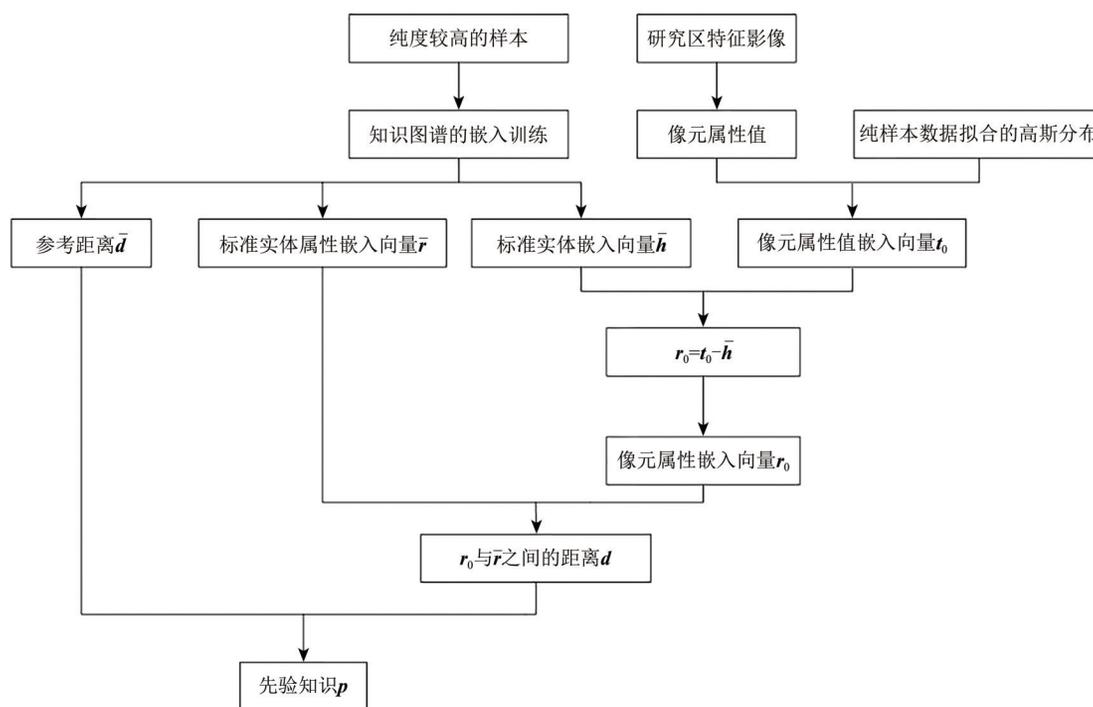


图 6 知识推理流程

Fig. 6 The process of knowledge inference

(4) 引入先验知识的光谱解混。以知识推理的结果作为 2.4 节的式 (6) 中的 p ，在通过表 1 算法所示的光谱解混算法得到最终的解混结果，此处不再赘述。

表 1 算法复杂度对比

Table 1 The comparison of algorithm time complexity

算法名称	算法时间复杂度
SUnSAL	$O(nN^2)$
S2WSU	$O(n^2N^3)$
KGESU	$O(n_c k + n_r k) + O((2n_r + 1)n) + O(nN^2)$

2.5 算法时间复杂度分析

全约束最小二乘法 (FCLS) 是在有限数量的递归中完成的，每个递归包含有限的步骤，由于所需递归的数量在很大程度上取决于数据，因此

FCLS 并无固定的时间复杂度，文献 (Heylen 等，2011) 中也遇到了相同的问题。论文中使用的多端元解混算法 (MEMSA) 是基于 FCLS 实现的，因此表 1 仅进行了稀疏解混算法 (SUnSAL)、光谱-空间加权稀疏回归算法 (S2WSU) 以及本文提出的 KGESU 算法的时间复杂度对比。其中， n 为图像像元个数， N 为端元个数， n_c 为知识图谱中实体总数， n_r 为知识图谱中关系总数， k 为知识图谱嵌入的维度。对于 KGESU 算法而言，其时间复杂度主要 3 部分组成：知识图谱嵌入训练的时间复杂度 $O(n_c k + n_r k)$ 、知识推理的时间复杂度 $O((2n_r + 1)n)$ 、光谱解混的时间复杂度 $O(nN^2)$ ，由于构建的知识图谱中关系的数量较少，实体数据较多，因此 KGESU 算法的时间复杂度主要增加在知识图谱嵌入部分。

3 实验与结果分析

本文的算法关键在于利用知识图谱嵌入的方式进行知识推理,从而获得先验知识。构建知识图谱需从多种遥感数据源中采样,而模拟数据很难模拟出这些地学规律,因此本文主要使用真实高光谱数据进行实验。

3.1 实验数据及其用途

实验数据的研究区为广东省东莞市,使用的数据主要分为3大类:用于提取数据性知识的多源数据、光谱解混数据以及检验解混精度的验证数据。

(1) 多源数据。要实现 KGESU 算法需要通过一些辅助数据对地学知识图谱中的先验知识实例化,使用的辅助数据以及实例化得到的数据性知识如表2所示。其中,Landsat 8图像用于计算NDVI、归一化水体指数NDWI (Normalized Difference Water Index) 以及地表温度LST (Land Surface Temperature), NDVI采用了2018年2月、5月,2016年9月以及2019年11月的图像,NDWI是从2018年2月的Landsat 8图像中计算得到,LST采用劈窗算法(Split window algorithm),借助北京大学遥感与地理信息系统研究所的Landsat 8地表温度反演软件(Du等,2015),从2018年2月的Landsat 8图像中反演得到。

表2 数据源及其对应的知识类型

Table 2 Data sources and the corresponding knowledge types

数据源	知识度量	知识类型
时相相近的Landsat 8 OLI	NDWI	属性
多时相Landsat 8 OLI	多时相NDVI	物候
GDEM V2数据	DEM、坡度、坡向	环境
时相相近的Landsat 8 TIRS	地表温度	属性

(2) 光谱解混数据。待光谱解混数据是高分五号卫星于2019年2月获取的广东省东莞市的图像,其中,可见光—近红外波段(VN)为150个,短波红外波段(SW)为180个,共330个波段,空间分辨率为30 m。

对高光谱影像进行的预处理主要是辐射定标和大气校正,辐射定标将DN值转化为辐射亮度或表观反射率数据,大气校正将辐射定标的结果消除大气传输的影响生成地表反射率数据。在影像

的预处理过程中,由于水气等各方面的影响,有部分的波段值为空值,形成坏波段,因此需进行坏波段移除,移除的坏波段有VN: 1—3、128—132; SW: 15—19、40—60、95—115、119—121、163—180。坏波段移除后,截取480—940 nm范围内的波段,共计106个波段,主要分布在可见光和近红外波段范围内,能够更好地反映出地物的光谱特性。

