

Wolfgang Krippner* und Fernando Puente León

Optische Bandselektion für die verbesserte Schätzung von Materialanteilen

Optical band selection to improve the estimation of material abundances

DOI 10.1515/teme-2017-0048

Zusammenfassung: Die in hyperspektralen Bildern enthaltene Information erlaubt die Bestimmung von Materialanteilen. Allerdings sind dazu die zeitaufwändige Aufnahme eines vollständigen Hyperspektralbilds und die Anwendung rechenintensiver Schätzalgorithmen notwendig. Durch eine spektrale Filterung im Lichtkanal ist es möglich, aus der Aufzeichnung einiger weniger Intensitätsbilder die gesuchten Materialanteile zu ermitteln (optische Materialanteilsschätzung). Wesentlich ist dabei der Entwurf der hierfür verwendeten Spektralfilter. Um auf Grundlage des linearen Mischmodells die Spektralfilterberechnung durchführen zu können, wird in dem folgenden Beitrag eine Bandselektion durchgeführt. Die Auswahl der Wellenlängenkanäle erfolgt anhand eines neu entwickelten Maßes, dessen Größen ebenfalls durch spektrale Filterung optisch bestimmt werden können. Somit kann weiterhin die Aufnahme vollständiger Hyperspektralbilder vermieden werden. Experimentelle Auswertungen zeigen, dass die optische Materialanteilsschätzung mit voriger Bandselektion deutlich präzisere Ergebnisse liefert.

Schlüsselwörter: Hyperspektralbild, optical Computing, optische Messverfahren, spektrale Filterung, spektrale Entmischung.

Abstract: Information provided by hyperspectral images allows to determine material abundances. As major drawbacks, the time-consuming measurement of hyperspectral images and the application of computationally expensive estimation algorithms are required. The use of programmable filters in the optical channel delivers a small number of intensity images which enable to decode material abundance estimates (optical measurement of material abundances). The way of determining these spectral filters influences the accuracy of the estimates. Since we account for the linear mixing model, a band selection is

proposed. The newly developed method still enables an optical implementation by using some additional spectral filter configurations. The experimental evaluation shows that more accurate estimates for material abundances result.

Keywords: Hyperspectral image, optical computing, optical measurement, spectral filtering, spectral unmixing.

1 Einleitung

Hyperspektrale Bilder sind bereits seit geraumer Zeit ein fester Bestandteil in der Fernerkundung. Dabei werden von luftgestützten Sensoren aus Spektren entlang der Erdoberfläche orts aufgelöst aufgezeichnet. Ziel ist es, Aussagen über die anteilige Zusammensetzung der Erdoberfläche aus beispielsweise Gebäude, Gewässer, Plantagen und Wälder anhand der hyperspektralen Information treffen zu können (*spectral unmixing*). Während die Reinspektren der betrachteten Bestandteile meist bekannt sind (*supervised unmixing*), liegt an einem jeden Pixel des hyperspektralen Bildes ein Mischspektrum vor. Dieses lässt sich nur als die Überlagerung der Reinspektren aufgrund einer im Verhältnis zur Größe der Bestandteile relativ geringen örtlichen Auflösung beschreiben [3, 5, 7].

Weiteren Einsatz finden hyperspektrale Bilder in der Materialklassifikation und der chemischen Analyse. Prinzipiell ist es mit hyperspektraler Information möglich, Aufgaben in der industriellen Qualitätskontrolle, medizinischen Analyse und dem Lebensmittelbereich zu lösen [11]. Die berührungslose und zerstörungsfreie Vorgehensweise durch Verarbeitung hyperspektraler Aufzeichnungen erscheint besonders attraktiv. Nicht nur die kostspielige notwendige Hardware, sondern auch die zeitaufwändige Aufzeichnung und die rechenintensive Auswertung der hyperspektralen Daten verhindern jedoch die breite Anwendung dieser Technik [1, 2].

Im Rahmen dieses Beitrags sollen Materialanteile in Mischungen auf optischem Wege bestimmt werden. Es werden durch die Verwendung von programmierbaren Spektralfiltern Intensitätsbilder aufgezeichnet, welche jeweils

*Korrespondenzautor: Wolfgang Krippner, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Industrielle Informationstechnik (IIT), E-Mail: wolfgang.krippner@kit.edu

Fernando Puente León, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Industrielle Informationstechnik (IIT)

bereits die Anteile eines Materials beschreiben. Die rechenintensive Auswertung und der hohe Speicherbedarf entfallen bei dieser optischen Schätzung von Materialanteilen. Eine angepasste Hardware stellt zudem eine kurze Aufnahmezeit in Aussicht. Wie Untersuchungen in [10] gezeigt haben, ist die Gültigkeit der Mischmodellbeschreibung für die Spektren der betrachteten Materialmischung für verlässliche Materialanteilsschätzungen wesentlich. Das lineare Mischmodell (LMM) bietet einen direkten Weg für die Berechnung der Spektralfilter, jedoch führen Abweichungen vom LMM zu ungenau geschätzten Materialanteilen. Deshalb wird nachfolgend auf Grundlage der Singulärwertzerlegung [4] eine Auswahl von spektralen Bereichen getroffen, in welchen die Spektren im Wesentlichen nach dem LMM gemischt sind. Die Selektion ist auf optischem Wege unter Verwendung zusätzlicher Spektralfilter möglich, wobei die Anzahl an insgesamt aufgezeichneten Intensitätsbildern und somit das Datenvolumen für die Materialanteilsbestimmung weiterhin geringer als bei einem entsprechenden vollständigen Hyperspektralbild bleibt.

