

Matthias Michelsburg

Materialklassifikation in optischen Inspektionssystemen mithilfe hyperspektraler Daten

Matthias Michelsburg

**Materialklassifikation in optischen Inspektionssystemen
mithilfe hyperspektraler Daten**

Forschungsberichte aus der Industriellen Informationstechnik
Band 10

Institut für Industrielle Informationstechnik
Karlsruher Institut für Technologie
Hrsg. Prof. Dr.-Ing. Fernando Puente León
Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Dostert

Eine Übersicht aller bisher in dieser Schriftenreihe erschienenen Bände
finden Sie am Ende des Buchs.

Materialklassifikation in optischen Inspektionssystemen mithilfe hyperspektraler Daten

von
Matthias Michelsburg

Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
Tag der mündlichen Prüfung: 17. September 2014
Referenten: Prof. Dr.-Ing. Fernando Puento León, KIT
Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Längle, Fraunhofer IOSB

Impressum



Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
KIT Scientific Publishing
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe

KIT Scientific Publishing is a registered trademark of Karlsruhe
Institute of Technology. Reprint using the book cover is not allowed.

www.ksp.kit.edu



*This document – excluding the cover – is licensed under the
Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 DE License
(CC BY-SA 3.0 DE): <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/de/>*



*The cover page is licensed under the Creative Commons
Attribution-No Derivatives 3.0 DE License (CC BY-ND 3.0 DE):
<http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/de/>*

Print on Demand 2014

ISSN 2190-6629

ISBN 978-3-7315-0273-9

DOI 10.5445/KSP/1000043415

Materialklassifikation in optischen Inspektionssystemen mithilfe hyperspektraler Daten

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

von der Fakultät für
Elektrotechnik und Informationstechnik
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)
genehmigte

DISSERTATION

von
Matthias Michelsburg,
geb. in Reutlingen

Tag der mündl. Prüfung: 17.09.2014
Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. Fernando Puente León, KIT
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Längle, Fraunhofer IOSB

Vorwort

Diese Arbeit entstand während meiner Forschungstätigkeit am Institut für Industrielle Informationstechnik (IIIT) des Karlsruher Instituts für Technologie. Ohne die vielseitige Unterstützung von Kollegen, Studenten und Freunden wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen, weshalb ich ihnen an dieser Stelle Danke sagen möchte.

An erster Stelle danke ich Prof. Dr.-Ing. Fernando Puente León für die Möglichkeit, diese Arbeit am IIIT anzufertigen, die gute Betreuung und die hilfreichen Anregungen. Ein besonderer Dank gilt auch Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Längle für die Übernahme des Korreferats und den Mitarbeitern seiner Abteilung Sichtprüfssysteme des Fraunhofer-Instituts für Optronik, Systemtechnik und Bildauswertung für die tolle Zusammenarbeit und den Zugang zu ihren Laboraufbauten.

Den Kollegen am IIIT danke ich für die vielen Korrekturvorschläge und die schönen Stunden auch neben der alltäglichen Arbeit. Insbesondere Mario Lietz, mit dem ich ein Büro teilen durfte, bin ich dankbar für die vielen Diskussionen und Kommentare.

Den zahlreichen Autoren von stackexchange.com möchte ich für ihren unermüdlichen Einsatz danken, alle meine \LaTeX - und Matlab-Probleme in geduldiger und freundlicher Weise aus dem Weg zu räumen.

Meiner Frau Stefanie bin ich zutiefst dankbar für die aufmunternden Worte und den Trost in manch schweren Stunden. Ohne deine Unterstützung und dein Verständnis hätte ich diese Arbeit nicht fertigstellen können.

Karlsruhe, im Oktober 2014

Matthias Michelsburg

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
1.1 Problemstellung	1
1.2 Stand der Technik	2
1.2.1 Inspektionssysteme	2
1.2.2 Methoden zur Materialerkennung	3
1.2.3 Hyperspektrale Kameras	4
1.3 Aufgabenstellung	5
1.4 Gliederung der Arbeit	10
2 Spektroskopie und Bildgewinnung	11
2.1 Einführung	11
2.1.1 Licht als elektromagnetische Welle	12
2.1.2 Spektralbereiche	12
2.2 Spektrale Messmethoden	15
2.2.1 Spektrometer	16
2.2.2 Bildsensoren	17
2.3 Bildgebende Spektroskopie	20
2.3.1 Hyperspektrale Bildaufnahme	20
2.3.2 Sensormodell	22
2.3.3 Einsatz hyperspektraler Kamerasysteme	25
3 Mathematische Grundlagen	27
3.1 Wahrscheinlichkeitstheorie	27
3.1.1 Zufallsvariable	27
3.1.2 Wahrscheinlichkeitsverteilung	27
3.1.3 Einige Wahrscheinlichkeitsdichten	30

3.1.4	Schätzung von Wahrscheinlichkeitsdichten	33
3.1.5	Distanzmaße	36
3.2	Klassifikation	41
3.2.1	Klassifikationsproblem	42
3.2.2	Merkmale	42
3.2.3	Klassifikatoren	49
3.2.4	N-Klassen-Klassifikation	56
3.2.5	Bewertung von Klassifikationsergebnissen	56
3.3	Inverse Probleme	58
3.3.1	Einführung	58
3.3.2	Lineare Probleme	58
3.3.3	Lösung linearer Probleme	59
3.3.4	Regularisierung	59
3.3.5	Nichtnegative Matrixfaktorisierung	61
3.4	Optimierungsverfahren	62
3.4.1	Simulated Annealing	62
3.4.2	Evolutionärer Algorithmus	63
3.4.3	Robuste Optimierung mit evolutionären Algorithmen	63
4	Hyperspektrale Bildverarbeitung	67
4.1	Klassifikation hyperspektraler Daten	67
4.1.1	Merkmale	68
4.1.2	Weiche Klassifikation – Subpixelmethoden	71
4.2	Spektrale Entmischung	72
4.2.1	Mischmodelle	72
4.2.2	Endmember	76
4.2.3	Entmischung	79
4.2.4	Bewertung von Entmischungsergebnissen	88
4.2.5	Erhöhung der räumlichen Auflösung	89
4.3	Fusion hyperspektraler Bilder	92
4.3.1	Pansharpening	93
4.3.2	Fusion mithilfe spektraler Entmischung	95
4.3.3	Bewertung der Fusionsergebnisse	99
4.4	Bandselektion	100
4.4.1	Auswahl von Bandbereichen durch Mittelung	102
4.4.2	Auswahl von Bandbereichen durch Filter	105

5	Messdaten und Simulationsmethoden	109
5.1	Laboraufbau	109
5.2	Datenaufbereitung	112
5.2.1	Linearität der hyperspektralen Kamera	112
5.2.2	Nonuniformity Correction (NUC)	112
5.2.3	Weißabgleich	114
5.2.4	Auswahl gültiger Sensorkanäle	117
5.2.5	Defekte Pixel	117
5.2.6	Normierung	119
5.3	Datensätze	120
5.3.1	Lebensmittel	121
5.3.2	Minerale	121
5.3.3	Pulver	122
5.4	Umsetzung der Verfahren	125
5.4.1	Programmierung	125
5.4.2	Simulation	125
6	Filterwahl für die Materialklassifikation	129
6.1	Einführung	129
6.2	Anforderungen an die Filterwahl	132
6.3	Auswahl des Klassifikators	134
6.4	Bewertung einer Filterkombination	136
6.4.1	Eigenschaften der Bhattacharyya- und Mahalanobis- Distanz	136
6.4.2	Histogrammüberlappung als Distanzmaß	142
6.4.3	Bewertung mittels mRMR-Maß	145
6.4.4	Bewertung anhand des Klassifikationsfehlers	146
6.5	Realisierung der Filterwahl	147
6.5.1	Vollständige Suche	147
6.5.2	Filterwahl mit globalen Optimierungsverfahren	152
6.5.3	Sequentielle Filterwahl	154
6.6	Robustheit der Filterwahl	154
6.6.1	Sensorrauschen	155
6.6.2	Offset	157
6.6.3	Filterschwankungen	158
6.6.4	Weitere Nebenbedingungen	160

6.6.5	Abschließende Bewertung	160
6.7	Zusammenfassung Filterwahl	163
7	Erweitertes Mischmodell	165
7.1	Mathematische Beschreibung	166
7.1.1	Örtliche Mischung	169
7.1.2	Spektrale Mischung	170
7.2	Kombination mehrerer Sensoren	173
7.3	Entmischung mit dem erweiterten Mischmodell	175
7.3.1	Anpassung der örtlichen Auflösung	176
7.3.2	Anpassung der Filterkennlinien	179
7.3.3	Regularisierung	180
7.4	Evaluation des erweiterten Mischmodells	184
7.4.1	Voruntersuchungen	184
7.4.2	Analyse mit simulierten Daten	190
7.4.3	Analyse mit Messdaten	195
7.5	Zusammenfassung Mischmodell	196
8	Zusammenfassung	199
8.1	Filterwahl	199
8.2	Erweitertes Mischmodell	200
8.3	Ausblick	201
A	Anhang	205
A.1	Messdaten	205
	Literaturverzeichnis	207
	Eigene Veröffentlichungen	221
	Studentische Arbeiten	222

Symbolverzeichnis

Allgemeine Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
bzw.	beziehungsweise
ca.	circa
d. h.	das heißt
engl.	englisch
etc.	<i>et cetera</i> (lat. und so weiter)
et al.	<i>et alii</i> (lat. und andere)
evtl.	eventuell
ggf.	gegebenenfalls
lat.	lateinisch
vgl.	vergleiche
z. B.	zum Beispiel
ANOVA	<i>Analysis of variance</i>
CCA	<i>Convex cone analysis</i>
CCD	<i>Charge-coupled device</i>
CMOS	<i>Complementary metal-oxide-semiconductor</i>
EMD	<i>Earth mover's distance</i>
FM	Fan-Mischmodell
FCLS	<i>Fully constrained least squares</i>
FTIR	Fouriertransformation-Infrarot
FWHM	<i>Full width half maximum</i>
GBM	Generalisiertes bilineares Mischmodell
HR	<i>High resolution</i>
ICA	<i>Independent component analysis</i>
IEA	<i>Iterative error analysis</i>
IFSMA	<i>Improved fusion method based on spectral mixture analysis</i>
IR	Infrarot (Spektralbereich)
kNN	<i>k</i> -Nächste-Nachbarn

Abkürzung	Bedeutung
Landsat TM	Landsat <i>Thematic Mapper</i>
LDA	Lineare Diskriminanzanalyse
LIBS	<i>Laser-induced breakdown spectroscopy</i>
LMM	Lineares Mischmodell
LoG	<i>Laplacian-of-Gaussian</i>
LR	<i>Low resolution</i>
LS	<i>Least squares</i>
LUT	<i>Lookup table</i>
MCT	<i>Mercury cadmium telluride</i> (HgCdTe)
MERIS FR	<i>Medium Resolution Imaging Spectrometer Full Resolution</i>
MNF	<i>Maximum noise fraction</i>
mRMR	Minimale Redundanz und maximale Relevanz
MSE	<i>Mean squared error</i>
MS	Multispektral
N-FINDR	<i>N-finder algorithm</i>
NAPC	<i>Noise adjusted principal components</i>
NCLS	<i>Non-negativity-constrained least squares</i>
NDVI	<i>Normalized difference vegetation index</i>
NIR	Nahinfrarot (Spektralbereich)
NMF	Nichtnegative Matrixfaktorisierung
NUC	<i>Nonuniformity correction</i>
PAN	<i>Panchromatic</i>
PCA	<i>Principal component analysis</i>
PC	<i>Personal computer</i>
PPNM	<i>Polynomial post-nonlinear mixing model</i>
PPI	<i>Pixel purity index</i>
PSNR	<i>Peak signal to noise ratio</i>
QDA	Quadratische Diskriminanzanalyse
RGB	Rot-Grün-Blau
RMSE	<i>Root-mean-square error</i>
SCLS	<i>Sum-to-one constrained least squares</i>
SNR	<i>Signal-to-noise ratio</i>
SVM	<i>Support vector machine</i>
UCLS	<i>Unconstrained least square</i>
UV	Ultraviolett (Spektralbereich)
VCA	<i>Vertex component analysis</i>
VIS	<i>Visible, Sichtbares Spektrum</i>

Symbole

Lateinische Buchstaben

Symbol	Bedeutung
0	Matrix mit Nullen
1	Matrix mit Einsen
A	Mischkoeffizienten (Abundanzen)
<i>b</i>	Nichtlineare Mischkoeffizienten
b	Filterkern
B	Örtliche Mischmatrix
$B(x)$	Beta-Funktion
<i>c</i>	Lichtgeschwindigkeit
<i>c</i>	Zentrale Wellenlänge
C	Spektrale Mischmatrix
C_{xy}	Kovarianz
d_{ED}	Euklidische Distanz
d_{SAM}	Spectral-Angle-Mapper
D_B	Bhattacharyya-Distanz
D_{dep}	Abhängigkeit
D_H	Hellinger-Distanz
D_{JM}	Jeffreys-Matusita-Distanz
D_{KL}	Kullback-Leibler-Divergenz
D_M	Mahalanobis-Distanz
D_{mRMR}	Minimale Redundanz, maximale Relevanz
D_{red}	Redundanz
D_{rel}	Relevanz
D_{\cap}	Histogramm-Überlappung
<i>e</i>	Fehler
<i>E</i>	Energie
$f(\lambda)$	Filterfunktion
$F_x(x)$	Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion
$f_x(x)$	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
g_{mn}	Bildsignal
<i>h</i>	Planck'sche Wirkungsquantum
<i>H</i>	Entropie
<i>I</i>	Transinformation
I	Einheitsmatrix

Symbol	Bedeutung
J	Gütemaß
L	Anzahl an Pixeln
$L(x, \lambda, t)$	Strahldichte
L_{ij}	Kostenfunktion
\mathbf{m}	Merkmalsvektor
M	Anzahl an Kanälen
$\mathcal{N}(\mu, \sigma)$	Normalverteilung
N	Anzahl an Endmitgliedern
P	Wahrscheinlichkeit
$P(\text{error})$	Fehlerwahrscheinlichkeit
$q(\lambda)$	Quanteneffizienz
$r(\lambda)$	Reflektanzfunktion
\mathbf{R}	Regularisierungsmatrix
\mathcal{R}	Nachbarschaftsregion
\mathbb{R}	Zahlenraum der reellen Zahlen
\mathbf{S}_B	Intervarianz
\mathbf{S}_W	Intravarianz
t	(Integrations-)Zeit
w	Filterbreite
\mathbf{w}	Projektionsrichtung
\mathbf{x}	Ortsvektor
\mathbf{X}	Endmemberspektren / Materialsignaturen
\mathbf{Y}	Sensorsignal

Griechische Buchstaben

Symbol	Bedeutung
α	NUC-Verstärkungsfaktor
β	NUC-Offset
γ	Mischkoeffizienten für GBM
$\Gamma(x)$	Gamma-Funktion
δ	Regularisierungsparameter
λ	Wellenlänge
μ	Mittelwert, Erwartungswert
ν	Frequenz
ρ_{xy}	Korrelationskoeffizient

Symbol	Bedeutung
σ^2	Varianz
Σ	Kovarianzmatrix
$\Phi(x)$	Kern-Funktion
ω	Klasse, Kategorie

Mathematische Operatoren

Operator	Bedeutung
\oslash	Elementweise Matrixdivision
\otimes	Kronecker-Produkt
\odot	Elementweise Matrixmultiplikation
*	Faltung eindimensionaler Signale
**	Faltung zweidimensionaler Signale
$E\{\cdot\}$	Erwartungswert
$\mathcal{F}^{-1}\{\cdot\}$	Inverse Fouriertransformation
$\mathcal{F}\{\cdot\}$	Fouriertransformation
$ \cdot $	Determinante einer Matrix, Kardinalität einer Menge, Betrag eines Skalars
$\ \cdot\ _1$	L_1 -Norm
$\ \cdot\ $	Euklidische Norm
$\ \cdot\ _2$	Euklidische Norm
$\ \cdot\ _F$	Frobeniusnorm
$\text{rang}\{\cdot\}$	Rang einer Matrix
$\text{spur}\{\cdot\}$	Spur einer Matrix
$\text{std}\{\cdot\}$	Standardabweichung
$\text{var}\{\cdot\}$	Varianz
$\text{vec}\{\cdot\}$	Spaltenweises Anordnen einer Matrix

1 Einleitung

1.1 Problemstellung

Die Materialklassifikation in Inspektionssystemen und Sortieranlagen ist in vielen Bereichen der Wirtschaft ein fester Teil der Prozesskette. Durch sie können verschiedene Materialien unterschieden und Materialzusammensetzungen gemessen werden. Dies dient beispielsweise in der Nahrungsmittelindustrie zur Detektion von Fremdmaterialien, im Bergbau zur Anreicherung von Erzen und im Recycling zur Trennung nach Stoffklassen.

In einigen Bereichen werden Inspektionsaufgaben händisch vom Menschen durchgeführt. Dabei ist die Sichtprüfung eine sehr ermüdende und anstrengende Tätigkeit, welche vom Menschen nur schwer reproduzierbar und objektiv durchgeführt werden kann [14]. Abhilfe schaffen automatische Inspektionsanlagen, die durch maschinelles Sehen und computergestützte Bildauswertung eine konstante Qualität sicherstellen.

Optische Inspektionsanlagen finden immer größere Anwendung, wie Studien zum Recycling [52], dem Lebensmittelmarkt [34] und dem Bergbau [35] zeigen. Vor allem eine strenger werdende Gesetzgebung [131, 132] oder der Wunsch nach hochwertigen und optisch einwandfreien Lebensmitteln [43] sind Haupttreiber dieser Entwicklung.

Die Hauptanforderungen an eine Materialklassifikation mittels optischer Inspektionssysteme sind eine hohe Klassifikationsgüte und eine hohe Klassifikationsgeschwindigkeit bei möglichst niedrigem Ressourcenbedarf. Insbesondere diese Ziele für eine beinahe unbegrenzte Anzahl an möglichen Anwendungsszenarien und Klassifikationsproblemen zu erreichen, stellt eine große Herausforderung dar. Um diese Anforderungen zu erfüllen, muss die Hardware und Software jeden Inspektionssystems speziell auf das Anwendungsszenario angepasst werden.

In dieser Arbeit wird ein systematisches Vorgehen für die Auswahl eines Kamerasystems zur Materialklassifikation untersucht. Hierbei werden hyperspektrale Bildaufnahmen für die Bewertung der Trennbarkeit verschiedener Materialien herangezogen. Zudem wird ein Verfahren vorgestellt, welches den Einsatz hyperspektraler Kameras für die spektrale Entmischung in Inspektionssystemen durch Fusion mehrerer Kameras ermöglicht. Hierfür wird ein neuartiges Mischmodell vorgestellt, welches die spektralen und räumlichen Eigenschaften der Sensoren kombiniert.

1.2 Stand der Technik

1.2.1 Inspektionssysteme

Optische Inspektionssysteme lassen sich auf unterschiedlichste Arten realisieren. Gemein sind allen optischen Inspektionssystemen ein oder mehrere Bildsensoren, welche üblicherweise als Flächen- oder Zeilensensor realisiert werden. Flächensensoren lassen sich zur Untersuchung einzelner Objekte verwenden, während Zeilensensoren für die Untersuchung von Schüttgütern auf einem Förderband geeignet sind. Hierbei entsteht durch das Aneinanderreihen der Bildzeilen ein Endlosbild, welches kontinuierlich ausgewertet werden kann.

Viele optische Inspektionssysteme sind Teil einer Sortieranlage, in der nicht nur eine Bewertung von Objekten oder Materialströmen stattfindet, sondern auch eine Objektrennung erfolgt. Ein möglicher prinzipieller Aufbau einer solchen Sortieranlage ist in Abbildung 1.1 dargestellt. Verschiedene Objekte werden auf einem Förderband durch das Sichtfeld einer Zeilenkamera geführt. Dabei führt eine automatische Bildauswertung zu einer Entscheidung, woraufhin eine Batterie von Luftdüsen angesteuert wird. Der Luftstrom der Düsen führt zum Ausstoß einzelner Objekte, was eine Trennung des Materialstroms in zwei Klassen ermöglicht. In einem solchen Aufbau wird die Echtzeitanforderung der Bildauswertung und Entscheidungsfindung deutlich. Schließlich muss diese abgeschlossen sein, bevor das untersuchte Objekt die Luftdüsen passiert.

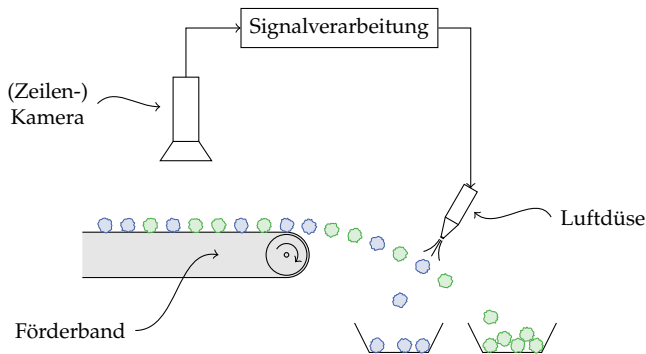


Abbildung 1.1 Schematische Darstellung einer Schüttgutsortieranlage.

Die Qualität einer Inspektion hängt von der Bildgewinnung und der Bildauswertung ab. Da die Bildgewinnung die Basis für die spätere Bildauswertung bildet, sollte hier schon möglichst viel der Information, welche zur Analyse und Trennung der Materialien nötig ist, gewonnen werden. Daher ist eine an die Problemstellung angepasste Bildgewinnung gewünscht, welche sich insbesondere durch die Wahl der Beleuchtung und durch die Wahl der Kamera beeinflussen lässt, denn bei der Charakterisierung von Materialien haben Spektralbereich und die spektrale Auflösung der Kamera großen Einfluss auf die Bildauswertung. Zudem kann auch der Bildhintergrund auf eine Problemstellung angepasst werden [122].

1.2.2 Methoden zur Materialerkennung

In der Laboranalytik wird eine Vielzahl an Verfahren zur Charakterisierung von Materialien eingesetzt. Dabei handelt es sich meist um spektrometrische oder nasschemische Verfahren [118]. Für optische Inspektionssysteme eignen sich jedoch nur die Verfahren aus der Spektroskopie.

Die Spektroskopie nutzt die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischen Wellen und dem Material [91]. Durch eintreffende Photonen werden so Moleküle zu Schwingungen angeregt oder Elektronen auf

andere Energieniveaus gehoben. Diese Wechselwirkung beeinflusst die spektrale Zusammensetzung des transmittierten, reflektierten oder absorbierten Lichts, welches Aufschluss über die materielle Zusammensetzung eines Objekts geben kann.

Nicht alle Techniken, welche in der Laboranalytik zur Materialcharakterisierung genutzt werden, lassen sich ohne Weiteres in Inspektionssystemen wie zum Beispiel in Sortieranlagen einsetzen; denn für den Einsatz in Inspektionssystemen müssen die Methoden möglichst zerstörungsfrei und berührungslos arbeiten. Zusätzlich sollten sie keine Probenpräparation voraussetzen und in den Fertigungsprozess eingebunden werden können. Eine Möglichkeit, diese Anforderungen zu erfüllen, bieten bildgebende spektroskopische Aufnahmeverfahren wie hyperspektrale Kameras.

1.2.3 Hyperspektrale Kameras

In der satelliten- oder flugzeuggestützten Fernerkundung werden seit mehreren Jahrzehnten optische Sensoren zur Materialidentifikation und -charakterisierung eingesetzt [55, 106]. Vor allem hyperspektrale Sensoren, welche zu jedem Bildpunkt ein Spektrum liefern, sind hierfür besonders gut geeignet. Da hyperspektrale Bilder sowohl die räumliche Information in zwei Dimensionen als auch zusätzliche spektrale Information in einer dritten Dimension enthalten, wird häufig von einem hyperspektralen Datenwürfel gesprochen. In Abbildung 1.2 ist eine hyperspektrale Aufnahme von sechs Objekten als ein solcher Würfel dargestellt.

Die Fernerkundung arbeitet prinzipbedingt berührungslos, zerstörungsfrei und ohne Präparation, weshalb sich viele der dort genutzten Ansätze auf Inspektionssysteme übertragen lassen.

Auch in anderen Bereichen werden hyperspektrale Bildaufnahmen eingesetzt. So z. B. in der Medizin [98], der Laboranalytik und Prozessüberwachung [100] sowie im Bergbau [134]; teilweise auch bereits im Recycling [146] und der Nahrungsmittelproduktion [46].

Allerdings besitzen hyperspektrale Kameras eine wesentlich geringere räumliche Auflösung und niedrigere Auslesegeschwindigkeit als Farb- oder Graubildkameras. Sie können daher einige Anforderungen der

Inspektionsanlagen, für die eine Echtzeitfähigkeit meist gewünscht ist, nicht erfüllen. Ihre Einsatzmöglichkeiten in der Sichtprüfung sind daher bisher begrenzt. Zudem stellt die große Datenmenge hyperspektraler Bildaufnahmen die Bildauswertung vor Herausforderungen.

Aus den Möglichkeiten, aber auch aus den Einschränkungen der Materialklassifikation mittels hyperspektraler Bilder lässt sich die Aufgabenstellung dieser Arbeit motivieren.

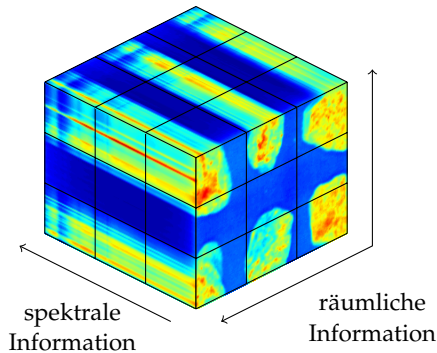


Abbildung 1.2 Oberfläche eines hyperspektralen Datenwürfels.

