通过最大体积约束端元分析解混高度混合的粒度分布数据

齐倩倩 Zhongming Chen杭州电子科技大学，中国 杭州电子科技大学，中国q.qi@hdu.edu.cn zmchen@hdu.edu.cn

Peter G.M. van der Heijden乌特勒支大学，荷兰和英国南安普敦大学p.g.m.vanderheijden@uu.nl

arXiv:2601.00154v1 [stat.ME] 1 Jan 2026

摘要

端元分析（EMA）将粒度分布（GSD）数据解混为多个端元（EM）的混合物，从而帮助人们理解沉积物物源、沉积环境及其过程。然而，对于高度混合的数据集，许多端元分析算法得到的端元仍是多个真实端元的混合物。为解决这一问题，我们提出最大体积约束 EMA（MVC-EMA），以尽可能找到彼此不同的端元。我们为 MVC-EMA 提出了唯一性定理和二次规划算法。实验结果表明，MVC-EMA 能够在高度混合的数据集中有效找到真实端元。

关键词：非负矩阵分析；最小体积；可辨识性；充分散布条件。

1 引言

在沉积地质学中，将粒度分布（GSD）数据解混为多个端元（EM）的混合，称为端元分析（EMA），有助于了解沉积物来源、沉积环境及其过程（Lin 等，2025；Liu 等，2023；Moskalewicz 和 Winter，2024；Paterson 和 Heslop，2015；Renner，1995；Renny 等，2026；Van Hateren、Prins 和 Van Balen，2018；Weltje，1997）。设 $\boldsymbol{P}$ 为大小为 $I \times J$ 的数据矩阵。 $\boldsymbol{P}$ 的每一行表示一个观测到的粒度分布数据样本，并满足非负约束和和为1约束： $\boldsymbol{P} \geq 0$ 和 $\boldsymbol{P}\mathbf{1} = \mathbf{1}$，其中 $\geq$ 表示矩阵中的每个元素均为非负数，1 表示适当维度的全1向量。端元分析通过低秩矩阵 $\boldsymbol{\Pi}$ 近似粒度分布数据 $\boldsymbol{P}$；该低秩矩阵是两个非负矩阵的乘积，且满足行和为1的约束。因此，端元分析可表示为

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}||\boldsymbol{P} - \boldsymbol{\Pi}||_F^2 \\ \text{subject to} \quad & \boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{G}, \quad \boldsymbol{W}\mathbf{1} = \mathbf{1}, \quad \boldsymbol{G}\mathbf{1} = \mathbf{1} \\ & \boldsymbol{W} \in \Re_+^{I \times K}, \quad \boldsymbol{G} \in \Re_+^{K \times J} \end{aligned} \tag{1}$$

其中 $K \leq \min\{I, J\}$，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的弗罗贝尼乌斯范数定义为 $||\boldsymbol{A}||_F^2 = \sqrt{\sum_i \sum_j \boldsymbol{A}(i,j)^2}$。除了弗罗贝尼乌斯范数之外，还有其他目标函数，例如 L_1 范数，可用于衡量 $\boldsymbol{P}$ 与 $\boldsymbol{\Pi}$ 之间的差异（Zhang、Wang、Xu 和 Yang，2020）。 $\boldsymbol{G}$ 的每一行都是一个端元，而 $\boldsymbol{\Pi}$ 中的每个样本均由这些端元构成，其权重或丰度位于 $\boldsymbol{W}$ 对应的行中。 $\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 分别称为丰度矩阵和端元矩阵。从几何角度看， $\boldsymbol{\Pi}$ 的各行位于由 $\boldsymbol{G}$ 的各行生成的凸包内（Avis 和 Bremner，1995；Gillis，

2020）。给定观测矩阵 $\boldsymbol{P}$，端元分析旨在恢复 $\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{G}$，从而得到低秩矩阵 $\boldsymbol{\Pi}$。

然而，端元分析并非唯一（Paterson & Heslop，2015；Renner，1993、1995；Weltje，1997；Weltje & Prins，2007；Zhang et al.，2020）。给定端元分析 $\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{WG}$，可得

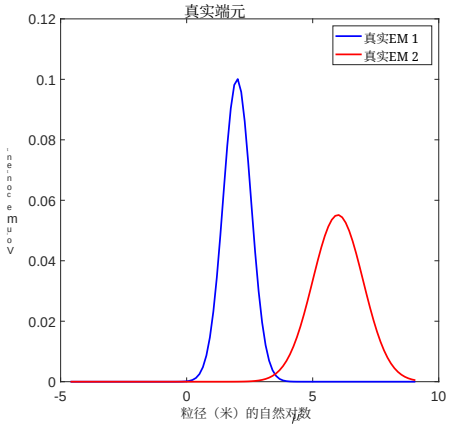
$$\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{WUU}^{-1}\boldsymbol{G},$$

其中，$\boldsymbol{U}$是一个大小为 $K \times K$ 的满秩矩阵。当且仅当 $\boldsymbol{WU1} = \mathbf{1}$和$\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{G1} = \mathbf{1}$时，满足和为一的条件 $\boldsymbol{U1} = \mathbf{1}$(De Leeuw, Van der Heijden, & Verboon，1990）。非负约束 $\boldsymbol{WU} \geq 0$和 $\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{G} \geq 0$进一步限制了 $\boldsymbol{U}$的可行集合。然而，即使施加这些约束，$\boldsymbol{U}$ 也可能不只是排列变换，这意味着端元分析存在多个等价解，其形式为 ($\boldsymbol{WU}$，$\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{G}$)。从几何角度看，非唯一性可以理解为：任何能够包围所有数据点的凸包都可能是端元分析的解。

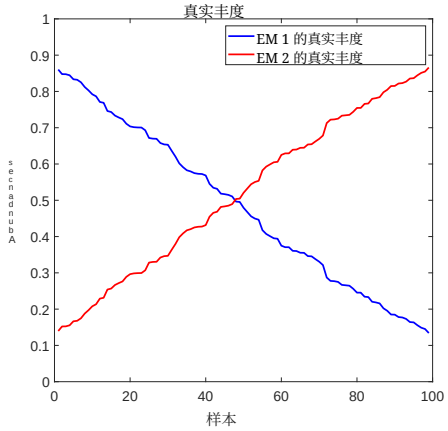
许多端元分析算法选择使用最小端元来确定解，即尽可能紧密地包围样本的端元（Dietze, Schulte, & Dietze, 2022; Pater- son & Heslop, 2015; Van Hateren et al., 2018; Weltje, 1997; Weltje & Prins, 2007）。然而，对于高度混合数据，这一框架并不适用，因为没有任何单个样本接近真实端元。这是因为估计的端元本身就是由真实端元混合而成的。然而，高度混合数据在自然环境中很常见。依照 Paterson 和 Heslop（2015），我们使用一组模拟 GSD数据（99×100）展示了一个高度混合的案例。这些数据源自两个对数正态端元，其丰度始终不低于 0.13（图 1a、1b）。采用端元建模算法（EMMA）（Seidel & Hlawitschka, 2015; Weltje, 1997）这一基础的最小端元算法，会得到两个双峰端元（图 1c）。每个端元都由一种来源主导，但同时受到另一种来源的污染，导致丰度估计偏差（图 1d）。

“最外围端元”概念由 Zhang 等人（2020）针对高度混合数据提出，其类似于潜在预算分析（LBA）中的“外部极端解”（Van der Ark、Van der Heijden 和 Sikkel，1999）。值得注意的是，LBA 与 EMA 具有相同的参数形式 $\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{WG}$ （Clogg，1981；De Leeuw 等，1990；Van der Heijden，1994）。LBA 起源于社会科学领域，可用于解释时间分配模式。然而，“最外围端元”或“外部极端解”框架缺乏唯一性定理。De Leeuw 等（1990）提出的唯一已知唯一性条件仅限于维度 $K = 2$，而 $K > 2$ 在实践中经常出现。在算法方面，为寻找最外围端元，Zhang 等人（2020）采用了遗传算法。遗传算法是一种灵活且应用广泛的算法，受自然选择机制启发。然而，由于其具有随机性和启发式特征，因此无法保证获得全局最优解，甚至无法保证获得局部最优解。Van der Ark 等（1999）提出使用 Metropolis算法寻找外部极端解（Jelihovschi 和 Allaman，2018）。同样，Metropolis算法本质上也是启发式的。