Der Beitrag gliedert sich wie folgt: Abschnitt 2 präsentiert das Vorgehen der optischen Schätzung von Materialanteilen, indem das LMM eingeführt, die mathematische Beschreibung der spektralen Filterung angegeben und die optische Realisierung der Spektralfilter erläutert werden. Anschließend gibt Abschnitt 3 das neu entwickelte Verfahren für die Bandselektion an, welches in Abschnitt 4 experimentell sowohl optisch als auch simulativ ausgewertet wird. Abschnitt 5 führt nach einer kurzen Zusammenfassung mögliche zukünftige Forschungsgegenstände auf.

2 Optische Schätzung von Materialanteilen

Für die optische Schätzung von Materialanteilen werden Spektralfilter eingesetzt. Ausgangslage für den Entwurf von Spektralfiltern ist das LMM, welches für die Beschreibung der Spektren in Materialmischungen verwendet wird. Die Spektralfilter lassen sich anhand von Umformulierungen des LMM berechnen. Zunächst folgt die Einführung des LMM. Sie erlaubt es, die Aufgabe der optischen Materialanteilsbestimmung mathematisch zu beschreiben. Anschließend wird die analytische Anwendung von Spektralfiltern und deren optische Realisierung vorgestellt.

2.1 Beschreibung von Mischspektren

Das lineare Mischmodell beschreibt das hyperspektrale Bild von Materialmischungen als die lineare Überlagerung von Reinspektren der auftretenden Materialien gewichtet mit deren Anteilen. Folglich ist das Spektrum $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^\Lambda$ bei Λ aufgezeichneten Wellenlängenkanälen an einem jeden Pixel bestimmt durch

$$\mathbf{y} = \mathbf{M} \mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon} = \tilde{\mathbf{y}} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1)$$

wobei die Matrix $\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_P] \in \mathbb{R}^{\Lambda \times P}$ die Reinspektren $\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_P$ der P Materialien enthält und der Vektor $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_P]^T$ die jeweiligen Materialanteile $a_1, \dots, a_P$ angibt. Abweichungen von dem modellierten Spektrum $\tilde{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^\Lambda$ zu dem aufgezeichneten Spektrum $\mathbf{y}$ sind durch $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^\Lambda$ beschrieben.

Anteil an $\boldsymbol{\varepsilon}$ haben neben allgemeinem Messrauschen hauptsächlich die sogenannte Spektrenvariabilität der Reinspektren [13] und nichtlineares Mischverhalten [6]. Die Spektrenvariabilität beschreibt die Abweichung des Mischspektrums an dem betrachteten Pixel des hyperspektralen Bildes von dem LMM aufgrund mehrerer möglicher Reinspektren. Die Reinspektren, welche in $\mathbf{M}$ notiert sind, werden über alle Pixel des hyperspektralen Bildes hinweg nach dem LMM als konstant angenommen. Dabei schlägt [13] eine spektrale Gewichtung für die Reduzierung des Anteils der Spektrenvariabilität in $\boldsymbol{\varepsilon}$ vor, um diejenigen Bereiche, in denen die Spektrenvariabilität gering ist, bevorzugt zu berücksichtigen.

Nichtlineares Mischverhalten kann beispielsweise bei Mischungen von Materialien auftreten, deren mikroskopische räumliche Ausdehnung in der Größenordnung des betrachteten Wellenlängenbereichs der Spektren liegt [5]. In dem verfolgten Szenario für die optische Materialanteilsbestimmung ist lediglich $\mathbf{M}$ gegeben. Die Aufzeichnung von $\mathbf{y}$ soll vermieden werden. Daher ist es im Vergleich zu Methoden des sogenannten *supervised unmixing* nicht möglich, $\boldsymbol{\varepsilon}$ durch ein Fehlermaß in der Schätzung von $\mathbf{a}$ zu berücksichtigen. Dagegen soll bei der optischen Bandselektion in Abschnitt 3 ausgenutzt werden, dass $\boldsymbol{\varepsilon}$ spektral variiert. Besonders hervorzuheben ist, dass die Abschätzung von $\boldsymbol{\varepsilon}$ ohne die Aufnahme von $\mathbf{y}$ optisch unter Verwendung geeigneter Spektralfilter erfolgen kann.

2.2 Verwendung von Spektralfiltern

Die analytische Anwendung von Spektralfiltern mit dem Ziel der Bestimmung von Materialanteilen lässt sich in Anlehnung an das LMM (1) wie folgt formulieren. Es soll

für die geschätzten Materialanteile $\hat{\mathbf{a}}$ gelten:

$$\hat{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \vdots \\ \hat{a}_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{f}_P^T \end{bmatrix} \mathbf{y} = \mathbf{a} + \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{f}_P^T \end{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{a} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (2)$$

wobei $\mathbf{f}_1 \dots \mathbf{f}_P \in \mathbb{R}^\Lambda$ die Spektralfilter für die Anteilschätzung $\hat{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^P$ der P Materialien und $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \in \mathbb{R}^P$ die Abweichung von den wahren Anteilen $\mathbf{a}$ bezeichnen. Nach (2) ist die Schätzung des Anteils von Material i durch das Skalarprodukt $\hat{a}_i = \mathbf{f}_i^T \mathbf{y}$ bestimmt.