1.3 Aufgabenstellung

Ziel dieser Arbeit ist es, die Materialklassifikation in Inspektionsanlagen durch den Einsatz hyperspektraler Bildaufnahmen und entsprechender Bildauswertung zu verbessern. Die zuvor genannten Nachteile der hyperspektralen Bildaufnahme in Bezug auf Schnelligkeit, Auflösung und Kosten sollen durch die entwickelten Methoden abgeschwächt werden. Dafür werden zwei verschiedene Szenarien untersucht, aus denen sich unterschiedliche Aufgabenstellungen ergeben.

In einem ersten Anwendungsszenario wird die hyperspektrale Kamera im Labor eingesetzt, um mit den umfangreichen Informationen, die mit ihr gewonnen werden, beim Entwurf einer Inspektionsanlage zu unterstützen und so eine möglichst optimale problemangepasste Lösung

zu ermöglichen. In der Inspektionsanlage sollen anstelle einer hyperspektralen Kamera multispektrale Sensoren Anwendung finden, welche die Anforderungen an die Echtzeitfähigkeit der Klassifikation erfüllen. Kernfrage hierbei ist, welche multispektrale Sensoren eingesetzt bzw. welche Spektralbereiche durch optische Filter extrahiert werden müssen, um eine zufriedenstellende Klassifikation bei einem bestimmten Klassifikationsproblem zu erreichen. Im Bereich der Fernerkundung wird diese Aufgabenstellung unter dem Begriff der Bandselektion betrachtet und erforscht.

Die Auswahl bestimmter Spektralbereiche für die Materialklassifikation lässt sich gut am Beispiel des menschlichen Auges und dessen Evolution verdeutlichen. Im Auge werden durch drei verschiedene Klassen an Photorezeptoren drei unterschiedliche Spektralbereiche aufgenommen (vgl. Abbildung 1.3).

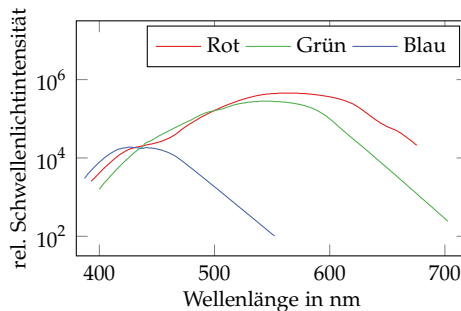


Abbildung 1.3 Spektrale Empfindlichkeit der menschlichen Zapfen [92].

Durch den aufeinander abgestimmten Verlauf der Sensitivitäten über der Wellenlänge erlaubt das Auge dem Menschen, sehr viele Grüntöne sowie die Farben grün und rot gut zu unterscheiden. In vergangenen Zeiten stellte sich dies für die Vorfahren des Menschen als großer Überlebensvorteil heraus, da Primaten sich hauptsächlich von roten Früchten und jungen Blättern ernähren [99, 153]. Im Laufe der Evolution entwickelten sich die Sensitivitätskurven also derart, dass eine effiziente Lösung besonders bedeutender Klassifikationsaufgaben ermöglicht wird.

Dieses Prinzip wird nun auf die Filterwahl für Inspektionsaufgaben übertragen. Auch hier soll aus den oben genannten Gründen nur ein niedrigdimensionales Bild aufgezeichnet werden. Die Filterfunktionen, d. h. die Verläufe der Sensitivität, sollen so gewählt werden, dass die spezielle Klassifikationsaufgabe möglichst gut gelöst werden kann. Dabei stellen sich zwei Hauptfragen:

- Wie müssen diese Filterkurven aussehen?
- Wie viele Kanäle werden benötigt, um eine bestimmte Klassifikationsgüte zu erreichen?

Zur Beantwortung dieser Fragen werden im Folgenden verschiedene Ansätze zur Bewertung einer Sensorkonfiguration bezüglich der Trennbarkeit unterschiedlicher Materialien präsentiert. Dabei wird eine Methodik zur Auswahl einer optimalen Kombination optischer Filter entwickelt. Abbildung 1.4 stellt die Vorgehensweise schematisch dar.

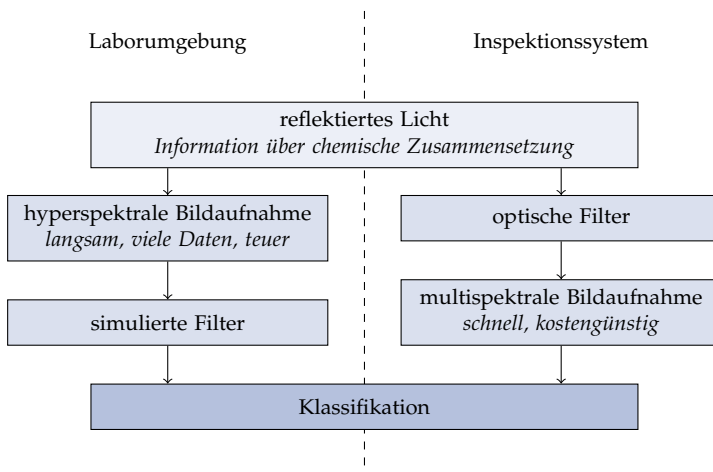


Abbildung 1.4 Gegenüberstellung der Merkmalsextraktion in der Laborumgebung mithilfe einer hyperspektralen Aufnahme und der Extraktion mithilfe optischer Filter in der Inspektionsanlage.

In der Laborumgebung werden aus den hyperspektralen Daten Merkmale extrahiert, welche zu einer guten Trennung verschiedener Materialien führen. Die Merkmalsextraktion erfolgt dabei durch simulierte optische Filter, welche dann im Inspektionssystem eingesetzt werden können, um eine schnelle und kostengünstige Bildaufnahme und -auswertung zu ermöglichen.

Neben einer guten Trennbarkeit wird in dieser Arbeit gleichzeitig eine hohe Robustheit gegenüber Veränderungen des Bildsignals gefordert. Diese können beispielsweise durch fehlerhafte Kalibrierung, Verschmutzung oder Abnutzung entstehen. Die Berücksichtigung dieser Einflüsse bereits bei der Auswahl optischer Filter ermöglicht auch bei Veränderungen des Signals noch zufriedenstellende Klassifikationsergebnisse.

Die systematische Vorgehensweise zur Bestimmung eines Aufnahmesystems anhand der Trennbarkeit und Robustheit stellt dabei einen Fortschritt im Bezug zum aktuellen Stand der Technik und Forschung der Bandselektion dar, wo heutzutage meist nur die Trennbarkeit berücksichtigt wird. In Zukunft soll dadurch der Entwurf leistungsfähigerer Inspektionsanlagen zur Materialklassifikation ermöglicht werden, welche problemspezifische optische Aufnahmesysteme enthalten.

In einem zweiten in dieser Arbeit betrachteten Szenario werden hyperspektrale Kameras trotz ihrer Nachteile in Bezug auf Auflösung und Geschwindigkeit in Inspektionssystemen eingesetzt. Die Information, die durch die geringere räumliche Auflösung des hyperspektralen Sensors fehlt, soll dabei durch zusätzliche multispektrale oder panchromatische Sensoren mit geringerer spektraler, aber höherer räumlicher Auflösung gewonnen werden. Dies soll den Einsatz von Methoden zur Materialklassifikation wie der spektralen Entmischung ermöglichen.

Die spektrale Entmischung dient dazu, Materialanteile aus einem hyperspektralen Bildsignal zu bestimmen. Hierfür wird angenommen, dass sich im Sichtfeld eines Pixels verschiedene Materialien befinden, welche mit dem einfallenden Licht interagieren. Diese Annahme ist vor allem in der Fernerkundung, wo der Abstand zwischen Bildsensor und Erdoberfläche sehr groß ist, gültig. Aber auch in Inspektionssystemen kann es zu einer Mischung kommen, wenn sich Objekte sehr schnell bewegen, wie es beispielsweise in Sortieranlagen der Fall ist.

Die Mischung verschiedener Signalanteile wird durch ein Mischmodell beschrieben. In dieser Arbeit wird auf Basis des linearen Mischmodells, welches bei der spektralen Entmischung breite Anwendung findet, ein Modell für die Verwendung mehrerer Sensoren unterschiedlicher spektraler und räumlicher Auflösung entwickelt. Dadurch können die Signale mehrerer Sensoren gleichzeitig entmischt und Materialanteile gemessen werden, wie es in Abbildung 1.5 dargestellt ist.

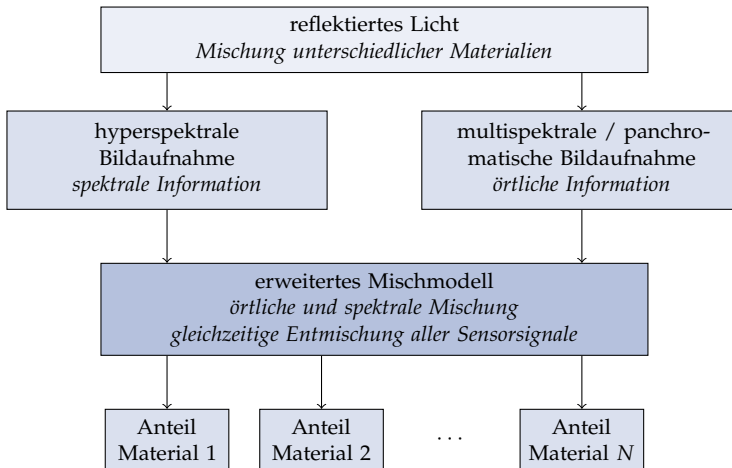


Abbildung 1.5 Gleichzeitige Entmischung der Signale mehrerer Sensoren mit dem erweiterten Mischmodell. Durch Berücksichtigung der spektralen und örtlichen Mischung können die Daten fusioniert und die Materialanteile in hoher räumlicher Auflösung ermittelt werden.

In dem entwickelten erweiterten Mischmodell wird zwischen spektraler und örtlicher Mischung unterschieden. Die spektrale Mischung beschreibt die spektrale Charakteristik der Sensoren, während die örtliche Mischung die räumlichen Eigenschaften des Sensors darstellt. Letztere lassen sich durch die Übertragungsfunktion beschreiben.

Schließlich werden die entwickelten Methoden zur Filterwahl und zur spektralen Entmischung an einem Laboraufbau erprobt und ihre Leistungsfähigkeit bewertet.

1.4 Gliederung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit ist in acht Kapitel gegliedert. Im folgenden Kapitel wird zunächst auf die Entstehung von elektromagnetischen Spektren und ihre Bedeutung für die Materialklassifikation eingegangen. Dabei werden Grundlagen der Spektroskopie beleuchtet und verschiedene Messmethoden beschrieben. Des Weiteren werden die bildgebende Spektroskopie, d. h. die hyperspektrale Bildaufnahme und deren Einsatzmöglichkeiten, vorgestellt.

Im dritten Kapitel werden mathematische Grundlagen behandelt, welche für das Verständnis der Ausführungen in den folgenden Kapiteln hilfreich sind. Der Fokus liegt hierbei zum einen auf der Beschreibung und Verarbeitung von Merkmalen als Zufallsvariablen sowie auf verschiedenen Methoden zur Klassifikation.

Nach der Behandlung der Grundlagen beschäftigt sich das vierte Kapitel mit unterschiedlichen Verfahren zum Umgang mit hyperspektralen Bilddaten und stellt den aktuellen Stand der Forschung auf diesem Gebiet dar. Hierbei werden drei verschiedene Anwendungen besonders betrachtet: die Bandselektion, die spektrale Entmischung und die Fusion hyperspektraler Bilder.

Die folgenden Kapitel bilden den Kernteil dieser Arbeit. So beschreibt das fünfte Kapitel den Laboraufbau, die Messdaten und die Simulationsumgebungen, mit denen spätere Auswertungen durchgeführt werden.

Anschließend werden die entwickelten Methoden zur optimalen Auswahl optischer Filter für eine gute Klassentrennbarkeit in Kapitel sechs vorgestellt und ausgewertet.

Im siebten Kapitel wird das erweiterte Mischmodell präsentiert, welches örtliche und spektrale Mischvorgänge kombiniert und dadurch die Fusion von Aufnahmen mehrerer Kameras mit unterschiedlichen Charakteristiken ermöglicht. Zudem werden verschiedene Ergebnisse, die mit dieser neuen Methode erzielt wurden, sowie deren Auswertung dargestellt.

Schließlich werden die Forschungsergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf weitere Forschungstätigkeiten gegeben.

2 Spektroskopie und Bildgewinnung

In diesem Kapitel wird auf die Grundlagen der Spektroskopie und Bildgewinnung eingegangen. Dabei werden verschiedene Arten der Spektroskopie betrachtet und die Möglichkeit der bildgebenden Spektroskopie mithilfe hyperspektraler Kameras beleuchtet.

2.1 Einführung

Die Spektroskopie bezeichnet die Analyse von elektromagnetischen Wellen in Abhängigkeit ihrer Wellenlänge, wobei in Emissions- und Absorptionsspektroskopie unterschieden wird. In der Emissionsspektroskopie wird Licht analysiert, welches von einem Körper, einer Flüssigkeit oder einem Gas ausgestrahlt wird, während bei der Absorptionsspektroskopie der Einfluss des bestrahlten Materials auf das Licht und die damit verbundene Absorption ausgewertet wird.

Da die spektrale Zusammensetzung des Lichts sowohl in der Emissions- als auch in der Absorptionsspektroskopie abhängig vom Material oder Medium ist, kann durch die Spektroskopie Aufschluss über dessen materielle Zusammensetzung gewonnen werden. Deshalb findet die Spektroskopie in der chemischen und physikalischen Analytik breiten Einsatz [151]. Die spektralen Eigenschaften eines Materials können folglich auch für die Materialklassifikation in Inspektionsanlagen genutzt werden.

2.1.1 Licht als elektromagnetische Welle

Licht kann als Welle oder als Teilchen beschrieben werden. Beide Möglichkeiten sind nötig, um die Effekte der Spektroskopie zu beschreiben. Die elektromagnetische Welle wird durch ihre Frequenz ν oder ihre Wellenlänge λ charakterisiert. Mit der Lichtgeschwindigkeit c gilt der Zusammenhang:

$$\lambda = \frac{c}{\nu}. \quad (2.1)$$

Entsprechend der Interpretation als Teilchen besteht Licht aus Photonen (Lichtteilchen) mit der Energie

$$E = h\nu, \quad (2.2)$$

wobei h für das Planck'sche Wirkungsquantum steht. Die Ausbreitungseigenschaften des Lichts in Abhängigkeit des Mediums lassen sich durch die Maxwell-Gleichungen beschreiben [108].

Strahlung setzt sich meist aus einer Vielzahl unterschiedlicher Wellen mit unterschiedlichen Wellenlängen zusammen. Die Analyse dieser Zusammensetzung ist die Aufgabe der Spektroskopie.

2.1.2 Spektralbereiche

Abhängig von den Eigenschaften der elektromagnetischen Wellen, insbesondere in Bezug auf die Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie, lässt sich das elektromagnetische Spektrum in unterschiedliche Wellenlängen- oder Spektralbereiche einteilen. Hierbei werden auch unterschiedliche physikalische Mechanismen und die menschliche Wahrnehmung berücksichtigt. Durch den direkten Zusammenhang zwischen Wellenlänge und Energie eines Lichtquants ist dies gleichzeitig auch eine Einteilung bezüglich der Energie der Strahlung.

Abbildung 2.1 zeigt eine gängige Einteilung des Spektrums [37]. Im Folgenden werden einige dieser Bereiche genauer beschrieben und auf die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie eingegangen.

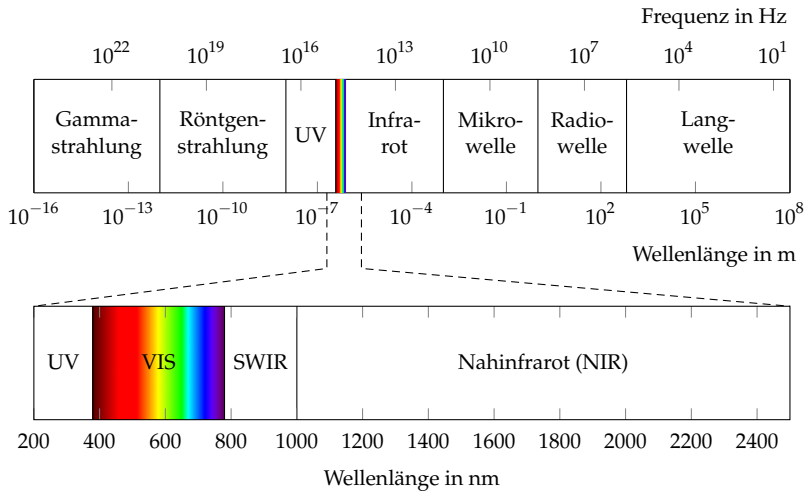


Abbildung 2.1 Einteilung der elektromagnetischen Wellen in verschiedene Spektralbereiche.

2.1.2.1 Sichtbares Licht

Für den Menschen ist nur der Spektralbereich von 380 nm bis 780 nm sichtbar [37]. Die menschliche Wahrnehmung erfolgt dabei nicht durch Messung des Spektrums, sondern durch Filtern der drei Farben Blau, Grün und Rot aus dem Spektrum. Diese Filterung geschieht durch die unterschiedliche Sensitivität der Lichtrezeptoren (Zapfen) [92]. Licht mit unterschiedlichem Spektrum kann dabei den gleichen Farbeindruck hervorrufen.

Viele Elektronenübergänge zwischen den Orbitalen eines Atoms haben Energiedifferenzen, welche dem sichtbaren Spektralbereich entsprechen. Durch die Bestrahlung eines Atoms mit sichtbarem Licht können Lichtquanten absorbiert und Elektronen auf höhere Energieniveaus gehoben werden; oder aber Elektronen verlassen höhere Energieniveaus und es wird sichtbare Strahlung emittiert. Die Spektroskopie im sichtbaren Spektralbereich gibt daher Aufschluss über den Aufbau von Atomen.

2.1.2.2 Infrarotspektrum

An den sichtbaren Spektralbereich schließt sich der Infrarotbereich an, dessen Wellenlängen länger und Photonenenergie geringer ist als im sichtbaren Spektralbereich. Der Infrarotbereich lässt sich grob in drei Teilbereiche gliedern: Das **ferne Infrarot** liegt im Bereich von Wellenlängen von $50\ \mu\text{m}$ bis $1\ \text{mm}$ und wird daher auch als Submillimeterwelle bezeichnet. Detektoren in diesem Spektralbereich werden hauptsächlich in der Astronomie genutzt.

Im **mittleren Infrarotbereich** ($2,50\ \mu\text{m} - 50\ \mu\text{m}$) liegen viele Absorptionsfrequenzen von Molekülschwingungen. Unter Molekülschwingungen werden die verschiedenen Rotations- und Vibrationschwingungen der Atome innerhalb eines Moleküls verstanden. In Abbildung 2.2 sind verschiedene mögliche Vibrationsmoden eines Wassermoleküls dargestellt. Moleküle mit N Atomen können dafür als Feder-Masse-Dämpfer-System mit $3N - 6$ Freiheitsgraden modelliert werden [91]. Verschiedene Molekülgruppen haben Schwingungsmoden bei charakteristischen Frequenzen bzw. Wellenlängen, z. B. die CH-Gruppe bei $3,30\ \mu\text{m}$ oder die OH-Gruppe bei $2,80\ \mu\text{m}$ [73]. Deshalb ist das Infrarotspektrum dazu geeignet, die materielle Zusammensetzung zu bestimmen. Da die Vibrationschwingungen auch abhängig von der Temperatur des Materials sind, arbeiten viele Wärmebildkameras in diesem Wellenlängenbereich.

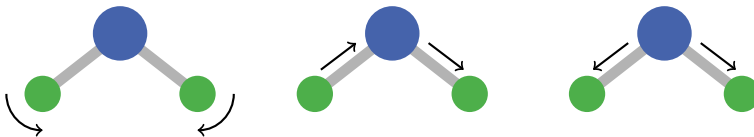


Abbildung 2.2 Verschiedene Vibrationschwingungen in einem Wassermolekül.

Die Schwingungsmoden können in einer Grundschiwingung oder in Oberschwingungen angeregt werden. Die Grundschiwingung ist dabei immer am stärksten ausgeprägt. Werden mehrere Schwingungen gleichzeitig angeregt, so spricht man von Kombinationsschwingungen.

Für die meisten Molekülverbindungen liegen die Grundswingungen im mittleren Infrarotbereich. Die Ober- und Kombinationsswingungen können im **Nahinfrarotbereich** ($0,80\ \mu\text{m} - 2,50\ \mu\text{m}$) detektiert werden. Beispielhaft ist in Abbildung 2.3 das Transmissionsspektrum von Wasserdampf im Nahinfrarotbereich dargestellt. Die charakteristischen Absorptionsbanden, in denen Strahlung absorbiert wird, sind deutlich zu erkennen. Daher kann ein solches Spektrum als Fingerabdruck oder Signatur genutzt werden, um Materialien zu charakterisieren und zu unterscheiden.

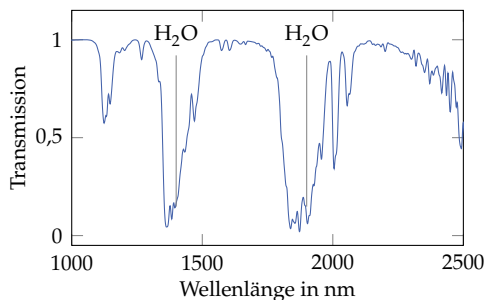


Abbildung 2.3 Typisches Transmissionsspektrum von Wasserdampf [53].

Das Nahinfrarotspektrum ist für die optische Sichtprüfung besonders gut geeignet, da keine Probenpräparation notwendig und eine einfache Beleuchtung in diesem Spektralbereich möglich ist. Außerdem ist die Strahlung nicht mit Risiken für den Anwender – wie beispielsweise bei der Röntgenstrahlung – verbunden.

2.2 Spektrale Messmethoden

Für die spektroskopische Untersuchung von Materialien gibt es verschiedene Ansätze. Für den Einsatz in optischen Inspektionsanlagen eignet sich die Analyse des Reflexionsspektrums. Die Ramanspektroskopie gibt ebenfalls Aufschluss über die materielle Zusammensetzung eines Stoffes. Hierbei wird monochromatisches Licht, beispielsweise das eines

Lasers, auf eine Probe aufgebracht. Neben der Wellenlänge des einstrahlten Lichts besteht das gestreute Licht auch aus Anteilen anderer Wellenlängen, welche für das Material charakteristisch sind.

Einen ähnlichen Ansatz verfolgt die laserinduzierte Plasmaspektroskopie (LIBS), wobei hier durch den Laser ein Plasma erzeugt wird, welches für die Atome charakteristisches Licht emittiert. Durch die Bestrahlung ist die Methode allerdings nicht zerstörungsfrei.

2.2.1 Spektrometer

Um das transmittierte oder reflektierte Licht spektral zu analysieren, bedarf es eines Spektrometers, welches die spektrale Zusammensetzung liefert. Hierfür werden hauptsächlich zwei Ansätze verwendet: das Fouriertransformations- und das Dispersionsspektrometer, die im Folgenden näher erläutert werden.

2.2.1.1 Fouriertransformationsinfrarotspektrometer (FTIR)

Ein Fouriertransformationsinfrarotspektrometer (FTIR) besteht aus einem Michelson-Interferometer mit einer breitbandigen Lichtquelle. Das Licht durchläuft zwei unterschiedliche Wege und passiert dabei die Probe üblicherweise in Transmission. Durch die Laufzeitdifferenz, die durch Bewegen eines Spiegels vorgegeben werden kann, kommt es zur Interferenz der beiden Lichtwege. Werden Laufzeiten über einen Bereich variiert, so erhält man ein Interferogramm aus dem mithilfe der Fouriertransformation das Spektrum berechnet werden kann. Einsatz findet die FTIR hauptsächlich in der Analytik, wegen der Probenpräparation aber nicht in der Sichtprüfung [104]. Meist wird mithilfe eines FTIR-Spektrometers die Transmission eines Pulvers oder einer Lösung bestimmt.

2.2.1.2 Beugungs- und Brechungsspektrometer

Eine andere Möglichkeit das Spektrum zu messen, ist das Licht nach der Wellenlänge aufzufächern. Hierfür können dispersive optische Elemente wie Beugungsgitter oder Prismen verwendet werden.

Die Aufteilung des Lichts durch ein Prisma beruht auf der Dispersion, der Abhängigkeit der Lichtgeschwindigkeit in einem Medium von der Wellenlänge. In Abbildung 2.4 ist dieser Effekt dargestellt.

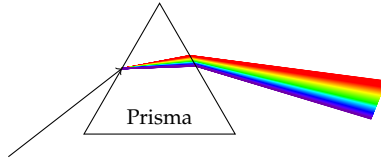


Abbildung 2.4 Weißes Licht wird durch ein Prisma aufgefächert.

Beugungs- und Brechungseffekte lassen sich auch kombinieren. In vielen bildgebenden Spektrometern werden sogenannte *Prism-Grating-Prism*-Optiken eingesetzt, welche aus Prismen und Beugungsgittern bestehen [3].

2.2.2 Bildsensoren

Für die Auswertung reflektierter Strahlung muss diese zunächst gemessen werden. Hierfür werden Bildsensoren verwendet, welche die Strahlung über einen begrenzten räumlichen und spektralen Bereich, einen begrenzten Winkel sowie über eine begrenzte Zeitspanne integrieren und in ein elektrisches Signal wandeln. Dieses wird anschließend digitalisiert und kann so mithilfe von Auswertelgorithmen weiterverarbeitet werden.