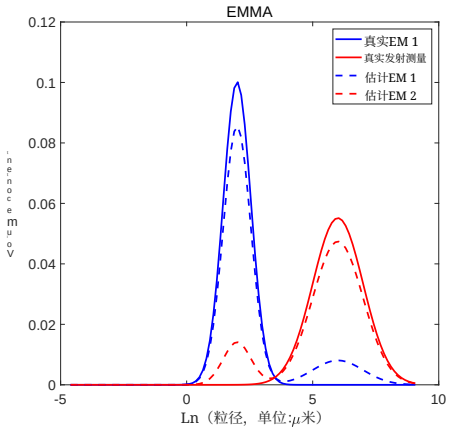
“最外围端元”或“外部极端解”是根据端元间距离和的最大值来定义的，例如曼哈顿距离或卡方距离之和



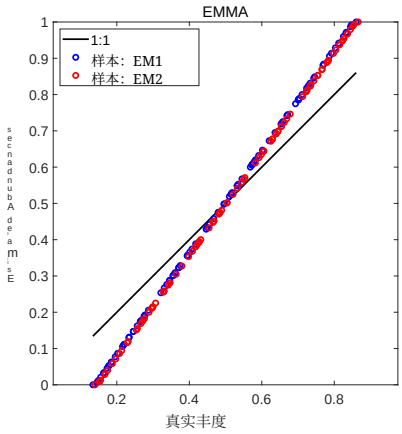
（a）真实 EM



（b）真实丰度



(c) EMMA EM



(d) EMMA 丰度

图 1：（a 和 b）两个对数正态端元及其丰度；（c 和 d）EMMA 解混结果。

（Van der Ark 等，1999；Zhang 等，2020）。相比之下，最小体积假设与“最小端元”密切相关，已在非负矩阵分解（NMF）中得到深入研究。非负矩阵分解将一个非负矩阵分解为两个非负矩阵的乘积，并将端元分析作为一种特例（Fu、Huang、Sidiropoulos 和 Ma，2019；Gillis，2020；Guo、Li 和 Liang，2024；Hobolth、Guo、Kousholt 和 Jensen，2020；Lee 和 Seung，1999；Paatero 和 Tapper，1994；Qi和Van der Heijden，2025；Saberi-Movahed 等，2025）。采用最小体积假设的非负矩阵分解，在唯一性定理和算法方面已得到相当详尽的研究；这在一定程度上得益于体积度量与 $\boldsymbol{GG}^T$ 的行列式相关，而非与距离相关（Abdolali、Barbarino 和 Gillis，2024；Fu、Huang 和 Sidiropoulos，2018；Fu、Ma、Huang 和 Sidiropoulos，2015；Guo 等，2024；Hobolth 等，2020；Leplat、Gillis 和 Ang，2020；Lin、Ma、Li、Chi 和 Ambikapathi，2015；Saberi-Movahed 等，2025）。

根据 Fu 等人 (2019）；Fu、Huang、Yang、Ma 和 Sidiropoulos(2016），所有基向量两两之间的平方距离之和 $\boldsymbol{G}$ 是基矩阵体积的一种近似 $\boldsymbol{G}$。在 Fu 等人 (2016的论文模拟部分中，与基向量间平方距离之和相关的正则项，在丰度均方误差（MSE）方面略逊于与基矩阵体积相关的正则项 $\boldsymbol{G}$。然而，据我所知，体积正则项此前从未用于端元分析。

受这些见解启发，我们针对高度混合数据提出了最大体积约束端元分析（ MVC-EMA）。第 2 节提出了 MVC-EMA 唯一性的充分条件。第 3 节提出了一种算法，简称 APFGM，即交替投影快速梯度法。该算法可采用最小体积、无体积和最大体积假设。第4 节将采用最大体积假设的 APFGM、采用无体积假设的 APFGM、采用最小体积假设的 APFGM，与 EMMA （沉积地质学中用于 “ 最小端元 ” 的经典算法）进行比较。最后，第 5 节总结本文。

2 最大体积假设下的唯一性定理

在开始本节之前，我们先介绍线性代数中的两个引理，后续将在本节中用到它们（Gillis, 2020）。矩阵的锥 $\boldsymbol{A} \in \Re^{I\times J}$ 定义为

$$\text{cone}(\boldsymbol{A}) = \left\{ \sum_j r_j \boldsymbol{A}(:,j) \mid r_j \geq 0,\ j = 1, \cdots, J \right\}.$$

L引理 1. 给定矩阵 $\boldsymbol{A}$，锥$(\boldsymbol{A})$ 的对偶定义为锥$^*(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{y} | \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} \geq 0\}$。

L引理 2. 给定两个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，若锥$(\boldsymbol{A}) \subseteq$ 锥$(\boldsymbol{B})$，则锥$^*(\boldsymbol{B}) \subseteq$ 锥$^*(\boldsymbol{A}$).

定义 1. 若且唯若对于任意其他˜ ˜ *EMA* 解 $(\boldsymbol{W}, \boldsymbol{G})$，其形式为.....，则称 $\boldsymbol{\Pi}$ 的 *EMA* 解 $(\boldsymbol{W}, \boldsymbol{G})$ 本质唯一

$$\tilde{\boldsymbol{W}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{\Gamma}^{-1} \text{ and } \tilde{\boldsymbol{G}} = \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{G}$$

其中 $\boldsymbol{\Gamma}$ 是置换矩阵。

给定低秩矩阵 $\boldsymbol{\Pi} \in \Re_+^{I\times J}$（其中 $\boldsymbol{\Pi}\mathbf{1} = \mathbf{1}$），希望在最大体积假设下找到端元分析 $\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{G}$ 的本质唯一解。形式上，最大体积约束端元分析（MVC-EMA）表述如下:

$$\begin{aligned} \max \quad & \det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T) \\ \text{subject to} \quad & \boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{G}, \quad \boldsymbol{W}\mathbf{1} = \mathbf{1}, \quad \boldsymbol{G}\mathbf{1} = \mathbf{1} \\ & \boldsymbol{W} \in \Re_+^{I\times K}, \quad \boldsymbol{G} \in \Re_+^{K\times J} \end{aligned} \tag{2}$$

其中，$K \leq \min\{I, J\}$，$\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T)$ 表示 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T$ 的行列式。

充分散布条件（SSC）是最小体积约束非负矩阵分解（NMF）具有唯一性的充分条件（Fu 等人，2018，2015；Leplat 等人，2020）。在最小体积约束 NMF 中，SSC 用于系数矩阵/丰度矩阵的语境。本文将 SSC 引入 MVC-EMA。与最小体积约束 NMF 不同，在 MVC-EMA 中，SSC 用于基矩阵/端元矩阵的语境。SSC 与稀疏性有关。这意味着，在 MVC-EMA 中，端元矩阵 $\boldsymbol{G}$而非丰度矩阵 $\boldsymbol{W}$趋于稀疏。

为推导 MVC-EMA（2）解的唯一性，我们需要作出如下假设，这些假设与 Fu 等人（2018、2015）以及Leplat 等人（2020）中的假设一致。

假设 A1：矩阵 $\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 满足秩$(\boldsymbol{W}) = $秩$(\boldsymbol{G}) = K$。

假设 A2：$\boldsymbol{G} \in \Re_+^{K\times J}$满足充分散布条件（SSC ）：

（1）SSC1：$\mathbb{C} \subseteq$锥$(\boldsymbol{G})$，其中 $\mathbb{C} = \{\boldsymbol{x} \in \Re_+^K | \mathbf{1}^T\boldsymbol{x} \geq \sqrt{K-1}||\boldsymbol{x}||_2\}$ 为二阶锥；