Das Skalarprodukt und somit die Anwendung des Spektralfilters $\mathbf{f}_i$ kann optisch durch die Modifikation der Aufnahme von hyperspektralen Daten realisiert werden. Dazu soll zunächst die Aufzeichnung herkömmlicher Hyperspektralbilder kurz erläutert werden. Es wird die Hardware betrachtet, wie sie auch in der experimentellen Umsetzung in Abschnitt 4 vorliegt.

Für die Aufzeichnung von Hyperspektralbildern wird ein fester Wellenlängenbereich in Λ Wellenlängenkanäle nahezu konstanter Breite unterteilt. Mit einem *Acousto-Optical Tunable Filter* (AOTF, Gooch & Housego HSi-300) wird ein spektraler Bandpass für den jeweiligen Bereich eingestellt. Es folgt die Aufzeichnung eines Intensitätsbilds mit einer EMCCD-Kamera (Andor iXon3 897) über eine festgelegte Belichtungszeit. Anschließend wird der darauffolgende Wellenlängenkanal ausgewählt und die nächste Aufzeichnung bei gleicher Belichtungszeit durchgeführt. Der Vorgang wiederholt sich über alle Wellenlängenkanäle. Somit ergeben sich Λ Intensitätsbilder, welche hintereinander gereiht in einem einzigen Hyperspektralbild der Szene resultieren. Die Beleuchtung der Szene ist hierbei durch eine 300 W Xenon-Lampe als Lichtquelle gegeben.

Für die optische Realisierung der Spektralfilter werden nun die Belichtungszeiten in den jeweiligen Wellenlängenkanälen angepasst. Es werden mit den Λ Filterkoeffizienten die Belichtungszeiten der einzelnen Kanäle als Vielfache einer Referenzzeit gewählt. Die Summation der so aufgezeichneten Intensitätsbilder liefert ein einziges Intensitätsbild, welches den Anteil von Material i orts aufgelöst enthält. Die rechenintensive Verarbeitung hyperspektraler Daten und der hohe Speicherbedarf entfallen. Offenbar liefern negative Filterkoeffizienten negative Werte für die Belichtungszeiten. Sie werden gesondert über ihren Betrag behandelt und die resultierenden Intensitätsbilder gehen in der Summation mit einem negativen Vorzeichen ein. Weitere Details bietet [10]. Es sei angemerkt, dass die Anwendung von Spektralfiltern als optische Auswertung des Skalarprodukts $\hat{a}_i = \mathbf{f}_i^T \mathbf{y}$ der Vorgehensweise in [12] bei Betrachtung von Punktspektren ähnelt.

3 Optische Bandselektion

Sofern der Fehlerterm $\boldsymbol{\varepsilon}$ im LMM (1) vernachlässigbar klein ist, können die Materialanteile $\mathbf{a}$ unmittelbar unter der Verwendung der Pseudoinversen der Reinspektrenmatrix, d. h. $[\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_P]^T = (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^T$, geschätzt werden. Insbesondere gibt die Pseudoinverse den besten linearen erwartungstreuen Schätzer an, falls $\boldsymbol{\varepsilon}$ durch einen weißen Störprozess beschrieben wird. Die geschätzten Materialanteile $\hat{\mathbf{a}}$ besitzen dann minimale Varianz [10]. Innerhalb dieses Beitrags soll die optische Materialanteilsbestimmung stets mit Hilfe der Pseudoinversen der Reinspektrenmatrix für den Spektralfilterentwurf erfolgen. Zwar kann ein weißer Störprozess durch die nachfolgende Bandselektion nicht sichergestellt werden, jedoch wird versucht, zumindest den Fehlerterm $\boldsymbol{\varepsilon}$ klein zu halten. Nach (2) sind genauere Materialanteilsschätzungen zu erwarten.

Für die optische Bandselektion wird das LMM (1) in K Bandbereiche unterteilt. Das i -te LMM mit $i = 1, \dots, K$ betrachtet dabei die $P + 1$ Wellenlängenkanäle $(i - 1)(P + 1) + 1, \dots, i(P + 1)$. Weiter wird angenommen, dass $\Lambda = K(P + 1)$ gilt. Es sollen nun die Singulärwertzerlegungen der Reinspektrenmatrizen $\mathbf{M}_i \in \mathbb{R}^{(P+1) \times P}$ des jeweiligen Bereichs untersucht werden. Nach [4] kann jedes der K LMM äquivalent ausgedrückt werden als

$$\mathbf{y}_i = \underbrace{\mathbf{U}_i \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{V}_i^T}_{\mathbf{M}_i} \mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}_i = \tilde{\mathbf{y}}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i \quad (3)$$

mit $\mathbf{y}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i, \tilde{\mathbf{y}}_i \in \mathbb{R}^{P+1}$ und den orthogonalen Matrizen $\mathbf{U}_i = [\mathbf{u}_i, \dots, \mathbf{u}_{i+P+1}] \in \mathbb{R}^{(P+1) \times (P+1)}$, $\mathbf{V}_i = [\mathbf{v}_i, \dots, \mathbf{v}_{i+P}] \in \mathbb{R}^{P \times P}$ sowie der Matrix

$$\boldsymbol{\Sigma}_i = \begin{bmatrix} \sigma_{i1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_{iP} \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(P+1) \times P} \quad (4)$$

mit den Singulärwerten $\sigma_{i1}, \dots, \sigma_{iP}$. In (3) bezeichnet $\mathbf{U}_i \boldsymbol{\Sigma}_i \mathbf{V}_i^T$ die Singulärwertzerlegung von $\mathbf{M}_i$.

