Wolfgang Krippner*, Philipp Benzing und Fernando Puente León

Iterativer Spektralfilterentwurf für eine genaue optische Bestimmung von Materialanteilen

Iterative spectral filter design for a precise optical estimation of material abundances

DOI 10.1515/teme-2018-0037

Zusammenfassung: Die spektrale Information hyperspektraler Bilder (HSI) bietet die Möglichkeit, Anteile von Materialien in Mischungen zu bestimmen. Die Aufzeichnung und Verarbeitung von HSIs sind zeitaufwändig und rechenintensiv. Deshalb wird ein Ansatz mit spektraler Filterung verfolgt. Anstelle von HSIs wird ein Intensitätsbild für jedes Spektralfilter aufgezeichnet. Die Werte dieser Intensitätsbilder tragen Information in Abhängigkeit der Filterkoeffizienten, wie beispielsweise die Anteile eines Materials. Innerhalb dieses Beitrags wird der Entwurf von Spektralfiltern mithilfe iterativer Verfahren untersucht. Neben der Übertragung existierender Methoden für eine solche optische Bestimmung von Materialanteilen, wird ein neuartiger mehrstufiger Ansatz vorgestellt.

Schlüsselwörter: Hyperspektralbild, Materialanalyse, optische Messverfahren, spektrale Filterung, spektrale Entmischung.

Abstract: Spectral information provided by hyperspectral images (HSI) enables to determine material abundances in mixtures. The acquisition and processing of HSIs is time-consuming and computationally intensive. For this reason, an approach based on spectral filtering is proposed. Instead of HSIs, the use of a spectral filters leads to the acquisition of a single intensity image. Depending on the design of the spectral filter, this intensity image holds information such as the abundances of a material. Within the scope of this work, we examine the design of spectral filters accounting for iterative approaches. Existing methods are investigated to be used for an optical determination of material abundances, and a new approach including several stages to estimate material abundances is presented.

Keywords: Hyperspectral image, material analysis, optical measurement, spectral filtering, spectral unmixing.

1 Einleitung

Bei RGB-Bildern liegt an jedem Pixel ein dreidimensionales Signal vor. Der sichtbare Wellenlängenbereich ist durch breitbandige Bandpässe in die Kanäle Rot, Grün und Blau unterteilt. Dagegen besitzen Hyperspektralbilder (HSI) an jedem Pixel ein hochdimensionales Signal. Im Unterschied zu RGB-Bildern wird der betrachtete Wellenlängenbereich in bis zu mehreren hundert schmalbandige Kanäle abgetastet. Ein HSI kann als Datenwürfel mit den Kanten der beiden räumlichen und der spektralen Richtung dargestellt werden. Die spektrale Dimension erlaubt es, über eine Szene Information orts aufgelöst zu gewinnen, welche durch das menschliche Auge nicht sichtbar ist. Mithilfe von HSIs können berührungslose Analysen eines Materials für die Qualitätskontrolle in beispielsweise dem Lebensmittelbereich und der Medizin durchgeführt werden [6, 13]. Dazu zählt auch die Materialanteilsbestimmung, d. h. das Ermitteln, zu welchen Anteilen ein Material in einer Szene in einer Materialmischung auftritt [1].

Die Verwendung von HSIs erweist sich als aufwändig. Es besteht ein hoher Speicherbedarf. Die meist zeitintensive Aufzeichnung benötigt eine teure Hardware. Weiter führt die Verarbeitung von HSIs zu hohen Rechenkosten [2, 7]. Deshalb wird ein Ansatz unter Einsatz von Spektralfiltern verfolgt. Die Anwendung eines Spektralfilters liefert ein Intensitätsbild. Mathematisch soll die spektrale Filterung durch

$$\mathbf{I} = \mathbf{f}^T \mathbf{Y} \quad (1)$$

beschrieben werden. In (1) bezeichnen $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^N$ das so aufgezeichnete Intensitätsbild, $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^\Lambda$ das Spektralfilter und $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N] \in \mathbb{R}^{\Lambda \times N}$ das Hyperspektralbild bei Λ Wellenlängenkanälen mit den einzelnen Pixelspektren $\mathbf{y}_i$, $i = 1, \dots, N$. Dabei sind die $N = X \cdot Y$ Pixel der räumlichen Richtungen, X , Y , sowohl in $\mathbf{I}$ als auch in $\mathbf{Y}$ aneinandergereiht. Durch die spektrale Filterung werden somit, anstelle eines hochdimensionalen HSIs, nur

*Korrespondenzautor: Wolfgang Krippner, Institut für Industrielle Informationstechnik (IIIT), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hertzstraße 16, Gebäude 6.35, 76187 Karlsruhe, E-Mail: wolfgang.krippner@kit.edu

Philipp Benzing, Fernando Puente León, Institut für Industrielle Informationstechnik (IIIT), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hertzstraße 16, Gebäude 6.35, 76187 Karlsruhe

einzelne eindimensionale Intensitätsbilder aufgezeichnet und abgespeichert. Diese enthalten Werte in Abhängigkeit von den gewählten Filterkoeffizienten in $\mathbf{f}$.