(3) 验证数据。验证数据采用高分二号获取的高空间分辨率图像,其全色波段分辨率为1 m,多光谱波段为4 m。将全色和多光谱波段进行图像融合后获得1 m分辨率的多光谱图像。在研究区内,结合野外调研资料以及目视判读选取样本,使用支持向量机SVM (Support Vector Machine) 分类器以及主动学习方法,对融合图像进行精确分类,以此作为参考图。

由于篇幅限制,仅展示各时间段的一幅影像数据的详细信息如表3所示,其余影像信息不再一一列出。

表3 图像的元数据

Table 3 Metadata of the images

数据源	影像获取时间	中心经度/°E	中心纬度/°N	星下点Path/Row
Landsat 8 OLI	2018-02-12	113.5864	23.1125	122/44
	2018-05-03	113.5596	23.1129	122/44
	2016-09-18	113.5836	23.1128	122/44
	2019-11-12	113.5846	23.1091	122/44
高分二号数据	2019-03-11	113.841	22.9295	1015/186
高分五号数据	2019-01-29	113.9495	22.8830	324/586

(4) 实验数据的地学知识图谱嵌入训练。通过地学先验知识构建地学知识图谱的三元组表示(实体,实体属性,实体属性值),构建的林地三元组为(林地,林地属性,{2月NDVI,5月NDVI,9月NDVI,11月NDVI,2月NDWI,LST,DEM,坡度,坡向})。利用2.1节中的实例化方法,从多源数据中采样,对三元组进行实例化表达,其中林地的一个实例化表达为(林地,林地属性,{0.28,0.38,0.43,0.33,-0.26,15,300,20,230})。对所有地类实例化完成后,对每种地类的各个属性值分别进行数据统计,建立各自的高斯模型来拟合数据分布。对于林地的一个实例化三元组(林地,林地属性,{0.28,0.38,0.43,0.33,-0.26,15,300,20,230}),对于林地2月NDVI建立的高斯

模型均值为0.29，方差为0.06，从而林地属性向量中的0.28在向量空间中的嵌入值为0.98，5月NDVI的高斯模型均值为0.39，方差为0.04，因此0.38的嵌入值为0.96，以此类推最终得到该三元组的属性值嵌入向量 t 为{0.98, 0.94, 0.70, 0.80, 0.67, 0.85, 0.80, 0.72, 0.66}。最后结合TransE模型进行训练，得到每种地类的实体嵌入向量 h 和实体属性嵌入向量 r ，以此作为后续知识推理的参考标准。

3.2 精度评价指标

即使使用参考图，但由于粗分辨率的混合像元和高分辨率的验证像元之间的精确对应关系很难确定，逐像元评价会存在一定的不确定性。为了减少这种误差，本文通过扩大评价窗口，增加像元之间的重叠区域，将残差进行分配，从而降低不同分辨率图像对配准误差的敏感性(Xue等, 2020; Zhou等, 2021; Hou等, 2022)。评价窗口越大，重叠区域越大，配准误差的影响就越小，然而窗口越大，对图像细节处解混误差评价的不确定性就越大，因此考虑重叠区域大于75%即可。评价窗口大小的确定是参考文献(Hou等, 2022)中提到的公式，即式(21)

$$R = \left(1 - \frac{s_x}{p \times m}\right) \left(1 - \frac{s_y}{p \times m}\right) \times 100\% \quad (21)$$

式中， R 表示像素间的重叠区域，评价窗口大小 $p \times p$ ， m 为不同分辨率图像分辨率之比， s_x ， s_y 分别为图像在行列上的像元偏移，如图7所示。考虑到图像配准时存在的像元不重合以及区域偏差问题，实验中将 s_x ， s_y 均设置为0.6 m，分辨率之比为 $m=30$ ，计算得出当 $p=5$ 时重叠区域为77.44%，后续实验采用 5×5 窗口进行精度评价。

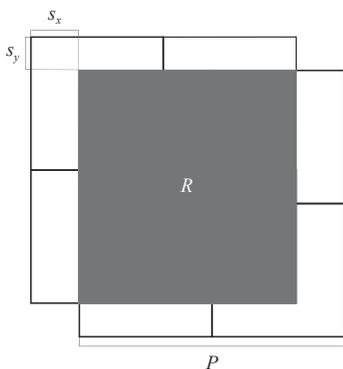


图7 评价窗口示意图

Fig.7 The schematic diagram of evaluation window

精度评价指标采用的是每种端元的均方根误差 $rmse_i$ 、各端元均方根误差的均值 $mean$ 以及图像整体均方根误差RMSE (Root Mean Square Error)，各类指标的计算公式如下：

$$rmse_i = \sqrt{\sum_{j=1}^N (y_{ij} - \hat{y}_{ij})^2} \quad (22)$$

式中， N 表示窗口总数， y_{ij} 和 \hat{y}_{ij} 表示第 i 类端元的第 j 个窗口的丰度估计值和真实值。

$$mean = \frac{\left(\sum_{i=1}^C rmse_i\right)}{C} \quad (23)$$

式中， C 为端元类别总数。

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^N (y_{ij} - \hat{y}_{ij})^2}{C \times N}} \quad (24)$$

3.3 真实数据实验分析

为了验证算法的解混性能，本文选择广东省东莞市为研究区。参考东莞市土地利用数据得知该区域的土地利用类型主要有草地、水域、城镇、耕地、园地、林地以及裸地等7类，由于城镇用地这类端元的光谱曲线不唯一，可分为高反射率城镇用地和低反射率城镇用地。因此，将城镇用地端元分为高反射率城镇用地端元和低反射率城镇用地端元，实验从研究区高光谱图像上选取参考光谱，每种端元选择30个样本，统计每种端元光谱的平均值作为该端元的参考光谱，得到八端元光谱库，如图8(a)和(b)所示。解混后将高反射率和低反射率城镇用地的丰度相加得到城镇用地端元丰度。

利用上述方法，构建整个东莞市的地学知识图谱，进行嵌入训练。选取土地利用无变化、具有不同植被覆盖度的区域作为样区，进行基于知识图谱先验知识的光谱解混实验，并与FCLS、MEMSA、SUnSAL以及S2WSU进行对比。精度评价采用经过精确几何配准的时像相近的高分二号卫星影像数据融合图像作为参考底图，在样区内，结合野外调研资料以及目视判读选取样本，使用支持向量机(SVM)分类器，对样区进行精确分类，并通过类别概率和丰度均值的比较来进行精度评价。共选取5个样区进行实验，每个样区的高光谱图像大小均为 50×50 ，各样区高分五号影像、高分二号影像以及分类结果如图9所示。