Die Orthogonalität von $\mathbf{U}_i$ und die Struktur von $\boldsymbol{\Sigma}_i$ werden nun genutzt, um ein Maß für $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ zu definieren. Aus der Projektion von $\mathbf{u}_{i+P+1}$ auf (3) folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{i+P+1}^T \mathbf{y}_i &= [0 \dots 0 1] \begin{bmatrix} \sigma_{i1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_{iP} \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \mathbf{V}_i^T \mathbf{a} + \mathbf{u}_{i+P+1}^T \boldsymbol{\varepsilon}_i \\ &= 0 + \mathbf{u}_{i+P+1}^T \boldsymbol{\varepsilon}_i. \end{aligned} \quad (5)$$

Somit lässt $\mathbf{u}_{i+P+1}^T \mathbf{y}_i$ bereits eine gewisse Bewertung von $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ zu. Falls $\mathbf{u}_{i+P+1}^T \mathbf{y}_i = 0$ gilt, tritt in dem i -ten Modell

keine Abweichung zu $\tilde{\mathbf{y}}_i$ auf. Eine präzise Materialanteilschätzung ist anzunehmen. Mit dem Ziel, s Bandbereiche, $s = 1, \dots, K$, auszuwählen, sind geeignete Vergleiche zwischen den Bandbereichen notwendig. Werte nach (5) lassen einen solchen Vergleich noch nicht zu. Es wird die Konditionszahl

$$\kappa_i = \frac{\sigma_{i1}}{\sigma_{iP}} \quad (6)$$

der Reinspektrenmatrix $\mathbf{M}_i$ hinzugenommen. Falls κ_i große Werte annimmt, ist $\mathbf{M}_i$ schlecht konditioniert und annähernd singular. Der zugehörige Bandbereich sollte möglicherweise nicht gewählt werden. Weiter wird die Höhe der Reflektanz $\mathbf{y}_i$ im i -ten Band bewertet, da ein hohes Signal-Rausch-Verhältnis bei großen $\mathbf{y}_i$ erwartet wird. Dazu wird die Betragssummennorm $\|\mathbf{y}_i\|_1$ betrachtet. Da $\mathbf{y}_i \geq \mathbf{0}$, kann $\|\mathbf{y}_i\|_1$ formuliert werden als

$$\|\mathbf{y}_i\|_1 = [\mathbf{1} \dots \mathbf{1}]^T \mathbf{y}_i = \mathbf{n}_i^T \mathbf{y}_i \quad (7)$$

mit $\mathbf{n}_i \in \mathbb{R}^{P+1}$. Als Maß für die Bandselektion wird letztendlich

$$c_i = \frac{\mathbf{u}_{i+P+1}^T \mathbf{y}_i}{\mathbf{n}_i^T \mathbf{y}_i} \kappa_i \quad (8)$$

vorgeschlagen. In (8) treten sowohl (5) und (6) als auch (7) wieder auf. Die Bandbereiche mit den s kleinsten Werten von c_i werden für die Materialanteilsbestimmung ausgewählt. Während κ_i mit der Kenntnis von $\mathbf{M}_i$ berechnet werden kann, sind die Werte $\mathbf{u}_{i+P+1}^T \mathbf{y}_i$ und $\mathbf{n}_i^T \mathbf{y}_i$ mit den Spektralfiltern $\mathbf{u}_{i+P+1}$ und $\mathbf{n}_i$ optisch bestimmbar. Folglich ist die Bandselektion nach (8) unter der Verwendung von $2K$ zusätzlichen Spektralfiltern durchführbar, ohne $\mathbf{y}$ bzw. $\mathbf{y}_i$ vollständig aufnehmen zu müssen. Die optische Materialanteilsbestimmung mit Bandselektion benötigt $2K + P$ Aufnahmen, während ein Hyperspektralbild $\Lambda = K(P + 1)$ Aufzeichnungen verlangt.

Das Verfahren für die Auswahl von Bändern ist mit der Bestimmung von c_i nach (8) und der Beschränkung auf Bandbereiche mit den s kleinsten Werten von c_i vollständig eingeführt. Aufgrund der mathematischen Struktur von c_i ist die Messung eines hyperspektralen Bilds nicht notwendig. Dennoch soll mit c_i ein sinnvolles Maß für ε_i und somit für die Wahl des i -ten Bandbereichs vorliegen. Der nachfolgende Abschnitt zeigt, inwiefern die Materialanteilsbestimmung durch das vorgeschlagene Vorgehen für die Bandselektion tatsächlich verbessert werden kann.