（2）SSC2：锥$^*(\boldsymbol{G}) \cap bd\mathbb{C}^* = \{\alpha\boldsymbol{e}_k | \alpha \geq 0, k = 1, \cdots, K\}$，其中 $\mathbb{C}$的对偶定义为 $\mathbb{C}^* = \{\boldsymbol{x} \in \Re^K | \mathbf{1}^T\boldsymbol{x} \geq ||\boldsymbol{x}||_2\}$。

我们证明，假设 A1 和假设 A2 是 MVC-EMA 解具有唯一性的充分条件。

定理 1. 在假设 *A1* 和 *A2* 下，*MVC-EMA* 可以唯一确定 $\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{G}$ （允许置换），即 *MVC-EMA*（2）的任意最优解 $\boldsymbol{W}_\#$ 和 $\boldsymbol{G}_\#$ 都具有以下形式：

$$\boldsymbol{W}_\# = \tilde{\boldsymbol{W}}\boldsymbol{U}^{-1} \text{ and } \boldsymbol{G}_\# = \boldsymbol{U}\tilde{\boldsymbol{G}} \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 是一个置换矩阵。

证明。步骤 1：设（$\boldsymbol{W}$，$\boldsymbol{G}$）和（$\boldsymbol{W}_\#$，$\boldsymbol{G}_\#$）均为（2）的最优解。

由于秩$(\boldsymbol{W}) = $秩$(\boldsymbol{G}) = $秩$(\boldsymbol{W}_\#) = $秩$(\boldsymbol{G}_\#) = K$，因此存在一个满秩矩阵 $\boldsymbol{U}$，其大小为 $K \times K$，使得

$$\boldsymbol{W}_\# = \tilde{\boldsymbol{W}}\boldsymbol{U}^{-1} \text{ and } \boldsymbol{G}_\# = \boldsymbol{U}\tilde{\boldsymbol{G}}.$$

矩阵 $\boldsymbol{U}$ 具有行和为 1 的约束，因为

$$\mathbf{1} = \boldsymbol{G}_\#\mathbf{1} = \boldsymbol{U}\tilde{\boldsymbol{G}}\mathbf{1} = \boldsymbol{U}\mathbf{1} \tag{4}$$

步骤 2：根据 $\boldsymbol{G}_\# = \boldsymbol{U}\boldsymbol{G}$，$\boldsymbol{U}$ 各行中的向量属于 $\boldsymbol{G}$的对偶锥，即$\boldsymbol{U}(i,:)^T \in$锥$^*(\tilde{\boldsymbol{G}})$，其中 $i = 1, \cdots, I$其中 $\boldsymbol{U}(i,:)$ 是一个行向量，其元素为 $\boldsymbol{U}$ 的第 i 行。根据 SSC1 （$\mathbb{C} \subseteq$ 锥$(\boldsymbol{G})$），我们有锥$^*(\boldsymbol{G}) \subseteq \mathbb{C}^*$。因此，$\boldsymbol{U}(i,:)^T \in \mathbb{C}^*$。这意味着

$$||\boldsymbol{U}(i,:)^T||_2 \leq \mathbf{1}^T\boldsymbol{U}(i,:)^T \tag{5}$$

因此，

$$|\det(\boldsymbol{U})| = |\det(\boldsymbol{U}^T)| \leq \prod_i ||\boldsymbol{U}(i,:)^T||_2 \leq \prod_i \mathbf{1}^T\boldsymbol{U}(i,:)^T = 1.$$

其中，第一个不等式是 Hadamard不等式，第二个不等式由此得出（5），最后一个等式由此得出（4）。

步骤3：如果 $|\det(\boldsymbol{U})|<1$，那么

$$\det(\boldsymbol{G}_{\#}\boldsymbol{G}_{\#}^{T})=\det(\boldsymbol{U}\tilde{\boldsymbol{G}}\tilde{\boldsymbol{G}}^{T}\boldsymbol{U}^{T})=|\det(\boldsymbol{U})|^{2}\det(\tilde{\boldsymbol{G}}\tilde{\boldsymbol{G}}^{T})<\det(\tilde{\boldsymbol{G}}\tilde{\boldsymbol{G}}^{T}).$$

这意味着 $\boldsymbol{G}_{\#}$ 不具有最大体积，这与$(\boldsymbol{W}_{\#},\ \boldsymbol{G}_{\#})$是一个最优解相矛盾。

步骤4：如果 $|\det(\boldsymbol{U})|=1$，那么所有不等式都必须取等号。因此，对于所有 i,$||\boldsymbol{U}(i,:)^{T}||_{2}=\mathbf{1}^{T}\boldsymbol{U}(i,:)^{T}$，这意味着 $\boldsymbol{U}(i,:)^{T}$是 $\mathbb{C}^{*}$的边界。并且 $\boldsymbol{U}(i,:)^{T}\in$是$^{*}(\tilde{\boldsymbol{G}})$的锥。根据 SSC2，我们有 $\boldsymbol{U}(i,:)^{T}=\alpha\boldsymbol{e}_{k}$。

步骤5：并且由于 $\boldsymbol{U}\mathbf{1}=\mathbf{1}$ 方程（4）中的约束，我们有 $\alpha=1$。因此 $\boldsymbol{U}$ 只能是一个置换矩阵。 □

值得注意的是，最大体积假设及定理1 的证明过程与最小体积假设以及最小体积约束非负矩阵分解中的唯一性定理（Fu 等人，2018，2015；Leplat 等人，2020）相似，但最大体积假设和定理1是新的，提供了一种全新的视角，尤其适用于高度混合数据。注意，SSC约束适用于基矩阵 $\boldsymbol{G}$，而非系数矩阵 $\boldsymbol{W}$。

我们借助图2说明 SSC，见 $K=3$(Gillis, 2020; Qi和Van der Heijden, 2025)。图2假设观察者位于非负正交象限内，面向原点，并观察二维平面 $\boldsymbol{x}\mathbf{1}=\mathbf{1}$ (Gillis, 2020)。具体而言，圆点“o”对应于 $\boldsymbol{G}$ 的列；叉号“X”是标准基向量 $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3$，圆形对应于二阶锥 $\mathbb{C}$；三角形对应于非负正交象限锥$(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3)$；多边形是 cone$(\boldsymbol{G})$。圆形包含于多边形之中。也就是说，SSC1 成立。

从几何角度看，SSC2 意味着唯一满足以下条件的正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ ： cone$(\boldsymbol{G})\ \subseteq$cone$(\boldsymbol{Q})$ 是一个置换矩阵（Gillis，2020）。任意置换矩阵的列所生成的锥，恰好就是图中的三角形。任意正交矩阵都是图中三角形的旋转版本。如图所示，非负正交象限锥$(\boldsymbol{e}_1,\ \boldsymbol{e}_2,\ \boldsymbol{e}_3)$ 的旋转版本（除其自身外）不包含由圆点构成的多边形。因此，SSC2 成立。

在图 2中， $\boldsymbol{G}$ 中的一些列点位于三角形的边上，这意味着这些列中存在零元素。因此，端元矩阵 $\boldsymbol{G}$ 是稀疏的。相比之下，在最小体积约束非负矩阵分解中，丰度矩阵 $\boldsymbol{W}$ 满足 SSC，因此丰度矩阵 $\boldsymbol{W}$ 是稀疏的。

接下来，我们借鉴非负矩阵分解领域的相关研究（Gillis，2014，2020；Leplat、Ang 和 Gillis，2019；Zhou、Xie、Yang、Yang 和 He，2011），为 MVC-EMA 提出一种二次规划算法。