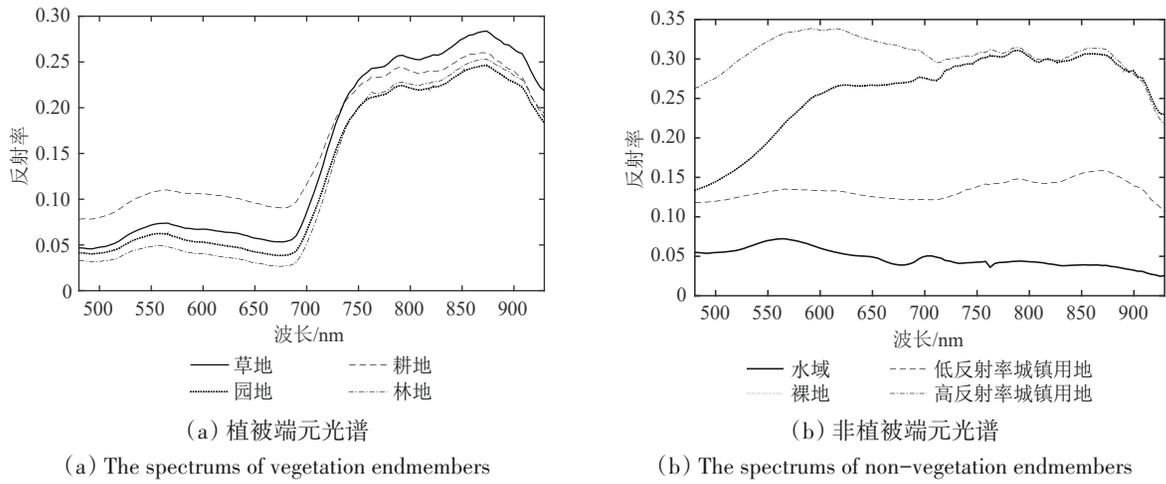


图8 端元光谱库

Fig. 8 The spectrum library of endmembers

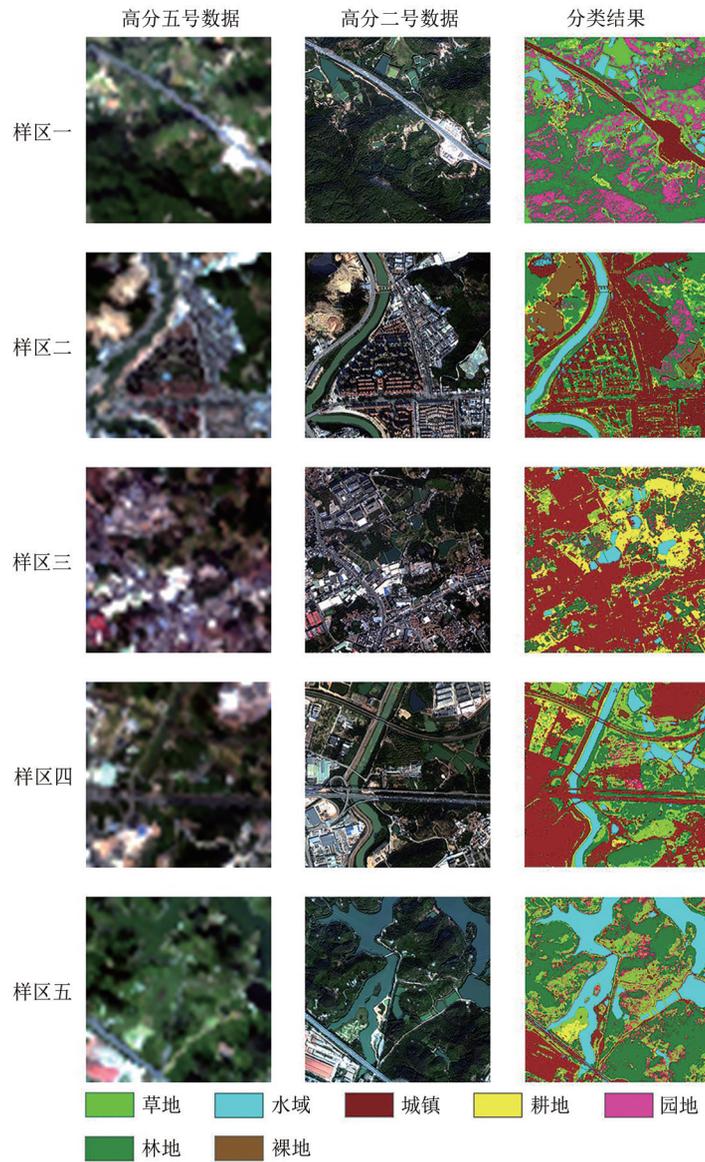


图9 全部样区数据示意图

Fig. 9 All sample area data schematic diagram

3.3.1 算法运行时间分析

为比较 KGESU 算法的性能，比较不同算法对一幅 50×50 大小的高光谱影像进行解混所需的平均时间，表 4 为 KGESU 算法各阶段运行时间的比较，各算法运行时间对比如表 5 所示，其中所有解混算法均基于 Matlab2021a 实现，知识图谱嵌入以及知识推理基于 python 实现，。运算设备参数为：CPU：AMD 5800H @ 3.20 GHz，16 G 运行内存，GPU 为笔记本端 NVIDIA GeForce RTX 3070 Laptop 8 G。

表 4 KGESU 算法各阶段运行时间
Table 4 The running time of each stage of KGESU algorithm

参量	知识图谱嵌入	知识推理	光谱解混
运行时间/s	3804	14.40	0.55

从表 4 和表 5 中可知，KGESU 算法运行稍慢，运行时间主要是知识图谱嵌入部分。知识图谱嵌入是对全区域的样本数据进行训练，且只需要训练一次，同参与光谱解混的高光谱图像的尺寸和数量无关，训练得到嵌入向量后，后续继续对区域内其他高光谱影像进行解混时，只需进行知识推理和光谱解混过程，运行时间较快。

表 5 所有算法运行时间

Table 5 The running time of all algorithm

算法名称	平均解混时间/s
FCLS	17.55
MEMSA	3670
SUnSAL	0.42
S2WSU	2.20
KGESU	3818.95 (其中 3804 为知识图谱嵌入所需时间)

3.3.2 参数选择

(1) 正则化参数 λ 的选择。在 SUnSAL、S2WSU、KGESU 的目标函数中，均包含正则化参数 λ ，用于调节稀疏约束对算法的影响。为了研究正则化参数 λ 对算法性能的影响，本文分别对 3 种算法设置不同 λ 进行实验，并比较不同 λ 值情况下算法的解混效果，设置迭代次数为 200 次，分别得到每种算法各自最优正则化参数 λ 。为了减少计算量， λ 将从有限数据集 $\{10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}\}$ 中选择。图 10 (a)、图 10 (b)、图 10 (c) 分别展示了 SUnSAL、S2WSU、KGESU 算法中每个样区 RMSE 随 λ 变化的不同结果。