4 Evaluierung

Für die experimentelle Untersuchung werden Mischungen aus Farbpigmenten betrachtet. Sie sollen als mögliche

Anwendungsaufgabe für die Bestimmung von Materialanteilen mit Hilfe von Spektralfiltern dienen. Die wahren Anteile (*ground truth*) der Farbpigmente in den 56 Mischfächern eines Setzkastens sind bekannt. Der Wellenlängenbereich von 410 nm bis 806 nm wird bei allen Auswertungen verwendet und ist in insgesamt 90 Wellenlängenkanäle unterteilt. Dabei beträgt die Kanalbreite bei allen Kanälen ca. 4 nm. Da $P = 4$ verschiedene Farbpigmente in jeweils unterschiedlichen Anteilen in den Mischfächern vermengt wurden, ergeben sich $K = 18$ spektrale Bereiche nach Abschnitt 3. Durch die Aufzeichnung eines vollständigen Hyperspektralbilds und anschließender Mittelwertbildung über die Pixel der Mischfächer, welche nur ein einziges Farbpigment enthalten, werden die Spektren $\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_K$ der Reinspektrenmatrix $\mathbf{M}$ bestimmt. Sie sind in Abb. 1 gezeigt und werden als bekannt angenommen. Die Mischung der Farbpigmente erscheint als ein geeignetes Beispiel für die optische Bandselektion, da nach [10] Spektren vermengter Farbpigmente nennenswerte und über den Wellenlängenbereich unterschiedlich starke Abweichungen zum LMM aufweisen (siehe Abb. 2). Dazu zeigt Abb. 3 für jeden spektralen Bereich i den über alle Pixel gemittelten relativen Fehler $\bar{\varepsilon}_i^{\text{rel}}$ von

$$\varepsilon_i^{\text{rel}} = \frac{1}{P+1} \sum_{l=1}^{P+1} \frac{|\tilde{y}_{il} - y_{il}|}{\tilde{y}_{il}} \quad (9)$$

mit $\tilde{\mathbf{y}}_i = [\tilde{y}_{i1}, \dots, \tilde{y}_{iP+1}]^T$ berechnet nach (3) unter der Annahme $\varepsilon_i = \mathbf{0}$ sowie dem aufgezeichneten Spektrum $\mathbf{y}_i = [y_{i1}, \dots, y_{iP+1}]^T$. Abbildung 3 motiviert zur Durchführung einer Bandselektion. Dabei sei betont, dass $\bar{\varepsilon}_i^{\text{rel}}$ aufgrund der angestrebten Vermeidung der vollständigen Aufzeichnung von $\mathbf{y}_i$ bei der optischen Materialanteilsbestimmung als Auswahlkriterium nicht berücksichtigt werden kann. Stattdessen wird die Eignung der s kleinsten Werte von (8) für die Bandauswahl im Folgenden diskutiert. Als Gütemaß für die geschätzten Materialanteile dient der über alle Pixel gemittelte quadratische Anteilsfehler $\bar{e}$ von

$$e = \frac{1}{P} \sum_{j=1}^P \sqrt{(a_j - \tilde{a}_j^{\text{stc}})^2}. \quad (10)$$

Dabei werden geschätzte, normalisierte Materialanteile

$$\tilde{a}_j^{\text{stc}} = \frac{\tilde{a}_j'}{\sum_{j=1}^P \tilde{a}_j'} \quad \text{und} \quad \tilde{a}_j' = \frac{\tilde{a}_j}{\max_{\forall r \in \mathcal{I}} \tilde{a}_r - \min_{\forall r \in \mathcal{I}} \tilde{a}_r} \quad (11)$$

mit $\mathcal{I} = \{1, \dots, P\}$ sowie die wahren Anteile a_j jeweils für Material j betrachtet. Dadurch genügen die $\tilde{a}_j^{\text{stc}}$ den sogenannten *Sum-to-one*- und *Non-negativity*-Bedingungen: An einem jeden Pixel liegen positive Anteilschätzungen

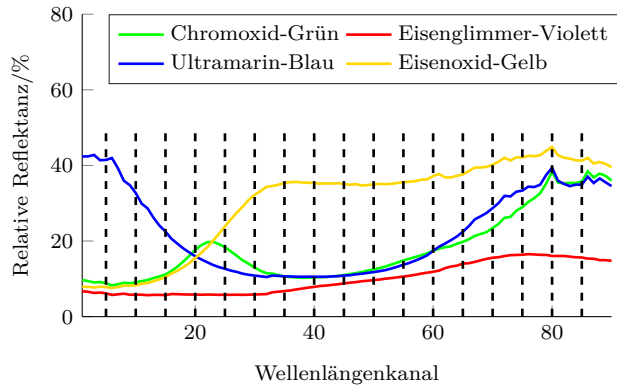


Abb. 1: Relative Reflektanz der Farbpigmente in den 90 betrachteten Wellenlängenkanälen und gestrichelt $K = 18$ untersuchte spektrale Bereiche.

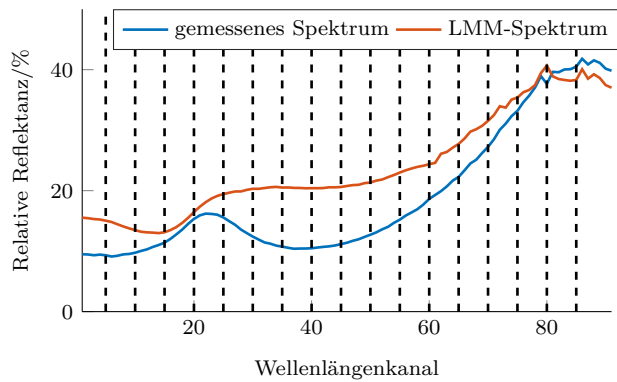


Abb. 2: Aufgezeichnetes Spektrum eines Mischfachs gemittelt über alle Pixel und Spektrum unter Verwendung des LMM mit $\varepsilon = 0$ sowie gestrichelt $K = 18$ untersuchte spektrale Bereiche.