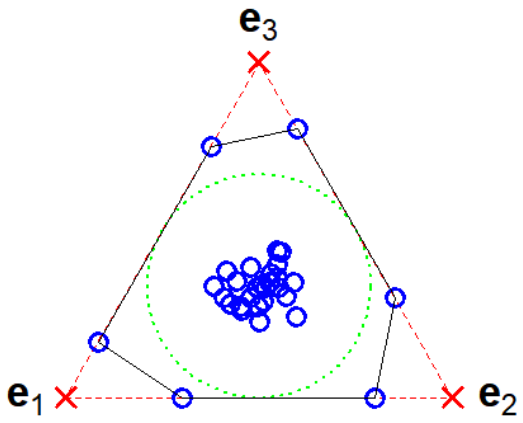


图2：端元矩阵 $\boldsymbol{G}$ 满足 SSC 的几何示意图。

3 APFGM算法

本文考虑的 MVC-EMA 中，观测数据矩阵 $\boldsymbol{P}$ 由 $\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{WG}$近似表示。以平方弗罗贝尼乌斯范数$||\boldsymbol{P} - \boldsymbol{WG}||_F^2$量化的近似误差作为数据拟合项，而 $\det(\boldsymbol{GG}^T)$ 则作为体积正则项。由此得到的 MVC-EMA 目标函数为

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{W},\boldsymbol{G}} \quad & J(\boldsymbol{W},\boldsymbol{G}) = \frac{1}{2}||\boldsymbol{P} - \boldsymbol{WG}||_F^2 - \frac{\lambda}{2}\det(\boldsymbol{GG}^T) \\ \text{subject to} \quad & \boldsymbol{W1} = \boldsymbol{1}, \quad \boldsymbol{G1} = \boldsymbol{1}, \quad \boldsymbol{W} \in \Re_+^{I\times K}, \quad \boldsymbol{G} \in \Re_+^{K\times J}. \end{aligned} \tag{6}$$

正则化参数 $\lambda \geq 0$ 控制数据拟合项$||\boldsymbol{P} - \boldsymbol{WG}||_F^2$与体积正则项 $\det(\boldsymbol{GG}^T)$之间的权衡。由于λ前有负号，增大 λ 会导致体积增加。这个负号是 MVC-EMA 与最小体积约束非负矩阵分解之间的关键区别；在后者中，λ 前的符号为正（Zhou 等人，2011）。

对于（6），同时优化 $\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 是一个非凸问题。与大多数非负矩阵分解研究一样，我们交替地对 $\boldsymbol{W}$ 或 $\boldsymbol{G}$最小化目标函数，每次优化一个矩阵，同时固定另一个矩阵。交替优化的迭代方案可写为：

$$\boldsymbol{W} = \arg\min_{\boldsymbol{W}:\boldsymbol{W1}=\boldsymbol{1},\boldsymbol{W}\geq 0} J(\boldsymbol{W},\boldsymbol{G}) \tag{7a}$$

$$\boldsymbol{G} = \arg\min_{\boldsymbol{G}:\boldsymbol{G1}=\boldsymbol{1},\boldsymbol{G}\geq 0} J(\boldsymbol{W},\boldsymbol{G}) \tag{7b}$$

3.1 更新丰度矩阵 W

在方程（7a）$\boldsymbol{G}$ 被视为已知。给定已知的 $\boldsymbol{G}$，方程（7a）的问题变为 $\boldsymbol{W} = \arg\min_{\boldsymbol{W}}: \boldsymbol{W}\mathbf{1}=\mathbf{1},\ \boldsymbol{W}\geq 0\ \frac{1}{2}||\boldsymbol{P}-\boldsymbol{W}\boldsymbol{G}||_F^2$因此这是一个凸优化问题（Gillis，2020）。求解 $\min_{\boldsymbol{W}}: \boldsymbol{W}\mathbf{1}=\mathbf{1},\ \boldsymbol{W}\geq 0\ \frac{1}{2}||\boldsymbol{P}-\boldsymbol{W}\boldsymbol{G}||_F^2$等价于求解子问题

$$\begin{aligned} &\min_{\boldsymbol{W}(i,:)} \quad \frac{1}{2}||\boldsymbol{P}(i,:)-\boldsymbol{W}(i,:)\boldsymbol{G}||_F^2 \\ &\text{subject to} \quad \boldsymbol{W}(i,:)\mathbf{1}=\mathbf{1}, \boldsymbol{W}(i,:)\geq 0 \end{aligned} \tag{8}$$

对于 $i=1,\ \cdots,\ I$，其中 $\boldsymbol{P}(i,\ :)$ 或 $\boldsymbol{W}(i,\ :)$ 是一个行向量，其元素分别为 $\boldsymbol{P}$ 或 $\boldsymbol{W}$ 的第 i 行。对于每个 i，这等价于求解

$$\begin{aligned} &\min_{\boldsymbol{W}(i,:)} \quad \boldsymbol{W}(i,:)\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T\right)\boldsymbol{W}(i,:)^T-\boldsymbol{P}(i,:)\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{W}(i,:)^T \\ &\text{subject to} \quad \boldsymbol{W}(i,:)\mathbf{1}=\mathbf{1}, \boldsymbol{W}(i,:)\geq 0 \end{aligned} \tag{9}$$

这是一个带有非负约束和行和为 1 约束的二次规划问题。在实际应用中，I 子问题可以并行求解。如果 $\boldsymbol{G}$ 的秩为 K，$\frac{1}{2}\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T$ 则为正定矩阵。因此，问题（9）可以通过二次规划算法求解，且其解是唯一的（Zhou 等人，2011）。这里，对于更新 $\boldsymbol{W}$（i，：），遵循 Gillis（2014）；Leplat 等人（2019），我们采用投影快速梯度法（PFGM）（Nesterov，2004）。

3.2 更新端元矩阵 G

在方程（7b）中，$\boldsymbol{W}$ 是一个已知矩阵。与更新丰度矩阵时一样，我们将方程（7b）的目标函数表示为 K 个子问题，其中每个子问题都是一个二次规划问题。

数据拟合项 $||\boldsymbol{P}-\boldsymbol{W}\boldsymbol{G}||_F^2$ 可表示为（Zhou 等人，2011）

$$\begin{aligned} ||\boldsymbol{P}-\boldsymbol{W}\boldsymbol{G}||_F^2 &= ||\boldsymbol{P}-\sum_{l=1}^{K}\boldsymbol{W}(:,l)\boldsymbol{G}(l,:)||_F^2 \\ &= ||\boldsymbol{P}-\sum_{l\neq k}\boldsymbol{W}(:,l)\boldsymbol{G}(l,:)-\boldsymbol{W}(:,k)\boldsymbol{G}(k,:)||_F^2 \\ &= ||\boldsymbol{P}_k-\boldsymbol{W}(:,k)\boldsymbol{G}(k,:)||_F^2 \\ &= ||\boldsymbol{P}_k||_F^2+||\boldsymbol{W}(:,k)||_F^2||\boldsymbol{G}(k,:)||_F^2-2\boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{P}_k^T\boldsymbol{W}(:,k) \end{aligned} \tag{10}$$

其中，$\boldsymbol{W}(:\ k)$ 是一个列向量，其元素为 $\boldsymbol{W}$ 的第 k 列；而 $\boldsymbol{G}(k,\ :)$ 是一个行向量，其元素为 $\boldsymbol{G}$ 的第 k 行，并且 $\boldsymbol{P}_k=\boldsymbol{P}-\sum_{l\neq k}\boldsymbol{W}(:\ l)\boldsymbol{G}(l,\ :)$。

令 $\bar{\boldsymbol{G}}_k$ 为从 $\boldsymbol{G}$ 中移除第 k 行后得到的 $\boldsymbol{G}$ 子矩阵。则 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{\Gamma}\begin{bmatrix}\boldsymbol{G}(k\\ \bar{\boldsymbol{G}}_k\end{bmatrix},:)$

其中 $\boldsymbol{\Gamma}$ 是一个置换矩阵。因此，我们有

$$\begin{aligned}\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T) &= \det\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{G}(k,:)\\ \bar{\boldsymbol{G}}_k\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{G}(k,:)\\ \bar{\boldsymbol{G}}_k\end{bmatrix}^T\right)\\ &= \det\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{G}(k,:)\\ \bar{\boldsymbol{G}}_k\end{bmatrix}\left[\boldsymbol{G}(k,:)^T, \bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T\right]\right)\\ &= \det\left(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T\right)\det\left(\boldsymbol{G}(k,:)(\boldsymbol{I}-\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)^{-1}\bar{\boldsymbol{G}}_k)\boldsymbol{G}(k,:)^T\right)\\ &= \det\left(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T\right)\left(\boldsymbol{G}(k,:)(\boldsymbol{I}-\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)^{-1}\bar{\boldsymbol{G}}_k)\boldsymbol{G}(k,:)^T\right).\end{aligned} \tag{11}$$