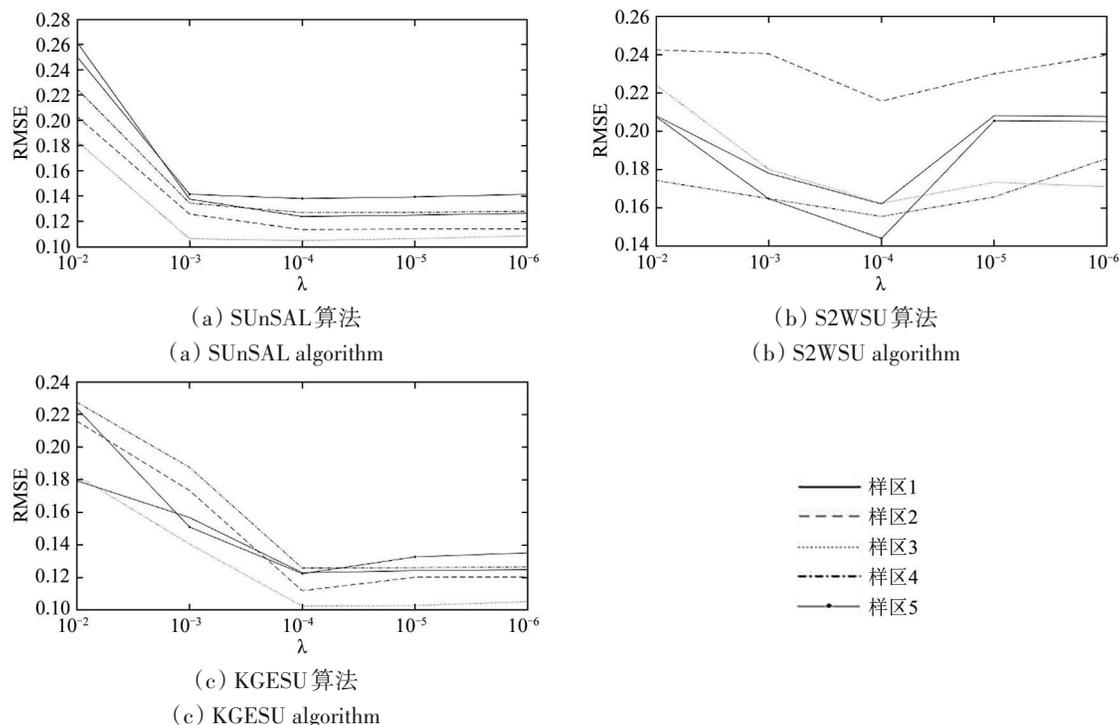


图 10 不同正则化参数 λ 对解混结果的影响

Fig. 10 The influence of different regularization parameter λ on the result of unmixing

由图 10 可知，不同正则化参数 λ 对算法的稀疏约束不同，导致解混结果不同。对于 SUnSAL 算

法，当参数 λ 大于 10^{-4} 时，所有样区 RMSE 均随着 λ 的减小而减小；当参数 λ 小于 10^{-4} 时，5 个样区

中 RMSE 均变化较小趋于稳定。对于 S2WSU 算法, 所有样区 RMSE 随着 λ 的总体变化趋势为: 当参数 λ 大于 10^{-4} 时, RMSE 随着 λ 的减小而减小; 当参数 λ 小于 10^{-4} 时, RMSE 随着 λ 的减小而增大。对 KGESU 算法而言, 当参数 λ 大于 10^{-4} 时, RMSE 随着 λ 的减小逐渐减小, 而当参数 λ 小于 10^{-4} 时, RMSE 随着 λ 减小而增大。由此可得出, 3 种算法参数 λ 的最佳值均在 10^{-4} 附近, 在后续实验中每种算法的 λ 均设为 10^{-4} 。

(2) 平衡参数 c 的选择。在 KGESU 算法中, 加入平衡参数 c 来调整先验知识的在解混过程中所起的作用, 为了研究 c 对算法性能的影响, 设置正则化参数 $\lambda = 10^{-4}$, 比较不同调整参数 c 情况下的解混效果, c 从有效数据集 $\{0, 0.5, 1, 1.5, 2, 3\}$ 中选择。图 11 为不同 c 值情况下的解混效果, 可以看出, 参数 c 变化趋势大致为: 当 c 小于 1.5 时, RMSE 随着 c 的增大而减小; 当 c 大于 1.5 时, 部分样区 RMSE 有所增大, 部分样区变化较小并趋于稳定, 即参数 c 的最佳值在 1.5 附近, 后续实验中参数 c 均设为 1.5。

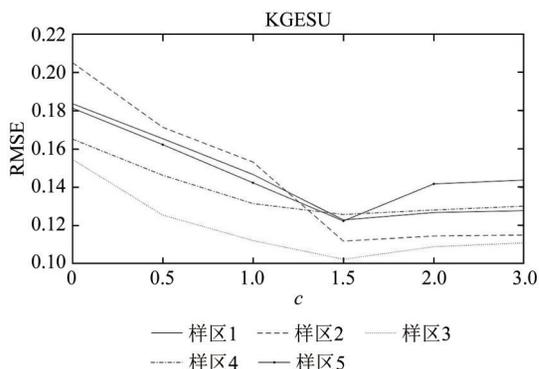


图 11 不同平衡参数 c 对解混结果的影响

Fig. 11 The influence of different equilibrium parameter c on the result of unmixing

3.3.3 解混结果精度比较

为了验证 KGESU 算法的解混性能, 对 5 个样区分别利用 FCLS、MEMSA、SUnSAL、S2WSU 以及 KGESU 算法进行实验, 并与参考值进行比较, 计算每个样区各端元地类的 $rmse_i$ 、 $mean$ 以及 RMSE。表 6 展示了所有样区在不同解混算法的精度评价结果, 图 12 为样区一的各算法丰度图以及参考丰度图, 由于篇幅限制, 其他 4 个样区的丰度结果图不再一一列出。