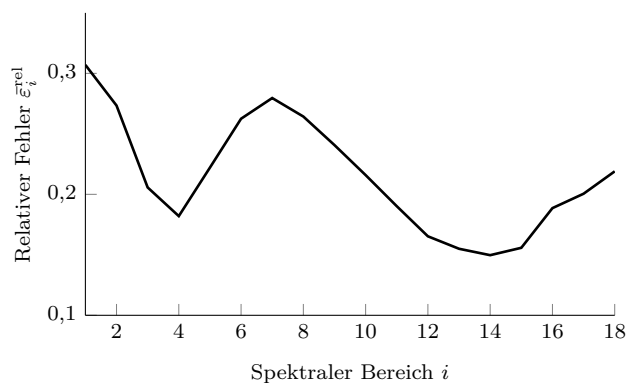


Abb. 3: Über alle Pixel gemittelter relativer Fehler $\bar{\varepsilon}_i^{\text{rel}}$ in Abhängigkeit des spektralen Bereichs i .

vor, welche physikalisch sinnvolle Werte im Sinne von dezimalen Materialanteilen besitzen [7].

Die folgenden Auswertungen beinhalten stets einen Vergleich in $\bar{\varepsilon}$. Dabei kennzeichnet $\bar{\varepsilon}^{\text{opt}}$ Ergebnisse für den gemittelten quadratischen Fehler der geschätzten Materialanteile, welche aus Anwendung von Spektralfiltern resultieren. Es wird sowohl die Bandselektion von s Bereichen nach (8) als auch die eigentliche Anteilsschätzung über die Pseudoinverse der so erhaltenen Materialanteilmatrix durch Auswertung von einigen wenigen Intensitätsbildern durchgeführt. Dagegen bezieht sich $\bar{\varepsilon}^{\text{sim}}$ auf Ergebnisse, welche aus der Aufzeichnung eines vollständigen Hyperspektralbilds und rechnergestützten Ausführung der Filterungen stammen.

Zunächst zeigt Abb. 4 den Verlauf von $\bar{\varepsilon}$ in Abhängigkeit von der Anzahl an ausgewählten spektralen Bereichen s . Bei $s = 18$ wird keine Bandselektion durchgeführt und die Anteilsschätzung erfolgt über alle verfügbaren Wellenlängenkanäle. Es ist zu sehen, dass die Bandselektion von $s = 2$ Bereichen bereits die Genauigkeit der Anteilsschätzung erhöht. Über einen großen Bereich von s werden Verbesserungen erzielt. Offenbar unterscheiden sich bei gleichen s die Werte von $\bar{\varepsilon}^{\text{opt}}$ und $\bar{\varepsilon}^{\text{sim}}$. Teilweise ist die Materialanteilsschätzung bei optischer Realisierung präziser. Dabei ist zu betonen, dass zwar die gleiche Anzahl an spektralen Bereichen jeweils ausgewählt wird, sich jedoch die s ausgewählten Bereiche je nach ermittelten Werten von c_i durchaus zwischen rechnerischer und optischer Durchführung unterscheiden können. Tabelle 1 enthält die numerischen Werte von $\bar{\varepsilon}^{\text{opt}}$ und $\bar{\varepsilon}^{\text{sim}}$ für $s = 1, \dots, 18$. Zusätzlich wird die Veränderung des Materialanteilsschätzfehlers durch die Verhältnisse $r^{\text{opt}} = \frac{\bar{\varepsilon}^{\text{opt}}}{\bar{\varepsilon}^{\text{all}}}$ und $r^{\text{sim}} = \frac{\bar{\varepsilon}^{\text{sim}}}{\bar{\varepsilon}^{\text{all}}}$ angegeben, wobei $\bar{\varepsilon}^{\text{all}}$ den mittleren quadratischen Anteilsfehler ohne Bandselektion und optischer Filterung bezeichnet. Nach Tabelle 1 kann bei $s = 6$ der Fehler $\bar{\varepsilon}^{\text{opt}}$ minimiert werden. Für einen anschaulichen Vergleich zeigt Abb. 5 die geschätzten Materialanteile in Anordnung der Mischfächer örtlich. Es werden die wahren Anteile, die geschätzten Anteile ohne Bandselektion und die Ergebnisse der Anteilsschätzung bei $s = 6$ für die vier Farbpigmente präsentiert. Sämtliche dabei benötigten Filterungen wurden optisch mit Spektralfiltern realisiert. Unterschiede in den Materialanteilsschätzungen sind auch hier deutlich erkennbar. Werden die Ergebnisse je Material in den einzelnen Mischfächern verglichen, sind Verbesserungen von zunächst teilweise unbrauchbaren Materialanteilsschätzungen bei keiner Bandselektion auszumachen. Der visuelle Eindruck stimmt mit den numerischen Werten einer genaueren Materialanteilsschätzung durch die optische Bandselektion überein.

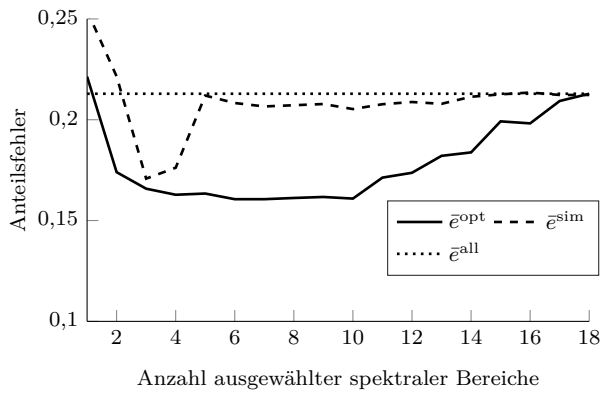


Abb. 4: Über alle Pixel gemittelter quadratischer Anteilsfehler $\bar{e}$ in Abhängigkeit der Anzahl an ausgewählten spektralen Bereichen.