最后一个等式成立，是因为 $\left(\boldsymbol{G}(k,:)(\boldsymbol{I}-\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)^{-1}\bar{\boldsymbol{G}}_k)\boldsymbol{G}(k,:)^T\right)$ 是一个大小为 1×1 的矩阵。我们有

$$\boldsymbol{G}(k,:)(\boldsymbol{I}-\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)^{-1}\bar{\boldsymbol{G}}_k)\boldsymbol{G}(k,:)^T = \boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{C}_k\boldsymbol{C}_k^T\boldsymbol{G}(k,:)^T \tag{12}$$

其中，$\boldsymbol{C}_k = \text{Null}(\bar{\boldsymbol{G}}_k)$ 是 $\boldsymbol{G}_k$ 的零空间的一组正交归一基。原因如下。由 $\boldsymbol{C}_k = \text{Null}(\bar{\boldsymbol{G}}_k)$，可得 $\boldsymbol{C}_k^T\boldsymbol{C}_k = \boldsymbol{I}$ 和 $\bar{\boldsymbol{G}}_k\boldsymbol{C}_k = \boldsymbol{0}$。$\boldsymbol{C}_k$ 的列与 $\boldsymbol{G}_k$ 的行共同构成该 J 维空间的一组基。因此，任意向量 $\boldsymbol{G}(k,:)^T$ 都可以表示为 $\boldsymbol{G}(k,:)^T = \boldsymbol{C}_k\boldsymbol{x} + \bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T\boldsymbol{y}$。于是我们有

$$\boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{G}(k,:)^T = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}^T\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T\boldsymbol{y}.$$

注意，$\bar{\boldsymbol{G}}_k\boldsymbol{G}(k,:)^T = \bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T\boldsymbol{y}$。因此，$\boldsymbol{G}(k,:)\,\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)^{-1}\bar{\boldsymbol{G}}_k\boldsymbol{G}(k,:)^T = \boldsymbol{y}^T\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T\boldsymbol{y}$。注意，$\boldsymbol{C}_k^T\boldsymbol{G}(k,:)^T = \boldsymbol{x}$。因此，$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{C}_k\boldsymbol{C}_k^T\boldsymbol{G}(k,:)^T$。因此，

$$\boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{G}(k,:)^T - \boldsymbol{G}(k,:)\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)^{-1}\bar{\boldsymbol{G}}_k\boldsymbol{G}(k,:)^T = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{C}_k\boldsymbol{C}_k^T\boldsymbol{G}(k,:)^T.$$

公式（12）的证明至此完成。将公式（11）与公式（12结合，体积项 $\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T)$ 可表示为

$$\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T) = \det(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)\boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{C}_k\boldsymbol{C}_k^T\boldsymbol{G}(k,:)^T \tag{13}$$

将公式（10）与公式（13结合后，公式（7b）的问题可分解为 K 个相互独立的子问题，这些子问题均为二次规划问题：

$$\begin{aligned}&\min_{\boldsymbol{G}(k,:)} \quad \boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{G}(k,:)^T - \boldsymbol{W}(:,k)^T\boldsymbol{P}_k\boldsymbol{G}(k,:)^T\\ &\text{subject to} \quad \boldsymbol{G}(k,:)\boldsymbol{1} = \boldsymbol{1}, \boldsymbol{G}(k,:) \geq 0\end{aligned} \tag{14}$$

其中 $\boldsymbol{Q}_k = \frac{1}{2}\boldsymbol{W}(:\,k)^T\boldsymbol{W}(:\,k)\boldsymbol{I} - \frac{\lambda}{2}\det(\bar{\boldsymbol{G}}_k\bar{\boldsymbol{G}}_k{}^T)\boldsymbol{C}_k\boldsymbol{C}_k^T$ 且 $\boldsymbol{P}_k = \boldsymbol{P} - \sum_{l\neq k}\boldsymbol{W}(:\,l)\boldsymbol{G}(l,:)$。在实际应用中，子问题通过交替求解，其中 $\boldsymbol{Q}_k$ 和 $\boldsymbol{P}_k$ 使用 $\boldsymbol{G}$的最新行。方程（14）的严格凸性要求 $\boldsymbol{Q}_k$ 为正定。因此，λ 的值不能太大。同样，遵循 Gillis (2014)；Leplat 等人 (2019) 的做法，我们对方程（14）使用 PFGM（Nesterov，2004）。

我们将该算法称为 APFGM，即交替投影快速梯度法的简称。结论见算法 1，其中，通过缩放输入 λ'来计算（6）中的 λ： $\lambda = \lambda' \frac{||\boldsymbol{P}-\boldsymbol{W}_{(0)}\boldsymbol{G}^{(0)}||_F^2}{\det(\boldsymbol{G}^{(0)}(\boldsymbol{G}^{(0)})^T)}$，其中 $\boldsymbol{W}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{G}^{(0)}$ 为初始输入矩阵。

请注意，在 APFGM 中，λ 可能为负值，因为 APFGM 倾向于尽可能使基向量彼此接近，这符合最小体积假设（Zhou 等人，2011）。

算法1： 交替投影快速梯度法（APFGM）

输入： 具有行和为1约束的输入非负矩阵 $P \in \mathbb{R}_+^{I\times J}$
$\boldsymbol{P}\mathbf{1} = \mathbf{1}$，维度 K，迭代次数 maxiter，以及 λ'。
输出： $\boldsymbol{W} \geq 0$，满足 $\boldsymbol{W}\mathbf{1} = \mathbf{1}$ 和 $\boldsymbol{G} \geq 0$，满足 $\boldsymbol{G}\mathbf{1} = \mathbf{1}$。
生成初始矩阵 $\boldsymbol{W}_{(0)} \geq 0$，满足 $\boldsymbol{W}^{(0)}\mathbf{1} = \mathbf{1}$，以及 $\boldsymbol{G}^{(0)} \geq 0$，满足 $\boldsymbol{G}^{(0)}\mathbf{1} = \mathbf{1}$。
令 $\lambda = \lambda' \frac{||\boldsymbol{P}-\boldsymbol{W}_{(0)}\boldsymbol{G}^{(0)}||_F^2}{\det(\boldsymbol{G}^{(0)}(\boldsymbol{G}^{(0)})^T)}$.
对于 $t = 1, 2, \ldots,$ *maxiter* **执行**
  将 FPGD 应用于二次规划问题方程（9），以更新丰度矩阵 $\boldsymbol{W}$
  将 FPGD 应用于二次规划问题方程（14），以更新端元矩阵 $\boldsymbol{G}$