Für das gemessene Bildsignal g gilt der Zusammenhang

$$g \propto \iiint L(\mathbf{x}, \lambda, t) q(\lambda) \, dx \, dt \, d\lambda, \quad (2.3)$$

wobei $L(\mathbf{x}, \lambda, t)$ die Strahldichte in Abhängigkeit des Ortes \mathbf{x} , der Wellenlänge λ und der Zeit t darstellt. Die Quanteneffizienz $q(\lambda)$ spiegelt die Empfindlichkeit des Sensors bei einer bestimmten Wellenlänge wider. Auf die Abhängigkeit von Einstrahlwinkel und Abbildungsverhalten der optischen Komponenten (Objektiv, Linse) wurde in dieser Darstellung verzichtet.

2.2.2.1 Sensorarten

Die meisten Bildsensoren bestehen aus Photodioden, in welchen eintreffendes Licht freie Ladungsträger erzeugt. Dieser Prozess wird Photoeffekt genannt. Die spektrale Sensitivität einer Photodiode wird durch die Halbleitermaterialien, aus welcher die Photodiode besteht, beeinflusst (siehe nächster Abschnitt).

Aus Photodioden lassen sich unterschiedliche Arten an Bildsensoren aufbauen, welche in Punkt-, Zeilen- und Flächensensoren unterschieden werden können. Punktsensoren bestehen aus einer einzelnen Photozelle und finden beispielsweise in FTIR-Spektrometern Einsatz, bei denen keine räumliche Auflösung nötig ist.

Zeilen- und Flächensensoren liefern dagegen räumliche Information. Hierfür werden viele Photodioden in einer Zeile bzw. einem Rechteck angeordnet. Ein Zeilensensor eignet sich insbesondere dann für Inspektionsanlagen, wenn das Material beispielsweise durch ein Förderband unter dem Sichtfeld des Sensors hindurchgeführt wird.

Der meist verwendete Sensortyp ist der CCD-Chip, in welchem die Ladung in jeder Zelle zwischengespeichert wird, um dann während des Auslesevorgangs von einer Zelle zur nächsten sukzessive weitergeschoben zu werden. Dagegen wird in CMOS-Sensoren jede Photozelle direkt angesteuert und ausgelesen. Ihr Aufbau ist dadurch komplizierter, ermöglicht dafür aber das Auslesen einzelner Bildausschnitte [79].

2.2.2.2 Sensormaterialien

Wie erwähnt, beeinflusst das Halbleitermaterial, aus welchem eine Photodiode aufgebaut ist, die Sensitivität des Sensors. Durch unterschiedliche Legierungen und die Dotierung der Materialien lassen sich Sensoren für verschiedene Spektralbereiche herstellen. Die Quanteneffizienz und Möglichkeit der Miniaturisierung sind dabei für die verschiedenen Materialien unterschiedlich. Einige Sensormaterialien mit den zugehörigen Spektralbereichen sind in Tabelle 2.1 aufgeführt.

Tabelle 2.1 Verschiedene Sensormaterialien und zugehörige Spektralbereiche sowie typische Arbeitstemperaturen. Zahlenwerte entnommen aus [67, 115].

Material	Spektralbereich	Arbeitstemperatur
Si	0,4 bis 1,0 μm	300 K
Ge	0,8 bis 1,8 μm	300 K
InGaAs	0,7 bis 1,7 μm	300 K
InAs	1,0 bis 3,1 μm	77 K
InSb	1,0 bis 5,5 μm	77 K
HgCdTe	0,8 bis 25 μm	77 bis 250 K

2.2.2.3 Farbkameras

Die spektrale Sensitivität eines Bildsensors lässt sich durch vorgelagerte optische Filter weiter eingrenzen. Für Farbkameras werden hierfür drei Filter ähnlich der Empfindlichkeit der menschlichen Sehzellen gewählt. Diese Filter lassen sich entweder direkt vor den einzelnen Photodioden des Sensors applizieren oder es werden mehrere Sensoren und entsprechende Strahlteiler plus Filter verwendet (siehe Abbildung 2.5). Ersteres ergibt ein sogenanntes Bayer-Pattern, durch welches sich ein Makropixel aus zwei grünen und jeweils einem roten und einem blauen Pixel zusammensetzt.

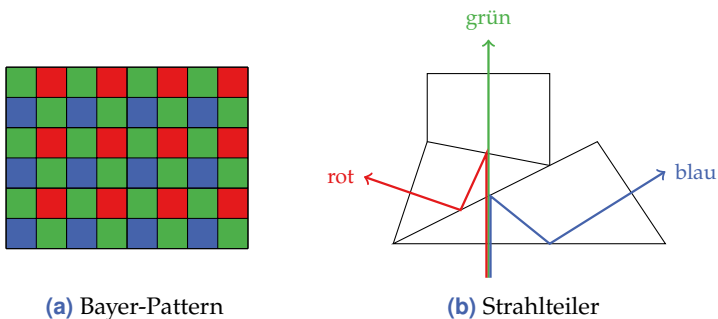


Abbildung 2.5 Möglichkeiten zur Realisierung einer Farbkamera (Abbildung nach [14]).

2.3 Bildgebende Spektroskopie

Häufig ist neben der spektralen Information, welche durch herkömmliche Spektrometer gewonnen werden kann, auch die räumliche Information von Interesse. Hierfür wird ein bildgebendes Spektrometer benötigt, welches für jeden Bildpunkt das zugehörige Spektrum liefert. Solche bildgebende Spektrometer werden auch hyperspektrale Kameras genannt.

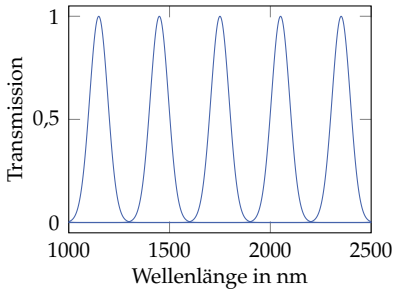
2.3.1 Hyperspektrale Bildaufnahme

Eine hyperspektrale Bildaufnahme zeichnet sich dadurch aus, dass sie in jedem Bildpunkt über hundert verschiedene spektrale Kanäle aufweist. Im Gegensatz zu multispektralen Aufnahmen liefern die verschiedenen Kanäle dadurch einen quasikontinuierlichen Verlauf. Der Unterschied zwischen einer multispektralen Aufnahme und einer hyperspektralen Aufnahme verdeutlicht Abbildung 2.6.

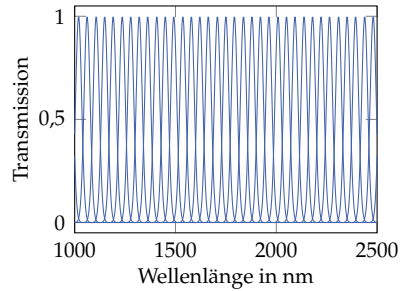
Es gibt verschiedene Möglichkeiten, hyperspektrale Bilder zu gewinnen. Ein naheliegender Ansatz ist, mit einem Punktspektrometer einzelne Punkte abzutasten. Dieses Vorgehen liefert je nach verwendetem Spektrometer die beste spektrale Auflösung, ist aber sehr aufwendig in der Umsetzung und daher für Inspektionssysteme ungeeignet.

Wie die räumliche Information kann auch die spektrale Information sukzessive gewonnen werden. Hierfür werden vor eine Graubildkamera verschiedene schmalbandige Spektralfilter appliziert und nacheinander Bilder der schmalen Spektralbereiche aufgenommen. Als Filter eignen sich insbesondere durchstimmbare Filter wie beispielsweise Flüssigkristallfilter (*liquid crystal tunable filters*). Durch die sequentielle Aufnahme ist auch dieser Ansatz für viele Anwendungen allerdings nicht ausreichend.

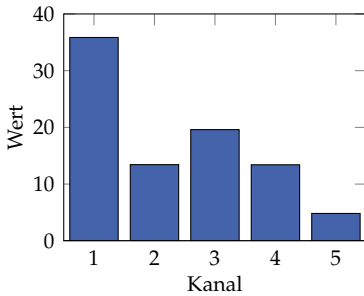
Eine dritte Möglichkeit ist die Pushbroom-Methode, welche in Abbildung 2.7 dargestellt ist. Durch eine schlitzförmige Blende wird das Licht einer Zeile in den Spektrographen und dann durch eine Beugungsoptik geleitet. Diese fächert das Licht nach der Wellenlänge auf (vgl. Abschnitt 2.2.1.2). Mit einem Flächensensor lässt sich dann gleichzeitig die spektrale und örtliche Information einer Zeile der beobachteten Szene gewinnen.



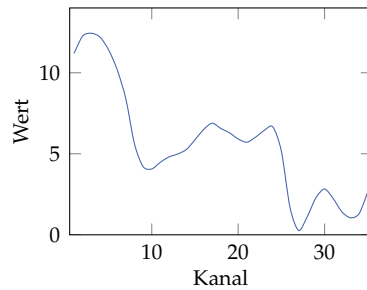
(a) Sensorkennlinien multispektral



(b) Sensorkennlinien hyperspektral



(c) Werte multispektral



(d) Werte hyperspektral

Abbildung 2.6 Vergleich der Sensorkennlinien und der dazugehörigen Signale einer multispektralen und einer hyperspektralen Bildaufnahme.

Um ein vollständiges Bild in beide räumliche Dimensionen zu erhalten, muss das beobachtete Objekt vor dem Sensor oder die Kamera über die Szene hinweg bewegt werden. Der erste Ansatz ist ideal für Inspektionsaufgaben, bei denen Objekte auf Förderbändern oder anderen Transportvorrichtungen bewegt werden. Der zweite Ansatz eignet sich dagegen für die Fernerkundung, bei der die Kamera in einem Flugzeug oder Satelliten über die Erde hinwegbewegt wird. Hyperspektrale Kameras wurden in den letzten Jahrzehnten hauptsächlich in diesem Bereich eingesetzt, da mit ihnen wichtige Information über die geologische Zusammensetzung des Bodens oder über die Vegetation gewonnen werden können.



Abbildung 2.7 Hyperspektrales Messprinzip nach der Pushbroom-Methode. Durch die Beugungsoptik wird das Licht aufgefächert, der Sensor kann somit das Bildsignal einer Zeile räumlich und spektral aufzeichnen.

Neben den drei vorgestellten Ansätzen zur hyperspektralen Bildgewinnung existieren noch weitere Mischformen. Diese beinhalten häufig Lichtleiter und optische Multiplexer, um so spektrale oder örtliche Bereiche der Aufnahme einzugrenzen. Sie sollen hier nicht weiter erläutert werden.

2.3.2 Sensormodell

Das Abbildungsverhalten eines Kamerasystems lässt sich durch die Übertragungsfunktion und durch Angaben über die Auflösung und das Rauschverhalten charakterisieren.

2.3.2.1 Übertragungsfunktion

Die Übertragungsfunktion eines Aufnahmesystems spiegelt den Zusammenhang zwischen dem betrachteten Objekt und dem entstehenden Bild wider. In der Regel wird dies als lineares System modelliert. Anstelle der Übertragungsfunktion (*modulation transfer function*) wird häufig auch die Impulsantwort (*point spread function*) zur Beschreibung herangezogen. Schowengerd hat verschiedene Möglichkeiten untersucht, um die Übertragungsfunktion eines hyperspektralen Aufnahmesystems zu schätzen [141].

2.3.2.2 Auflösung

Die Auflösung eines Sensors gibt Aufschluss über die Information, welche das Bild darstellen kann. Sie lässt sich in die örtliche oder räumliche, die zeitliche und die spektrale Auflösung unterteilen.

Mit der **räumlichen Auflösung** wird angegeben, wie viele Pixel pro Flächeneinheit verwendet werden. Dieser Wert ist über das Abtasttheorem mit der größten örtlichen Frequenz verknüpft, welche das Bildsignal fehlerfrei darstellen kann [79]. Über die Übertragungsfunktion kann hieraus auch bestimmt werden, welche Region der beobachteten Szene einem Bildpunkt entspricht. Häufig wird daher auch die Kantenlänge eines Pixels in der Szene als räumliche Auflösung angegeben. Typische Werte reichen hierfür von 0,30 mm in Inspektionsanlagen bis zu 30 m in der Fernerkundung. In der Fernerkundung wird der Wert auch als *ground sample distance* bezeichnet.

Die **zeitliche Auflösung** eines Kamerasystems wird durch die Bildwiederholrate angegeben. Bewegen sich Szene und Kamera relativ zueinander, wie beispielsweise beim Einsatz von Zeilenscankameras über Förderbändern, so ist die zeitliche Auflösung direkt mit der räumlichen Auflösung verknüpft. Die zeitliche Auflösung wird unter anderem durch die Auslesegeschwindigkeit des Sensors und durch die Integrationszeit limitiert. Für Aufnahmen im Infrarotbereich sind wegen der geringeren Quanteneffizienz der Sensoren üblicherweise längere Belichtungszeiten notwendig, wodurch die Bildwiederholrate sinkt. Beim Einsatz hyperspektraler Zeilenscankameras nach dem Pushbroom-Prinzip hängt die Auslesezeit zusätzlich von der Anzahl an spektralen Kanälen ab. Während für RGB-Zeilenscankameras Bildwiederholraten von bis zu einigen kHz erreicht werden, liegen diese bei hyperspektralen Kameras im Infrarotbereich nur bei ca. 100 Hz.

Die Anzahl spektraler Kanäle im Verhältnis zur Breite des Wellenlängenbereichs spiegelt die **spektrale Auflösung** eines Kamerasystems wider. Bei hyperspektralen Kameras sind die spektralen Kanäle meist äquidistant über den beobachteten Spektralbereich verteilt. Die Angabe der spektralen Auflösung ergibt sich dann als Anzahl der Kanäle pro Spektralbereich und aus der Halbwertsbreite (*full width half maximum*, FWHM-Wert) der Filterfunktionen der einzelnen Kanäle, welche sich häu-

fig auch überlappen. Je höher die spektrale Auflösung eines Kamerasystems ist, desto mehr Information über die materielle Zusammensetzung eines beobachteten Objekts kann gewonnen werden. Hyperspektrale Kameras im Nahinfrarotbereich bestehen typischer Weise aus 150 bis 250 Kanälen mit einer Halbwertsbreite von ca. 6 nm.

Die Auflösung einer hyperspektralen Aufnahme ist nicht nur von der Kamera, sondern vom gesamten Kamerasystem, bestehend aus mehreren optischen Komponenten, sowie dessen Geometrie abhängig. In dieser Arbeit wird jedoch angenommen, dass die Auflösungsbegrenzung hauptsächlich durch die Eigenschaften der Kamera hervorgerufen werden.

2.3.2.3 Bildrauschen

Neben der Auflösung beeinträchtigt das Bildrauschen die Qualität einer Bildaufnahme. Es lässt sich anhand seiner stochastischen Eigenschaften und seiner Ursache einteilen.

Zunächst ist die Bildentstehung von der Anzahl an Photonen, die während der Belichtungszeit auf die photosensitive Fläche des Kamerachips treffen, abhängig. Die Anzahl der Photonen ist diskret und Schwankungen unterworfen. Diese Schwankungen und Abweichungen vom mittleren Wert werden als Photonenrauschen bezeichnet. Es lässt sich mithilfe der Poisson-Verteilung modellieren (vgl. Abschnitt 3.1.3). Treffen bei einer Aufnahme nur sehr wenige Photonen auf ein Pixel, so ist das Poisson-Rauschen hoch und muss in seinen Eigenschaften berücksichtigt werden. Bei höherer Photonenanzahl gleicht die Poisson-Verteilung der Normalverteilung und das Photonenrauschen ist vernachlässigbar oder kann mit anderen normalverteilten Effekten zusammengefasst werden. Für das Signal-Rausch-Verhältnis gilt der Zusammenhang

$$\text{SNR} = \sqrt{N}, \quad (2.4)$$

wobei N die Anzahl der aufgetroffenen Photonen darstellt [79]. Um ein hohes SNR zu erhalten, muss diese Anzahl möglichst groß werden. Hierfür kann entweder die Belichtungsdauer erhöht, die Beleuchtung verstärkt oder der Durchlassbereich eines vorgeschalteten optischen Filters vergrößert werden.

In einem Kamerachip kommt es zudem zu einer Vielzahl elektrischer Auslese- und Verstärkungsvorgänge, welche ebenfalls Rauschprozessen ausgesetzt sind. Dieses Rauschen lässt sich durch Gauß'sches Rauschen beschreiben und in einen Wert zusammenfassen [70]. Vor allem die Verstärkung des Sensors beeinflusst das Rauschen, weshalb diese möglichst gering gehalten werden sollte. Dies kann durch dieselben Ansätze wie beim Photonenrauschen geschehen. Zuletzt kommt es durch die Diskretisierung zu Quantisierungsrauschen, welches als gleichverteilt angenommen werden kann [129].

Für die Bestimmung der verschiedenen Rauscheinflüsse kann der EMVA-1288-Standard zur Charakterisierung von Bildsensoren und Kameras herangezogen werden [42].

Neben den erwähnten Rauschprozessen wird das Bildsignal auch durch Defekte und Unregelmäßigkeiten des Sensors beeinflusst. Einige dieser systematischen Fehler können im Nachhinein entfernt werden, wie beispielsweise Abweichungen im Dunkelstrom durch Subtraktion eines Dunkelbildes (vgl. Abschnitt 5.2.5)

2.3.3 Einsatz hyperspektraler Kamerasysteme

Hyperspektrale Kamerasysteme fanden ihren ersten Einsatz in der Fernerkundung, wo vorher schon multispektrale Kameras eingesetzt wurden [141]. Hier dienen sie hauptsächlich dazu, die Erdoberfläche zu charakterisieren und Veränderungen – beispielsweise in der Vegetation – festzustellen. Neben der Fernerkundung werden hyperspektrale Kameras auch in Laboren zur Analytik und Überwachung chemischer Prozesse verwendet. Hierbei wird durch die hyperspektralen Kameras Information darüber gewonnen, zu welchem Zeitpunkt und an welchem Ort ein bestimmter Stoff vorkommt. Dies dient zur genauen Charakterisierung chemischer Reaktionen.

Auch in optischen Inspektionssystemen werden hyperspektrale Kameras eingesetzt, allerdings sind ihre Einsatzmöglichkeiten aufgrund der geringen örtlichen und zeitlichen Auflösung beschränkt. Viele der Anwendungen in der Sichtprüfung befinden sich noch in der Forschung und Entwicklung und sind noch nicht im industriellen Einsatz. Die Einsatzgebiete lassen sich in vier Hauptbereiche aufteilen: Landwirtschaft,

Nahrungsmittelindustrie, Bergbau und Recycling. In der Landwirtschaft werden hyperspektrale Systeme beispielsweise zur Detektion von Unkraut oder zur Bestimmung des Reifegrads verwendet [34, 168].

In der Nahrungsmittelindustrie können Hyperspektralkameras zur Detektion von Fremdkörpern in Stoffströmen und zur Qualitätsbewertung eingesetzt werden. So wurde gezeigt, dass z. B. Druckstellen in Obst, welche im sichtbaren Bereich nicht wahrgenommen werden können, durch Infrarotsysteme detektiert werden können [9]. Auch die Qualität und Belastung von Fleisch kann gemessen werden [46]. Bei der Bewertung von Mineralen im Bergbau können hyperspektrale Aufnahmen dazu dienen, abgebautes und gebrochenes Material nach seiner Güte zu bewerten und zu sortieren, um eine wirtschaftlichere Auslastung der nachfolgenden Prozesse zu ermöglichen [134]. Im Recycling-Bereich werden hyperspektrale Kameras für die Klassifikation unterschiedlicher Stoffgruppen im Hausmüll eingesetzt. Mit Aufnahmen im Infrarotbereich können verschiedene Kunststoffe und Additive, wie beispielsweise Flammschutzmittel, detektiert werden [96]. Um die Anforderungen an die Schnelligkeit zu erfüllen, wird hierbei aus speziellen hyperspektralen Kameras nur ein Teil der Kanäle ausgelesen.

Für die Auswertung hyperspektraler Bildaufnahmen werden je nach Anwendung sehr unterschiedliche Methoden verwendet. Viele Methoden der hyperspektralen Datenauswertung stammen aus dem Gebiet der Fernerkundung. Hier spielen die Mustererkennung, Entmischung und Endmemberdetektion sowie die Sensorfusion eine wichtige Rolle. Die Echtzeitfähigkeit ist in Anwendungen der Fernerkundung nicht unbedingt notwendig, da eine Analyse der Daten auch offline stattfinden kann. Anders ist dies beispielsweise in Sortieranlagen, für die Algorithmen benötigt werden, welche eine schnelle Klassifikation ermöglichen.

3 Mathematische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die mathematischen Grundlagen, die für die verschiedenen Aspekte der Klassifikation hyperspektraler Daten, welche in den folgenden Kapiteln behandelt werden, notwendig sind, zusammengefasst.

3.1 Wahrscheinlichkeitstheorie

Zunächst sollen einige Begriffe aus der Wahrscheinlichkeitstheorie eingeführt werden. Die Darstellungen orientieren sich dabei an den Ausführungen in [83, 129].

3.1.1 Zufallsvariable

In einem Zufallsexperiment wird jedem Ereignis ein Wert zugeordnet. Die Zufallsvariable x bezeichnet die Funktion, die jedem Ereignis diesen Wert zuordnet. Der Wert kann dabei ein- oder mehrdimensional sein.

3.1.2 Wahrscheinlichkeitsverteilung

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $F_x(x)$ gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit eine Zufallsvariable x Werte kleiner oder gleich x annimmt:

$$P(x \leq x) = F_x(x). \quad (3.1)$$

Aus dieser Verteilungsfunktion lässt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte ableiten:

$$f_x(x) = \frac{dF_x(x)}{dx}. \quad (3.2)$$

Es gilt

$$f_x(x) \geq 0 \quad \text{und} \quad \int f_x(x) \, dx = 1, \quad (3.3)$$

wobei die Integration über den Träger der Zufallsvariablen x erfolgt. Sofern keine Verwechslungsgefahr besteht, wird häufig auf die Indizierung mit der Zufallsvariablen verzichtet und stattdessen $F(x)$ bzw. $f(x)$ geschrieben.

Setzt sich eine Zufallsgröße aus mehreren eindimensionalen Zufallsvariablen zusammen, so lässt sich eine Verbundwahrscheinlichkeitsdichte definieren. Für den Fall zweier Zufallsvariablen x und y gilt

$$F_{xy}(x, y) = P(x \leq x \cap y \leq y). \quad (3.4)$$

Analog zur eindimensionalen Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich damit die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte durch partielle Ableitung:

$$f_{xy}(x, y) = \frac{\partial^2 F_{xy}(x, y)}{\partial x \partial y}. \quad (3.5)$$

Wird davon ausgegangen, dass die Zufallsvariable y den Wert y annimmt, so erhält man damit die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_{x|y}(x|y) = \frac{f_{xy}(x, y)}{f_y(y)}. \quad (3.6)$$

Daraus lässt sich das Bayes-Theorem

$$f_{x|y}(x|y) = \frac{f_{y|x}(y|x)f_x(x)}{f_y(y)} \quad (3.7)$$

zwischen den bedingten Wahrscheinlichkeitsdichten ableiten.

3.1.2.1 Charakterisierung von Zufallsvariablen

Wahrscheinlichkeitsdichten lassen sich durch die Momente

$$E\{x^m\} = \int x^m f(x) \, dx \quad (3.8)$$

der Ordnung m charakterisieren, wobei der Operator $E\{\cdot\}$ den Erwartungswert

$$E\{g(x)\} = \int g(x) \cdot f(x) dx \quad (3.9)$$

darstellt. Das erste Moment $E\{x\}$ ist der Mittelwert μ_x der Zufallsvariable x . Zusätzlich lassen sich die zentralen Momente

$$E\{(x - E\{x\})^m\} \quad (3.10)$$

definieren, wobei das zweite zentrale Moment als Varianz σ_x^2 bezeichnet und zusammen mit dem Mittelwert häufig zur Beschreibung von Zufallsvariablen herangezogen wird.

Durch sogenannte Verbunddichten lassen sich Statistiken höherer Ordnung beschreiben, welche die Abhängigkeit mehrerer Zufallsvariablen berücksichtigen. Wichtig ist hierbei insbesondere die Kovarianz

$$C_{xy} = E\{(x - \mu_x)(y - \mu_y)\}, \quad (3.11)$$

welche das zweite zentrale Moment der Statistik zweiter Ordnung darstellt. Aus der Kovarianz lässt sich der Korrelationskoeffizient

$$\rho_{xy} = \frac{C_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} \quad (3.12)$$

ableiten, mit dem sich die Korrelation zwischen zwei Zufallsvariablen ausdrücken lässt. Für unkorrelierte Zufallsgrößen nimmt er den Wert 0 an, für starke Korrelation Werte nahe 1 oder -1 .

3.1.2.2 Entropie und Transinformation

Zur Charakterisierung des Informationsgehalts diskreter Zufallsvariablen schlug Shannon die Entropie vor, welche sich für kontinuierliche Variablen als

$$H(x) = - \int f(x) \log f(x) dx \quad (3.13)$$

darstellen lässt [147]. Sie gibt beispielsweise an, wie stark die Information einer Quelle komprimiert werden kann.

Außerdem ist die Verbundentropie folgendermaßen definiert:

$$H(x, y) = - \iint f(x, y) \log f(x, y) \, dx \, dy. \quad (3.14)$$

Aus der Entropie zweier Zufallsvariablen und deren Verbundentropie lässt sich die Transinformation $I(x, y)$ (*mutual information*) berechnen. Es gilt:

$$\begin{aligned} I(x, y) &= H(x) + H(y) - H(x, y) \\ &= \iint f(x, y) \log \frac{f(x, y)}{f(x)f(y)} \, dx \, dy. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Für weitere Eigenschaften von Wahrscheinlichkeitsdichten sei auf [83] verwiesen. Auf spezielle Wahrscheinlichkeitsdichten wird im nächsten Abschnitt eingegangen.

3.1.3 Einige Wahrscheinlichkeitsdichten

Definition 3.1: Normalverteilung

Die Normalverteilung beschreibt eine Zufallsvariable mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f(x) = \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (3.16)$$

wobei der Erwartungswert μ und die Varianz σ^2 die Verteilung vollständig beschreiben.