Die praktische Umsetzung solcher Spektralfilter konnte bislang an einem institutseigenen Versuchsaufbau erfolgreich durchgeführt werden. Dieser besteht aus einem programmierbaren *Acousto-Optical Tunable Filter* (AOTF), einer EMCCD-Kamera (Andor iXon3897 EMCCD) und einer 300 W Xenon-Lampe als Lichtquelle. Die Implementierung erfolgte durch Anpassung der Belichtungszeiten je Wellenlängenkanal beim Durchfahren sämtlicher Wellenlängenkanäle durch das AOTF. Es konnten die Möglichkeit zur Reduktion des Speicherbedarfs und eine weniger rechenintensive Verarbeitung (die Auswertung von (1) findet in der Aufnahme von $\mathbf{I}$ statt) durch die spektrale Filterung bereits gezeigt werden. Für eine Realisierung mit geringem Zeitbedarf ist eine angepasste Hardware notwendig [9, 10].

Innerhalb dieses Beitrags stehen die Methoden für die Berechnung der Spektralfilter im Vordergrund. Die Realisierung in einer geeigneten Hardware wird nicht weiter berücksichtigt. Stattdessen wird die spektrale Filterung simulativ untersucht. Es liegen HSIs von Mischproben vor und die Auswertung von (1) erfolgt computergestützt. Das Ziel ist eine genaue Materialanteilsschätzung unter Einhaltung physikalischer Randbedingungen (3) zu erhalten.

Die methodischen Grundlagen werden in den folgenden Abschnitten präsentiert. In Abschnitt 3 erfolgt der Vergleich der vorgeschlagenen Verfahren an verschiedenen Mischproben. Abschnitt 4 bietet eine Zusammenfassung und einen Ausblick auf mögliche Erweiterungen.

2 Optische Bestimmung von Materialanteilen

Für das Bestimmen der Filterkoeffizienten wird von einem Mischmodell (siehe Abschnitt 2.1) ausgegangen. Da Spektren aus Materialmischungen Abweichungen zu dem gewählten Mischmodell besitzen, wird eine iterative Vorgehensweise für den Spektralfilterentwurf (siehe Abschnitt 2.2) angesetzt. In Abschnitt 2.3 werden zwei existierende Verfahren gezeigt. Eine neuartige, mehrstufige Vorgehensweise wird zudem vorgestellt.

2.1 Ansatz des Spektralfilterentwurfs

Für die Schätzung von Materialanteilen wird das lineare Mischmodell (LMM) angenommen [7]. Die Spektren reiner Materialien sollen bekannt sein. Es sei angemerkt,

dass, je nach vorliegender Materialmischung, nichtlineare Mischmodelle [4] die Mischspektren genauer beschreiben können. Allerdings ist bei diesen ein Zusammenhang zur spektralen Filterung (1) nicht stets unmittelbar gegeben. Stattdessen müssen Hilfsmethoden angewendet werden, wie die Umformulierung der Materialanteilsschätzung in ein Klassifikationsproblem [11]. Das LMM beschreibt jedes Mischspektrum $\mathbf{y}_i$ bestehend aus bis zu P Materialien sowie $P \leq \Lambda$ nach

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{M} \mathbf{a}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_i, \quad (2)$$

$$\sum_{j=1}^P a_{ij} = 1 \quad \text{und} \quad a_{ij} > 0 \quad \forall j. \quad (3)$$

Dabei geben $\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_P] \in \mathbb{R}^{\Lambda \times P}$ und $\mathbf{a}_i = [a_{i1}, \dots, a_{iP}]^T$ jeweils die Reinspektrenmatrix und den Anteilsvektor an. Abweichungen von einer reinen linearen Überlagerung der Reinspektren $\mathbf{m}_j$ mit den jeweiligen Materialanteilen a_{ij} , $j = 1, \dots, P$ sind in $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ enthalten. Die optimale Lösung für die Materialanteile im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate ist gegeben durch

$$\hat{\mathbf{a}}_i = \underbrace{(\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^T}_{\hat{\mathbf{M}}} \mathbf{y}_i + \underbrace{(\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^T}_{\boldsymbol{\varepsilon}_{ai}} \boldsymbol{\varepsilon}_i \quad (4)$$

mit der Pseudoinversen $\hat{\mathbf{M}}$. Die Schätzung $\hat{\mathbf{a}}_i = [\hat{a}_{i1}, \dots, \hat{a}_{iP}]^T$ weicht von den wahren Materialanteilen $\mathbf{a}$ durch $\boldsymbol{\varepsilon}_{ai}$ ab. Insbesondere erfüllt diese möglicherweise nicht mehr die *Sum-to-one* (STO)- und *Non-negativity* (NN)-Bedingungen in (3), welche für eine physikalisch sinnvolle Interpretation von $\hat{\mathbf{a}}_i$ gestellt werden. Werden die P Zeilen von $\hat{\mathbf{M}}$ jeweils als Filterkoeffizienten in (1) gewählt, liefern die P aufgezeichneten Intensitätsbilder die orts aufgelöste Schätzung $\hat{\mathbf{A}} = [\hat{\mathbf{a}}_1, \dots, \hat{\mathbf{a}}_N]$.