表 6 所有样区的精度评价

Table 6 The accuracy evaluation of all samples

类别	$rmse_i$					
	FCLS	MEMSA	SUnSAL	S2WSU	KGESU	
样区 1	草地	0.1337	0.1116	0.1770	0.1210	0.1785
	水体	0.2379	0.2915	<u>0.0796</u>	0.2472	0.0771
	城镇	0.0782	0.0895	0.0414	0.0959	<u>0.0417</u>
	耕地	0.0742	0.0667	0.0606	0.0524	<u>0.0591</u>
	园地	0.2828	0.2928	0.1892	0.1690	<u>0.1849</u>
	林地	0.1764	0.2206	<u>0.1649</u>	0.2571	0.1634
	裸地	<u>0.0405</u>	0.0469	0.0435	0.0359	0.0433
mean	0.1462	0.1599	<u>0.1080</u>	0.1397	0.1069	
RMSE	0.1685	0.1876	<u>0.1242</u>	0.1620	0.1229	
类别	$rmse_i$					
	FCLS	MEMSA	SUnSAL	S2WSU	KGESU	
样区 2	草地	0.1234	0.0547	0.1289	0.1295	<u>0.1220</u>
	水体	0.2822	0.3046	<u>0.0973</u>	0.3629	0.0936
	城镇	0.2734	0.2971	0.1499	0.3476	<u>0.1534</u>
	耕地	0.0654	0.0649	0.0578	0.0672	<u>0.0598</u>
	园地	0.0775	<u>0.0717</u>	0.0769	0.1035	0.0708
	林地	0.1314	0.01197	0.1268	0.1492	<u>0.1237</u>
	裸地	0.1307	0.1297	<u>0.1294</u>	0.1369	0.1286
mean	0.1549	0.1489	<u>0.1096</u>	0.1853	0.1074	
RMSE	0.1749	0.1791	<u>0.1138</u>	0.2157	0.1119	
类别	$rmse_i$					
	FCLS	MEMSA	SUnSAL	S2WSU	KGESU	
样区 3	草地	0.2428	0.1021	<u>0.0754</u>	0.1107	0.0701
	水体	<u>0.0933</u>	0.0863	0.1083	0.1893	0.1036
	城镇	0.1605	0.1679	<u>0.1543</u>	0.3119	0.1534
	耕地	0.1548	0.1602	0.1369	<u>0.1313</u>	0.1307
	园地	0.1100	0.1145	<u>0.0737</u>	0.0810	0.0736
	林地	0.1081	0.1220	0.0930	0.1033	<u>0.0947</u>
	裸地	0.0444	0.0693	0.0579	0.0689	<u>0.0578</u>
mean	0.1305	0.1175	<u>0.0999</u>	0.1423	0.0977	
RMSE	0.1430	0.1222	<u>0.1052</u>	0.1624	0.1028	
类别	$rmse_i$					
	FCLS	MEMSA	SUnSAL	S2WSU	KGESU	
样区 4	草地	0.1751	<u>0.1124</u>	0.1443	0.0774	0.1403
	水体	0.1472	0.1685	<u>0.1061</u>	0.1798	0.1032
	城镇	0.1940	0.2232	<u>0.1706</u>	0.2742	0.1702
	耕地	0.1238	0.1206	0.1127	0.0955	<u>0.1125</u>
	园地	<u>0.1005</u>	0.1366	0.1008	0.1070	0.0975
	林地	0.1440	0.1527	<u>0.1518</u>	0.1750	0.1545
	裸地	<u>0.0809</u>	0.0952	0.0810	0.0678	0.0813
mean	0.1380	0.1442	<u>0.1239</u>	0.1395	0.1228	
RMSE	0.1428	0.1495	<u>0.1274</u>	0.1555	0.1265	
类别	$rmse_i$					
	FCLS	MEMSA	SUnSAL	S2WSU	KGESU	
样区 5	草地	0.1840	<u>0.1230</u>	0.1635	0.1158	0.1416
	水体	0.2042	0.2363	<u>0.1313</u>	0.2024	0.1297
	城镇	0.1264	0.1363	0.0863	0.1155	<u>0.0881</u>
	耕地	0.0694	0.0679	<u>0.5934</u>	0.0777	0.0541
	园地	0.2629	0.2464	0.1925	0.1619	<u>0.1719</u>
	林地	0.1656	0.2342	0.1866	0.2078	<u>0.1835</u>
	裸地	<u>0.0562</u>	0.0648	0.0851	0.0451	0.0850
mean	0.1527	0.1584	<u>0.1292</u>	0.1323	0.1220	
RMSE	0.1674	0.1748	<u>0.1384</u>	0.1440	0.1298	

注: 黑体数据为最优值, 加下划线数据为次优值。

对于 KGESU 算法，在所有样区的各端元的 $rmse_i$ 中最大值为 0.1849，最小值为 0.0417。由于使用的高光谱解混数据的分辨率为 30 m，精度检验数据分辨率为 1 m，且样区分类方法采用的是监督分类，通过分类得到的类别概率存在着一定的误差，因此样区采用 KGESU 算法进行混合像元分解后得到的丰度均值的误差在可接受的范围内，验证了该算法的正确性。从图 12 中可以看出，与参考丰度图相比较，KGESU 与 SUnSAL 算法解混得

到的丰度图比较相似，但 KGESU 算法得到的丰度图更具稀疏性，包含更少的干扰，如水体，更加接近高分二号影像数据中地物的分布。通过与 FCLS、MEMSA、SUnSAL 以及 S2WSU 算法进行精度评价可以看出，KGESU 算法估算的大部分端元的均方根误差 $rmse_i$ 最优或次优，且 5 个样区的各端元均方根误差的均值以及样区整体 RMSE 均为最优值，这说明 KGESU 算法的解混结果更接近真实结果，其解混效果优于其他对比算法，解混精度更高。