Tab. 1: Numerische Werte der gemittelten quadratischen Anteilsfehler.

Anzahl spektraler Bereiche s	$\bar{e}^{\text{opt}}$	$\bar{e}^{\text{sim}}$	$\bar{r}^{\text{opt}}$	$\bar{r}^{\text{sim}}$
1	0,2214	0,2541	1,0395	1,1932
2	0,1740	0,2215	0,8170	1,0403
3	0,1658	0,1708	0,7787	0,8020
4	0,1628	0,2120	0,7643	0,8272
5	0,1634	0,2083	0,7673	0,9957
6	0,1606	0,1111	0,7542	0,9781
7	0,1606	0,2066	0,7541	0,9703
8	0,1612	0,2072	0,7570	0,9730
9	0,1612	0,2078	0,7593	0,9757
10	0,1617	0,2053	0,7553	0,9640
11	0,1609	0,2077	0,8042	0,9752
12	0,1713	0,2088	0,8154	0,9806
13	0,1737	0,2079	0,8553	0,9765
14	0,1821	0,2114	0,8631	0,9926
15	0,1838	0,2126	0,9352	0,9982
16	0,1992	0,2135	0,9307	1,0023
17	0,1982	0,2123	0,9828	0,9971
18	0,2129	0,2123	1,0000	0,9968

Aus den Auswertungen wird gefolgert, dass die Bandselektion unter Verwendung der Pseudoinversen der Materialanteilmatrix bei den untersuchten Mischungen verschiedener Farbpigmente zu genaueren Anteilsschätzungen führt. Die vorgeschlagene Selektion nach den kleinsten Werten von c_i nach (8) erweist sich als geeignet. Insbesondere liefert die optische Realisierung durch angepasste Spektralfilter ähnliche Resultate für $\bar{e}$ wie die rechnergestützte Auswertung der Filterungen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Die Pseudoinverse der Reinspektrenmatrix ist für die optische Materialanteilsschätzung nur bedingt geeignet. Es ist zu beachten, ob das LMM die Mischspektren ausreichend beschreiben kann. Da sich der Modellfehler über spektrale Bandbereiche insbesondere bei den betrachteten Mischungen aus Farbpigmenten unterscheiden kann, wurde in diesem Beitrag eine Bandselektion vorgeschlagen. Als Kriterium für die Auswahl von Bändern wurde ein Maß definiert, welches keine Aufzeichnungen eines vollständigen Hyperspektralbilds benötigt. Die Berechnung kann durch Auswertung einiger weniger Intensitätsbilder erfolgen. Dafür sind neben Spektralfiltern für die optische Materialanteilsschätzung weitere Spektralfilter notwendig. Nach der Auswertung der experimentell erhaltenen Ergebnisse ist die vorgestellte Methode für die Bandselektion optisch realisierbar und führt zu genaueren Materialanteilsschätzungen.

Da lediglich Mischungen aus Farbpigmenten betrachtet wurden, sind zukünftig Auswertungen an weiteren Materialmischungen für eine allgemeinere Evaluierung notwendig. Dabei sollte untersucht werden, ob auch andere Bewertungen als das vorgeschlagene Maß c_i nach (8) ähnliche Ergebnisse liefern können. Möglicherweise sind eine andere Kombination oder eine Gewichtung der enthaltenen Größen ebenso zielführend. Der Einfluss der Breite der spektralen Bereiche ist in Zukunft ebenfalls zu berücksichtigen.

Die Auswertung der c_i nach (8) erfolgt orts aufgelöst. Folglich ist eine orts aufgelöste Bandselektion möglich. Die Auswirkung auf die Genauigkeit der optisch geschätzten Materialanteile nach einer solchen Bandselektion sollte in zukünftigen Arbeiten ebenfalls Bestandteil sein.

Im Allgemeinen besteht die Möglichkeit, nach der Bandselektion neben der Pseudoinversen weitere Verfahren für den Entwurf der Spektralfilter für die Materialanteilsschätzung in den ausgewählten Wellenkanälen anzuwenden. Inwiefern sich Ergebnisse wie beispielsweise in [8] oder [9] dadurch verbessern lassen, ist bei weiteren Betrachtungen eine lohnende Untersuchung.