Die Bedingungen (3) sind bei dieser Wahl der Filterkoeffizienten nicht enthalten. Die Bestimmung der Spektralfilter basiert ausschließlich auf $\mathbf{M}$. Im Folgenden werden Vorgehensweisen betrachtet, welche die Filterkoeffizienten iterativ bestimmen und (3) mit einbeziehen.

2.2 Iterativer Spektralfilterentwurf

Die Materialanteilsschätzung mithilfe der Pseudoinversen nach (4) geschieht einmalig. Nach Anwendung der so ermittelten P Spektralfilter liegen Schätzungen für die Anteile aller P Materialien vor. Der iterative Spektralfilterentwurf verwendet ebenfalls die Reinspektrenmatrix $\mathbf{M}$ als Vorwissen und betrachtet das LMM (2) als Modell für die Mischspektren. Die Anteilsschätzung soll jedoch über mehrere Durchläufe stattfinden. Dabei werden für die Berechnung der $K^{(i)} \in \mathbb{N}$ benötigten Spektralfilter $\mathbf{f}_1^{(i)}, \dots, \mathbf{f}_K^{(i)}$

im Durchlauf i , $i = 0, \dots, I - 1$ und I der maximalen Anzahl an Durchläufen, die aufgezeichneten Intensitätsbilder $\mathbf{I}_1^{(i-1)}, \dots, \mathbf{I}_K^{(i-1)}$ des vorhergehenden Durchlaufs $i - 1$ einbezogen (siehe Abb. 1). Beispielsweise kann die Auswertung der erstmaligen Anteilsschätzung $\hat{\mathbf{A}}^{(0)}$ über $\hat{\mathbf{M}}$ erfolgen und die Bestimmung der Spektralfilter für den darauffolgenden Durchlauf mit beeinflussen.

2.3 Methoden für die Berechnung von Spektralfiltern

Die iterative Materialanteilsschätzung erfolgt auf Grundlage spektraler Filterungen. Dazu werden mit dem *Fully Constrained Least-Squares* (FCLS)- und dem *Modified Constrained Least-Squares* (MCLS)-Verfahren zwei Algorithmen aus der Literatur gewählt. Bei der Auswahl besteht ein Kriterium in der Möglichkeit einer Umsetzung nach (1), ohne den Bedarf an nennenswerten zusätzlichen Rechenkosten. Das weitere Kriterium ist die Möglichkeit auf den Verzicht der Aufnahme von $\mathbf{Y}$.

Die Verfahren werden in den folgenden Abschnitten in der notwendigen Ausführlichkeit vorgestellt. Das Schema nach Abb. 1 erlaubt auch eine mehrstufige iterative Vorgehensweise. In den einzelnen Stufen erfolgen Schritte zur Analyse der Mischspektren in Bezug auf die Modellannahme durch das LMM (siehe Abschnitt 2.3.3).

2.3.1 Der FCLS-Algorithmus

Das FCLS-Verfahren [5] bezieht sich auf (2) und berücksichtigt die Bedingungen (3) bei der Materialanteilsschätzung. Dazu wird die Kostenfunktion

$$J = \frac{1}{2} (\mathbf{y}_i - \mathbf{M} \mathbf{a}_i) (\mathbf{y}_i - \mathbf{M} \mathbf{a}_i)^T - t \left(\sum_{j=1}^P a_{ij} - 1 \right) \quad (5)$$

betrachtet. Es wird die Ableitung von (5) nach $\mathbf{a}_i$ gebildet, zu null gesetzt und $\mathbf{a}_i$ durch (4), wobei $\boldsymbol{\varepsilon}_i = \mathbf{0}$, ersetzt. Es folgt nach kurzer Rechnung die Bedingung

$$\mathbf{0} \stackrel{!}{=} \hat{\mathbf{a}}_i - t (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{1} \quad (6)$$

mit $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^P$ sowie aus (5) und (6):

$$t = (1 - \mathbf{1}^T \hat{\mathbf{a}}_i) / \left(\mathbf{1}^T (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{1} \right). \quad (7)$$

Der optimalen Lösung wird versucht, sich iterativ mit den geschätzten Materialanteilen $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}i} \in \mathbb{R}^P$ durch die einzelnen Schritte in Algorithmus 1 anzunähern. Dabei wird $\mathbf{s} = (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{1}$ als Richtungsvektor verwendet, um

Algorithmus 1 FCLS-Algorithmus.