3.3 将 APFGM 应用于引言中的模拟 GSD 数据

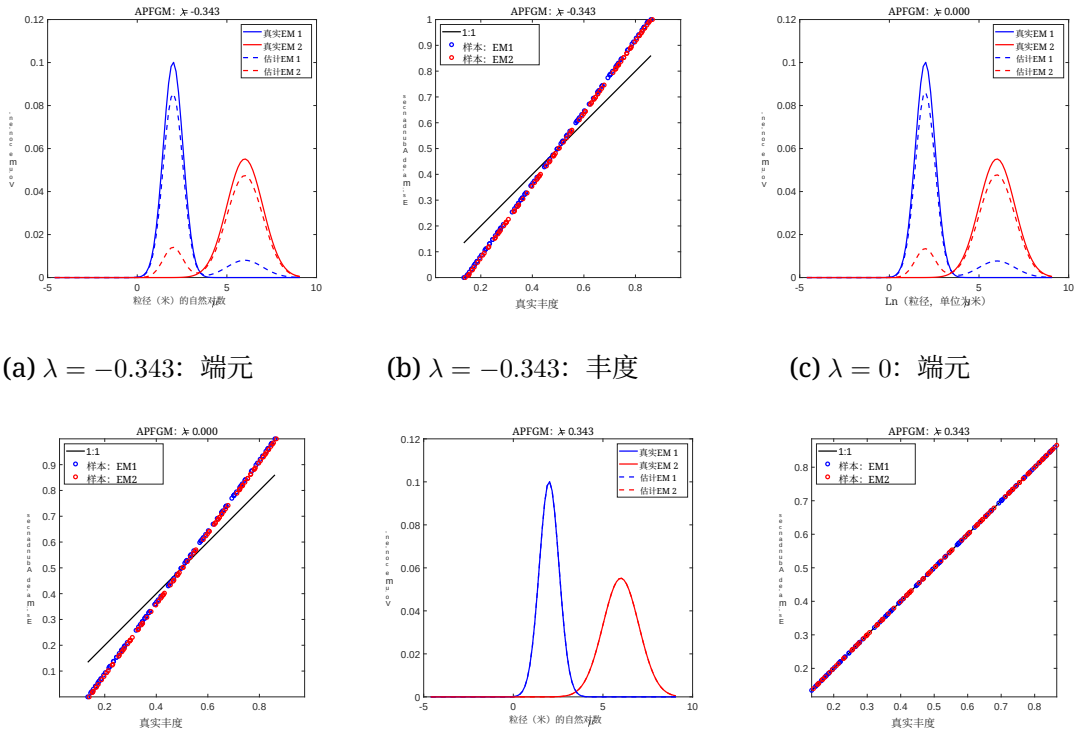
我们对引言中相同的模拟 GSD 数据应用 APFGM。当 $\lambda < 0$，即采用最小体积约束时，图 3a 和 3b 中的结果与 EMMA 的图 1c和 1d 相似，无法得到真实 EM，也会错误估计丰度。对于无体积约束的情况，我们在图 3c 和3d 中 $\lambda = 0$也发现了相同的结果。然而，当 $\lambda > 0$, 即采用最大体积假设时，APFGM 能够恢复真实 EM 和丰度；见图 3e和 3f。对于采用最小体积的 APFGM、无体积的 APFGM 和 EMMA，$\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T$ 的行列式约为 0.0015；而采用最大体积的 APFGM 的行列式约为 0.0028。采用最大体积的 APFGM 倾向于找到彼此差异尽可能大的端元，因此适用于这种高度混合的 GSD 数据。

4 实验

在本节中，我们模拟不同混合程度的GSD数据，以全面探究APFGM的性能。本文的代码可在GitHub网站 https://github.com/qianqianqi28/MVC-EMA 获取，使用 MATLAB R2024b 和 R 4.2.3 实现。

4.1 人工GSD数据的生成

图中展示了三个由对数正态分布模拟的端元（EM）4，其中每个端元包含100个值。随后，通过以随机丰度组合这些端元，生成了六组人工GSD数据；每组GSD数据包含200个样本，且



(a) $\lambda = -0.343$：端元　(b) $\lambda = -0.343$：丰度　(c) $\lambda = 0$：端元

(d) $\lambda = 0$：丰度　(e) $\lambda = 0.343$：端元　(f) $\lambda = 0.343$：丰度

图 3：APFGM：（a 和 b）$\lambda = -0.343$；（c 和 d）$\lambda = 0$；（e 和 f）$\lambda = 0.343$。

每个样本的最低丰度以0.05为增量在0至0.25之间变化，分别用于模拟从混合程度较低到较高的条件。

4.2 用于评估解混结果的指标

我们使用真实 EM 与估计值 EM 之间的平均角度偏差（单位：度）来评估估计值 GSD：

$$\text{MAEM} = \frac{180}{\pi K} \sum_{k=1}^{K} \arccos\left(\frac{\langle \text{True } \boldsymbol{G}(k,:), \text{Est. } \boldsymbol{G}(k,:) \rangle}{\|\text{True } \boldsymbol{G}(k,:)\| \|\text{Est. } \boldsymbol{G}(k,:)\|} \right) \tag{15}$$

并使用真实丰度与估计值丰度之间的平均角度偏差（单位：度）来评估估计值丰度：

$$\text{MAAB} = \frac{180}{\pi I} \sum_{i=1}^{I} \arccos\left(\frac{\langle \text{True } \boldsymbol{W}(i,:), \text{Est. } \boldsymbol{W}(i,:) \rangle}{\|\text{True } \boldsymbol{W}(i,:)\| \|\text{Est. } \boldsymbol{W}(i,:)\|} \right) \tag{16}$$

MAEM 和 MAAB 的范围为大于或等于 0 度且小于或等于 90 度。MAEM 或 EAAB 越小，算法表现越好。MAEM（MAAB）为 0 表示估计的 EM（丰度）与真实 EM（丰度）完全一致。MAEM（MAAB）为 90 表示估计的 EM（丰度）与真实 EM（丰度）相互正交。

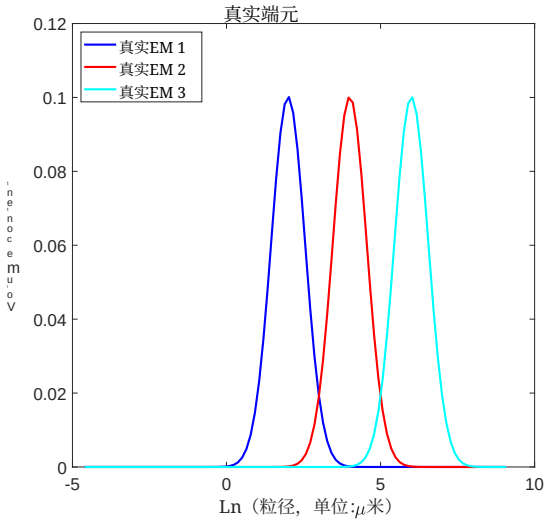
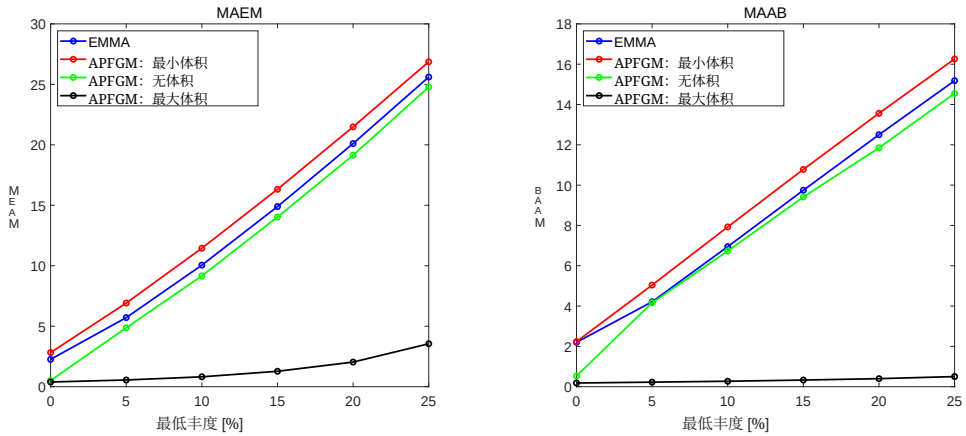


图4：三个对数正态端元。

4.3 EMMA、采用最小体积的 APFGM、无体积约束的 APFGM 与最大体积约束的 APFGM 的比较

缩放因子 λ' 控制 APFGM 中的体积正则化。其取值为 -1、0、1，分别对应采用最小体积、无体积和最大体积的 APFGM。随着混合度增加，MAEM 和 MAAB 的变化分别绘于图 5a 和图 5b ，并分别列于表 1 和表 2。可以看出，采用最大体积的 APFGM 表现最佳，其次是无体积的 APFGM，最后是 EMMA 和采用最小体积的 APFGM。具体而言，在混合水平为零时，采用无体积和最大体积的 APFGM 对真实端元和丰度的估计比 EMMA 和采用最小体积的 APFGM 更准确。这意味着 APFGM算法也适用于未混合的 GSD数据。随着混合水平提高，EMMA 以及采用无体积和最小体积的 APFGM 无法清晰地估计 EM 和丰度；但采用最大体积的 APFGM 仍能拟合真实 EM 和丰度，仅有轻微退化。这凸显了最大体积正则项在高度混合数据集中的实用性。