Literatur

- [1] S. Bauer und F. Puente León. Gewinnung und Verarbeitung hyperspektraler Fluoreszenzbilder zur optischen Mineralklassifikation. *tm – Technisches Messen*, 82(1):24–33, 2015.
- [2] S. Bauer und F. Puente León. Spectral and geometric aspects of mineral identification by means of hyperspectral

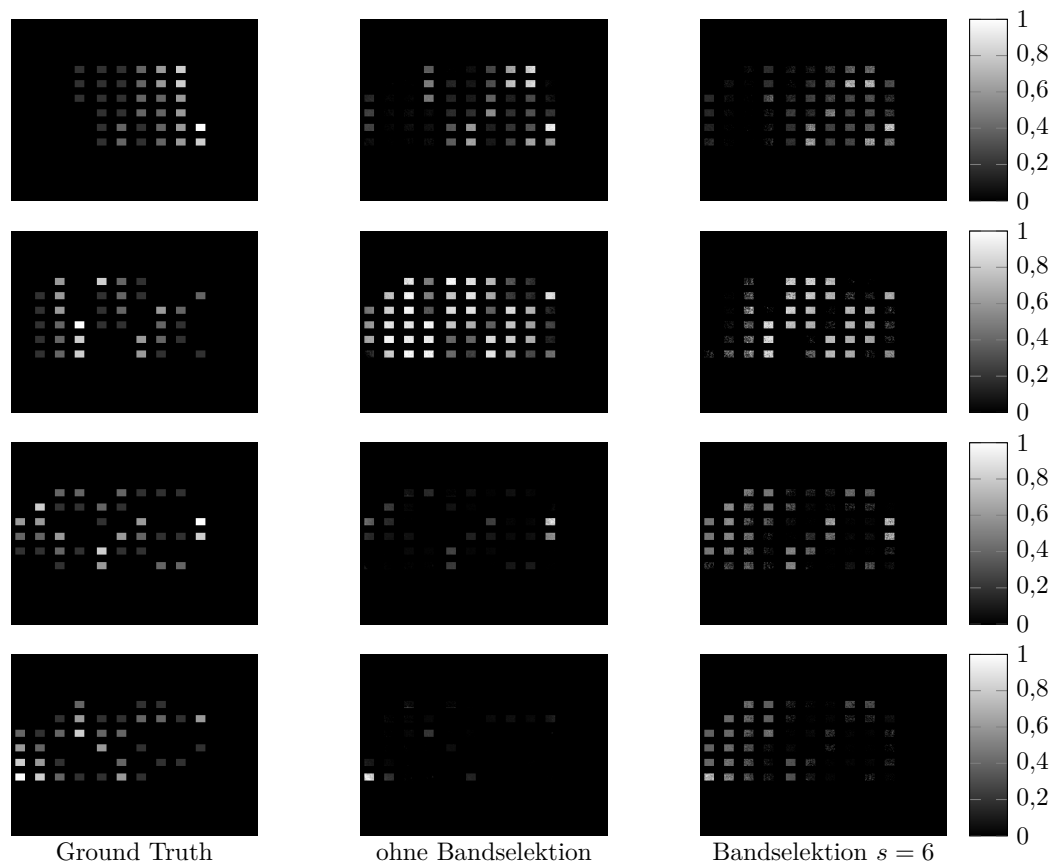


Abb. 5: Zeilenweise Materialanteile von Chromoxid-Grün, Eisenglimmer-Violett, Ultramarin-Blau und Eisenoxid-Gelb und spaltenweise Ground Truth, Materialanteilsschätzung ohne Bandselektion sowie Materialanteilsschätzung nach Bandselektion von $s = 6$ Bereichen. Alle Ergebnisse durch optische Realisierung sowohl der Bandselektion als auch der Spektralfilter aus den Pseudoinversen der jeweiligen Reinspektrenmatrix ermittelt.

- fluorescence imaging. *tm – Technisches Messen*, 82(12):597–605, 2015.
- [3] S. Bauer, J. Stefan und F. Puente León. Hyperspectral image unmixing involving spatial information by extending the alternating least-squares algorithm. *tm – Technisches Messen*, 82(4):174–186, 2015.
 - [4] P. Deufhard und A. Hohmann. *Numerische Mathematik I*. Berlin: De Gruyter, 2008.
 - [5] J. M. Bioucas-Dias, A. Plaza, N. Dobigeon, M. Parente, Q. Du, P. Gader und J. Chanussot. 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, 2012.
 - [6] N. Dobigeon, Y. Altmann, N. Brun und S. Moussaoui. Linear and nonlinear unmixing in hyperspectral imaging. In *Data Handling in Science and Technology, Vol. 30*. Amsterdam: Elsevier, 2016, 185–224.
 - [7] N. Keshava und J. F. Mustard. Spectral unmixing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 19(1):44–57, 2002.
 - [8] W. Krippner, S. Bauer und F. Puente León. Optical determination of material abundances by using neural networks for the derivation of spectral filters. *Automated Visual Inspection and Machine Vision*, Proceedings of SPIE Vol. 10334, 1033408, 2017.
 - [9] W. Krippner, S. Bauer und F. Puente León. Optical measurement of material abundances in mixtures incorporating preprocessing to mitigate spectral variability. In: *OCM 2017 – Optical Characterization of Materials*. Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2017, 87–96.
 - [10] W. Krippner, S. Bauer und F. Puente León. Ortsaufgelöste optische Bestimmung von Materialanteilen in Mischungen. *tm – Technisches Messen*, 84(3):207–215, 2017.
 - [11] G. Lu und B. Fei. Medical hyperspectral imaging: a review. *Journal of Biomedical Optics*, 19(1):010901, 2014.
 - [12] A. M. C. Prakash, C. M. Stellman und K. S. Booksh. Optical regression: A method for improving quantitative precision of multivariate prediction with single channel spectrometers. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 46(2):265–274, 1999.
 - [13] B. Somers, G. P. Asner, L. Tits und P. Coppin. Endmember variability in spectral mixture analysis: A review. *Remote Sensing of Environment*, 115(7):1603–1616, 2011.