Eingabe: $\mathbf{y}_i, \mathbf{M}$

Ausgabe: $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}i}$

```

1: Initialisierung: Stopp  $\leftarrow$  false,
2: while Stopp = false do
3:    $\hat{\mathbf{a}}_i \leftarrow (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^T \mathbf{y}_i$ 
4:    $\mathbf{s} \leftarrow (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{1}$ 
5:    $t \leftarrow \frac{1 - \mathbf{1}^T \hat{\mathbf{a}}_i}{\mathbf{1}^T \mathbf{s}}$ 
6:    $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}i} \leftarrow \hat{\mathbf{a}}_i - t \mathbf{s}$ 
7:   if  $\min_{j \in \mathcal{P}} \hat{a}_{\text{FCLS}ij} < 0$  mit  $\mathcal{P} = \{1, \dots, P\}$  then
8:      $\rho \leftarrow \operatorname{argmin}_{j \in \mathcal{P}} \frac{\hat{a}_{\text{FCLS}ij}}{s_j}$ 
9:      $\hat{a}_{\text{FCLS}i\rho} = 0$   $\triangleright$  Anteil in Endergebnis zu null
       setzen
10:     $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}i} = [a_1, \dots, a_{\rho-1}, a_{\rho+1}, \dots, a_P]^T$ 
11:     $\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1 \dots \mathbf{m}_{\rho-1} \mathbf{m}_{\rho+1} \dots \mathbf{m}_P]$   $\triangleright$  Material  $\rho$ 
       für weitere Schätzung entfernen
12:   else
13:     Stopp  $\leftarrow$  true
14:   end if
15: end while
```

zu bestimmen, welche Änderung durch t für das Erfüllen der NN-Bedingung notwendig ist.

Da nach jedem Durchlauf ein Reinspektrum und ein Materialanteil nicht mehr weiter betrachtet werden (siehe Zeilen 10–11 in Algorithmus 1), gibt es höchstens $P - 1$ Durchläufe im FCLS-Verfahren. Das Ergebnis $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}i}$ erfüllt die Bedingungen (3) im Allgemeinen nur näherungsweise. Die Reinspektrenmatrix $\mathbf{M}$ und somit auch die Filterkoeffizienten ändern sich in jedem Durchlauf (siehe Zeilen 3 und 11 in Algorithmus 1). Die Filterkoeffizienten des aktuellen Durchlaufs sind in Zeile 3 abzulesen.

2.3.2 Der MCLS-Algorithmus

Im Gegensatz zu dem FCLS-Verfahren, wird beim MCLS-Algorithmus [3] ein parametrischer Ansatz verfolgt. Es werden beide Bedingungen (3) berücksichtigt. Dazu wird das LMM (2) erweitert zu

$$\bar{\mathbf{y}}_i = \bar{\mathbf{M}} \mathbf{a}_i + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_i \quad (8)$$

mit $\bar{\mathbf{y}}_i = [\mathbf{y}_i^T, \lambda_1, \lambda_2]^T$, $\bar{\mathbf{M}} = [\mathbf{M}^T, \lambda_1 \mathbf{1}, \lambda_2 \operatorname{sign}(\mathbf{a}_i)]^T$ und $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_i = [\boldsymbol{\varepsilon}_i^T, 0, 0]^T$. In (8) ist $\operatorname{sign}(\mathbf{a}_i)^T$ elementweise definiert, wobei

$$\operatorname{sign}(a_{ip}) = \begin{cases} 1 & \text{für } a_{ip} > 0, \\ -1 & \text{für } a_{ip} < 0, \\ 0 & \text{für } a_{ip} = 0 \end{cases} \quad (9)$$

Abb. 1: Schema der Materialanteilsschätzung $\hat{\mathbf{A}}$ durch einen iterativen Spektralfilterentwurf: In jedem Durchlauf werden die aktuellen Aufzeichnungen $\mathbf{I}_1^{(i)}, \dots, \mathbf{I}_K^{(i)}$ ausgewertet. Falls ein definiertes Abbruchkriterium erreicht wird, ist die Anteilsschätzung abgeschlossen. Andernfalls werden Spektralfilter $\mathbf{f}_1^{(i+1)}, \dots, \mathbf{f}_K^{(i+1)}$ für den nächsten Durchlauf mit Einbezug von $\mathbf{I}_1^{(i)}, \dots, \mathbf{I}_K^{(i)}$ und der Reinspektrenmatrix $\mathbf{M}$ berechnet.

gilt. Mit den Parametern $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ kann der Einfluss von (3) auf die Schätzung $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}i}$ gesteuert werden. Der vollständige Ablauf des MCLS-Verfahrens ist in Algorithmus 2 zu sehen. Die Initialisierung beider Parameter erfolgt mit einem Wert von 10000, wobei eine Erhöhung im Verlauf der Schätzung stattfinden kann (siehe Zeilen 12 und 17 in Algorithmus 2). Alle Zahlenwerte sind aus [3] entnommen. Zusätzlich müssen Schwellenwerte ϵ_1 und ϵ_2 für einen Abbruch des Algorithmus festgelegt werden (siehe Zeilen 11 und 16 in Algorithmus 2). Für die Auswertung in Abschnitt 3 werden $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0,01$ verwendet.