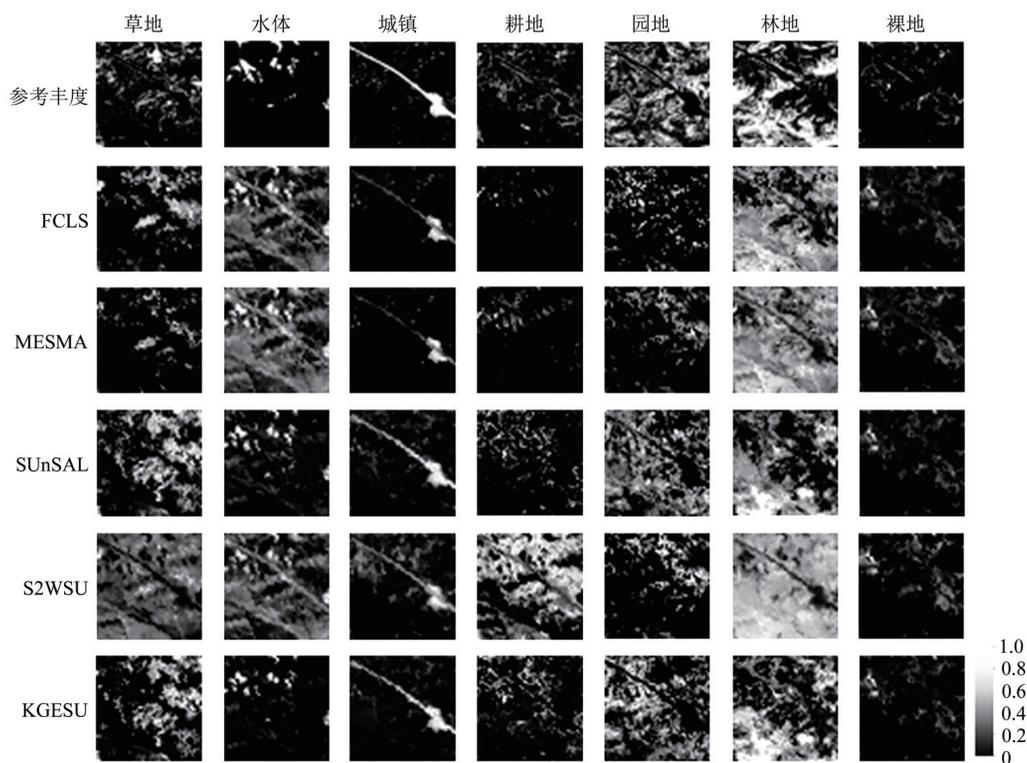


图 12 样区一解混丰度图

Fig. 12 The unmixing abundance map of sample one

4 结 论

本文提出了一种知识图谱嵌入的光谱解混算法 (KGESU)，该算法构建了一个知识图谱嵌入的解混框架，旨在能够从外部其他多源数据中引入更丰富的地学知识，通过知识的引导来改善由数据本身的光谱变异性、外部噪声等因素所带来的不确定性问题。同时，本方法能够从多源数据中获取先验知识，把各地类的物候差异、所处的地形、温度等地理环境差异所反应的地学规律引入到光谱解混过程，进一步提升对端元的辨析能力，能够在一定程度上减少端元选择的不确定性。最后，本方法结合了知识推理与数值计算的优势，

通过地学知识与光谱特征来共同确定端元，使得解混结果更加可靠。实验结果表明与传统的 FCLS、MEMSA、SUnSAL 和 S2WSU 算法相比，KGESU 算法的解混精度更高，证明了该方法具有一定的应用潜力。

本研究有以下问题需要进一步考虑：(1) 本文仅从土地利用一级分类的角度构建知识图谱引入先验知识，后续工作可考虑二级或者更丰富的分类，以突显高光谱图像的优势；(2) 考虑更复杂的地物关系，引入更丰富的地学知识，进一步构建更加完善的地学知识图谱；(3) 图嵌入的知识推理是目前相对较好的一种将推理结果融入光谱解混的方法，随着技术的不断发展，进一步尝

试对图嵌入算法进行优化提升算法的运行效率以及通过其他知识推理机制实现先验知识的引入。

参考文献(References)

- Bhatt J S and Joshi M V. 2020. Deep learning in hyperspectral unmixing: a review//2020 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium. Waikoloa: IEEE: 2189-2192 [DOI: 10.1109/IGARSS39084.2020.9324546]
- Bioucas-Dias J M, Plaza A, Dobigeon N, Parente M, Du Q, Gader P and Chanussot J. 2012. Hyperspectral unmixing overview: geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 5(2): 354-379 [DOI: 10.1109/jstars.2012.2194696]
- Bordes A, Usunier N, Garcia-Durán A, Weston J and Yakhnenko O. 2013. Translating embeddings for modeling multi-relational data//Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems. Lake Tahoe: Curran Associates Inc.: 2787-2795
- De'Ath G and Fabricius K F. 2000. Classification and regression trees: a powerful yet simple technique for ecological data analysis. *Ecology*, 81(11): 3178-3192 [DOI: 10.1890/0012-9658(2000)081[3178:CARTAP]2.0.CO;2]
- Dempster A P, Laird N M and Rubin D B. 1977. Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B*, 39(1): 1-22
- Dobigeon N, Moussaoui S, Coulon M, Tournet J Y and Hero A O. 2009. Joint Bayesian endmember extraction and linear unmixing for hyperspectral imagery. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 57(11): 4355-4368 [DOI: 10.1109/tsp.2009.2025797]
- Du C, Ren H Z, Qin Q M, Meng J J and Zhao S H. 2015. A practical split-window algorithm for estimating land surface temperature from landsat 8 data. *Remote Sensing*, 7(1): 647-665 [DOI: 10.3390/rs70100647]
- Ha K, Ding Q L, Men M X and Xu H. 2015. Spatial distribution of land use and its relationship with terrain factors in hilly area. *Geographical Research*, 34(5): 909-921 (哈凯, 丁庆龙, 门明新, 许峰. 2015. 山地丘陵区土地利用分布及其与地形因子关系——以河北省怀来县为例. *地理研究*, 34(5): 909-921) [DOI: 10.11821/dlyj201505010]
- Han Z, Hong D F, Gao L R, Zhang B and Chanussot J. 2021. Deep half-Siamese networks for hyperspectral unmixing. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 18(11): 1996-2000 [DOI: 10.1109/LGRS.2020.3011941]
- Heylen R, Burazerovic D and Scheunders P. 2011. Fully constrained least squares spectral unmixing by simplex projection. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 49(11): 4112-4122 [DOI: 10.1109/TGRS.2011.2155070]
- Hou S W, Sun W F, Guo B L, Li X D, Zhang J H, Xu C Z, Li X B, Shao Y Z and Li C. 2022. RFSDAF: a new spatiotemporal fusion method robust to registration errors. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 60: 5616018 [DOI: 10.1109/TGRS.2021.3138078]
- Iordache M D, Bioucas-Dias J M and Plaza A. 2011. Sparse unmixing of hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 49(6): 2014-2039 [DOI: 10.1109/tgrs.2010.2098413]
- Jia N F, Duan J N and Qiao Z M. 2007. Analysis method of spatial distribution of land use in relation to topo. *Economic Geography*, 27(2): 310-312 (贾宁凤, 段建南, 乔志敏. 2007. 土地利用空间分布与地形因子相关性分析方法. *经济地理*, 27(2): 310-312) [DOI: 10.15957/j.cnki.jjdl.2007.02.029]
- Jia Y, Cui N B, Wei X P, Gong D Z and Hu X T. 2016. Applicability evaluation of different algorithms for reference crop evapotranspiration in Yangtze River Basin based on inverse distance weighted method. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 32(6): 130-138 (贾悦, 崔宁博, 魏新平, 龚道枝, 胡笑涛. 2016. 基于反距离权重法的长江流域参考作物蒸散量算法适用性评价. *农业工程学报*, 32(6): 130-138) [DOI: 10.11975/j.issn.1002-6819.2016.06.018]
- Li J, Agathos A, Zaharie D, Bioucas-Dias J M, Plaza A and Li X. 2015a. Minimum volume simplex analysis: a fast algorithm for linear hyperspectral unmixing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 53(9): 5067-5082 [DOI: 10.1109/tgrs.2015.2417162]
- Li W L and Wu C S. 2015b. Incorporating land use land cover probability information into endmember class selections for temporal mixture analysis. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 101: 163-173 [DOI: 10.1016/j.isprsjprs.2014.12.007]
- Li Y S, Kong D Y, Zhang Y J, Chen R X and Chen J D. 2021. Representation learning of remote sensing knowledge graph for zero-shot remote sensing image scene classification//2021 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium. Brussels: IEEE: 1351-1354 [DOI: 10.1109/IGARSS47720.2021.9553667]
- Li Y S, Ouyang S and Zhang Y J. 2022. Combining deep learning and ontology reasoning for remote sensing image semantic segmentation. *Knowledge-Based Systems*, 243: 108469 [DOI: 10.1016/j.knsys.2022.108469]
- Liu X T, Zhou L, Shi H, Wang S Q and Chi Y G. 2018. Phenological characteristics of temperate coniferous and broad-leaved mixed forests based on multiple remote sensing vegetation indices, chlorophyll fluorescence and CO₂ flux data. *Acta Ecologica Sinica*, 38(10): 3482-3494 (刘啸添, 周蕾, 石浩, 王绍强, 迟永刚. 2018. 基于多种遥感植被指数、叶绿素荧光与CO₂通量数据的温带针阔混交林物候特征对比分析. *生态学报*, 38(10): 3482-3494) [DOI: 10.5846/stxb201708211508]
- Lu F, Li S, Cao J J, E X Z and Zhou Y. 2019. Algorithm for extraction of point cloud boundary point based on inverse distance weight