Die Normalverteilung ist in Abbildung 3.1(a) dargestellt. Sie lässt sich gut zur Beschreibung von Messdaten und -fehlern verwenden.

Für vektorielle Zufallsvariablen der Dimension n lässt sich ebenfalls die Normalverteilung definieren:

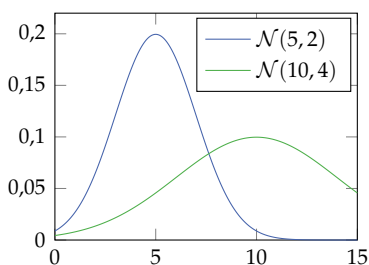
$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\Sigma|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right). \quad (3.17)$$

Hierbei stehen μ für den Mittelwertvektor, Σ für die Kovarianzmatrix und $|\Sigma|$ für deren Determinante.

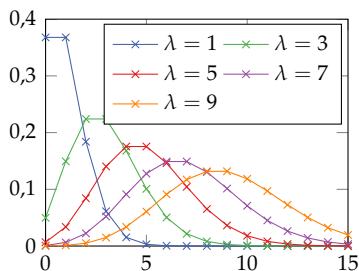
Für den bivariaten Fall lässt sich die Kovarianzmatrix als

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

schreiben, wobei ρ der Korrelationskoeffizient ist und die Korrelation der beiden Zufallsvariablen ausdrückt.



(a) Normalverteilung



(b) Poisson-Verteilung

Abbildung 3.1 Wahrscheinlichkeitsdichten der Normal- und der Poisson-Verteilung.

Definition 3.2: Poisson-Verteilung

Die Poisson-Verteilung ist eine diskrete Wahrscheinlichkeitsdichte, die sich zur Beschreibung von Zufallsprozessen mit konstanter Ereignisrate eignet. Sie besitzt die Dichtefunktion

$$f(k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}, \quad (3.19)$$

wobei k die Anzahl der Ereignisse darstellt. Der Parameter λ entspricht sowohl dem Erwartungswert als auch der Varianz.

Das Auftreten von Lichtquanten auf einem Bildsensor kann beispielsweise mithilfe der Poisson-Verteilung beschrieben werden. Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Poisson-Verteilung für verschieden Werte des Parameters λ ist in Abbildung 3.1(b) gezeigt.

Definition 3.3: Dirichlet-Verteilung

Die Dirichlet-Verteilung ist eine multivariate Wahrscheinlichkeitsverteilung der Dimension n mit der Dichtefunktion

$$f(x_1, \dots, x_{n-1}; \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \frac{1}{B(\alpha)} \prod_{i=1}^n x_i^{\alpha_i - 1}, \quad (3.20)$$

wobei x_i die Elemente einer vektoriellen Zufallsgröße x sind. Mit der multivariaten Betafunktion

$$B(\alpha) = \frac{\prod_{i=1}^n \Gamma(\alpha_i)}{\Gamma(\sum_{i=1}^n \alpha_i)}, \quad \alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_n]^T, \quad (3.21)$$

die sich mit der Gammafunktion $\Gamma(x)$ darstellen lässt, wird eine Normierung durchgeführt.

Es gilt zusätzlich

$$x_i \geq 0 \quad \text{und} \quad x_i \leq 1 \quad \forall i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (3.22)$$

sowie

$$x_n = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} x_i. \quad (3.23)$$

Die Dirichlet-Verteilung eignet sich zur Beschreibung multivariater Zufallsvariablen, deren L_1 -Norm gleich 1 ist, da sich alle Elemente x_i zu eins aufsummieren. Dies wird insbesondere bei der Modellierung von Materialanteilen bei der spektralen Entmischung genutzt (vgl. Abschnitt 4.2.1).

Eine Besonderheit stellt die symmetrische Dirichlet-Verteilung mit $\alpha_i = \alpha$ dar. Hierbei werden alle Elemente gleich gewichtet:

$$f(x_1, \dots, x_{n-1}; \alpha) = \frac{\Gamma(\alpha n)}{\Gamma(\alpha)^n} \prod_{i=1}^n x_i^{\alpha - 1}. \quad (3.24)$$

Der Parameter α beschreibt dabei die Konzentration der Vektorelemente. Für Werte von α größer 1 sind die Werte des Vektors einander sehr

ähnlich, für Werte kleiner 1 gibt es größere Abweichungen zwischen den Werten. Für $\alpha = 1$ entspricht die Verteilung einer Gleichverteilung auf dem $(n - 1)$ -Simplex.

Für den Erwartungswert und die Varianz der Dirichlet-Verteilung gilt

$$E\{x_i\} = \frac{\alpha_i}{\alpha_0} \quad \text{bzw.} \quad \text{Var}\{x_i\} = \frac{\alpha_i(\alpha_0 - \alpha_i)}{\alpha_0^2(\alpha_0 + 1)} \quad (3.25)$$

mit $\alpha_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i$. In Abbildung 3.2 ist die Dichte einer dreidimensionalen Dirichlet-Verteilung für verschiedene Parameter α dargestellt.

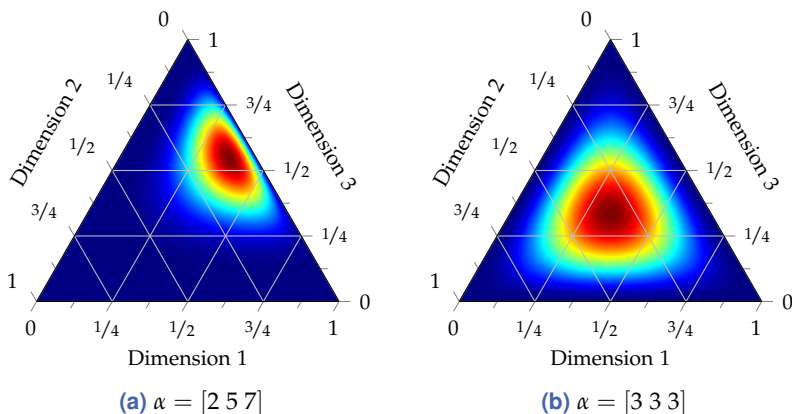


Abbildung 3.2 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer dreidimensionalen Dirichlet-Verteilung für unterschiedliche Parameter α .

3.1.4 Schätzung von Wahrscheinlichkeitsdichten

Im Allgemeinen ist die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Zufallsvariable nicht bekannt, sondern nur eine Stichprobe ihrer Realisierungen. Aus dieser muss die Wahrscheinlichkeitsdichte geschätzt werden. Dazu können entweder Annahmen über eine parametrisierte Verteilung gemacht und dann deren Parameter geschätzt werden, oder aber direkte Beschreibungen der Verteilung ohne Annahmen gewonnen werden.

3.1.4.1 Parameterschätzung

Für die Schätzung der Parameter muss ein Modell der Wahrscheinlichkeitsdichte angenommen werden, anhand dessen ein Schätzer definiert werden kann. Dabei kommen häufig Least-Squares- und Maximum-Likelihood-Schätzer zum Einsatz.

Die Parameter einer Normalverteilung lassen sich durch den Stichprobenmittelwert

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (3.26)$$

und die Stichprobenvarianz

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \hat{\mu})^2 \quad (3.27)$$

berechnen. Der Stichprobenmittelwert ist dabei gleichbedeutend mit dem Maximum-Likelihood-Schätzwert.

3.1.4.2 Histogramme

Eine Möglichkeit, Wahrscheinlichkeitsdichten dagegen ohne Parameterschätzung zu beschreiben, sind Häufigkeitsverteilungen oder Histogramme. Hierfür wird der Träger der Zufallsvariable in Bereiche gleicher Breite Δx diskretisiert und für jeden Bereich die Häufigkeit ermittelt, mit der ein Wert der Stichprobe innerhalb dieses Bereichs liegt. Die einzelnen Bereiche werden auch Bins genannt und ihre Größe dementsprechend Binsgröße. Die Wahl der Binsgröße und -anzahl sollte dabei in Abhängigkeit der Stichprobe durchgeführt werden. Als Maß für die Streuung der Daten kann die Stichprobenvarianz $\hat{\sigma}^2$ dienen. Für normalverteilte Daten erhält man mit der Binbreite

$$\Delta x \approx \frac{3,49 \hat{\sigma}}{\sqrt[3]{n}} \quad (3.28)$$

die Darstellung des Histogramms mit der kleinsten quadratischen Abweichung von der eigentlichen Verteilung [143].

3.1.4.3 Kerndichteschätzverfahren

Anstelle von Histogrammen können auch Parzen-Fenster oder Kernfunktionen zur Schätzung einer Dichte verwendet werden [120, 136]. Für eine Menge an Messwerten $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$ lässt sich die geschätzte Dichte

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (3.29)$$

mit dem Parzen-Fenster $\Phi(\mathbf{x})$ bestimmen. Für das Parzen-Fenster muss außerdem die Bedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 1 \quad (3.30)$$

gelten.

Als Kern-Funktion $\Phi(\mathbf{x})$ werden häufig Gauß-Funktionen verwendet, wobei die Varianz b der Funktion als Parameter zu wählen ist. Hierfür stehen Methoden wie die Minimierung des integrierten quadratischen Fehlers mithilfe der Kreuzvalidierung oder Diffusion zur Verfügung [21, 144]. Kerndichteschätzverfahren haben den Vorteil, dass mit ihnen eine kontinuierliche Dichte geschätzt werden kann. Eine Einteilung in Bins wie bei Histogrammen ist hierbei nicht erforderlich und eine bessere Schätzung der zugrundeliegenden Dichte wird ermöglicht. Abbildung 3.3 zeigt den Vergleich zwischen einer Kerndichteschätzung und einem Histogramm.

3.1.4.4 Schätzung von Entropie und Transinformation

Für die Schätzung der Entropie aus einer Stichprobe $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ stellt sich das Problem, dass die zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion meist unbekannt ist. Eine Möglichkeit besteht darin, die Zufallsvariable zu diskretisieren und die relative Häufigkeit eines diskreten Werts als diskrete Wahrscheinlichkeit für das Ereignis aufzufassen. Aus dem Integral in Gleichung (3.13) wird dadurch eine Summe.

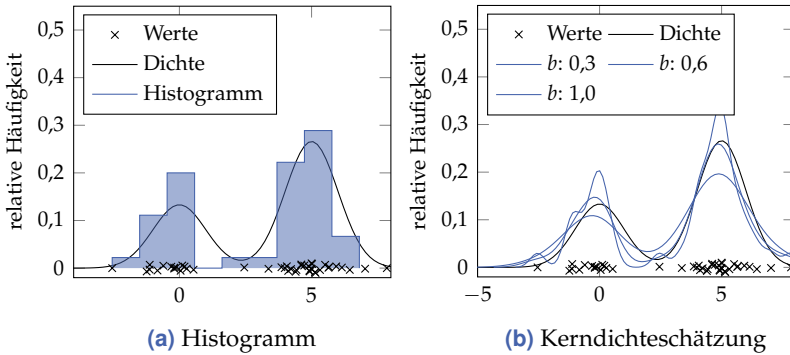


Abbildung 3.3 Schätzung einer Wahrscheinlichkeitsdichte aus Realisierungen der Zufallsvariable mittels eines Histogramms und verschiedener Kerndichteschätzer mit Gauß-Kernen der Varianz b .

Eine andere Möglichkeit bietet die Schätzung mithilfe eines Kerndichteschätzers. Hierfür wird in Gleichung (3.13) die geschätzte Dichte aus (3.29) eingesetzt. Für die anschließende Integration kann genutzt werden, dass sich die Entropie auch als Erwartungswert darstellen lässt:

$$H(x) = E\{-\log f(x)\}. \quad (3.31)$$

Der Maximum-Likelihood-Schätzwert für die Entropie aus einer Stichprobe \mathcal{X} ergibt sich somit zu

$$\hat{H}(x) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Phi(x_i - x_j). \quad (3.32)$$

Für eine ausführliche Betrachtung der Entropieschätzung sei auf die Arbeiten von Kraskov et al. [88] und Schaffernicht et al. [139] verwiesen.

3.1.5 Distanzmaße

Mithilfe von Distanzmaßen lässt sich der Unterschied zwischen verschiedenen Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschreiben. In Bezug auf die Materialklassifikation in Inspektionssystemen dienen diese zur Bewertung der Trennbarkeit verschiedener Stoffklassen.

Die meisten Distanzmaße sind für kontinuierliche Zufallsvariablen mit kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsdichten beschrieben, lassen sich aber auch für den diskreten Fall anpassen.

3.1.5.1 Distanz zwischen kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsdichten

Es existieren verschiedene Distanzmaße, um zwei Wahrscheinlichkeitsdichten $f_1(x)$ und $f_2(x)$ miteinander zu vergleichen, von denen einige im Folgenden definiert werden sollen.

Definition 3.4: Bhattacharyya-Distanz

Die Bhattacharyya-Distanz ist definiert als [15]

$$D_B = -\ln C_B, \quad \text{mit} \quad C_B = \int \sqrt{f_1(x) \cdot f_2(x)} \, dx. \quad (3.33)$$

Der Bhattacharyya-Koeffizient C_B ist dabei ein Maß für die Überlappung zweier Dichten. Mit ihm lässt sich auch die Hellinger-Distanz

$$D_H(f_1, f_2) = \sqrt{1 - C_B} \quad (3.34)$$

definieren [72].

Definition 3.5: Kullback-Leibler-Divergenz

Die Kullback-Leibler-Divergenz ist definiert als

$$D_{KL}(f_1, f_2) = \int \ln \left(\frac{f_1(x)}{f_2(x)} \right) f_1(x) \, dx. \quad (3.35)$$

Man beachte, dass die Kullback-Leibler-Divergenz nicht symmetrisch ist. Wird ein symmetrisches Distanzmaß benötigt, kann die Summe

$$D_{KL}(f_1, f_2) + D_{KL}(f_2, f_1) \quad (3.36)$$

gebildet werden.

Häufig wird angenommen, dass die Daten multivariaten Normalverteilungen $\mathcal{N}_i(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$ entsprechen. Für diesen Fall können die Distanzmaße

als Funktion der Mittelwerte μ_i und der Kovarianzmatrizen Σ_i angegeben werden. Es ergeben sich die folgenden Terme:

$$D_B(\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2) = \frac{1}{8} (\mu_1 - \mu_2)^T \left(\frac{\Sigma_1 + \Sigma_2}{2} \right)^{-1} (\mu_1 - \mu_2) + \frac{1}{2} \ln \left| \frac{\Sigma_1 + \Sigma_2}{2} \right| - \frac{1}{4} \ln |\Sigma_1| |\Sigma_2| \quad (3.37)$$

$$D_{\text{KL}}(\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2) = \frac{1}{2} \left(\text{spur} \left(\Sigma_2^{-1} \Sigma_1 \right) \dots + (\mu_2 - \mu_1)^T \Sigma_2^{-1} (\mu_2 - \mu_1) \dots - k - \ln \left(\frac{|\Sigma_1|}{|\Sigma_2|} \right) \right). \quad (3.38)$$

Wird für die beiden Wahrscheinlichkeitsverteilungen angenommen, dass sie die gleiche Kovarianzmatrix Σ besitzen, so vereinfacht sich die Bhattacharyya-Distanz zu

$$D_B(\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2) = \frac{1}{8} (\mu_1 - \mu_2)^T \Sigma^{-1} (\mu_1 - \mu_2). \quad (3.39)$$

Dies hängt mit der Mahalanobis-Distanz

$$D_M(\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2) = \sqrt{(\mu_1 - \mu_2)^T \left(\frac{\Sigma_1 + \Sigma_2}{2} \right)^{-1} (\mu_1 - \mu_2)} \quad (3.40)$$

zusammen, wie sie in der linearen Diskriminanzanalyse verwendet wird (vgl. Abschnitt 3.2.3.2).

3.1.5.2 Distanz zwischen Histogrammen

Distanzmaße können auch zwischen diskreten Verteilungen bestimmt werden. Durch Histogramme lassen sich diese diskreten Verteilungen schätzen.

Die Bhattacharyya-Distanz lässt sich berechnen als

$$D_B(f_1, f_2) = -\ln \sum_{i=1}^N \sqrt{f_1(x_i) f_2(x_i)}, \quad (3.41)$$

wobei N die Anzahl der diskreten Variablen x_i darstellt.

Ähnlich hierzu können auch die Kullback-Leibler-Divergenz und die Henninger-Distanz für den diskreten Fall angepasst werden.

Neben den wahrscheinlichkeitstheoretischen Distanzmaßen können auch andere Normen verwendet werden, um Histogramme miteinander zu vergleichen. Der einfachste Fall ist hierfür die L_1 -Norm:

$$D_{L_1}(f_1, f_2) = \sum_{i=1}^N |f_1(x_i) - f_2(x_i)|. \quad (3.42)$$

Anstatt alle Beträge der Differenzen der beiden Dichten zu addieren, kann auch die L_2 -Norm verwendet werden:

$$D_{L_2}(f_1, f_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^N (f_1(x_i) - f_2(x_i))^2} = \|\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2\|_2. \quad (3.43)$$

Außerdem ist der Anteil einer Verteilung, der nicht durch die andere überdeckt wird, ein weiteres Maß für die Distanz zweier Histogramme:

$$D_{\cap} = 1 - \sum_{i=1}^N \min \{f_1(x_i), f_2(x_i)\}. \quad (3.44)$$

Die hier beschriebenen Distanzmaße können alle als Bin-by-Bin-Distanzmethoden aufgefasst werden, da für den Vergleich zweier Histogramme nur gleiche Bins miteinander ins Verhältnis gesetzt werden. Im Gegensatz dazu stehen Cross-Bin-Methoden, bei denen mehrere Bins bis hin zum gesamten Histogramm zur Berechnung des Distanzmaßes herangezogen werden. Als Cross-Bin-Distanzmaße können zunächst Distanzmaße auf Grundlage des kumulativen Histogramms bzw. der Verteilungsfunktion bestimmt werden. Auch hier ist die L_1 -Norm ein gängiges Maß für den Vergleich zweier Histogramme. Weitere Distanzmaße sind die Kolmogorov-Smirnov-Distanz sowie quadratische Distanzmaße [137].

Zudem ist die Earth-Mover's-Distance (EMD) ein weiteres Distanzmaß, das die Abstände der Binposition berücksichtigt. Mit der EMD wird der Aufwand bewertet, eine Verteilung in die andere zu überführen. Für die mathematische Definition der EMD sei auf die Ausführungen von Rubner et al. verwiesen [137].

3.1.5.3 Distanz zwischen Klassen

Für die Unterscheidung mehrerer Klassen können Distanzmaße auch zwischen klassenbedingten Wahrscheinlichkeitsdichten $\sqrt{f(\mathbf{x}|\omega_i)}$ bestimmt werden. Hierfür eignet sich beispielsweise die Jeffreys-Matusita-Distanz.

Definition 3.6: Jeffreys-Matusita-Distanz

Die Jeffreys-Matusita-Distanz zwischen zwei klassenbedingten Wahrscheinlichkeitsdichten $f(\mathbf{x}|\omega_i)$ und $f(\mathbf{x}|\omega_j)$ ist definiert als

$$D_{\text{JM},ij} = \int_{\mathbf{x}} \left[\sqrt{f(\mathbf{x}|\omega_i)} - \sqrt{f(\mathbf{x}|\omega_j)} \right]^2 d\mathbf{x}. \quad (3.45)$$

Für die größte Separabilität zwischen den Klassen nimmt die Jeffreys-Matusita-Distanz einen Wert nahe 2 an.

Für Normalverteilungen mit einem Erwartungswert μ und einer Kovarianzmatrix Σ gilt

$$D_{\text{JM},ij} = 2 \left(1 - e^{-D_{\text{B},ij}} \right), \quad (3.46)$$

mit der Bhattacharyya-Distanz $D_{\text{B},ij}$ zwischen den Klassen ω_i und ω_j .

Für den Fall eines N -Klassen-Problems kann die Jeffreys-Matusita-Distanz erweitert werden und man erhält

$$D_{\text{JM}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \sqrt{P_i P_j} D_{\text{JM},ij}, \quad (3.47)$$

wobei P_i die A-priori-Wahrscheinlichkeit der Klasse ω_i darstellt [24].

3.1.5.4 Distanzen zwischen spektralen Signaturen

Neben den Distanzen zwischen Wahrscheinlichkeitsdichten können Distanzmaße auch zwischen einzelnen Variablen gebildet werden. Häufig gibt die Ähnlichkeit eines Spektrums mit einem oder mehreren Prototypenspektren Aufschluss über die materielle Zusammensetzung des

beobachteten Objekts. Zwei Distanzmaße für die Bestimmung der Ähnlichkeit sollen hier vorgestellt werden.

Es seien zwei Vektoren \mathbf{x} und $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^M$ das Signal eines Pixels bzw. das Prototypenspektrum.

Definition 3.7: Spectral Angle Mapper

Der spektrale Winkel zwischen zwei Vektoren lässt sich als

$$d_{\text{SAM}} = \arccos \left(\frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|} \right) \quad (3.48)$$

bestimmen.

Ein Vorteil des spektralen Winkels ist seine Invarianz gegenüber Skalierung, d. h. $d_{\text{SAM}}(a\mathbf{x}, b\mathbf{y}) = d_{\text{SAM}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ [85]. Oft haben die Spektren eines Materials eine ähnliche Form, sind aber unterschiedlich hell, was annäherungsweise einer Skalierung des Signals entspricht. In diesem Fall ist die Anwendung des spektralen Winkels als Distanzmaß naheliegend.

Definition 3.8: Euklidische Distanz

Auch die euklidische Distanz zwischen zwei Vektoren wird zur Bewertung der Ähnlichkeit von Spektren herangezogen:

$$d_{\text{ED}} = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|. \quad (3.49)$$

Im Gegensatz zum spektralen Winkel ist die euklidische Distanz nicht skalierungsinvariant; das Quadrat der Distanz lässt sich jedoch als Summe der quadratischen Distanzen in Unterräumen darstellen.

3.2 Klassifikation

In den folgenden Abschnitten wird auf Grundlagen der Merkmalsgewinnung und Klassifikation vor dem Hintergrund der Materialklassifikation in Inspektionssystemen eingegangen. Für eine tiefer gehende und allgemein gültigere Betrachtung sei auf die Arbeiten von Bishop [18], Duda et al. [40] und Hastie et al. [69] verwiesen, an denen sich Teile dieser Ausführungen orientieren.

3.2.1 Klassifikationsproblem

Bei der Klassifikation soll ein unbekanntes Muster einer Klasse ω_i zugeordnet werden. Als Muster werden dabei alle Messwerte der Messung eines Objekts bezeichnet. Aus diesem Muster werden Merkmale extrahiert und basierend auf diesen eine Klassifikation durchgeführt. Als Ergebnis erhält man dann eine Zuordnung zu einer Klasse. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 3.4 dargestellt.

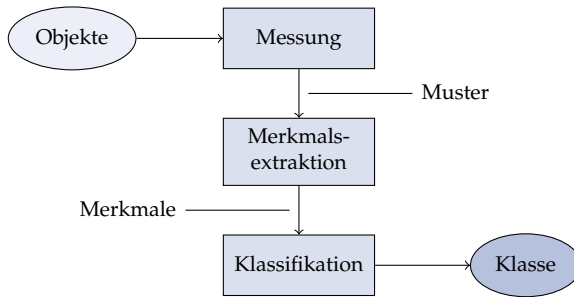


Abbildung 3.4 Ablauf einer Klassifikation.

Im Folgenden soll zunächst auf die Merkmale genauer eingegangen werden, bevor anschließend verschiedene Klassifikationsansätze vorgestellt werden.

3.2.2 Merkmale

Durch die Merkmalsextraktion werden eine Messung und die entsprechenden Messwerte in den Merkmalsraum transformiert. Jedem Muster wird dabei ein Merkmalsvektor $\mathbf{m} = [m_1 \ m_2 \ \dots \ m_k]^T$ mit k Merkmalen zugeordnet. In optischen Inspektionssystemen kann ein Merkmalsvektor beispielsweise aus den Signalwerten der Kanäle einer multispektralen Kamera bestehen.

An die Merkmalsvektoren werden einige Forderungen gestellt. Der Merkmalsvektor sollte möglichst gut die charakteristischen Eigenschaften eines Musters wiedergeben, um eine bestmögliche Unterscheidung zwischen den Mustern und eine Zuordnung zu den Klassen zu ermögli-

chen. Dabei sollte die Varianz innerhalb einer Klasse möglichst klein, der Unterschied zwischen Klassen allerdings möglichst groß sein.

Neben der Unterscheidung ist auch die Generalisierung einer Klassifikation von den Merkmalen abhängig. Hierfür müssen Merkmale möglichst invariant gegenüber Transformationen und robust gegenüber unterschiedlichsten Einflüssen sein. Für die spätere Klassifikation und den damit verbundenen Implementierungsaufwand sind außerdem ein Merkmalsvektor möglichst kleiner Dimension sowie Merkmale mit geringer Abhängigkeit wünschenswert. Zudem ist eine Interpretierbarkeit der Merkmale beim Entwurf und der Bewertung eines Klassifikators von Vorteil [40].

Um einige dieser Eigenschaften zu erfüllen, können Merkmale normalisiert und damit unabhängig von äußeren Einflüssen gemacht werden. Daneben kann bereits bei der Auswahl und Extraktion der Merkmale auf die Invarianz gegenüber Transformationen geachtet werden [142].

Für viele Anwendungen ist es hilfreich, die Merkmalsvektoren in einen anderen Raum zu transformieren oder die Merkmalsanzahl zu reduzieren. Dies ist unter anderem mit der Hauptkomponentenanalyse (*principal component analysis*, PCA) möglich. Durch die Hauptkomponentenanalyse werden durch Projektion auf einen k' -dimensionalen Unterraum Merkmale erzeugt, welche unkorreliert sind und eine beste lineare Approximation der ursprünglichen Daten bezüglich eines quadratischen Fehlers besitzen [14].