Die Filterkoeffizienten für jeden Durchlauf sind in Zeile 5 im Algorithmus 2 mit den ersten Λ Spalten aus $(\bar{\mathbf{M}}^T \bar{\mathbf{M}})^{-1} \bar{\mathbf{M}}^T \in \mathbb{R}^{P \times \Lambda+2}$ abzulesen. Die letzten beiden Spalten ergeben im Produkt mit $[\lambda_1, \lambda_2]^T$ einen P -wertigen Vektor, ohne $\mathbf{y}_i$ zu benötigen. Die Summe mit dem durch spektrale Filterung ermittelten Teil ergibt die jeweils aktuelle Anteilsschätzung. Da in jedem Durchlauf $\bar{\mathbf{M}}$ modifiziert wird, ändern sich auch die Spektralfilter, bis die endgültige Anteilsschätzung $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}i} \in \mathbb{R}^P$ vorliegt.

2.3.3 Mehrstufiger iterativer Spektralfilterentwurf

Der Ansatz des mehrstufigen iterativen Spektralfilterentwurfs unterteilt sich in drei Stufen (siehe Abb. 2).

Zuerst wird eine Bandbereichsauswahl [8] getroffen. Aufgrund der Beobachtung, dass ε_i in (2) meist spektral betragsmäßig unterschiedlich große Werte besitzt, wird der betrachtete Wellenlängenbereich in einzelne Bandbereiche unterteilt und für jeden dieser Bandbereiche das sich ergebende LMM untersucht. Darauf findet eine Auswahl

Algorithmus 2 MCLS-Algorithmus.

Eingabe: $\mathbf{y}_i, \mathbf{M}$

Ausgabe: $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}i}$

```

1: Initialisierungen:  $\lambda_1 \leftarrow 10000, \lambda_2 \leftarrow 10000, \hat{\mathbf{a}} \leftarrow$ 
    $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^P, \text{Bed1} \leftarrow \text{false}, \text{Bed2} \leftarrow \text{false}, \text{Bed3} \leftarrow \text{false}$ 
2: while  $\text{Bed1} = \text{false}$  or  $\text{Bed2} = \text{false}$  or  $\text{Bed3} = \text{false}$ 
   do
3:    $\bar{\mathbf{y}}_i \leftarrow [\mathbf{y}_i^T, \lambda_1, \lambda_2]^T$ 
4:    $\bar{\mathbf{M}} \leftarrow [\mathbf{M}^T, \lambda_1 \mathbf{1}, \lambda_2 \text{sign}(\hat{\mathbf{a}})]^T$ 
5:    $\hat{\mathbf{a}} \leftarrow (\bar{\mathbf{M}}^T \bar{\mathbf{M}})^{-1} \bar{\mathbf{M}}^T \bar{\mathbf{y}}_i$ 
6:   if  $\min_{j \in \mathcal{P}} \hat{a}_j < 0$  mit  $\mathcal{P} = \{1, \dots, P\}$  then
7:      $\mathbf{m}_j \leftarrow 10000 \cdot \mathbf{m}_j$ 
8:   else
9:      $\text{Bed1} \leftarrow \text{true}$ 
10:  end if
11:  if  $|\mathbf{1}^T \hat{\mathbf{a}} - 1| > \epsilon_1$  then
12:     $\lambda_1$  erhöhen
13:  else
14:     $\text{Bed2} \leftarrow \text{true}$ 
15:  end if
16:  if  $|\text{sign}(\hat{\mathbf{a}})^T \hat{\mathbf{a}} - 1| > \epsilon_2$  then
17:     $\lambda_2$  erhöhen
18:  else
19:     $\text{Bed3} \leftarrow \text{true}$ 
20:  end if
21: end while
22:  $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}i} \leftarrow \hat{\mathbf{a}}$ 

```

Abb. 2: Schema der mehrstufigen iterativen Materialanteilsschätzung: Vor der iterativen Materialanteilsschätzung erfolgt eine Bandbereichsauswahl und eine Klassifikation der vorhandenen Reinspektren.

von S Bandbereichen statt, in welchen gemutmaß wird, dass sich das LMM nur wenig von dem Mischspektrum $\mathbf{y}_i$ unterscheidet. Dazu werden Spektralfilter geeignet gewählt und die sich nach (1) ergebenden Intensitätsbilder ausgewertet. Für eine detaillierte Beschreibung wird auf [8] verwiesen.