(a) MAEM (b) MAAB

图5：EMMA、采用最小体积的 APFGM、采用无体积的 APFGM，以及采用最大体积的 APFGM：(a) MAEM；(b) MAAB。

表1：不同混合水平下，EMMA、采用最小体积的 APFGM、采用无体积的 APFGM，以及采用最大体积的 APFGM 的 MAEM。

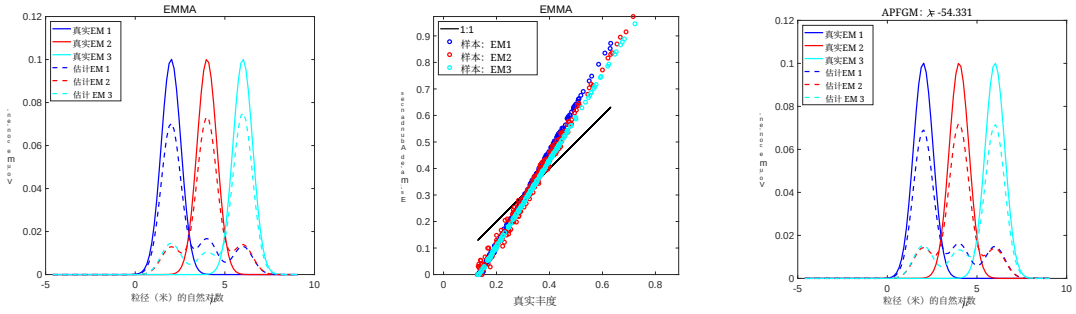
混合水平	EMMA	APFGM 最小体积	APFGM 无体积	APFGM 最大体积
0.00	2.2602	2.8223	0.5175	0.3883
0.05	5.7117	6.9162	4.8707	0.5551
0.10	10.0522	11.4498	9.1652	0.8163
0.15	14.8928	16.3239	14.0272	1.2743
0.20	20.1057	21.4845	19.1438	2.0358
0.25	25.6058	26.8632	24.7793	3.5488

表2：不同混合水平下，EMMA、最小体积 APFGM、无体积 APFGM 和最大体积 APFGM 的 MAAB。

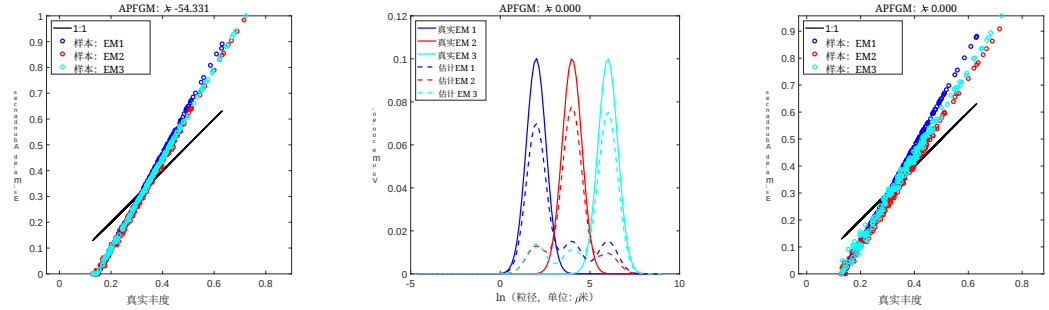
混合水平	EMMA	APFGM 最小体积	APFGM 无体积	APFGM 最大体积
0.00	2.2020	2.2359	0.5307	0.1834
0.05	4.2121	5.0408	4.1633	0.2248
0.10	6.9495	7.9277	6.7321	0.2700
0.15	9.7462	10.7792	9.4098	0.3296
0.20	12.5014	13.5635	11.8517	0.3982
0.25	15.1823	16.2625	14.5505	0.5017

图 6显示了最低丰度为 15% 时的端元及其丰度。EMMA 和 APFGM 估计的端元（含 $\lambda \leq 0$）彼此之间存在三个 EM 的污染，导致丰度估计不准确；而采用最大体积的 APFGM 能更好地恢复单峰源。因此，采用最大体积的 APFGM

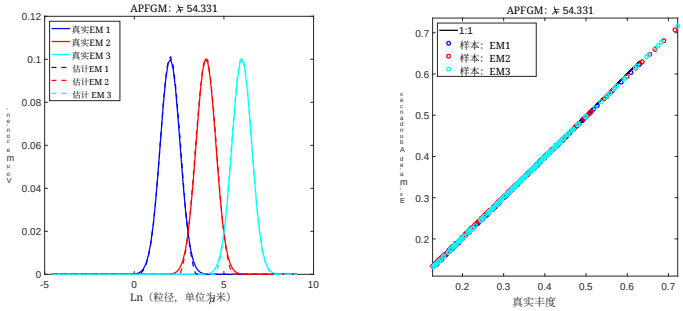
体积对高度混合的GSD数据表现出稳健性。



(a) EMMA：EM　　(b) EMMA：丰度　　(c) 采用最小体积的PFGM：EM



(d) 最小体积 PFGM：丰度　　(e) 无体积 PFGM：EM　　(f) 无体积 PFGM：丰度



(g) 最大体积 PFGM：EM　　(h) 最大体积 PFGM：丰度

图6：（a 和 b）EMMA；（c 和 d）最小体积 PFGM；（e 和 f）无体积 PFGM；（g 和 h）最大体积 PFGM。

体积 $\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T)$ 随混合度增加的变化如图 7 和表 3所示。可以看出，在任何混合水平下，采用最大体积的 APFGM 具有最大的体积，其次是无体积的 APFGM，最后是 EMMA 和采用最小体积的 APFGM。随着混合水平增加，采用最大体积的 APFGM 的体积 $\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T)$ 增加，而 EMMA 以及采用无体积和最小体积的 APFGM 的体积 det 减小。

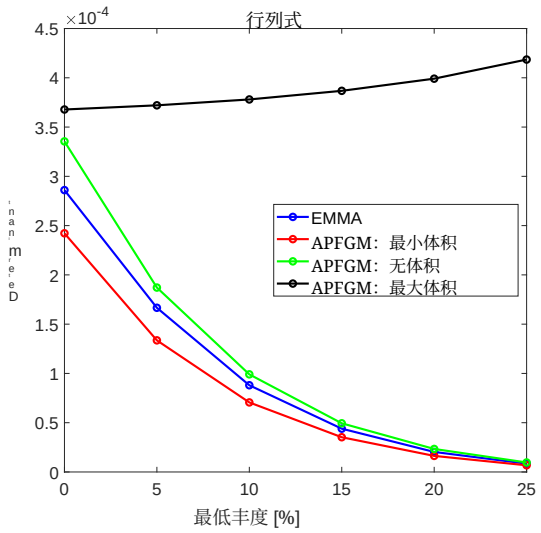


图7：EMMA、采用最小体积的 APFGM、采用无体积的 APFGM，以及采用最大体积的 APFGM：$\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T)$。

表3：不同混合水平下，EMMA、采用最小体积的 APFGM、无体积约束的 APFGM 以及采用最大体积的 APFGM 的 $\det(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T)$。

混合水平	EMMA	APFGM 最小	APFGM无	APFGM 最大
0.00	0.2860	0.2422	0.3355	0.3678
0.05	0.1666	0.1336	0.1871	0.3721
0.10	0.0880	0.0706	0.0991	0.3780
0.15	0.0439	0.0353	0.0494	0.3868
0.20	0.0203	0.0163	0.0234	0.3991
0.25	0.0085	0.0068	0.0096	0.4185