Die Hauptkomponentenanalyse hat den Nachteil, dass bei der Transformation die Klassenzugehörigkeit nicht berücksichtigt wird. Die Klassentrennbarkeit kann daher unter Umständen durch die Transformation verloren gehen. Darüber hinaus besitzen die transformierten Merkmale im Allgemeinen keine interpretierbare Bedeutung mehr.

3.2.2.1 Merkmalsselektion

Das Ziel der Merkmalsselektion ist es, aus einer Menge an k Merkmalen eine Teilmenge auszuwählen, welche trotz der geringeren Dimension eine gute Klassifikation ermöglicht. Durch die Reduktion der Merkmale auf die Teilmenge reduzieren sich der Rechenaufwand und die Komplexität des Klassifikationsproblems. Spiegeln die Merkmale die spektralen Kanä-

le einer multispektralen Kamera wider, so bedeutet eine Reduktion der Merkmalsanzahl beispielsweise eine Realisierung mit weniger optischen Kanälen. Für eine gute Klassifikation müssen die Merkmale gefunden werden, welche einerseits ähnliche Werte für Objekte innerhalb einer Kategorie annehmen, sich andererseits aber für Objekte verschiedener Klassen stark unterscheiden [40].

Die Gesamtmenge aller möglichen Teilmengen an Merkmalen entspricht der Potenzmenge. Um diese vollständig zu durchsuchen und die Klassentrennbarkeit zu bewerten, müssen 2^k Teilmengen verglichen werden. Dies ist häufig zu aufwendig. Deshalb kommen neben der vollständigen Suche auch Heuristiken wie beispielsweise die sequentielle Suche zum Einsatz. Hierbei wird zunächst das Merkmal mit der besten Klassentrennbarkeit ausgewählt und anschließend in jedem Schritt das Merkmal hinzugefügt, welches die Klassentrennbarkeit am stärksten erhöht. Dieser Ansatz ist ein Greedy-Algorithmus und auch als *forward feature selection* bekannt. Der Ansatz kann auch umgekehrt und in jedem Schritt ein Merkmal entfernt werden. Man spricht dann von *backward feature elimination*. Beide Verfahren können weiter angepasst werden, sodass beispielsweise bereits hinzugefügte Merkmale wieder entfernt werden können [128].

Für die Bewertung der Merkmale und ihrer Klassentrennbarkeit werden zwei grundsätzliche Ansätze unterschieden: der Filteransatz und der Wrapper-Ansatz, die im Folgenden beschrieben werden.

Filteransatz

Der Ablauf einer Merkmalsselektion mithilfe des Filteransatzes ist in Abbildung 3.5 zu sehen. Hierbei werden die Merkmale oder eine Auswahl ohne Verwendung eines Klassifikators direkt bewertet. Es wird also eine Untermenge der Merkmale herausgefiltert, worauf der Name der Methode basiert. Die Bewertung kann anhand von Distanzen zwischen den klassenbedingten Wahrscheinlichkeitsdichten geschehen (vgl. Abschnitt 3.1.5.1). Hierfür eignet sich beispielsweise die Bhattacharyya-Distanz.

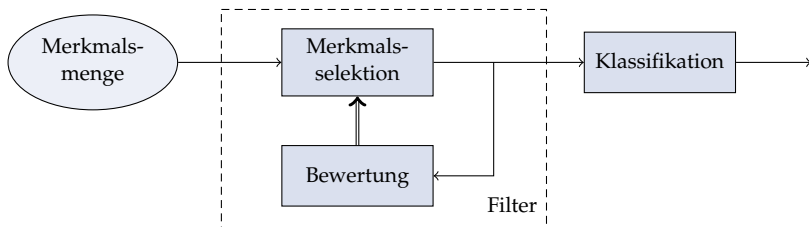


Abbildung 3.5 Merkmalsauswahl mit dem Filteransatz.

Aus dem Bereich der Informationstheorie gibt es einige weitere Maße, mit denen eine Merkmalsselektion bewertet und durchgeführt werden kann. Diese berücksichtigen z. B. den Informationsgehalt, der durch ein Merkmal repräsentiert wird. Außerdem wird in einigen Ansätzen die Transinformation zwischen den Merkmalen und der Klassenzugehörigkeit genutzt. Im Folgenden sollen drei Ansätze gemäß den Ausführungen von Peng et al. vorgestellt werden [123].

Das Prinzip der maximalen Abhängigkeit fordert, dass Merkmale und Klassenzugehörigkeit möglichst stark statistisch voneinander abhängen. Dazu wird die Transinformation I der ausgewählten Merkmale und der Klassenzugehörigkeit maximiert.

Es sei \mathcal{S} die Menge der ausgewählten Merkmale x_i und ω die Klassenzugehörigkeit. Es gilt dann, die Transinformation

$$D_{\text{dep}} = I(\mathcal{S}; \omega) = I(\{x_i, i = 1, \dots, m\}; \omega) \quad (3.50)$$

zu maximieren.

Die Auswahl an Merkmalen kann sukzessiv durchgeführt werden. Ist eine Menge \mathcal{S}_{m-1} mit $m - 1$ Merkmalen bereits gefunden, so wählt man als nächstes Merkmal jenes aus, welches zur größten Transinformation $I(\mathcal{S}_m; c) = I(\{\mathcal{S}_{m-1}, x_i\}; \omega)$ führt. Allerdings müssen hierfür die mehrdimensionalen Dichten $f(x_1, \dots, x_m)$ und $f(x_1, \dots, x_m, \omega)$ geschätzt werden, was mit steigender Dimensionalität des Merkmalsraums schwieriger wird.

Um auf die Schätzung höherdimensionaler Dichten zu verzichten, wurde vorgeschlagen, nur die paarweise Transinformation zu berücksichtigen. Hierdurch entsteht der Ansatz, Merkmale mit maximaler Relevanz

auszuwählen. Als Relevanz wird die mittlere Transinformation zwischen einem einzelnen Merkmal und der Klassenzugehörigkeit definiert. Es muss daher

$$D_{\text{rel}} = \frac{1}{|\mathcal{S}|} \sum_{x_i \in \mathcal{S}} I(x_i; \omega) \quad (3.51)$$

maximiert werden. Dieser Ansatz birgt den Nachteil, dass die Abhängigkeit zwischen den einzelnen Merkmalen nicht berücksichtigt wird und daher sehr hoch sein kann. Dies kann sich z. B. dadurch äußern, dass von zwei abhängigen Merkmalen eines entfernt werden kann, ohne die Klassifikationsgüte oder den Informationsgehalt zu beeinflussen. Da im Allgemeinen Merkmalsräume möglichst niedriger Dimension gesucht sind, ist das Prinzip der maximalen Relevanz nicht optimal.

Durch den Ansatz der minimalen Redundanz und maximalen Relevanz (mRMR) wird das zuvor beschriebene Gütemaß um die Redundanz erweitert. Die Redundanz spiegelt wider, wie stark die Merkmale paarweise voneinander abhängen. Sie berechnet sich dabei als die mittlere paarweise Transinformation zwischen zwei Merkmalen:

$$D_{\text{red}} = \frac{1}{|\mathcal{S}|^2} \sum_{x_i, x_j \in \mathcal{S}} I(x_i; x_j). \quad (3.52)$$

Es soll nun gleichzeitig die Relevanz maximiert und die Redundanz minimiert werden, was durch Bildung der Differenz der beiden Ausdrücke erreicht wird. Gesucht ist also diejenige Menge \mathcal{S} an Merkmalen, welche den Ausdruck

$$D_{\text{mRMR}} = \frac{1}{|\mathcal{S}|} \sum_{x_i \in \mathcal{S}} I(x_i; \omega) - \frac{1}{|\mathcal{S}|^2} \sum_{x_i, x_j \in \mathcal{S}} I(x_i; x_j) \quad (3.53)$$

maximiert.

Für eine sukzessive Auswahl wird das Merkmal gesucht, welches zu dem größten Zuwachs führt:

$$\arg \max_{x_j \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{S}_{m-1}} \left(I(x_j; \omega) - \frac{1}{m-1} \sum_{x_i \in \mathcal{S}_{m-1}} I(x_j; x_i) \right). \quad (3.54)$$

Die Merkmalsauswahl durch den mRMR-Ansatz kann als Vorauswahl für einen nachfolgenden Wrapper-Ansatz verwendet werden und damit den Rechenaufwand senken.

Für die Auswahl von m Merkmalen x_i und die Klassenzugehörigkeit ω ergibt sich für das mRMR-Gütemaß

$$\begin{aligned} D_{\text{mRMR}} &= D_{\text{rel}} - \alpha D_{\text{red}} \\ &= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m I(x_i, \omega) - \alpha \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m I(x_i, x_j), \end{aligned} \quad (3.55)$$

was sich in einen Ausdruck der Entropien umformen lässt:

$$\begin{aligned} D_{\text{mRMR}} &= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m [H(x_i) - H(x_i|\omega)] \\ &\quad - \alpha \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m [H(x_i) + H(x_j) - H(x_i, x_j)] \\ &= \frac{1-2\alpha}{m} \sum_{i=1}^m H(x_i) - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m H(x_i|\omega) + \frac{\alpha}{m^2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m H(x_i, x_j). \end{aligned} \quad (3.56)$$

Die einzelnen Terme lassen sich wie folgt mithilfe eines Kerndichteschätzers aus einer Stichprobe \mathcal{X} bestimmen (vgl. (3.32)):

$$H(x_i) = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \log \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \Phi(x_{ik} - x_{il}), \quad (3.57)$$

$$H(x_i|\omega) = -\frac{1}{N} \sum_{p=1}^{N_c} \sum_{k \in \mathcal{S}_p} \log \frac{1}{|\mathcal{S}_p|} \sum_{l \in \mathcal{S}_p} \Phi(x_{ik} - x_{il}), \quad (3.58)$$

$$H(x_i, x_j) = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \log \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \Phi(x_{ik} - x_{il}, x_{jk} - x_{jl}). \quad (3.59)$$

Wrapper-Ansatz

Im Gegensatz zum Filteransatz wird beim Wrapper-Ansatz der Klassifikator zur Merkmalsbewertung herangezogen. Als Bewertungsmaß dient hier der Klassifikationsfehler in einem Testdatensatz, der durch Kreuzvalidierung gewonnen werden kann. Der Ablauf einer Merkmalsselektion mit Wrapper-Ansatz ist in Abbildung 3.6 dargestellt.

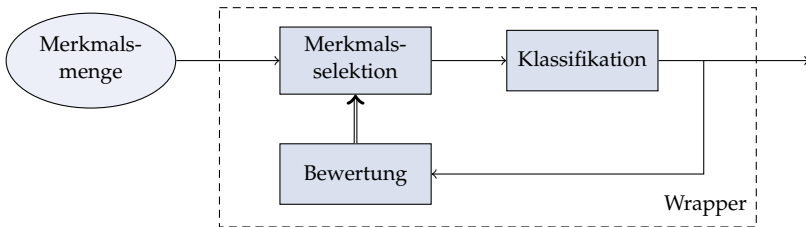


Abbildung 3.6 Merkmalsauswahl mit dem Wrapper-Ansatz.

Der Wrapper-Ansatz liefert in der Regel für einen bestimmten Klassifikator ein besseres Ergebnis als der Filteransatz. Allerdings ist dieses Ergebnis nicht ohne Einschränkungen auf andere Klassifikatoren übertragbar, da dieser bereits zur Auswahl der Merkmale verwendet wurde. Eine bestimmte Teilmenge an Merkmalen kann bei einem Klassifikator gute Ergebnisse liefern, bei einem anderen allerdings zu höheren Fehlklassifikationen führen [63].

Durch das häufige Trainieren des Klassifikators ist der Wrapper-Ansatz für die meisten Klassifikatoren zudem wesentlich rechenaufwendiger als der Filteransatz. Bei beiden Ansätzen muss auf die Generalisierbarkeit der Merkmalsauswahl geachtet werden, um eine Überanpassung durch die Auswahl zu vermeiden.

Neben dem Filter- und Wrapper-Ansatz existieren auch noch Klassifikationsmethoden, in die die Merkmalsauswahl bereits eingebettet ist [63]. Dies sind beispielsweise Entscheidungsbäume, auf die hier nicht näher eingegangen werden soll.

3.2.3 Klassifikatoren

3.2.3.1 Bayes'sche Entscheidungstheorie

Die Bayes'sche Entscheidungstheorie ist die Grundlage für eine Reihe von Klassifikatoren. Hier soll sie kurz zunächst für den Zweiklassenfall erläutert werden.

Eine Messung gehört entweder der Klasse ω_1 oder ω_2 an und soll einer dieser Klassen zugeordnet werden. Die Zugehörigkeit einer Messung zu einer Klasse wird durch die A-posteriori-Dichte $f(\omega_i|x)$ beschrieben.

Mithilfe des Bayes-Theorems lässt sich diese darstellen als

$$f(\omega_i|x) = \frac{f(x|\omega_i)P(\omega_i)}{f(x)}, \quad (3.60)$$

mit

$$f(x) = \sum_{k=1}^2 f(x|\omega_k)P(\omega_k), \quad (3.61)$$

wobei $P(\omega_i)$ die A-priori-Wahrscheinlichkeit der Klasse i darstellt. Der Term $f(x|\omega_i)$ beschreibt die klassenbedingte Wahrscheinlichkeitsdichte (*likelihood*).

Für die Klassifikation wird die Messung derjenigen Klasse zugeordnet, welche die höchste A-posteriori-Dichte aufweist. Daraus ergeben sich Entscheidungsgrenzen und entsprechende Regionen \mathcal{R}_i , in denen eine Messung der Klasse i zugewiesen wird.

Für die Bewertung des Bayes-Klassifizierers ist die Betrachtung der Fehlerwahrscheinlichkeit interessant:

$$f(\text{error}|x) = \min(f(\omega_1|x), f(\omega_2|x)). \quad (3.62)$$

Die Gesamtfehlerwahrscheinlichkeit ergibt sich zu

$$P(\text{error}) = \int f(\text{error}|x)f(x) dx. \quad (3.63)$$

Diese Fehlerwahrscheinlichkeit hängt von den Entscheidungsgrenzen ab, welche bei bekannter A-priori-Verteilung und bekannter Likelihood

optimal gewählt werden können, sodass der Bayes-Klassifizierer die minimal mögliche Fehlerwahrscheinlichkeit liefert.

Eine fehlerhafte Zuordnung einer Messung kann durch eine Kostenfunktion L_{ij} für die verschiedenen Klassen unterschiedlich stark gewichtet werden. Dann wird eine Messung derjenigen Klasse zugeordnet, welche die erwarteten Kosten

$$\sum_{i=1}^2 L_{ij} f(\omega_i | x) \quad (3.64)$$

minimiert.

3.2.3.2 Diskriminanzanalyse

Im Folgenden wird die Klassifikation mithilfe von Diskriminanzanalysen vorgestellt.

Fisher'sche Diskriminanzanalyse

Mit dem Fisher-Kriterium wird die Klassentrennbarkeit bewertet, indem die Streuung innerhalb der Klassen (Intravarianz, \mathbf{S}_W) mit der Streuung zwischen den Klassen (Intervarianz, \mathbf{S}_B) ins Verhältnis gesetzt wird [47]. Diese berechnen sich zu

$$\mathbf{S}_W = \sum_{\mathbf{x} \in C_1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_1)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_2)^T + \sum_{\mathbf{x} \in C_2} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_1)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_2)^T \quad (3.65)$$

und

$$\mathbf{S}_B = (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m})(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m})^T + (\mathbf{m}_2 - \mathbf{m})(\mathbf{m}_2 - \mathbf{m})^T \quad (3.66)$$

mit den Mittelwerten der einzelnen Klassen

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{|C_i|} \sum_{\mathbf{x} \in C_i} \mathbf{x}. \quad (3.67)$$

Das Fisher-Kriterium wird aus der Intra- und Intervarianz durch Projektion auf den Vektor \mathbf{w} gebildet:

$$J(\mathbf{w}) = \frac{|\mathbf{w}^T \mathbf{S}_B \mathbf{w}|}{|\mathbf{w}^T \mathbf{S}_W \mathbf{w}|}. \quad (3.68)$$

Gesucht ist derjenige Vektor \mathbf{w} , welcher die optimale Projektionsrichtung darstellt, in welcher der Quotient $J(\mathbf{w})$ und damit die Trennbarkeit der beiden Klassen am größten werden. Der Betrag der Projektionsrichtung \mathbf{w} ist hierbei nicht von Interesse, sondern nur dessen Richtung. Es gilt

$$\mathbf{w} \propto \mathbf{S}_W^{-1}(\mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1). \quad (3.69)$$

Für eine Klassifikation basierend auf dieser Projektionsrichtung muss noch eine Grenze y_0 gefunden werden, für die eine projizierte Stichprobe $y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$ der Klasse 1 zugeordnet wird, sobald $y(\mathbf{x}) \geq y_0$ gilt.

Lineare Diskriminanzanalyse

Die lineare Diskriminanzanalyse (LDA) lässt sich aus der Bayes'schen Entscheidungstheorie für normalverteilte klassenbedingte Wahrscheinlichkeiten herleiten. Die Entscheidungsfunktion kann in diesem Fall einfacher als Loglikelihood geschrieben werden:

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{x}) &= \ln f(\mathbf{x}|\omega_i) + \ln P(\omega_i) \\ &= -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i) - \frac{n}{2} \ln 2\pi - \frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_i| + \ln P(\omega_i). \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$(3.71)$$

Für die Entscheidungsfindung, d. h. die Bestimmung der Klasse i , für welche die Funktion $g_i(\mathbf{x})$ den größten Wert annimmt, sind die von i unabhängigen Terme nicht von Bedeutung. Daher können diese aus der Gleichung entfernt werden und man erhält

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i) - \frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_i| + \ln P(\omega_i). \quad (3.72)$$

Nimmt man zusätzlich an, dass alle Klassen dieselbe Kovarianz aufweisen, so gilt

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}_i \quad (3.73)$$

und die Entscheidungsfunktion ergibt sich zu

$$g_i(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mu}_i^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_i^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_i + \ln P(\omega_i) \quad (3.74)$$

$$= \mathbf{w}_i^T \mathbf{x} + \mathbf{w}_0. \quad (3.75)$$

Es handelt sich also bei der Entscheidungsfunktion um eine lineare Projektion, wie auch bereits bei der Fischer'schen Diskriminanzanalyse. Für die Klassifikation wird dann der Wert \mathbf{x} der Klasse i zugeordnet, für die $g_i(\mathbf{x})$ maximal ist.

An der Entscheidungsgrenze haben die Entscheidungsfunktionen zweier Klassen die gleichen Werte. Durch Gleichsetzen ergibt sich

$$\ln \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)} - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) + \mathbf{x}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) = 0 \quad (3.76)$$

als Entscheidungsgrenze, welche im zweidimensionalen Raum einer Trenngerade und verallgemeinert einer Hyperebene entspricht.

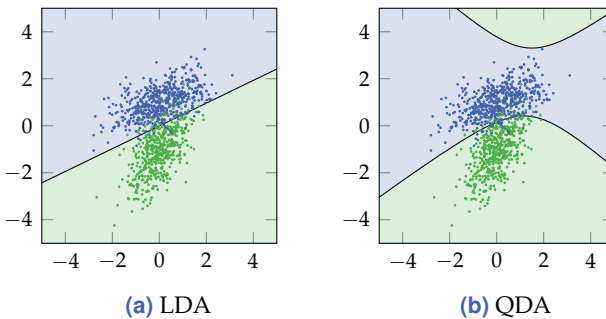


Abbildung 3.7 Vergleich der Klassifikation einer Stichprobe mittels linearer Diskriminanzanalyse (LDA) und quadratischer Diskriminanzanalyse (QDA).

Quadratische Diskriminanzanalyse

Bei der quadratischen Diskriminanzanalyse (QDA) werden im Gegensatz zur LDA verschiedene Kovarianzmatrizen für die einzelnen Klassen ange-

nommen. Die Entscheidungsfunktion entspricht damit Gleichung (3.72) und einer quadratischen Funktion der Form

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{W}_i \mathbf{x} + \mathbf{w}_i^T \mathbf{x} + \mathbf{w}_0. \quad (3.77)$$

Die Entscheidungsgrenzen sind dementsprechend ebenfalls quadratische Funktionen.

Die Einteilung des Merkmalsraums durch die LDA und QDA sind für normalverteilte Beispieldaten in Abbildung 3.7 dargestellt.

3.2.3.3 Support Vector Machine

Support Vector Machines (SVMs) zählen zu der Klasse der parameterfreien Klassifikationsansätze, d. h. sie benötigen keine Information über die zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsdichten. Die Funktionsweise einer SVM soll hier kurz skizziert werden. Die Ausführungen orientieren sich dabei an der Beschreibung von Melgani und Bruzzone [107].

Eine Trainingsmenge besteht aus K N -dimensionalen Merkmalsvektoren $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^N$. Für jeden Merkmalsvektor \mathbf{x}_i gibt es einen entsprechenden Wert $y_i \in \{-1, +1\}$, der die Klassenzugehörigkeit anzeigt.

Zunächst soll angenommen werden, dass die beiden Klassen linear trennbar sind. In diesem Fall kann mit einem Vektor $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^N$ und einem Skalar $b \in \mathbb{R}$ eine Diskriminanzfunktion

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b \quad (3.78)$$

aufgestellt werden, für die

$$y_i \cdot g(\mathbf{x}) = y_i (\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b) > 0, \quad \text{für alle } i = 1, 2, \dots, K \quad (3.79)$$

gilt.

Durch \mathbf{w} und b wird eine Hyperebene aufgestellt. In einer SVM soll der kleinste Abstand eines Elements der Trainingsmenge von der Hyperebene möglichst groß sein. Wenn für alle i

$$y_i (\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}_i + b) \geq 1 \quad (3.80)$$

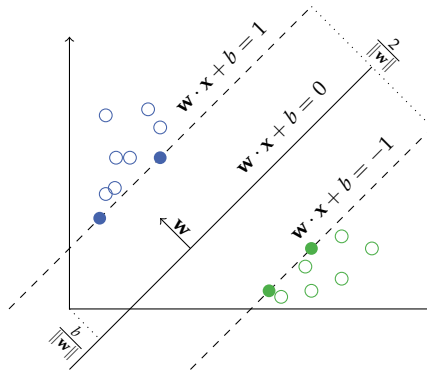


Abbildung 3.8 Support Vector Machine: Trennung der Objekte unterschiedlicher Klassen im zweidimensionalen Merkmalsraum durch eine Gerade.

gilt, so ist der Abstand des nächsten Elements genau $\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$ und der Abstand zwischen den Klassen $\frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$ (siehe Abbildung 3.8).

Um die Hyperebene zu finden, welche den größten Abstand aufweist, muss das folgende quadratische Problem gelöst werden:

$$\text{minimiere: } \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad (3.81)$$

$$\text{NB: } y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) \geq 1, \quad \text{für alle } i = 1, 2, \dots, K. \quad (3.82)$$

Mithilfe von Lagrange-Multiplikatoren lässt sich ein duales Problem formulieren, dessen Lösung die Trainingsdaten identifiziert, welche von der optimalen Trennebene den Abstand $\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$ aufweisen (siehe Abbildung 3.8). Diese werden Support-Vektoren genannt und geben der SVM ihren Namen.

Durch verschiedene Ansätze kann die SVM erweitert werden. Die Einführung einer Schlupfvariablen lässt auch Trainingsdaten zu, welche einen Abstand kleiner $\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$ von der Trennebene besitzen. Hierdurch wird eine Generalisierbarkeit des Problems erreicht und z. B. das Problem verrauschter Daten adressiert. Des Weiteren kann durch Transformation der Daten in einen höherdimensionalen Raum eine bessere Trennbarkeit erreicht werden, was sich mithilfe der Kernel-Methode effizient umsetzt.

zen lässt. Für die Bestimmung der Schlupfvariablen und der Kernel-Parameter kann die Kreuzvalidierung verwendet werden.

Eine besonderer Art von Klassifikatoren sind 1-Klassen-Klassifikatoren, die mit nur einer Klasse trainiert werden. Sie sind besonders geeignet, wenn nur Trainingsdaten einer Klasse zur Verfügung stehen und jegliche andersartige Daten erkannt werden sollen. Auch wenn nur wenige Beispiele der zweiten (Schlecht-)Klasse existieren und diese Gruppe beliebig erweitert werden kann, ist der Einsatz von 1-Klassen-Klassifikatoren sinnvoll. Die Schlechtklasse hat dann nicht unbedingt gemeinsame statistische Eigenschaften, außer dass sie sich von der Gutklasse unterscheidet.

Die SVM kann so erweitert werden, dass sich mit ihr ein solches 1-Klassen-Klassifikationsproblem lösen lässt. Für die Definition sei auf die Ausführungen von Schölkopf et al. verwiesen [140].

3.2.3.4 Nächster-Nachbar-Klassifikator

Ein weiterer Klassifikator, bei dem keine Annahme über die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Daten getroffen werden muss, ist der Nächster-Nachbar-Klassifikator. Dabei wird jede Messung derjenigen Klasse zugeordnet, welcher der nächstliegende Merkmalsvektor aus dem Trainingsdatensatz angehört. Nächster-Nachbar-Klassifikatoren liefern sehr gute Ergebnisse, wenn die Klassen voneinander getrennt sind und die Trainingsdaten die gesamte Varianz der Verteilungen hinreichend gut abdecken. Ist dies nicht der Fall, so nimmt die Fehlklassifikation zu. Dies kann durch Betrachtung von den k nächsten Nachbarn abgemildert werden, wobei die Entscheidung auf die Klasse fällt, der die meisten der k Nachbarn angehören. Man spricht dann von einer k -Nächster-Nachbar-Klassifikation.

Als Abstandsmaß können bei der k -Nächster-Nachbar-Klassifikation verschiedene Distanzmaße zum Einsatz kommen. Für die Klassifikation von hyperspektralen Daten eignen sich beispielsweise Distanzmaße zum Vergleich von Spektren (vgl. Abschnitt 3.7).