Im nächsten Schritt erfolgt eine Klassifikation. Es wird ermittelt, welche Materialien in einem Mischspektrum präsent sind, ohne deren Anteile quantitativ zu schätzen. Dazu wird die folgende Vorgehensweise als ein mögliches Verfahren vorgeschlagen: Alle möglichen Kombinationen an Reinspektrenmatrizen $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}}$, bestehend aus höchstens $P - 1$ Reinspektren, werden untersucht. Dabei enthält die Indexmenge $\mathcal{I} \subset \{1, \dots, P\}$ die Indizes der derzeit gewählten Reinspektren. Es werden weiter die Gleichanteile des sich nach der Bandbereichsauswahl ergebenden Mischspektrums und der Reinspektrenmatrix entfernt, sowie lediglich die ersten $Q + 1$ spektralen Frequenzkoeffizienten beibehalten, wobei $Q = |\mathcal{I}|$ die Anzahl an Reinspektren in der Kombination $\mathcal{I}$ bezeichnet. Die noch vorhandenen Frequenzkoeffizienten weisen einen hohen Signalanteil auf. Die spektrale Transformation und Manipulation basieren auf einer diskreten Kosinustransformation und können in den Spektralfilterentwurf einbezogen werden [8, 12]. Das sich ergebende Mischspektrum, die Reinspektrenmatrix sowie die Abweichung von dem LMM bezeichnen jeweils $\tilde{\mathbf{y}}_i \in \mathbb{R}^{Q+1}$, $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}} \in \mathbb{R}^{Q+1 \times Q}$ und $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_i \in \mathbb{R}^{Q+1}$. Als Nächstes wird das resultierende LMM unter Vernachlässigung von $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ betrachtet und die Singulärwertzerlegung auf $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}}$ angewendet:

$$\tilde{\mathbf{y}}_i = \underbrace{\tilde{\mathbf{U}}_{\mathcal{I}} \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathcal{I}} \tilde{\mathbf{V}}_{\mathcal{I}}^T}_{\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}}} \mathbf{a}_i. \quad (10)$$

Dabei ist $\tilde{\mathbf{U}}_{\mathcal{I}} \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathcal{I}} \tilde{\mathbf{V}}_{\mathcal{I}}^T$ die Singulärwertzerlegung von $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}}$, wobei $\tilde{\mathbf{U}}_{\mathcal{I}}, \tilde{\mathbf{V}}_{\mathcal{I}}$ orthogonal sind und

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathcal{I}} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_Q & \\ 0 & \dots & 0 & \end{bmatrix} \quad (11)$$

mit den Singulärwerten $\sigma_1, \dots, \sigma_Q$. Falls in der Materialmischung $\tilde{\mathbf{y}}_i$ keine weiteren, außer die in $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}}$ enthaltenen Materialien vorhanden sind, folgt mit dem $Q + 1$ -ten Spaltenvektor $\tilde{\mathbf{u}}_{\mathcal{I}Q+1}$ von $\tilde{\mathbf{U}}_{\mathcal{I}}$ aus (10) und (11):

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}}_{\mathcal{I}Q+1}^T \tilde{\mathbf{y}}_i &= \tilde{\mathbf{u}}_{\mathcal{I}Q+1}^T \mathbf{D}_i \mathbf{y}_i = \tilde{\mathbf{u}}_{\mathcal{I}Q+1}^T \tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}} \mathbf{a}_i \\ &= [0 \dots 0] \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathcal{I}} \tilde{\mathbf{V}}_{\mathcal{I}}^T \mathbf{a} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Somit kann mit den Spektralfiltern $\tilde{\mathbf{u}}_{\mathcal{I}Q+1}^T \mathbf{D}_i$ klassifiziert werden, welche Materialien in $\tilde{\mathbf{y}}_i$ bzw. $\mathbf{y}_i$ vorhanden sind. Umformungsschritte, wie die Bandbereichsauswahl und das Betrachten von $Q + 1$ Frequenzkoeffizienten, sind in der Umformungsmatrix $\mathbf{D}_i \in \mathbb{R}^{Q+1 \times \Lambda}$ enthalten. Das sich ergebende Intensitätsbild trägt an dem Pixel i einen Wert nahe null. In ähnlicher Form findet die Singulärwertzerlegung Anwendung in der Bandbereichsauswahl [8]. Entscheidend für richtige Klassifikationsergebnisse basierend auf (12) sind betragsmäßig kleine Werte von $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$, da anstelle von null sich

$$\tilde{\mathbf{u}}_{\mathcal{I}Q+1}^T \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_i = \tilde{\mathbf{u}}_{\mathcal{I}Q+1}^T \mathbf{D}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i \quad (13)$$

bei bestehenden Abweichungen zu ausschließlich linear überlagerten Reinspektren ergibt.

Die Anteilsschätzung erfolgt im letzten Schritt des mehrstufigen Verfahrens. Es wird dazu ein iterativer Algorithmus wie in Abschnitt 2.3.1 oder Abschnitt 2.3.2 gewählt. Dabei werden das Mischspektrum $\mathbf{y}_i^o$ und die Reinspektrenmatrix nach dem Klassifikationsschritt, $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}}^o$, eingesetzt, wobei $\mathbf{y}_i^o$ und $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathcal{I}}^o$ Spektren besitzen, welche sich aus der Bandselektion ergeben und deren spektraler Gleichanteil entfernt wurde.

Nachfolgend sollen alle in diesem Abschnitt vorgestellten Verfahren sowie die Pseudoinverse $\hat{\mathbf{M}}$ für die Anteilsschätzung im Vergleich stehen.