- and density. *Computer Engineering and Design*, 40(2): 364-369, 454 (陆帆, 李松, 曹菁菁, 鄂晓征, 周勇. 2019. 基于反距离权重和密度的点云边界点检测算法. *计算机工程与设计*, 40(2): 364-369, 454) [DOI: 10.16208/j.issn1000-7024.2019.02.012]
- Ma W K, Bioucas-Dias J M, Chan T H, Gillis N, Gader P, Plaza A J, Ambikapathi A and Chi C Y. 2014. A signal processing perspective on hyperspectral unmixing: insights from remote sensing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 31(1): 67-81 [DOI: 10.1109/MSP.2013.2279731]
- Nascimento J M P and Dias J M B. 2005. Vertex component analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 43(4): 898-910 [DOI: 10.1109/TGRS.2005.844293]
- Roberts D A, Gardner M, Church R, Ustin S, Scheer G and Green R O. 1998. Mapping chaparral in the Santa Monica Mountains using multiple endmember spectral mixture models. *Remote Sensing of Environment*, 65(3): 267-279 [DOI: 10.1016/S0034-4257(98)00037-6]
- Shi S K, Zhang L J, Altmann Y and Chen J. 2022. Deep generative model for spatial-spectral unmixing with multiple endmember priors. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 60: 5527214 [DOI: 10.1109/TGRS.2022.3168712]
- Singhal A. 2012. Introducing the Knowledge Graph: Things, Not Strings. [https://www.blog.google/products/search/introducing-knowledge-graph-things-not/\[2021-10-29\]](https://www.blog.google/products/search/introducing-knowledge-graph-things-not/)
- Sun Z Q, Deng Z H, Nie J Y and Tang J. 2019. RotatE: knowledge graph embedding by relational rotation in complex space. arXiv: 1902.10197
- Tong Q X, Zhang B and Zhang L F. 2016. Current progress of hyperspectral remote sensing in China. *Journal of Remote Sensing (in Chinese)*, 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]
- Tong Q X, Zhang B and Zheng L F. 2006a. *Hyperspectral Remote Sensing and It's Multidisciplinary Applications*. Beijing: Publishing House of Electronics Industry (童庆禧, 张兵, 郑兰芬. 2006a. 高光谱遥感的多学科应用. 北京: 电子工业出版社)
- Tong Q X, Zhang B and Zheng L F. 2006b. *Hyperspectral Remote Sensing: The Principle, Technology and Application*. Beijing: Higher Education Press (童庆禧, 张兵, 郑兰芬. 2006b. 高光谱遥感: 原理、技术与应用. 北京: 高等教育出版社)
- 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 M Y, Luo Y, Zhang Z Y, Xie Q Y, Wu X D and Ma X L. 2022. Recent advances in remote sensing of vegetation phenology: retrieval algorithm and validation strategy. *National Remote Sensing Bulletin*, 26(3): 431-455 (王敏钰, 罗毅, 张正阳, 谢巧云, 吴小丹, 马轩龙. 2022. 植被物候参数遥感提取与验证方法研究进展. *遥感学报*, 26(3): 431-455) [DOI: 10.11834/jrs.20211601]
- 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 Q, Mao Z D, Wang B and Guo L. 2017. Knowledge graph embedding: a survey of approaches and applications. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 29(12): 2724-2743 [DOI: 10.1109/tkde.2017.2754499]
- Wang Z H, Yang X M and Zhou C H. 2021. Geographic knowledge graph for remote sensing big data. *Journal of Geo-Information Science*, 23(1): 16-28 (王志华, 杨晓梅, 周成虎. 2021. 面向遥感大数据的地理知识图谱构想. *地球信息科学学报*, 23(1): 16-28) [DOI: 10.12082/dqxxkx.2021.200632]
- Winter M E. 1999. N-FINDR: an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data//*Proceedings Volume 3753, Imaging Spectrometry V*. Denver: SPIE: 266-275 [DOI: 10.1117/12.366289]
- Xiang M T, Wei W and Wu W B. 2018. Review of vegetation phenology estimation by using remote sensing. *China Agricultural Information*, 30(1): 55-66 (项铭涛, 卫伟, 吴文斌. 2018. 植被物候参数遥感提取研究进展评述. *中国农业信息*, 30(1): 55-66) [DOI: 10.12105/j.issn.1672-0423.20180106]
- Xiong F C, Zhou J, Ye M C, Lu J F and Qian Y T. 2021. NMF-SAE: an interpretable sparse autoencoder for hyperspectral unmixing//2021 *IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*. Toronto: IEEE: 1865-1869 [DOI: 10.1109/ICASSP39728.2021.9414084]
- Xu N, Xiao X Y, Geng X R, You H J and Cao Y G. 2016. Spectral-spatial constrained sparse unmixing of hyperspectral imagery using a hybrid spectral library. *Remote Sensing Letters*, 7(7): 641-650 [DOI: 10.1080/2150704x.2016.1177240]
- Xue J, Anderson M C, Gao F, Hain C, Sun L, Yang Y, Knipper K R, Kustas W P, Torres-Rua A and Schull M. 2020. Sharpening ECOSTRESS and VIIRS land surface temperature using harmonized Landsat-Sentinel surface reflectances. *Remote Sensing of Environment*, 251: 112055 [DOI: 10.1016/j.rse.2020.112055]
- Yuan B. 2018. NMF hyperspectral unmixing algorithm combined with spatial and spectral correlation analysis. *Journal of Remote Sensing (in Chinese)*, 22(2): 265-276 (袁博. 2018. 空间与谱间相关性分析的NMF高光谱解混. *遥感学报*, 22(2): 265-276) [DOI: 10.11834/jrs.20186445]
- Zhang J X, Gu H Y, Yang Y, Zhang H and Li H T. 2021. Research progress and trend of high-resolution remote sensing imagery intelligent interpretation. *National Remote Sensing Bulletin*, 25(11): 2198-2210 (张继贤, 顾海燕, 杨懿, 张鹤, 李海涛. 2021. 高分辨率遥感影像智能解译研究进展与趋势. *遥感学报*, 25(11): 2198-2210) [DOI: 10.11834/jrs.20210382]
- Zhang L P and Li J Y. 2016. Development and prospect of sparse repre-