Um die Generalisierbarkeit und die Geschwindigkeit einer Nächster-Nachbar-Klassifikation zu erhöhen, gibt es verschiedene Verfahren, die aus den Trainingsdaten eine Auswahl treffen oder zusätzliche Prototypen generieren [50, 159].

3.2.4 N -Klassen-Klassifikation

Oftmals ist statt einer Klassifikation in zwei Klassen eine Unterteilung in $N > 2$ Klassen nötig. Viele Klassifikatoren können allerdings nur zwei Klassen unterscheiden; daher werden mehrere 2-Klassen-Klassifikatoren zu einem N -Klassen-Klassifikator erweitert. Hierfür bestehen verschiedene Ansätze, von denen die beiden gängigsten hier kurz erläutert werden sollen.

Bei der **Jeder-gegen-jeden**-Strategie werden bei N Klassen $\frac{(N-1)N}{2}$ binäre Klassifikatoren mit jeweils zwei Klassen trainiert. Ein Muster wird der Klasse zugeordnet, für die am meisten Klassifikatoren gestimmt haben. Sollten für mehrere Klassen gleich viele Klassifikatoren stimmen, wird für die Klasse mit der höchsten A-priori-Wahrscheinlichkeit entschieden.

Für den **Jeder-gegen-alle**-Ansatz werden nur so viele Klassifikatoren benötigt, wie es Klassen gibt. In diesem Fall also N Klassifikatoren, die jeweils mit allen Trainingsdaten spezifiziert werden. Eine Gruppe wird dabei aus den Daten einer Klasse gebildet, während der zweiten die restlichen Daten zugeteilt werden. Die endgültige Entscheidung fällt dann auf die Klasse, bei deren Klassifikator die Entscheidungsfunktion den höchsten Wert annimmt.

Welche Strategie im Einzelfall besser geeignet ist, hängt von der Zusammensetzung der Klassen und den Trainingsdaten ab und muss daher für jedes Problem gesondert überprüft werden.

3.2.5 Bewertung von Klassifikationsergebnissen

Zur Bewertung von Klassifikatoren wird ein Testdatensatz herangezogen. Das Ergebnis der Klassifikation der Testdaten gibt Aufschluss über die Klassifikationsgüte und die Generalisierbarkeit des Klassifikators. Um mit wenigen Daten eine generalisierbare Aussage treffen zu können, eignet sich die k -fache Kreuzvalidierung. Hierbei wird der Datensatz in k Gruppen unterteilt, wobei jeweils eine als Testdatensatz fungiert und die anderen zum Training des Klassifikators herangezogen werden. Durch dieses Vorgehen ist jedes Muster einmal Teil des Testdatensatzes, was eine Aussage über die Klassifikationsgüte möglich macht. Besteht der

Datensatz aus sehr wenigen Mustern, so kann auch eine *Leave-one-out*-Taktik gewählt werden, bei der jeweils mit einem Muster getestet und mit allen anderen trainiert wird.

Die Klassifikationsergebnisse eines Testdatensatzes werden häufig in einer Konfusionsmatrix aufgetragen. In dieser werden die absoluten Häufigkeiten nach Klassenzugehörigkeit und Klassifikationsergebnis zusammengestellt. Häufig wird mit einer Klassifikation auf eine bestimmte Klassenzugehörigkeit geprüft. Das Testergebnis wird dann als *positiv* bezeichnet, wenn für diese Klasse entschieden wurde und *negativ*, wenn dagegen entschieden wurde. Entsprechend ergibt sich für die Klassifikation von zwei Klassen eine Konfusionsmatrix wie in Tabelle 3.1.

Tabelle 3.1 Konfusionsmatrix.

	Klasse 1	Klasse 2
Test Klasse 1	richtig positiv (r_p)	falsch positiv (f_p)
Test Klasse 2	falsch negativ (f_n)	richtig negativ (r_n)

Ausgehend von den Werten in der Konfusionsmatrix können weitere Kenngrößen definiert werden. Die **Sensitivität** $\frac{r_p}{r_p + f_n}$ gibt an, welcher Anteil an Testdaten der positiven Klasse richtig erkannt wurde. Dagegen zeigt die **Spezifizität** an, wie viele Daten der negativen Klasse auch als solche klassifiziert wurden.

Wenn der Klassifikator nicht nur auf eine Klassenzugehörigkeit testen soll, ist eine Einteilung in positive und negative Klassen nicht sinnvoll. Stattdessen kann die Richtigklassifikationsrate pro Klasse aber auch über alle Klassen bestimmt werden. Diese ergibt sich als

$$\frac{r_p + r_n}{r_p + f_n + r_n + f_p}. \quad (3.83)$$

Ihr gegenüber steht die Falschklassifikationsrate, welche sich mit der Richtigklassifikationsrate zu eins addiert. Allerdings sind diese Raten nur dann aussagekräftig, wenn es sich um bilanzierte Stichproben handelt, d. h. wenn von jeder Klasse gleich viele Muster vorhanden sind.

3.3 Inverse Probleme

3.3.1 Einführung

Als inverses Problem wird im Allgemeinen das Schließen von einer beobachteten Wirkung auf dessen Ursache bezeichnet [133]. Im Falle der Materialklassifikation in optischen Inspektionssystemen entspricht dies dem Rückschluss vom Kamerasignal auf das Material. Für eine Abbildung

$$f : x \rightarrow y \quad \text{bzw.} \quad y = f(x) \quad (3.84)$$

muss aus der Größe y auf die Größe x geschlossen werden. Hierfür kann, wenn möglich, die Umkehrfunktion $f^{-1}(y)$ genutzt werden.

Inverse Probleme lassen sich in gut und schlecht gestellte Probleme unterscheiden. Nach Hadamard zeichnen sich gut gestellte Probleme durch drei Eigenschaften aus [65]:

- für jeden Wert y gibt es einen zugehörigen Wert x (Existenz);
- zu jedem Wert y gibt es nur einen Wert x (Eindeutigkeit);
- die inverse Abbildung f^{-1} ist stetig (Stabilität).

Ist eine dieser Bedingungen nicht erfüllt, so ist das Problem schlecht gestellt.

3.3.2 Lineare Probleme

Handelt es sich bei $f(x)$ um eine lineare Abbildung, so erhält man ein lineares Problem:

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}, \quad (3.85)$$

wobei die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und der Datenvektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ gegeben sind und der Parametervektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ gesucht ist. Es handelt sich hierbei um ein Gleichungssystem mit m Gleichungen und n Unbekannten.

Gilt $n = m$ und besitzt \mathbf{A} vollen Rang, so kann das Problem mithilfe der Inversen \mathbf{A}^{-1} gelöst werden:

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}. \quad (3.86)$$

In anderen Fällen ist das System über- oder unterbestimmt. Im überbestimmten Fall besteht das Gleichungssystem aus mehr Gleichungen als Unbekannten ($m > n$), im unterbestimmten Fall liegen zu wenige oder linear abhängige Gleichungen vor.

3.3.3 Lösung linearer Probleme

Zur Lösung linearer Probleme, deren Inverse \mathbf{A}^{-1} nicht existiert, kann das Quadratmittelproblem angewandt werden. Mit diesem wird die Fehlerquadratsumme

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|^2 \quad (3.87)$$

minimiert. Durch Differentiation ergibt sich die Lösung

$$\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{y}. \quad (3.88)$$

Gilt $\text{rang } \mathbf{A} = n$, d. h. besitzt \mathbf{A} vollen Rang, dann ist $(\mathbf{A}^T\mathbf{A})$ invertierbar und die Lösung ist eindeutig. Dagegen gibt es für $\text{rang } \mathbf{A} < n$ keine eindeutige Lösung und es müssen zusätzliche Bedingungen zur Bestimmung einer Lösung $\hat{\mathbf{x}}$ herangezogen werden.

3.3.4 Regularisierung

Durch Regularisierung werden zusätzliche Bedingungen oder Informationen für die Lösung eines inversen Problems herangezogen. Hierdurch soll für ein schlecht gestelltes Problem ohne eindeutige Lösung diese gefunden werden.

3.3.4.1 Randbedingungen

Durch Hinzufügen von Randbedingungen und der damit verbundenen Eingrenzung des Lösungsraums kann zusätzliche Information zur Lösung des inversen Problems genutzt werden. Dies kann beispielsweise

eine Beschränkung auf positive Zahlen sein. In Abschnitt 4.2.3.1 wird anhand des Beispiels hyperspektraler Bilder genauer auf die Lösung inverser Probleme mittels LS-Schätzer unter Nebenbedingungen eingegangen.

3.3.4.2 Tichonow-Regularisierung

Bei der Tichonow-Regularisierung wird zusätzlich zum Approximationsfehler auch die L_2 -Norm des gewichteten Lösungsvektors minimiert [158].

Es lässt sich folgendes Minimierungsproblem aufstellen:

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|^2 + \delta \|\mathbf{Rx}\|^2 \rightarrow \min, \quad (3.89)$$

wobei die Matrix \mathbf{R} beliebig gewählt werden kann und der Faktor δ den Einfluss der Regularisierung bestimmt. Soll direkt die L_2 -Norm minimiert werden, gilt $\mathbf{R} = \mathbf{I}$. Das Problem in Gleichung (3.89) lässt sich umformen zu

$$\left\| \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\delta} \mathbf{R} \end{bmatrix} \mathbf{x} \right\|^2 \rightarrow \min, \quad (3.90)$$

was sich nach kurzer Rechnung zeigen lässt. In dieser Form gleicht das Problem Gleichung (3.87) und es kann die Lösung (3.88) direkt berechnet werden.

3.3.4.3 Regularisierung mittels L_1 -Norm

Anstelle der L_2 -Norm wie bei der Tichonow-Regularisierung kann auch die L_1 -Norm zur Regularisierung verwendet werden. Man erhält dadurch das Minimierungsproblem

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|^2 + \delta \|\mathbf{Rx}\|_1^2 \rightarrow \min. \quad (3.91)$$

Dies wird beispielsweise bei der Bildrestauration angewandt [138].

3.3.5 Nichtnegative Matrixfaktorisierung

Die nichtnegative Matrixfaktorisierung (NMF) ermöglicht die Aufspaltung einer Matrix \mathbf{M} in das Produkt zweier Matrizen:

$$\mathbf{M} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{H}. \quad (3.92)$$

Dabei müssen alle Einträge der Matrizen \mathbf{W} und \mathbf{H} nichtnegativ sein. Dieses Problem ist verwandt mit den linearen inversen Problemen (vgl. Gleichung (3.85)). Allerdings müssen nun nicht nur die Parameter \mathbf{x} , sondern auch die Abbildung \mathbf{A} bestimmt werden.

Die NMF wurde von Lee und Seung als eine „Zerlegung in Anteile“ vorgestellt, da sich ein Signal nur additiv aus verschiedenen Anteilen zusammensetzen kann [93].

Die Berechnung der Faktorisierung kann auf unterschiedliche Arten erfolgen. Lee und Seung maximieren die Gütefunktion

$$f(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_{i=1}^n \sum_{\mu=1}^m \left(v_{i\mu} \log (\mathbf{WH})_{i\mu} - (\mathbf{WH})_{i\mu} \right), \quad (3.93)$$

wobei die Schreibweise $(\cdot)_{ij}$ für das Matrixelement der i -ten Zeile und j -ten Spalte steht. Die Maximierung erfolgt mit zwei rekursiven Vorschriften für die Berechnung der beiden Matrizen \mathbf{W} und \mathbf{H} , beginnend mit einer zufälligen nichtnegativen Belegung.

Lee und Seung zeigen, dass durch multiplikative Rekursionsvorschriften ein lokales Minimum erreicht wird [94]. Die Rekursionsregeln lauten

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \left(\mathbf{VH}^T \right) \oslash \left(\mathbf{WHH}^T \right), \quad (3.94)$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \left(\mathbf{W}^T \mathbf{V} \right) \oslash \left(\mathbf{W}^T \mathbf{WH} \right), \quad (3.95)$$

wobei die Operatoren \odot und \oslash für die elementweise Multiplikation bzw. Division der Matrizen stehen.

Diese multiplikativen Regeln entsprechen denen einer additiven Rekursion bei einem gewöhnlichen Gradientenabstiegsverfahren, wenn die Schrittweite passend gewählt wird.

3.4 Optimierungsverfahren

Optimierungsverfahren dienen dazu, bestmögliche Parameter \mathbf{x} zu finden, welche eine (meist skalare) Zielfunktion $f(\mathbf{x})$ maximieren oder minimieren. Lässt sich die Zielfunktion nicht analytisch lösen, werden hierfür numerische Ansätze verwendet. An die Parameter \mathbf{x} können dabei verschiedene Nebenbedingungen gestellt werden.

Bei der Lösung des linearen inversen Problems wurde bereits ein Optimierungsverfahren vorgestellt. Hierbei ist die Fehlerquadratsumme die Zielfunktion, welche minimiert werden soll (vgl. Gleichung (3.87)). Das lineare Problem lässt sich daher analytisch lösen.

Ist keine analytische Lösung möglich, können andere Verfahren eingesetzt werden. Viele nutzen hierfür die erste oder zweite Ableitung (vgl. Gradientenabstiegsverfahren, Newton-Verfahren). Allerdings führen diese Verfahren meist nur bei konvexen Problemen zu einer optimalen Lösung; zudem muss der Gradient der Zielfunktion bekannt sein. Ist dieser unbekannt oder eine Berechnung oder Näherung nicht möglich, so kann auf stochastische und heuristische Verfahren wie das *Simulated Annealing* und den Evolutionären Algorithmus zurückgegriffen werden.

3.4.1 Simulated Annealing

Simulated Annealing bezeichnet ein iteratives Optimierungsverfahren, welches eine Zielfunktion $f(\mathbf{x})$ minimiert. Vorgestellt wurde das Verfahren, das der Abkühlung von Metallen nachempfunden ist, erstmals von Kirkpatrick et al. und Cerny [27, 87]. Bei der Abkühlung von Metallen ordnen sich die Atome so an, dass ein energieärmerer Zustand erreicht wird, was zu einer stabilen Kristallstruktur führt. Dieser Zusammenhang wird auf das Optimierungsverfahren übertragen.

Das Grundprinzip des Simulated Annealing ist, dass die Zielfunktion nicht unbedingt in jedem Optimierungsschritt sinken muss, sondern auch zwischenzeitig ansteigen darf. Hierdurch wird vermieden, dass der Algorithmus in lokalen Minima konvergiert.

Der Ablauf des Algorithmus ist folgender: Zunächst wird ein Startkandidat gewählt und eine monoton fallende Temperaturfolge T_n festgelegt. In der Umgebung des aktuellen Parameterwerts \mathbf{x}_k wird ein neuer Wert

\mathbf{x}_{k+1} ermittelt und die Zielfunktion $f(\mathbf{x}_{k+1})$ an dieser neuen Position bestimmt. Gilt $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$, so wurde ein besserer Kandidat ausgewählt und die Auswahl wird beibehalten. Im umgekehrten Fall wird nur mit der Wahrscheinlichkeit

$$f \propto \exp\left(-\frac{f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)}{T_k}\right) \quad (3.96)$$

der Wert verwendet. Ansonsten wird $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k$ gesetzt. Dadurch, dass diese Wahrscheinlichkeit mit steigender Iteration sinkt, konvergiert der Algorithmus.

3.4.2 Evolutionärer Algorithmus

Evolutionäre Algorithmen sind ebenfalls heuristische und stochastische Optimierungsverfahren. Ihr Ansatz orientiert sich an der Evolution von Lebewesen. Im Gegensatz zu anderen Algorithmen steht bei evolutionären Algorithmen in jedem Iterationsschritt eine Menge \mathcal{X} an möglichen Lösungskandidaten zur Verfügung. Diese wird Generation oder auch Population genannt.

Jeder Iterationsschritt unterteilt sich in Selektion, Mutation und Rekombination. Durch die Selektion werden basierend auf den Werten der Zielfunktion Kandidaten für eine spätere Rekombination ausgewählt. Die Mutation bezeichnet die zufällige Änderung der Kandidaten, wodurch der Lösungsraum erschlossen wird. Durch die Rekombination werden gute Lösungen zusammengeführt. Die Mutations- und Rekombinationsrate sowie die Größe der Population sind dabei als Parameter vorzugeben. Für eine detaillierte Beschreibung evolutionärer Algorithmen sei auf [166] verwiesen.

3.4.3 Robuste Optimierung mit evolutionären Algorithmen

Ziel einer robusten Optimierung ist es, nicht nur ein Minimum einer Gütefunktion $f(x)$ zu finden, sondern gleichzeitig ein möglichst robustes (lokales) Minimum auszuwählen. Als Robustheit ist hierbei zu verstehen, wie weit der Funktionswert $f(x)$ vom minimalen Funktionswert abweicht,

wenn der Parametervektor x eine Abweichung Δx vom gefundenen Optimum \hat{x} aufweist.

Die Aufgabenstellung soll an einem eindimensionalen Beispiel verdeutlicht werden (übernommen aus [82]).

Beispiel 3.1: Pareto-Front

Abbildung 3.9 zeigt die Funktion

$$f(x) = 2 \sin\left(10 e^{-0,08x} x\right) e^{-0,25x}, \quad x \leq 0 \leq 10, \quad (3.97)$$

deren Minimum gefunden werden soll.

Insgesamt weist die Funktion im Definitionsbereich sieben lokale Minima auf, welche sich alle in unterschiedlich breiten Tälern befinden. Je breiter ein solches Tal ist, desto robuster ist das entsprechende lokale Minimum, da eine Abweichung weniger Einfluss auf den Funktionswert hat. Allerdings steigt der Funktionswert der lokalen Minima mit der Robustheit, wodurch sich zwei konkurrierende Ziele aufstellen lassen: Zum einen soll der Funktionswert möglichst klein sein, zum anderen die Robustheit der Lösung aber möglichst groß.

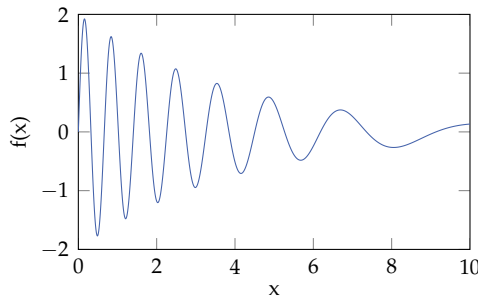


Abbildung 3.9 Eindimensionale Gütefunktion $f(x)$ mit sieben lokalen Minima mit unterschiedlicher Robustheit.

Der Zusammenhang konkurrierender Ziele wird in Abbildung 3.10 verdeutlicht, welche die sogenannte Pareto-Front zeigt, auf der sich alle

optimalen Lösungen befinden. Die Achsen zeigen die beiden Gütemaße Funktionswert und Variabilität, welche beide möglichst klein sein sollen.

Um die Robustheit zu bewerten, kann die Nachbarschaft einer potentiellen Lösung betrachtet werden. Es existieren zwei Ansätze, um aus dieser Nachbarschaft ein Maß für die Robustheit abzuleiten. Zum einen kann zu jedem Optimierungsschritt über die Nachbarschaft gemittelt werden, und nach diesem mittleren Funktionswert optimiert werden. Dieser Ansatz hat den Nachteil, dass sich Funktionswerte an stark steigenden oder fallenden Flanken herausmitteln können und somit keine Sicherheit für eine minimale und stabile Lösung besteht.

Eine andere Möglichkeit stellt die Betrachtung der Varianz der Funktionswerte innerhalb der Nachbarschaft dar, welche möglichst klein sein sollte.

Als Maß für die Varianz sollen zwei Ansätze vorgestellt werden: Es seien eine Menge von Parametern x_i und die zugehörigen Funktionswerte $f(x_i)$ bekannt und \mathcal{R}_i die Menge der Indizes der Nachbarschaftregion des Parameters x_i , dann lässt sich ein Gütemaß

$$f_1^R = \sqrt{\frac{1}{|\mathcal{R}_i|} \sum_{k \in \mathcal{N}_i} \left(\frac{f(x_k) - f(x_i)}{x_k - x_i} \right)^2} \quad (3.98)$$

aufstellen [82]. Für mehrdimensionale Parametervektoren würde das Gütemaß über alle Dimensionen gemittelt.

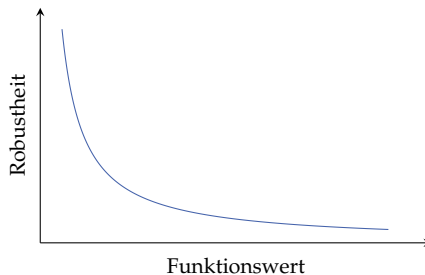


Abbildung 3.10 Pareto-Front für eine Optimierung nach den beiden Gütekriterien Funktionswert und Robustheit.

Ein zweites Maß kann über die Standardabweichung der Funktionswerte und der Parameter in der Nachbarschaft ermittelt werden [82]:

$$f_2^R = \frac{\text{std}\{f(x_k)\}}{\text{std}\{x_k\}}, \quad k \in \mathcal{N}_i. \quad (3.99)$$

Auch hier würde für mehrdimensionale Parametervektoren die Standardabweichung über alle Dimensionen gemittelt.

Mit einem dieser Gütemaße für die Robustheit eines Parametervektors und der eigentlichen Gütefunktion lässt sich nun eine Optimierung durchführen. Evolutionäre Algorithmen eignen sich für dieses Vorgehen besonders gut, da in jedem Schritt eine Population an Lösungsvektoren besteht. Mit diesen kann eine direkte Bewertung der Robustheit durchgeführt werden. Außerdem können die Mutations- und Rekombinationsvorschriften derart angepasst werden, dass eine möglichst gute Pareto-Front gefunden wird.

Das Ergebnis einer Optimierung mit einem evolutionären Algorithmus für das obige Beispiel zeigt Abbildung 3.11. Eine Pareto-Front, welche sich auf die sieben lokalen Minima aufteilt, ist deutlich zu erkennen. Mit dieser Darstellung können nun bequem die beiden Kriterien Güte und Robustheit abgewogen werden.

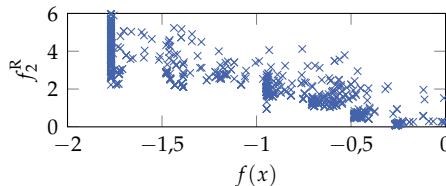


Abbildung 3.11 Pareto-Front für die Optimierung nach Beispiel 3.1.

4 Hyperspektrale Bildverarbeitung

In diesem Kapitel werden der Stand der Technik und Forschung zur Verarbeitung von hyperspektralen Bildern vorgestellt. Zunächst wird auf die Klassifikation hyperspektraler Daten eingegangen, wobei zwischen harten und weichen Klassifikationsansätzen unterschieden wird. Bei der weichen Klassifikation wird der Ansatz zur Überlagerung von Signalanteilen, welche durch Interaktion mit unterschiedlichen Materialien entstehen, vorgestellt. Dieses Konzept der Überlagerung ist unter dem Begriff spektrale Mischung (*spectral mixing*) bekannt. Die Inversion des Problems wird dementsprechend spektrale Entmischung bzw. *spectral unmixing* genannt.

Anschließend werden unterschiedliche Ansätze zur Fusion von hyperspektralen Bildern mit ein- oder mehrkanaligen Bildern beschrieben. Dabei werden insbesondere die Auswirkungen auf die räumliche und spektrale Auflösung betrachtet.

Zuletzt werden in diesem Kapitel Verfahren zur Bandselektion beleuchtet. Diese gliedern sich in Ansätze zur Kanalselektion, Bandpartition, Bandselektion und Filterselektion.

4.1 Klassifikation hyperspektraler Daten

Die Klassifikation hyperspektraler Daten lässt sich auf eine Vielzahl von Arten durchführen. Fast alle gängigen Klassifikatoren, wie Support-Vector-Machines [45, 107], k -Nearest-Neighbors [103], Random-Forest [119] und Diskriminanzanalysen [51] finden hierbei Anwendung (vgl. Abschnitt 3.2). Bei hyperspektralen Daten spielen neben den herkömmlichen, diskriminierenden Klassifikatoren auch Detektions- und Entmi-

schungsalgorithmen eine wichtige Rolle. Diese führen statt einer harten Klassifikation, bei der jedes Pixel eines hyperspektralen Bildes genau einer Klasse zugeordnet wird, eine weiche Klassifikation durch [11]. Hierbei wird berücksichtigt, dass in einem Pixel mehrere Materialien oder Klassen vorkommen können. Detektionsalgorithmen entscheiden lediglich, ob eine bestimmte Materialklasse in einem Pixel vorkommt. Entmischungsalgorithmen versuchen die Mischung rückgängig zu machen und die Mischungsanteile zu bestimmen.

Hyperspektrale Bildaufnahmen zeichnet aus, dass sie sowohl spektrale als auch räumliche Information enthalten. Viele Klassifikationsansätze verzichten allerdings vollständig auf die räumliche Information und bestimmen für jedes Pixel gesondert die Klassenzugehörigkeit und vernachlässigen damit die Nachbarschaftsbeziehungen.

Andere Algorithmen berücksichtigen die Korrelation benachbarter Pixel dadurch, dass sie jeweils auf eine Region des Bildes angewandt werden. So wird beispielsweise angenommen, dass die Anteile an Materialien, aus denen sich das beobachtete Objekt zusammensetzt, in einer Region konstant sind. Somit können in einem hierarchischen Verfahren die Klassen durch Clusterverfahren gefunden und anschließend eine Entmischung mit diesen Klassen durchgeführt werden.

Viele Anwendungen der Klassifikation hyperspektraler Bilder kommen aus dem Bereich der Fernerkundung [55, 141], wo für jedes Pixel Klassenzugehörigkeiten gesucht sind. Das dadurch entstehende Attributbild wird auch *thematic map* genannt, da es eine thematische eingefärbte Landkarte darstellt.