3 Auswertung

Die vorgestellten Methoden für den iterativen Spektralfilterentwurf werden an insgesamt zwei Datensätzen von Materialmischungen evaluiert. Die erste Mischprobe besteht aus bis zu vier verschiedenen Farbpulvern, während sich die zweite Mischprobe aus bis zu vier verschiedenen eingefärbten Quarzsanden zusammensetzt. In den Fächern

eines Setzkastens wurden jeweils Mischungen zu unterschiedlichen Anteilen der Reinstoffe eingefüllt. Anschließend wurden hyperspektrale Bilder aufgezeichnet. Der betrachtete spektrale Bereich von 410 nm bis 810 nm wurde in 91 Wellenlängenkanäle abgetastet.

Für die Auswertung werden aus jeder Mischprobe acht Fächer ausgewählt. Die Verfahren werden auf die Mittelwertspektren der ausgewählten Fächer angewendet. Auf die gleiche Weise werden die Reinspektren ermittelt. Alle Spektren der Fächer mit nur einem Material wurden gemittelt, um die Reinspektrenmatrix zu bilden.

Der Vergleich zwischen den einzelnen iterativen Verfahren und der Pseudoinversen nach (4) erfolgt an drei Fehlermaßen für die geschätzten Materialanteile. Abweichungen der jeweiligen Schätzungen $\hat{a}_{i1}, \dots, \hat{a}_{iP}$ zu den wahren Materialanteilen $a_{i1}, \dots, a_{iP}$ werden bewertet durch

$$Err = \sqrt{\frac{1}{P} \sum_{j=1}^P (\hat{a}_{ij} - a_{ij})^2}. \quad (14)$$

Verletzungen der STO- und NN-Bedingungen werden bewertet anhand von

$$\Delta_{STO} = \left| 1 - \sum_{j=1}^P \hat{a}_{ij} \right| \quad (15)$$

sowie

$$\Delta_{NN} = \left| \sum_{j=1}^P \hat{a}_{ij}^* \right| \quad \text{mit} \quad \hat{a}_{ij}^* = \begin{cases} \hat{a}_{ij} & \text{für } \hat{a}_{ij} < 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (16)$$

Sämtliche Ergebnisse der Fehlermaße können in den Tabellen 1–2 abgelesen werden. Im Vergleich zur Verwendung der Pseudoinversen $\hat{\mathbf{M}}$ führen die gewählten iterativen Verfahren mit dem MCLS- und FCLS-Algorithmus stets zu geringeren oder ähnlichen Anteilsfehlern. Nur der MCLS-Algorithmus kann sowohl die STO- als auch NN-Bedingungen in allen Fällen numerisch erfüllen. Der FCLS-Algorithmus führt zu keinen negativen Schätzergebnissen. Durch die mehrstufige Vorgehensweise weisen die zugehörigen Fehlermaße Δ_{STO}^M und Δ_{NN}^M stets geringere Werte auf. Die physikalische Interpretierbarkeit verbessert sich. Auch die Anteilsfehler werden geringer, mit Ausnahme des MCLS-Verfahrens angewendet auf die Quarzsandmischung.

Besonders deutlich ist die Auswirkung des mehrstufigen Verfahrens bei der Farbpulvermischung zu beobachten, während bei der Quarzsandmischung nur kleine Veränderungen auszumachen sind. Die Anteilsschätzfehler Err und Err^M , als Ergebnis des mehrstufigen Verfahrens, sind bei den Farbpulvermischungen im Allgemeinen größer. Frühere Untersuchungen [8] haben gezeigt, dass die

Tab. 1: Numerische Werte der über die Fächer gemittelten Fehlermaße für die Farbpulvermischung. Das hochgestellte M verweist auf das mehrstufige Verfahren.

	Err	Err^M	Δ_{STO}	Δ_{STO}^M	Δ_{NN}	Δ_{NN}^M
Pseudo	0,2313	0,1795	0,0980	0,0536	0,0388	0
MCLS	0,2131	0,1969	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
FCLS	0,2318	0,1651	0,1511	0,1097	0	0

Tab. 2: Numerische Werte der über die Fächer gemittelten Fehlermaße für die Quarzsandmischung. Das hochgestellte M verweist auf das mehrstufige Verfahren.

	Err	Err^M	Δ_{STO}	Δ_{STO}^M	Δ_{NN}	Δ_{NN}^M
Pseudo	0,0808	0,0745	0,0567	0,0350	0,0511	0,0029
MCLS	0,0703	0,0812	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
FCLS	0,0786	0,0754	0,0845	0,0672	0	0

Farbpulvermischung höhere Abweichungen zu dem LMM besitzen als die Mischung aus Quarzsanden. Die beiden Stufen der Bandselektion und der Klassifikation vorhandener Reinspektren können offenbar das hohe Fehlerniveau nicht vollständig abbauen. Die Abbildungen 3–4 zeigen dazu beispielhaft ein Fach der Farbpulvermischung. Nach der Bandselektion und dem Entfernen des spektralen Gleichanteils sind weiterhin Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Mischspektren vorhanden.