- sensation-based hyperspectral image processing and analysis. *Journal of Remote Sensing (in Chinese)*, 20(5): 1091-1101 (张良培, 李家艺. 2016. 高光谱图像稀疏信息处理综述与展望. *遥感学报*, 20(5): 1091-1101) [DOI: 10.11834/jrs.20166050]
- Zhang S Q, Li J, Li H C, Deng C Z and Plaza A. 2018. Spectral-spatial weighted sparse regression for hyperspectral image unmixing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 56(6): 3265-3276 [DOI: 10.1109/TGRS.2018.2797200]
- Zhou C H, Wang H, Wang C S, Hou Z Q, Zheng Z M, Shen S Z, Cheng Q M, Feng Z Q, Wang X B, Lü H R, Fan J X, Hu X M, Hou M C and Zhu Y Q. 2021. Geoscience knowledge graph in the big data era. *Science China Earth Sciences*, 64(7): 1105-1114 (周成虎, 王华, 王成善, 侯增谦, 郑志明, 沈树忠, 成秋明, 冯志强, 王新兵, 闫海荣, 樊隽轩, 胡修棉, 侯明才, 诸云强. 2021. 大数据时代的地质知识图谱研究. *中国科学: 地球科学*, 51(7): 1070-1079) [DOI: 10.1360/SSTe-2020-0337]
- Zhou J X, Qiu Y A, Chen J and Chen X H. 2021. A geometric misregistration resistant data fusion approach for adding red-edge (RE) and short-wave infrared (SWIR) bands to high spatial resolution imagery. *Science of Remote Sensing*, 4: 100033 [DOI: 10.1016/j.srs.2021.100033]
- Zhu Q Q, Lei Y, Sun X L, Guan Q F, Zhong Y F, Zhang L P and Li D R. 2022a. Knowledge-guided land pattern depiction for urban land use mapping: a case study of Chinese cities. *Remote Sensing of Environment*, 272: 112916 [DOI: 10.1016/j.rse.2022.112916]
- Zhu Q Q, Wang L L, Chen J L, Zeng W, Zhong Y F, Guan Q F and Yang Z J. 2022b. S³TRM: spectral-spatial unmixing of hyperspectral imagery based on sparse topic relaxation-clustering model. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 60: 5515613 [DOI: 10.1109/tgrs.2021.3117250]

Knowledge graph embedding spectral unmixing

WU Rui, LUO Wenfei, CHEN Jianghao

School of Geography, South China Normal University, Guangzhou 510631, China

Abstract: Selecting effective endmembers from a set of endmembers is important in the process of spectral unmixing. However, the selection of endmembers will be affected by the spectral variability of endmembers, which results in a certain uncertainty in the results of selection and the accuracy of unmixing. This study combines geoscience prior knowledge with sparse unmixing to solve this problem, and a Knowledge Graph Embedding Spectral Unmixing (KGESU) algorithm is proposed. While utilizing spectral features, certain prior knowledge is introduced to further improve the reliability of endmember selection.

The implementation steps of the KGESU algorithm involve two issues the embedding training of geoscience knowledge graph and spectral unmixing with priori knowledge. The embedding training of geoscience knowledge graph transforms geoscience knowledge into a structured expression form through knowledge graph. Then, the TransE model is used for graph embedding. We perform knowledge reasoning according to the knowledge graph embedding to address the second issue. Then, a reasoning - weighting sparse unmixing algorithm is developed to integrate the process of reasoning and unmixing.

Experiments are conducted to validate the effectiveness of the proposed method. The prior knowledge is instantiated with the aid of auxiliary data such as Landsat 8 and GDEM V2. The spectral unmixing data are GF-5 satellite data. The GF-2 data with a resolution of 1 m after graphic fusion are used for verification. Compared with the traditional pixel-by-pixel evaluation, this study expands the evaluation window. The sensitivity of different resolution images to registration errors is reduced by increasing the overlap area between pixels and allocating the residuals. The root mean square error of each endmember, the mean of the root mean square error of each endmember, and the overall root mean square error of the image are used as evaluation indexes to evaluate the unmixing results. Results demonstrate that the KGESU algorithm outperforms the state-of-the-art algorithms.

By the guidance of geo-prior knowledge in the unmixing process, the uncertainty caused by factors such as data itself and external noise can be reduced. The ability to discriminate endmembers can be improved to a certain extent. At the same time, the method proposed in this study combines the advantages of knowledge reasoning and numerical computation. Furthermore, we use geoscience knowledge and spectral characteristics to select endmembers. The unmixing result can be more reliable. In the future, the research has the following issues that need further consideration. (1) In this study, a knowledge graph is constructed only from the perspective of land use classification, and prior knowledge is introduced. In the follow-up work, secondary and even more precise classification can be considered to highlight the advantages of hyperspectral data. (2) In the future work, we will consider more complex relationships between ground objects, introduce more abundant geoscience knowledge, and further build a more perfect geoscience knowledge graph. (3) Knowledge reasoning based on graph embedding is a relatively good method to integrate reasoning results into spectral unmixing at present. With the continuous development of technology, we will further attempt to introduce knowledge through other knowledge reasoning mechanisms.

Key words: remote sensing, knowledge graph, knowledge graph embedding, endmember selection, spectral unmixing

Supported by Major Special Project-the China High-Resolution Earth Observation System (No. 11-Y20A40-9002-15/17)