In Inspektionssystemen finden hyperspektrale Bilder bisher nur wenig Einsatz. Daher wurden noch keine speziellen Klassifikationsansätze entwickelt, welche für diese Anwendung besonders gut geeignet sind. Auf diesen Missstand wird in dieser Arbeit eingegangen.

4.1.1 Merkmale

Die Merkmale hyperspektraler Daten können in spektrale und räumliche Merkmale unterteilt werden. Spektrale Merkmale bilden sich aus den verschiedenen Kanälen eines Pixels, während räumliche Merkmale die

Ortsbeziehungen zwischen Pixeln verwenden, allerdings werden diese entweder nur für jeden Kanal oder ein spektrales Merkmal bestimmt.

Merkmale lassen sich aus hyperspektralen Messungen entweder direkt bestimmen oder es kann zunächst eine Korrektur durchgeführt werden. Diese ist beispielsweise notwendig, um die Daten zu normieren oder anderweitig aufzubereiten. Die genaue Vorgehensweise, mit der Messdaten in dieser Arbeit korrigiert wurden, wird in Abschnitt 5.2 beschrieben.

4.1.1.1 Spektrale Merkmale

Als einfachste spektrale Merkmale können die einzelnen Kanäle eines hyperspektralen Pixels verwendet werden. Diese sind allerdings nur bedingt als Merkmale geeignet, da sie sich durch eine hohe Korrelation zwischen benachbarten Kanälen auszeichnen. Korrelierte Merkmale wirken sich beispielsweise auf die Robustheit einer späteren Klassifikation nachteilig aus [36]. Daher wird meist nur ein Teil der Kanäle verwendet, welcher durch Merkmalsselektionsverfahren ausgewählt wird.

Eine weitere Möglichkeit ist die Bestimmung neuer Merkmale durch Merkmalsextraktion. Die Hauptkomponentenanalyse kommt hierbei häufig zum Einsatz [81, 127, 152], wobei nur die Hauptkomponenten mit größter Varianz als Merkmale herangezogen werden. Andere Transformationen wie die *maximum noise fraction* (MNF) [57], *noise adjusted principal components* (NAPC) [95] und *independent component analysis* (ICA) [13] werden ebenfalls eingesetzt.

In Inspektionssystemen kann anstatt einer hyperspektralen Kamera auch eine multispektrale Kamera eingesetzt werden, deren spektrale Eigenschaften problemspezifisch ausgewählt werden. Ein Teil der Merkmalsextraktion kann dadurch in die optische Domäne verschoben werden. Die Merkmale entsprechen dann den Bildwerten in den einzelnen Kanälen. Eine solche Merkmalsextraktion eignet sich besonders gut für Inspektionsaufgaben, da hierdurch die Messung auf die für die Klassifikation notwendigen Merkmale reduziert und somit beschleunigt wird. Die Bestimmung der spektralen Eigenschaften der benötigten Filter für die Extraktion solcher Merkmale ist die Fragestellung der Bandselektion. Auf diese wird in Abschnitt 4.4 ausführlich eingegangen.

Neben der Auswahl einzelner Kanäle, der Transformation und der Merkmalsextraktion durch optische Filter haben sich in der Fernerkundung noch weitere Merkmale etabliert. Diese lassen sich aufgrund verschiedener Berechnungsvorschriften meist aus zwei Kanälen bestimmen. Ein Beispiel hierfür ist der Vegetationsindex NDVI (*normalized difference vegetation index*), der sich als

$$\text{NDVI} = (y_{800\text{nm}} - y_{670\text{nm}}) / (y_{800\text{nm}} + y_{670\text{nm}}) \quad (4.1)$$

berechnet, wobei y_λ für das Signal eines schmalbandigen Kanals um die Wellenlänge λ steht [89]. Der NDVI eignet sich zur Bestimmung des Chlorophyllgehalts von Pflanzen und misst folglich die Vegetation. Die Definition solcher Indizes beruht auf physikalischen Zusammenhängen oder Vorwissen, welches durch Experten eingebracht wird [64].

Da das Signal eines hyperspektralen Bildes ein kontinuierliches Spektrum ist, werden auch Merkmale verwendet, die aus dem Bereich der analytischen Spektroskopie kommen. So können beispielsweise die Ableitung des Spektrums oder die Lagen lokaler Extrema als Merkmale verwendet werden [102].

4.1.1.2 Räumliche Merkmale

Räumliche Merkmale auf dem gesamten hyperspektralen Bild werden nur selten verwendet. Stattdessen werden einzelne Kanäle oder einzelne spektrale Merkmale genutzt, um daraus räumliche Merkmale zu berechnen. Dies können Merkmale zur Beschreibung von Objekten oder auch zur Qualifizierung von Oberflächen sein. Ein Beispiel hierfür ist die Form eines Objekts [33].

In einigen Fällen werden auch spektrale Merkmale und räumliche Merkmale verknüpft. Beispielsweise werden zur Bestimmung der Zartheit von Fleisch als spektrales Merkmal die ersten Hauptkomponenten einer PCA verwendet und zusätzliche Texturmerkmale beigefügt [111]. Auf detaillierte Ausführungen wird an dieser Stelle verzichtet, da in dieser Arbeit räumliche Merkmale nicht betrachtet wurden.

4.1.2 Weiche Klassifikation – Subpixelmethoden

Bei der multi- oder hyperspektralen Bildaufnahme können in dem Sichtfeld eines Pixels mehrere Materialien vorkommen. Die aufgrund der verschiedenen spektralen Signaturen unterschiedlich reflektierten Signale mischen sich und eine Zuordnung des Bildsignals zu nur einer einzelnen Klasse ist nicht mehr sinnvoll. Aus diesem Grund spielen weiche Klassifikatoren oder Subpixelmethoden in der Materialklassifikation eine wichtige Rolle. Hierbei wird versucht, für jedes Pixel herauszufinden, aus welchen Materialien es sich zusammensetzt und welchen Anteil die jeweiligen Materialien besitzen. Bei einem Teil der Subpixelmethoden kann darüber hinaus noch die Auflösung erhöht werden, indem die Anteile innerhalb eines Pixels als nicht konstant angenommen werden [48].

Subpixelmethoden spielen vor allem in der Fernerkundung eine große Rolle, da hier durch den großen Abstand zwischen beobachteten Objekt und dem Bildsensor das Sichtfeld eines Pixels eine Kantenlänge von mehreren Metern haben kann. Daher passiert es häufig, dass unterschiedliche Materialien in dem Sichtfeld des Pixels aufzufinden sind, wie beispielsweise Asphalt, Vegetation oder Hausdächer.

Auch in Inspektionssystemen kommt es zur Mischung von Signalen. Allerdings ist hier seltener das ausgedehnte Sichtfelds eines Pixels das Problem, da der Abstand zwischen Sensor und Objekt geringer ist. Vielmehr ist häufig die hohe Geschwindigkeit der Objekte die Ursache für die Mischung. Während der Integrationszeit des Bildsensors bewegt sich das Objekt weiter und so werden während einer Aufnahme Signale von unterschiedlichen Orten des Objekts und somit auch möglicherweise unterschiedlicher Materialien aufgenommen. Dieser Effekt ist auch als Bewegungsunschärfe bekannt.

Die bekannteste Subpixelmethode ist die spektrale Entmischung, welche in Abschnitt 4.2 vorgestellt wird. Da bei den Subpixelmethoden jedem Pixel mehrere Klassen zugeordnet werden, ist die Entscheidung nicht mehr hart und es wird in diesem Zusammenhang auch von weicher Klassifikation gesprochen [48]. Neben der spektralen Entmischung gibt es weitere Ansätze, wie beispielsweise die Maximum-Likelihood-Klassifikation oder Fuzzy-c-means-Verfahren, auf die an dieser Stelle nicht weiter eingegangen werden soll.

4.2 Spektrale Entmischung

Bei der spektralen Entmischung wird angenommen, dass sich das Reflektanzspektrum eines Pixels aus den Reflektanzspektren der Materialien zusammensetzt, welche im Bereich des Pixels liegen. Daher handelt es sich beim Signal, welches auf den Sensor trifft, um eine Mischung aus verschiedenen Signalen. Die Bestimmung der Anteile, mit denen jedes Material zum Gesamtsignal beiträgt, ist Aufgabe der spektralen Entmischung.

Die spektrale Entmischung wird schon längere Zeit eingesetzt, ist aber immer noch Gegenstand aktueller Forschungsfragen [1, 17, 150]. Mithilfe verschiedener Annahmen können Mischmodelle definiert werden, welche das Problem der Mischung und Entmischung mathematisch beschreiben. Dadurch kann die spektrale Entmischung auch als inverses Problem aufgefasst werden.

4.2.1 Mischmodelle

Es gibt verschiedene Mischmodelle, um die Signalbildung einer Mischung verschiedener Materialien zu beschreiben. Generell wird zwischen linearen und nichtlinearen Mischmodellen unterschieden. Der Unterschied zwischen den verschiedenen Mischmodellen wird in Abbildung 4.1 verdeutlicht und im Folgenden näher erläutert.

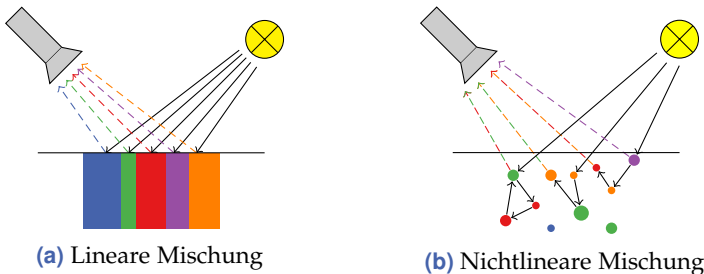


Abbildung 4.1 Schematische Darstellung der spektralen Mischung als lineare und nichtlineare Mischung in Anlehnung an [86].

Sind die Materialien örtlich voneinander getrennt, interagiert ein Lichtquant nur mit einem Material und das lineare Mischmodell ermöglicht eine gute Beschreibung. Sind die verschiedenen Materialien dagegen miteinander vermischt, so kommt es zu vielfachen Streuvorgängen und das eintreffende Licht interagiert mit einer Vielzahl an Materialien, bevor es auf den Sensor trifft [20]. In diesem Fall kann ein lineares Modell oftmals nur als Näherung verwendet werden. Für eine bessere Modellierung kann auf nichtlineare Mischmodelle zurückgegriffen werden [86].

4.2.1.1 Lineares Mischmodell

Das lineare Mischmodell (LMM) wird am häufigsten genutzt, um die Mischung in hyperspektralen Bildsignalen zu beschreiben. Dabei wird davon ausgegangen, dass sich das Signal eines Pixels aus einer Linearkombination verschiedener Signalanteile zusammensetzt. Diese Signalanteile sind materialspezifische Signaturen und werden auch als *Endmember* bezeichnet, welche in Abschnitt 4.2.2 genauer erläutert werden. Mathematisch wird ein M -kanäliges Endmemberspektrum mit einem $M \times 1$ -Vektor \mathbf{x} beschrieben. Verschiedene Materials Signaturen werden in der Endmembermatrix

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_N \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

zusammengefasst, wobei N die Anzahl der Endmember bezeichnet. Das Signal eines Pixels ist der $M \times 1$ -Vektor \mathbf{y} , der sich als Linearkombination mit den Mischkoeffizienten a_i aus den Endmembersignaturen zusammensetzt. Der Mischkoeffizient a_i gibt an, welchen Anteil das Endmember i am Signal hat. Es ergibt sich folglich der lineare Zusammenhang für das Signal eines Pixels

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a}, \quad (4.3)$$

mit

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1N} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{M1} & x_{M2} & \dots & x_{MN} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_M \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}.$$

An die Mischkoeffizienten \mathbf{a} werden zwei Nebenbedingungen gestellt. Zum einen sind für die Koeffizienten nur positive Werte sinnvoll, da auch die Signaturen und reflektierten Spektren nur positive Werte annehmen und die Mischung additiv erfolgt. Zum anderen sollten sich alle Mischkoeffizienten eines Pixels auf eins summieren. Die erste Nebenbedingung wird als Nichtnegativitätsbedingung (*non-negativity constraint*) bezeichnet, die zweite als Normierungsbedingung (*sum-to-one constraint*). Es gilt folglich

$$a_i \geq 0 \quad \text{für } i = 1 \dots N \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^N a_i = 1. \quad (4.4)$$

Die Nebenbedingungen können nur eingehalten werden, wenn das Modell die Signalentstehung perfekt beschreibt. Häufig sind allerdings nicht alle Endmember oder deren Signaturen bekannt. Daher werden verschiedene Verfahren zur Entmischung verwendet, welche nur eine der Nebenbedingungen oder diese nur zu einem gewissen Grad erfüllen. So können beispielsweise auch Mischkoeffizienten außerhalb des Intervalls $[0, 1]$ Sinn ergeben; und zwar dann, wenn das Endmember-Spektrum nur das mittlere Spektrum widerspiegelt und nicht die maximale Intensität eines reinen Materials darstellt [59]. Des Weiteren beschreibt das lineare Mischmodell die Mischvorgänge nur in einer ersten Näherung, weshalb es auf verschiedene Arten ergänzt werden kann. Dies wird in den folgenden Abschnitten näher ausgeführt.

4.2.1.2 Bilineares Mischmodell

Das lineare Mischmodell kann um nichtlineare Mischterme erweitert werden. Ein gängiger Ansatz ist hierbei, die Mischung als Summe einer linearen und einer nichtlinearen Mischung aufzufassen [66]:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N b_{i,j} \mathbf{x}_i \odot \mathbf{x}_j. \quad (4.5)$$

Ein Modell dieser Form wird bilineares Mischmodell genannt. Der Operator \odot steht dabei für die elementweise Multiplikation der Endmember-

spektralen. Das bilineare Mischmodell lässt sich in ein lineares Mischmodell umformen. Dazu werden alle Kombinationen $\mathbf{x}_i \odot \mathbf{x}_j$ als zusätzliche Endmember aufgefasst. Erweitert man die Endmembermatrix um diese neuen Spektren, so erhält man

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{N^*} a_i^* \mathbf{x}_i^* \quad (4.6)$$

mit

$$a_i^* = \begin{cases} a_i \\ b_{k,l} \end{cases} \quad \text{und} \quad \mathbf{x}_i^* = \begin{cases} \mathbf{x}_i & \text{für } 1 \leq i \leq N, \\ \mathbf{x}_k \odot \mathbf{x}_l & \text{für } N < i \leq \frac{1}{2}N(N+1). \end{cases}$$

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, dieses nichtlineare Mischmodell durch Nebenbedingungen weiter einzuschränken. Eine dieser Möglichkeiten ist, die Summe aller Mischkoeffizienten eines Pixels auf eins zu normieren [113]:

$$\sum_{i=1}^N a_i + \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N b_{k,l} = 1. \quad (4.7)$$

Des Weiteren können die linearen Mischkoeffizienten wie beim LMM in der Summe auf eins normiert und die nichtlinearen Mischkoeffizienten davon abhängig gemacht werden. Fan et al. fassen die nichtlinearen Koeffizienten als Produkt der linearen Koeffizienten auf [44]. Somit erhält man

$$\sum_{i=1}^N a_i = 1 \quad \text{und} \quad b_{k,l} = a_k a_l. \quad (4.8)$$

Dieses Modell wird auch Fan-Modell genannt und lässt sich nicht mehr in ein lineares Modell überführen. Es gibt aber Möglichkeiten, dieses Modell mithilfe einer Taylor-Reihenentwicklung zu invertieren [44].

Mit dem Generalisierten Bilinearen Mischmodell (GBM) wird der letzte Ansatz nochmal erweitert [66]:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \gamma_{k,l} a_k a_l \mathbf{x}_k \odot \mathbf{x}_l. \quad (4.9)$$

Für die linearen Mischkoeffizienten a_i gelten dabei die gleichen Nebenbedingungen wie beim LMM. Es kommt allerdings noch ein weiterer Koeffizient $\gamma_{k,l}$ hinzu, welcher den Beitrag der Endmemberkombination beschreibt. Für den Mischkoeffizienten $\gamma_{k,l}$ gilt

$$0 \leq \gamma_{k,l} \leq 1 \quad \forall k \in \{1, \dots, N-1\} \quad \forall l \in \{k+1, \dots, N\}. \quad (4.10)$$

Zusätzlich zu den N linearen Mischkoeffizienten eines Pixels gibt es bei diesem Ansatz nochmals $(N-1)N/2$ Mischkoeffizienten. Das GBM lässt sich auf das LMM für den Fall $\gamma_{i,j} = 0$ zurückführen. Für den umgekehrten Fall $\gamma_{i,j} = 1$ ist es das Modell, welches in (4.8) beschrieben wurde.

Eine Erweiterung des bilinearen Modells um quadratische Terme liefert das polynomische postnichtlineare Mischmodell (*polynomial postnonlinear model*, PPNM) [5]. Hierbei wird das Signal als

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + b(\mathbf{X}\mathbf{a}) \odot (\mathbf{X}\mathbf{a}) \quad (4.11)$$

modelliert, wobei der Parameter b angibt, wie stark der nichtlineare Anteil ist.

4.2.2 Endmember

Es soll nun genauer auf die Endmemberspektren eingegangen werden. Der Begriff Endmember stammt ursprünglich aus dem Gebiet der anorganischen Chemie und dient der Beschreibung von Mischkristallen [116]. Diese setzen sich aus verschiedenen Elementen oder Verbindungen zusammen, wobei häufig ein Element durch ein zweites ersetzt werden kann.

Ein Beispiel für eine Mischreihe ist die Olivingruppe $[\text{MgFe}]_2\text{SiO}_4$ mit den Endgliedern Forsterit Mg_2SiO_4 und Fayalit Fe_2SiO_4 . Es können dabei nahezu beliebige Anteile an Magnesium- und Eisenionen vorkommen. Des Weiteren ist es möglich, dass anstelle von Mg^{2+} auch Ni^{2+} bzw. anstelle von Fe^{2+} auch Mn^{2+} eingebaut werden [116].

Die Mischkristalle, welche nur eines der Metallionen enthalten, werden als Endglieder einer Mischreihe bezeichnet. Im Bereich der spektralen

Entmischung wurde dieser Begriff aufgenommen und steht für die spektralen Signaturen der reinen Materialien. Im Deutschen wird häufig die englische Bezeichnung *Endmember* statt *Endglieder* verwendet. Diese Konvention wird auch in der vorliegenden Arbeit verwendet.

4.2.2.1 Bestimmung der Endmemberanzahl

Für eine gute Entmischung eines hyperspektralen Bildes ist es wichtig, die richtige Anzahl an Endmembers zu verwenden und deren spektrale Signatur möglichst gut zu kennen. Ist die Anzahl an Endmembers unbekannt, gibt es eine Reihe an Ansätzen, um diese zu ermitteln [29, 41, 74, 101]. Diese beruhen zum großen Teil auf der Betrachtung der Varianz des Bildsignals, wie beispielsweise durch die Hauptkomponentenanalyse, oder auf der Bewertung der Signalenergie.

4.2.2.2 Bestimmung der Endmembersignaturen

Neben der Anzahl an Endmembers sind deren spektrale Signaturen der Schlüssel für eine erfolgreiche Entmischung eines hyperspektralen Bildes. Es lassen sich generell zwei verschiedene Arten an Signaturen unterscheiden: Signaturen, die aus einer Bibliothek an Spektren entnommen werden und solche, die aus einem hyperspektralen Bild extrahiert werden. Problematisch ist hierbei allerdings, dass Endmember aus Bibliotheken möglicherweise unter anderen Bedingungen aufgenommen wurden, während die extrahierten Endmember zur gleichen Zeit und mit der gleichen Kamera aufgezeichnet wurden [124]. Eine weit verbreitete Datenbank mit spektralen Signaturen von Mineralen ist die *Spectral Library* des *United States Geological Survey*. Für die zweite Art von Endmembers existieren verschiedene Ansätze, wie diese aus dem Bild gewonnen werden können.

Diese Ansätze zur Endmemberbestimmung lassen sich in zwei Arten unterteilen: Entweder sie identifizieren Pixel des Bildes, die möglichst rein sind und als Endmember genutzt werden können, oder aber sie extrahieren die Endmember aus gemischten Pixeln. Diese Einteilung lässt sich mit den Begriffen *Endmemberselektion* und *Endmemberextraktion*

in Anlehnung an die Merkmalsselektion bzw. -extraktion verdeutlichen (vgl. Abschnitt 3.2.2.1).

Zu bekannten Endmemberselektionsverfahren zählen der *pixel purity index* (PPI) [19], N-FINDR [167] und die *vertex component analysis* (VCA) [112].

Der PPI-Algorithmus versucht die reinsten Pixel zu finden, d. h. diejenigen Pixel, welche am wenigsten gemischt sind. Dazu wird jeder Pixelvektor mehrere hundert Mal auf einen zufälligen Vektor projiziert und diejenigen Pixel bestimmt, deren projizierter Vektor den größten Betrag besitzt. Diese liegen am Rand des Datenvolumens und werden daher als rein angesehen. Um den Rechenaufwand zu reduzieren, kann vor der PPI-Berechnung eine Reduktion der Dimension durch eine NAPC [95] oder MNF [57] durchgeführt werden.

Einen ähnlichen Ansatz verfolgt der VCA-Algorithmus, wobei statt auf zufällige Vektoren auf eine Richtung projiziert wird, welche orthogonal zu den schon bestimmten Endmembern liegt. Hierbei wird der Umstand ausgenutzt, dass die Endmember an den Ecken eines Simplex liegen, wenn die Normierungs- und Nichtnegativitätsbedingungen eingehalten werden.

Der N-FINDR-Ansatz arbeitet ebenfalls auf einem MNF-transformiertem Bild und versucht die Pixel zu bestimmen, welche ein möglichst großes Volumen aufspannen. Es wird mit einer zufälligen Auswahl an Pixeln begonnen, aus der nacheinander Kandidaten mit anderen Pixeln ersetzt werden, bis sich das Volumen nicht mehr erhöht. Der Rechenaufwand ist dabei allerdings höher als beim VCA-Algorithmus.

Als Vertreter der Endmemberextraktionsverfahren seien die *iterative error analysis* (IEA) [114] und die *convex cone analysis* (CCA) [76] genannt. Für einen Vergleich der Verfahren sei auf [124] verwiesen. In dieser Arbeit finden sie jedoch keinen Einsatz.

Neben den Endmemberselektions- und Extraktionsverfahren gibt es auch einige Entmischungsalgorithmen, welche zusätzlich zur Entmischung auch die Endmember bestimmen. Zu diesen zählt beispielsweise ein Bayes'scher Ansatz, bei dem die Endmemberspektren als Parameter aufgefasst und mit den Mischkoeffizienten zusammen geschätzt werden [39]. Auch bei der Nichtnegativen Matrixfaktorisierung werden die Endmember während der Entmischung bestimmt (vgl. Abschnitt 4.2.3.4).

Endmemberselektionsverfahren spielen hierbei eine wichtige Rolle bei der Initialisierung des Algorithmus [60].

4.2.3 Entmischung

Die Entmischung hyperspektraler Daten kann auf sehr unterschiedliche Weise erfolgen. Gemein ist allen, dass sie auf Annahmen über die Mischung beruhen und somit immer ein bestimmtes Mischmodell voraussetzen. Bekannte Vertreter von Entmischungsansätzen sind nach einer Auflistung von Bioucas Dias und Plaza Folgende [16]: Maximum-Likelihood-Schätzer, *Spectral Signature Matching*, *Spectral Angle Mapper*, Unterraumprojektionsverfahren und Least-Squares-Schätzer mit Nebenbedingungen.

In dieser Arbeit werden hauptsächlich Least-Squares-Schätzer und Gradientenabstiegsverfahren eingesetzt, weshalb nur diese hier genauer erläutert werden sollen.

4.2.3.1 Least-Squares-Methoden

Bei der Entmischung mit Least-Squares-Algorithmen wird die Lösung $\hat{\mathbf{a}}$ gesucht, welche den Rekonstruktionsfehler

$$e(\mathbf{a}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2 \quad (4.12)$$

minimiert. Fasst man das Problem der Entmischung als lineares inverses Problem auf (vgl. Abschnitt 3.3.3), so ergibt sich die Lösung

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}} = \arg \min_{\mathbf{a}} e(\mathbf{a}) = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}. \quad (4.13)$$

Das Least-Squares-Problem kann erweitert werden, indem die einzelnen spektralen Kanäle (Variablen) bei der Bestimmung des Schätzfehlers unterschiedlich stark gewichtet werden. Der Schätzfehler lautet dann

$$e(\mathbf{a}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})^T \mathbf{W} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}), \quad (4.14)$$

wobei \mathbf{W} eine Gewichtungsmatrix darstellt, welche z. B. entsprechend des Rauschens gewählt werden kann. Der Algorithmus wird dann auch *weighted least squares* genannt.

Nichtnegativität

Um die Nebenbedingungen des linearen Mischmodells zu berücksichtigen, kann der Least-Squares-Ansatz um diese Bedingungen erweitert werden.

Es wird angenommen, dass die Mischkoeffizienten nur nichtnegative Werte annehmen können: $a_i \geq 0$. Dazu wird mit der Multiplikatorenmethode von Lagrange ein Gütemaß aufgestellt, welches einen zusätzlichen Vektor \mathbf{c} enthält, der die Nichtnegativität darstellt [30].

Mit $\mathbf{c} = [c_1 \ c_2 \ \dots \ c_N]^T$, $c_j > 0 \ \forall \ 1 \leq j \leq N$ und den Lagrange-Multiplikatoren λ ergibt sich dann das Gütemaß

$$J = \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}^T \mathbf{a})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}^T \mathbf{a}) + \lambda (\mathbf{a} - \mathbf{c}), \quad (4.15)$$

wobei für das Minimum $\hat{\mathbf{a}}$

$$\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{c} \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial J}{\partial \mathbf{a}} \right|_{\hat{\mathbf{a}}_{\text{NCLS}}} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}}_{\text{NCLS}} - \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \lambda = 0 \quad (4.16)$$

gelten müssen.