In den betrachteten Materialmischungen beträgt im MCLS- und FCLS-Algorithmus die maximale Anzahl an Durchläufen drei. Somit bleibt auch das mehrstufige Verfahren im Aufwand in Bezug auf die benötigte Filterzahl vertretbar. Dazu zeigt Abb. 5 den Vergleich der berechneten Filterkoeffizienten im MCLS-Algorithmus für den 3. Reinstoff eines Faches der Farbpulvermischung. Es sind deutlich sowohl die Auswirkung der vorverarbeitenden

Abb. 3: Vergleich des aufgezeichneten Mischspektrums und dem Spektrum berechnet nach dem LMM eines Faches der Farbpulvermischung mit den wahren Anteilen $\mathbf{a} = [0, 0,4, 0,4, 0,2]^T$.

Abb. 4: Ergebnis der Bandselektion und Entfernung des spektralen Gleichanteils im mehrstufigen Verfahren: Vergleich des aufgezeichneten Mischspektrums und dem Spektrum berechnet nach dem LMM eines Fachs der Farbpulvermischung mit den wahren Anteilen $\mathbf{a} = [0, 0,4, 0,4, 0,2]^T$.

Abb. 5: Entwicklung der Filterkoeffizienten über die ersten beiden Durchläufe im MCLS-Algorithmus für die Materialanteilsschätzung des 3. Reinstoffs eines Fachs der Farbpulvermischung. Das hochgestellte M verweist auf das mehrstufige Verfahren.

Schritte des mehrstufigen Verfahrens, als auch Änderungen zwischen den einzelnen Durchläufen erkennbar.

4 Zusammenfassung

Neben der Untersuchung von bestehenden iterativen Verfahren für eine Materialanteilsschätzung mithilfe von Spektralfiltern wurde ein mehrstufiges Verfahren vorgestellt. Die Ergebnisse an den betrachteten Mischproben zeigen, dass bestehende Verfahren in der Lage sind, Bedingungen an Anteilsschätzungen für eine physikalisch sinnvolle Interpretation einzuhalten. Genauere Materialanteilsschätzungen können nur durch die neu entwickelte, mehrstufige Vorgehensweise erreicht werden.

Zukünftig sollten mehr Mischproben untersucht werden. Neben den vorgestellten iterativen Methoden gibt es

weitere Verfahren für die Materialanteilsschätzung. Auch diese sollten zusammen mit dem mehrstufigen Ansatz untersucht werden. Sinnvoll kann zudem die Erweiterung um den Einbezug von sog. *Spektrenvariabilität* [14] sein.

Literatur

- [1] S. Bauer und F. Puente León. Using image pyramids for the acceleration of spectral unmixing based on nonnegative matrix factorization. In *8th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*, Los Angeles, CA, 21-24 August 2016.
- [2] 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.
- [3] C.-I. Chang, H. Ren, F. M. D’Amico und J. O. Jensen. Subpixel target size estimation for remotely sensed imagery. *SPIE Proceedings*, S. 398. SPIE, 2003. 10.1117/12.487058.
- [4] N. Dobigeon, Y. Altmann, N. Brun und S. Moussaoui. *Linear and Nonlinear Unmixing in Hyperspectral Imaging*, Band 30 of *Data Handling in Science and Technology*, S. 185–224. Elsevier, Netherlands, 2016.
- [5] D. Heinz, C.-I. Chang und M. Althouse. Fully constrained least-squares based linear unmixing [hyperspectral image classification]. In *IEEE 1999 International Geoscience and Remote Sensing Symposium. IGARSS’99 (Cat. No. 99CH36293)*, S. 1401–1403. IEEE, 1999.
- [6] H. Huang, L. Liu und M. O. Ngadi. Recent developments in hyperspectral imaging for assessment of food quality and safety. *Sensors (Basel, Switzerland)*, 14(4):7248–7276, 2014.
- [7] N. Keshava und J. F. Mustard. Spectral unmixing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 19(1):44–57, 2002.
- [8] W. Krippner und F. Puente León. Bandbereichswahl und Materialanteilsschätzung mithilfe von Spektralfiltern. *tm – Technisches Messen*, 85(6):454–467, 2018.
- [9] W. Krippner und F. Puente León. Optische Bandselektion für die verbesserte Schätzung von Materialanteilen. *tm – Technisches Messen*, 84(S1):S124–S130, 2017.
- [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] W. Krippner, S. Bauer und F. Puente León. Optical determination of material abundances by using neural networks for the derivation of spectral filters. In J. Beyerer und F. Puente, editors, *Automated Visual Inspection and Machine Vision*, Band 10334 of *Proceedings of SPIE*, Bellingham, WA, 2017.
- [12] W. Krippner, S. Bauer und F. Puente León. Considering spectral variability for optical material abundance estimation. *tm – Technisches Messen*, 85(3):149–158, 2018.
- [13] G. Lu und B. Fei. Medical hyperspectral imaging: a review. *Journal of biomedical optics*, 19(1):10901, 2014.
- [14] 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, April 2011.