5 结论

总之，本文针对高度混合的 GSD数据提出了最大体积约束 EMA（MVC-EMA）。我们证明，在充分散布条件下，MVC-EMA 具有唯一性。充分散布条件是一种新的 NMF 可辨识准则，是对最小体积约束非负矩阵分解中现有体积最小化准则的谨慎调整。我们提出了利用交替投影快速梯度法的 APFGM。实验结果表明，与采用最小体积、无体积的 APFGM 以及 EMMA 相比，采用最大体积的 APFGM 能更有效地处理高度混合的 GSD数据。然而，作为一种新方法，它仍有一些重要问题需要进一步研究。首先，需要在一些真实 SGD 上测试 MVC-EMA，以全面评估其性能。其次，需要研究允许平衡参数取任意数值的算法。

致谢

Zhongming Chen 获得了浙江省自然科学基金（编号：LY22A010012）和新疆维吾尔自治区自然科学基金（编号：2024D01A09）的部分资助。

利益冲突

作者声明不存在潜在利益冲突。

参考文献

Abdolali, M., Barbarino, G., & Gillis, N. (2024). 面向单纯形结构矩阵分解的双单纯形体积最大化。*SIAM* 影像科学杂志, *17*(4), 2362-2391. Avis, D., & Bremner, D. (1995). 凸包算法的效果如何？载于第十一届年度计算几何研讨会论文集 (第20–28页)。美国纽约州纽约市：计算机协会。Clogg, C. C. (1981). 流动性的潜在结构模型。美国社会学杂志,*86*(4), 836–868. De Leeuw, J., Van der Heijden, P. G. M., & Verboon, P. (1990). 潜在时间预算模型。《荷兰统计学》, *44*(1), 1-22. Dietze, M., Schulte, P., & Dietze, E. (2022). 端元建模在粒径数据中的应用：约束与局限。《沉积学》,*69*(2), 845-863. Fu, X., Huang, K., & Sidiropoulos, N. D. (2018). 关于非负矩阵分解的可辨识性。*IEEE* 信号处理快报,*25*(3), 328-332. Fu, X., Huang, K., Sidiropoulos, N. D., & Ma, W.-K. (2019). 用于信号与数据分析的非负矩阵分解：可辨识性、算法与应用。*IEEE* 信号处理杂志, *36*(2), 59-80. Fu, X., Huang, K., Yang, B., Ma, W.-K., & Sidiropoulos, N. D. (2016). 用于遥感和文档聚类的鲁棒基于体积最小化的矩阵分解。*IEEE* 信号处理汇刊,*64*(23), 6254-6268. Fu, X., Ma, W.-K., Huang, K., & Sidiropoulos, N. D. (2015). 准平稳源的盲分离：利用协方差域中的凸几何。*IEEE* 信号处理汇刊, *63*(9), 2306-2320. Gillis, N. (2014). 用于鲁棒非负盲源分离的逐次非负投影算法。*SIAM* 影像科学杂志, *7*(2), 1420-1450. Gillis, N. (2020). 非负矩阵分解。美国宾夕法尼亚州费城：工业与应用数学学会。Guo, Y.-T., Li, Q.-Q., & Liang, C.-S. (2024). 非负矩阵分解的兴起：算法与应用。《信息系统》,*123*, 102379.

Hobolth, A., Guo, Q., Kousholt, A., & Jensen, J. L. (2020). 非负矩阵分解算法的统一框架与比较。《国际统计评论》, *88*(1), 29–53. Jelihovschi, E., & Allaman, I. B. (2018). lba：一个用于潜在预算分析的R软件包。《*R*期刊》,*10*, 269-287. Lee, D. D., & Seung, H. S. (1999). 通过非负矩阵分解学习物体的组成部分。《自然》, *401*(6755), 788-791. Leplat, V., Ang, A. M., & Gillis, N. (2019). 最小体积秩亏非负矩阵分解。载于*Icassp 2019 - 2019 IEEE*声学、语音与信号处理国际会议（*ICASSP*）(第3402-3406页)。Leplat, V., Gillis, N., & Ang, A. M. (2020). 基于最小体积β散度非负矩阵分解的盲音频源分离。*IEEE* 信号处理汇刊, *68*, 3400-3410. Lin, C.-H., Ma, W.-K., Li, W.-C., Chi, C.-Y., & Ambikapathi, A. (2015). 盲高光谱解混中单纯形体积最小化准则的可辨识性：无纯像元情形。《*IEEE*地球科学与遥感汇刊》, *53*(10), 5530-5546. Lin, Z., Wan, Q., Zhang, F., Zhong, J., Zhou, Z., & Bao, K. (2025). 利用端元模型算法从广东华南红树林沉积物粒度推断沉积过程。《海洋科学区域研究》, *83*, 104069. Liu, Y., Wang, T., Liu, B., Long, Y., Liu, X., & Sun, Y. (2023). 通用分解模型：基于粒径分布进行古环境重建的高效技术。《沉积学》, *70*(7), 2127-2149. Moskalewicz, D., & Winter, C. (2024). 将端元分析（emmageo）应用于颗粒形状分布，以识别北海叙尔特岛的补沙沉积物。《海洋地质学》, *467*, 107201. Nesterov, Y. (2004). 凸优化导论：基础课程。施普林格纽约，纽约州。Paatero, P., & Tapper, U. (1994). 正矩阵分解：一种非负因子模型，能够最优利用数据值的误差估计。《环境计量学》, *5*(2), 111-126. Paterson, G. A., & Heslop, D. (2015). 沉积物粒度数据解混的新方法。《地球化学、地球物理学、地球系统》,*16*(12), 4494-4506. Qi, Q., & Van der Heijden, P. G. M. (2025). *NMF*、*PLSA*、*LBA*、*EMA*和*LCA*综述，重点关注可辨识性问题。arXiv: 2512.22282. Renner, R. M. (1993). 将组成数据集分解为固定源组成的混合物。*Journal of the Royal StatisticalSociety Series C: Applied Statistics*,*42*(4), 615-631. Renner, R. M. (1995). 极端组成的构建。*MathematicalGeology*,*27*(4), 485-497. Renny, A., Kawsar, M., Manoj, M., Bikkina, S., Phartiyal, B., Kurian, P. J., . . . Thakur, B. (2026). 解读季风季节性与海洋的沉积响应

阿拉伯海东南部过去 50 ka 期间的环流。古地理学、古气候学、古生态学，*681*，113384。Saberi-Movahed, F., Berahmand, K., Sheikhpour, R., Li, Y., Pan, S., & Jalili, M. (2025). 降维中的非负矩阵分解：综述。*ACMComputingSurveys*，*58*(5)。Seidel, M., & Hlawitschka, M. (2015). 一种基于 R 的端元组成建模函数。*Mathematical Geosciences*，*47*(8)，995-1007。Van Hateren, J., Prins, M., & Van Balen, R. (2018). 粒度分布中具有遗传学意义的分解：不同端元建模算法的比较。沉积地质学，*375*，49-71。（沉积物性质分析）Van der Ark, L. A., Van der Heijden, P. G. M., & Sikkel, D. (1999). 关于潜在预算模型的可辨识性。*Journal ofClassification*，*16*(1)，117-137。Van der Heijden, P. G. M. (1994). 端元分析与潜在预算分析。*Journalof the Royal Statistical Society Series C:Applied Statistics*，*43*(3)，527-530。Weltje, G. J. (1997). 成分数据的端元建模：求解显式混合问题的数值统计算法。*Mathematical Geology*，*29*(4)，503-549。Weltje, G. J., & Prins, M. A. (2007). 粒度分布的遗传学意义分解。沉积地质学，*202*(3)，409-424。（从颗粒粒径到沉积动力学）Zhang, X., Wang, H., Xu, S., & Yang, Z. (2020). 海洋沉积物粒度数据的基础端元模型算法。*Estuarine,Coastal and Shelf Science*，*236*，106656。Zhou, G., Xie, S., Yang, Z., Yang, J.-M., & He, Z. (2011). 最小体积约束非负矩阵分解：增强部件学习能力。*IEEETransac-tions on Neural Networks*，*22*(10)，1626-1637。