Daraus ergeben sich zwei Gleichungen, mit denen das Problem iterativ gelöst werden kann:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_{\text{NCLS}} &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \lambda \\ &= \hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}} - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \lambda, \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\lambda = \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}}_{\text{NCLS}}). \quad (4.18)$$

Ein schneller Algorithmus wird von Bro und De Jong vorgestellt und hier als NCLS-Algorithmus bezeichnet (*non-negativity constrained least squares*) [22]. Dabei wird die Menge an zu schätzenden Mischkoeffizienten in zwei Teilmengen eingeteilt: Die Menge \mathcal{P} enthält die Indizes der nichtnegativen Mischkoeffizienten, die Menge \mathcal{N} dagegen die Indizes der negativen Mischkoeffizienten. Da die Nebenbedingungen nur für die negativen Mischkoeffizienten erfüllt werden müssen, gilt

$$\lambda_j = 0 \quad j \in \mathcal{P}, \quad (4.19)$$

$$\lambda_j < 0 \quad j \in \mathcal{N}. \quad (4.20)$$

Daraus folgt, dass die positiven Werte des aktuellen $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ denen aus $\hat{\mathbf{a}}_{\text{NCLS}}$ entsprechen (vgl. Gleichung (4.17)).

Normierungsbedingung

Die Bedingung, dass sich alle Mischkoeffizienten eines Pixels zu eins summieren, kann auf unterschiedliche Arten implementiert werden [10, 71]. Ein naheliegender Ansatz ist, die Mischkoeffizienten so zu normieren, dass sie in der Summe eins ergeben. Dies lässt sich durch folgende Vorschrift realisieren:

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{SCLS}} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{1}^T) \hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}} + \mathbf{P}, \quad (4.21)$$

wobei $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ nach (4.13) bestimmt wird, $\mathbf{1} = [1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$ gilt und

$$\mathbf{P} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{1} \left[\mathbf{1}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{1} \right]^{-1} \quad (4.22)$$

die Normierung ermöglicht. Dieses Vorgehen wird SCLS-Algorithmus genannt (*sum-to-one constrained least squares*).

Die beiden Ansätze (NCLS und SCLS), welche jeweils eine der Nebenbedingungen erfüllen, werden von Chang und Heinz verglichen [30]. Es wird dort gezeigt, dass durch die Normierungsbedingung sehr kleine Werte für die Mischkoeffizienten gefunden werden und sich die Lösung auf viele Materialien aufteilt. Eine anschließende Klassifikation, bei der vor allem ein Material detektiert werden soll, wird daher durch diese Verteilung erschwert. Anders ist dies beim NCLS-Algorithmus.

Nichtnegativität und Normierungsbedingung

Es gilt nun einen Algorithmus zu finden, welcher beide Randbedingungen (Nichtnegativität und Normierung) berücksichtigt und dennoch eine Entmischung ermöglicht. Dazu können die beiden vorgestellten Algorithmen NCLS und SCLS verwendet werden. Beide Algorithmen liefern einen Schätzwert für den Mischungsvektor, der jeweils eine der beiden Bedingungen erfüllt. Um die andere Randbedingung zu erfüllen, muss das Ergebnis lediglich in der Summe auf eins normiert bzw. so angepasst werden, dass keine negativen Mischkoeffizienten mehr vorkommen. Dies kann durch Nicht-Berücksichtigung der negativen Koeffizienten und anschließende Normierung erreicht werden. Beide

Ansätze liefern allerdings kein optimales Ergebnis im Sinne des Gütemaßes aus Gleichung (4.12), da die Randbedingungen nicht gleichzeitig, sondern nacheinander erfüllt werden.

Eine andere Methode, die auch in verschiedenen anderen Erweiterungen angewendet wird, ist der FCLS-Algorithmus [71, 171]. Es wird dafür eine zusätzliche Zeile in die Matrix mit den Endmemberspektren eingefügt

$$\mathbf{X}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \frac{\delta}{N_{\text{endm}}} \mathbf{1}^T \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

und zudem der Signalvektor erweitert:

$$\mathbf{y}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \delta \end{bmatrix}. \quad (4.24)$$

Mit dem Parameter δ lässt sich der Einfluss der Nebenbedingung steuern. Diese erweiterte Problemstellung wird nun mit dem NCLS-Algorithmus gelöst. Dadurch wird gleichzeitig sowohl die Nichtnegativitätsbedingung als auch die Normierung berücksichtigt.

Regularisierung

Falls das hyperspektrale Signal weniger Kanäle aufweist als Materialien entmischt werden sollen, ist das Gleichungssystem unterbestimmt. Um trotzdem eine eindeutige Lösung zu finden, muss das Problem reguliert werden; sprich das Gütemaß muss um zusätzliche Bedingungen erweitert werden.

Generell gilt, dass das zu lösende Gleichungssystem unterbestimmt ist, wenn

$$\text{rang } \mathbf{X} = r < N \quad (4.25)$$

gilt. Dann gibt es keine eindeutige Lösung $\hat{\mathbf{a}}$, welche den Schätzfehler $e(\mathbf{a})$ minimiert, sondern einen ganzen Lösungsraum und es lassen sich $N - r$ Einträge von $\hat{\mathbf{a}}$ beliebig bestimmen. Durch die Normierungsbedingung wird dieses Problem um eine Dimension, d. h. die Bestimmung eines Materialanteils, abgeschwächt, dennoch ist es nötig, weitere Regularisierungsansätze zu verwenden.

Ein gängiger Ansatz zur Regularisierung ist, gleichzeitig zum quadratischen Fehler $e(\mathbf{a}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2$ auch die Norm des Lösungsvektors, also der Mischkoeffizienten $\|\mathbf{a}\|^2$, zu minimieren. Ein anderes Vorgehen ist, die Anzahl an Mischkoeffizienten ungleich null zu minimieren. Dadurch wird die Lösung auf wenige Materialien reduziert. Dieser Ansatz ist als dünnbesetzte Entmischung bekannt und besonders hilfreich, wenn aus einer großen Datenbank an Endmemberspektren diejenigen Materialien bestimmt werden sollen, aus denen sich das Signal zusammensetzt [77].

Auf die Zusammensetzung des Mischkoeffizientenvektors kann auch durch die Thichonow-Regularisierung Einfluss genommen werden. Ebenso ist eine Berücksichtigung der räumlichen Anordnung möglich, beispielsweise durch Betrachtung der L_1 -Norm der Differenzen zu Nachbarpixeln [62].

4.2.3.2 Bayes'sche Parameterschätzung

Auch mithilfe der Bayes'schen Statistik kann das Entmischungsproblem gelöst werden. Generell sind diese Lösungsansätze rechenintensiver als die vorherigen, liefern dafür teilweise bessere Ergebnisse. Ein Vorteil der Bayes'schen Entmischung ist, dass auch nichtlineare Mischmodelle invertiert werden können. So können beispielsweise die Mischmodelle aus (4.8) und (4.9) mit hierarchischen Bayes'schen Modellen gelöst werden [66]. Im Folgenden soll das Vorgehen anhand des linearen Mischmodells erläutert werden [38].

Es wird angenommen, dass die Messwerte einer Normalverteilung gehorchen und alle Kanäle die gleiche Varianz σ aufweisen. Daher gilt für die *Likelihood*-Funktion des Messsignals

$$f(\mathbf{y}|\mathbf{a}, \sigma^2) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{M}{2}} \exp\left\{-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (4.26)$$

Für die A-priori-Verteilung der Mischkoeffizienten \mathbf{a} wird die Annahme getroffen, dass die Koeffizienten auf einem Simplex gleichverteilt sind:

$$f(\mathbf{a}) \propto \mathbf{1}_S, \quad (4.27)$$

wobei $\mathbf{1}_S$ die Indikatorfunktion auf dem Simplex ist. Die Normierungsbedingung wird dadurch berücksichtigt, dass nur $N - 1$ Koeffizienten geschätzt werden. Der übrigbleibende Koeffizient kann durch Summation der berechneten Koeffizienten und Subtraktion von 1 ermittelt werden.

Die Varianz des Messrauschens wird mit einer inversen Gamma-Verteilung modelliert. Es gilt

$$f(\sigma^2 | \nu, \gamma) \sim \Gamma^{-1}\left(\frac{\nu}{2}, \frac{\gamma}{2}\right). \quad (4.28)$$

Der Hyperparameter ν wird hierbei auf 2 gesetzt und γ entsprechend der Dichte

$$f(\gamma) \propto \begin{cases} \frac{1}{\gamma} & \text{für } \gamma > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.29)$$

gewählt.

Die zu schätzenden Parameter (Mischkoeffizienten und Varianz des Messrauschens) können in einem Vektor $\boldsymbol{\theta} = [\mathbf{a}, \sigma^2]$ zusammengefasst werden. Für den Parametervektor ergibt sich nun die A-posteriori-Dichte

$$f(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) \propto \int f(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta}) f(\boldsymbol{\theta} | \gamma) f(\gamma) \, d\gamma. \quad (4.30)$$

Wird zusätzlich angenommen, dass \mathbf{a} und σ^2 voneinander statistisch unabhängig sind, ergibt sich

$$f(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) \propto \int f(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta}) f(\mathbf{a}) f(\sigma^2 | \gamma) f(\gamma) \, d\gamma. \quad (4.31)$$

Mit dem Zusammenhang

$$f(\sigma^2) = \int f(\sigma^2 | \nu, \gamma) f(\gamma) \, d\gamma \propto \frac{1}{\sigma^2} \quad (4.32)$$

ergibt sich durch Einsetzen schließlich

$$f(\mathbf{a}, \sigma^2 | \mathbf{y}) \propto \frac{1}{\sigma^2} f(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta}) f(\mathbf{a}). \quad (4.33)$$

Die Schätzung von \mathbf{a} und σ^2 kann mithilfe eines Gibbs-Samplers [26] durchgeführt werden.

Es ergibt sich nach kurzer Rechnung für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f(\mathbf{a}|\sigma^2, \mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{(\mathbf{a} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} (\mathbf{a} - \boldsymbol{\mu})}{2}\right) \mathbf{1}_S(\mathbf{a}), \quad (4.34)$$

wobei

$$\boldsymbol{\Lambda} = \left[\frac{1}{\sigma^2} (\mathbf{X}^* - \mathbf{x}_N \mathbf{1}^T)^T (\mathbf{X}^* - \mathbf{x}_N \mathbf{1}^T) \right]^{-1} \quad (4.35)$$

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\Lambda} \left[\frac{1}{\sigma^2} (\mathbf{X}^* - \mathbf{x}_N \mathbf{1}^T)^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}_N) \right] \quad (4.36)$$

und

$$\mathbf{X}^* = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N-1}\} \quad (4.37)$$

gelten. Die Koeffizienten gehorchen also wiederum einer Normalverteilung, welche auf den Bereich null bis eins begrenzt ist.

Für die Schätzung der Varianz σ^2 wird der Zusammenhang

$$f(\sigma^2|\mathbf{a}^*, \mathbf{y}) \sim \Gamma^{-1}\left(\frac{L}{2}, \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2}{2}\right) \quad (4.38)$$

mit der Inversen Gammaverteilung genutzt.

Um die A-posteriori-Dichte $f(\mathbf{a}^*, \sigma^2|\mathbf{y})$ zu bestimmen, werden nun beginnend mit beliebigen Startwerten für \mathbf{a} und σ^2 abwechselnd Realisierungen für die beiden Zufallsgrößen anhand der Randdichten $f(\mathbf{a}|\sigma^2, \mathbf{y})$ bzw. $f(\sigma^2|\mathbf{a}^*, \mathbf{y})$ bestimmt. Bei jedem Ziehen der Realisierungen wird ein Mischkoeffizient, der durch die Summenbedingung bestimmt wird, zufällig ausgewählt. Anschließend wird aus den Dichten nach einer *Burn-In-Period* ein Schätzwert gewählt. Dieser kann sowohl der Maximum-a-posteriori- als auch der Maximum-Likelihood-Schätzwert sein.

4.2.3.3 Entmischung mit unbekanntem Endmembersignaturen

In vielen Fällen sind die Endmembersignaturen, aus denen sich ein Signal zusammensetzt, nicht bekannt. Die Signaturen müssen in diesen Fällen entweder aus einer Datenbank entnommen oder aus der Aufnahme extrahiert werden. In Abschnitt 4.2.2.2 wurde bereits auf verschiedene Endmemberextraktions- und selektionsansätze eingegangen.

Ein Verfahren, welches eine Auswahl an Endmembers aus einer Datenbank nutzt, ist die stufenweise Entmischung [58]. Hier wird adaptiv für jedes Pixel eine separate Auswahl an Endmembers getroffen. Das Vorgehen basiert auf der ANOVA. Im ersten Schritt wird nur mit jedem Endmember einzeln entmischt und das Endmember ausgewählt, welches den kleinsten Rekonstruktionsfehler liefert. Dies wird fortgeführt und in jedem Schritt ein weiteres Endmember hinzugefügt, welches in Kombination mit den bereits ausgewählten das beste Ergebnis liefert. Sobald mindestens drei Endmembers ausgewählt worden sind, können auch einzelne Endmembers aus der Auswahl entfernt werden. Dieses Vorgehen wird solange wiederholt, bis sich der Rekonstruktionsfehler nicht mehr verringert, wenn Endmembers hinzugefügt oder gestrichen werden.

4.2.3.4 Nichtnegative Matrixfaktorisierung

Eine weitere Möglichkeit, eine Entmischung und gleichzeitige Schätzung der Endmembersignaturen durchzuführen, ist die Anwendung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung (NMF), da deren Problemstellung der des linearen Mischmodells gleicht (vgl. Abschnitt 3.3.5). Eine ausführliche Einführung in die Anwendung von NMF zur spektralen Entmischung findet sich in [121]. Hier soll die Vorgehensweise kurz dargestellt werden.

Für eine M -kanalige Aufnahme mit L Pixeln und der Signalmatrix $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{M \times L}$ sowie einer positiven Anzahl an Endmembers $N < \min\{M, L\}$ sollen die nichtnegativen Matrizen $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ der Endmembersignaturen und $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times L}$ der Mischkoeffizienten gefunden werden, welche die Gütefunktion

$$J_{\text{NMF}} = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{A}\|_{\text{F}}^2 \quad (4.39)$$

minimieren. Dabei steht $\|\cdot\|_F^2$ für die quadrierte Frobeniusnorm:

$$\|\mathbf{U}\|_F^2 = \sum_i \sum_j |u_{ij}|^2. \quad (4.40)$$

Das Gütemaß ist also die Summe aller quadrierten absoluten Rekonstruktionsfehler über alle Einträge der Matrix \mathbf{Y} und entspricht dem *Least-Squares-Kriterium*.

Das Problem hat keine eindeutige Lösung, weshalb die Gütefunktion in Gleichung (4.39) beliebig erweitert werden kann, um weitere Nebenbedingungen einzuführen. So kann beispielsweise die Glattheit (*smoothness*) der zu findenden Endmemberspektren \mathbf{x} oder die Dünnbesetztheit (*sparsity*) der Mischmatrix \mathbf{A} beeinflusst werden [121]. Die Gütefunktion aus Gleichung (3.93) wird hierbei um Terme für die Norm der Matrizen für Endmemberspektren und Mischkoeffizienten erweitert:

$$J = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{A}\|_F^2 + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{X}\|_F^2 + \frac{\beta}{2} \|\mathbf{A}\|_F^2. \quad (4.41)$$

Um diese Gütefunktion zu minimieren, werden die beiden Rekursionsregeln (3.95) und (3.94) erweitert:

$$\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} \odot \left(\mathbf{Y}\mathbf{A}^T - \alpha\mathbf{X} \right) \oslash \left(\mathbf{X}\mathbf{A}\mathbf{A}^T \right), \quad (4.42)$$

$$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} \odot \left(\mathbf{X}^T\mathbf{Y} - \beta\mathbf{A} \right) \oslash \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{A} \right). \quad (4.43)$$

Weitere Anmerkungen zur numerisch stabilen Berechnung finden sich in [121, 171]. Für die Umsetzung des Algorithmus gibt es unterschiedliche Anmerkungen von verschiedenen Autoren. So wurde vorgeschlagen, die beiden Gleichungen (4.42) und (4.43) nicht nacheinander auszuführen, sondern abwechselnd eine Zeile in \mathbf{A} und anschließend die korrespondierende Spalte in \mathbf{X} zu aktualisieren [121]. Außerdem sollte dem Nenner ein kleiner Wert hinzugefügt werden, um numerische Instabilitäten zu vermeiden. Des Weiteren sollten die Matrix \mathbf{Y} vor der Optimierung und die Matrix \mathbf{X} nach jedem Optimierungsschritt spaltenweise normiert werden. Für eine bessere numerische Stabilität sei es außerdem sinnvoll, die Matrixmultiplikationen $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ und $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ zuerst zu berechnen [171].

4.2.4 Bewertung von Entmischungsergebnissen

Die Bewertung von Entmischungsergebnissen zur Evaluation der verschiedenen Ansätze ist keine triviale Aufgabe, da die *Ground Truth*, d. h. die wahren Mischkoeffizienten, in der Regel nicht bekannt sind. Folglich ist der Rekonstruktionsfehler, also die Differenz zwischen dem gemessenen Signal \mathbf{y} und dem rekonstruierten Signal $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{a}$ das einzige Maß, welches direkt aus dem Signal bestimmt werden kann. Der Rekonstruktionsfehler kann pro spektralem Kanal, pro Pixel oder für das gesamte Bild gemittelt werden. Hierfür eignet sich der mittlere quadratische Fehler (MSE) oder der RMSE-Wert, welcher sich als Wurzel aus den mittleren Fehlerquadraten bestimmen lässt. Für den MSE-Wert für das gesamte Bild ergibt sich somit

$$e_{\text{MSE}} = \frac{1}{LM} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^M |y_{ij} - \hat{y}_{ij}|^2, \quad (4.44)$$

wobei L und M die Anzahl der Pixel bzw. der Kanäle sind. Der RMSE-Wert lässt sich als die Wurzel des MSE-Werts bestimmen:

$$e_{\text{RMSE}} = \sqrt{e_{\text{MSE}}} = \sqrt{\frac{1}{LM} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^M |y_{ij} - \hat{y}_{ij}|^2}. \quad (4.45)$$

Analog können die Werte für einzelne Kanäle oder Pixel berechnet werden.

Ein weiteres Maß, welches sich aus dem mittleren Fehlerquadraten bestimmen lässt, ist das Spitzen-Signal-Rausch-Verhältnis (PSNR) [165]. Hier wird der MSE-Wert ins Verhältnis zum Maximalwert des Signals gebracht und anschließend in Dezibel angegeben:

$$e_{\text{PSNR}} = 10 \cdot \log_{10} \left(\frac{\max_{i,j} \{y_{ij}^2\}}{e_{\text{MSE}}} \right). \quad (4.46)$$

Für viele Fälle ist die reine Betrachtung des Rekonstruktionsfehlers noch nicht zufriedenstellend, da dieser auch das Gütemaß vieler Entmischungsalgorithmen ist. Häufig haben verschiedene Ansätze einen gleich

niedrigen Rekonstruktionsfehler, unterscheiden sich aber in den gefundenen Entmischungskoeffizienten stark. Dies ist insbesondere bei der Betrachtung von Algorithmen mit unterschiedlichen Nebenbedingungen der Fall.

Stehen die wahren Mischkoeffizienten zur Verfügung, sei es aus anderen Analyseverfahren oder durch entsprechendes Design des Experiments, so kann der RMSE-Wert auch für die wahren Mischkoeffizienten \mathbf{a} und die geschätzten Koeffizienten $\hat{\mathbf{a}}$ berechnet werden. Dieses Fehlermaß gibt dann direkt Aufschluss darüber, wie gut das Entmischungsergebnis ist und ist daher dem Rekonstruktionsfehler vorzuziehen.

Als zusätzliche Möglichkeit zum Vergleich von Entmischungsansätzen können simulierte Daten verwendet werden. Für die Generierung hyperspektraler Bilder stehen eine Reihe von Ansätzen und fertigen Softwarepaketen zur Verfügung [61, 160]. Die Simulationen haben den Vorteil, dass sowohl die *Ground Truth* bekannt ist, als auch verschiedene Parameter des Signals beliebig modifiziert werden können. Vor allem das Signalrauschen ist hiermit gut modellierbar. Dadurch kann die Leistung der Algorithmen für eine Vielzahl von Signaltypen und Parametern vergleichbar gemacht werden.

4.2.5 Erhöhung der räumlichen Auflösung

Die spektrale Entmischung wurde eingeführt, um Aufnahmen zu beschreiben, bei denen sich im Sichtfeld eines Pixels mehrere Materialien befinden. Die unterschiedlichen Materialien können zum einen als feine Mischung vorkommen oder aber räumlich getrennt nebeneinander angeordnet sein. Als feine Mischung wird hierbei der Fall beschrieben, bei der die einzelnen Bereiche reiner Materialien eine Ausdehnung um Größenordnungen kleiner als die Pixelgröße haben. Sind die Materialien räumlich getrennt, so liegt es nahe, diese Anordnung möglichst genau zu ermitteln. Da für dieses Ziel Ergebnisse nicht nur pro Pixel, sondern auch innerhalb eines Pixels gefunden werden müssen, werden die entsprechenden Methoden als Subpixel-Methoden oder Super-resolution-Ansätze bezeichnet.

Die Zusammenhänge der Kameraauflösung und Mischung der Signale unterschiedlicher Orte werden für hyperspektrale Aufnahmen von

Atkinson beschrieben [11]. Dabei wird vor allem aus Sicht der Fernerkundung und Geologie argumentiert. Wichtig ist, dass zwischen der Region, die ein Pixel repräsentiert und der Region, aus der sich das Signal zusammensetzt, unterschieden wird. Diesen Zusammenhang beschreiben die Übertragungsfunktion bzw. Impulsantwort (*point spread function*), welche das limitierende Element der Subpixel-Methoden ist. Nähere Informationen dazu finden sich in [49].

Der Einfluss der Übertragungsfunktion auf die Auflösung lässt sich in verschiedene Effekte, wie die Bewegungsunschärfe, Tiefpassfilterung oder Integration über einen Bereich, aufteilen. All diese Effekte können in einer Übertragungsfunktion zusammengefasst werden. In [84] wird dieses Modell für die Übertragungsfunktion genauer vorgestellt und eine Methode vorgeschlagen, mit welcher die Übertragungsfunktion geschätzt werden kann.

Zunächst soll auf Möglichkeiten eingegangen werden, die nur eine einzelne hyperspektrale Aufnahme verwenden und deren Auflösung erhöhen. Methoden, welche mehrere Aufnahmen kombinieren und dadurch Ergebnisse auf Subpixel-Ebene erzielen, werden in Abschnitt 4.3 beschrieben.

4.2.5.1 Verbesserte Anordnung der Subpixel

Basierend auf einer spektralen Entmischung kann eine Auflösungserhöhung erreicht werden. Da als Ergebnis der Entmischung die verschiedenen Anteile der Materialien zur Verfügung stehen, können Subpixel entsprechend dem Verhältnis der Materialien erstellt werden. Hierbei wird die Annahme getroffen, dass die reinen Materialien örtlich getrennt vorkommen. Aus der ursprünglich weichen Klassifikation mit der spektralen Entmischung wird durch diesen Ansatz eine harte Klassifikation in höherer Auflösung. Es gilt nun, die Anordnung der Subpixel vorzunehmen, wie sie beispielsweise in [161] beschrieben wird.

Häufig wird die örtliche Korrelation zwischen den Subpixeln als Gütekriterium genutzt. Diese wird entweder maximiert oder aber es wird versucht, die Korrelation an ein Modell anzupassen, welches z. B. aus einem Variogramm gewonnen werden kann oder die Form bestimmter Objekte beschreibt. Um die Subpixel anzuordnen, werden unter ande-

rem Neuronale Netze verwendet, wobei Subpixel paarweise getauscht werden [109, 125, 155].

Anstelle der Korrelation kann auch die *Total Variation*, d. h. die örtliche Veränderung der Entmischungskoeffizienten zwischen Nachbarpixeln, als Gütemaß verwendet werden [62]. Die zugrundeliegende Annahme ist hierbei, dass Pixel gleichen Materials nebeneinander angeordnet sein sollten.

4.2.5.2 Auflösungserhöhung während der Entmischung

Mit den bisherigen Ansätzen werden Entmischungsergebnisse verbessert. Es gibt zusätzlich aber auch die Möglichkeit, schon während der Entmischung auf die örtliche Verteilung der Mischkoeffizienten einzugehen. Es kann dabei eine Entmischung in der ursprünglichen oder aber in höherer Auflösung vorgenommen werden.

Hierfür wird das zu minimierende Gütemaß um einen Term, der die örtlichen Eigenschaften widerspiegelt, erweitert. Dies kann beispielsweise der Abstand zu benachbarten Pixeln gleicher Klasse sein [97].

Soll keine harte Klassifikation durchgeführt werden, liefert der Abstand der Entmischungskoeffizienten von benachbarten Pixeln ein entsprechendes Kriterium. Zare und Gader verwenden hierfür das Gütemaß

$$G_{ik} = \sum_{\substack{j \in \mathcal{R} \\ j \neq i}} \frac{1}{d_{ij} + 1} (1 - a_{kj})^2 \frac{1}{\| \mathbf{y}_j - \mathbf{X} \mathbf{a}_j \|^2 + 1}, \quad (4.47)$$

wobei die Menge \mathcal{R} alle Pixelindizes der Nachbarschaftsregion des Pixels i enthält, d_{ij} den Abstand der beiden Pixel i und j darstellt und a_{kj} der Mischkoeffizient für das k -te Endmember des Pixels j ist [172]. Als Nachbarschaft wird eine 3×3 - oder 5×5 -Region vorgeschlagen. Während der Entmischung wird zusätzlich zum Rekonstruktionsfehler der Term

$$\mathbf{G}_i \mathbf{a}_i \quad (4.48)$$

minimiert, welcher die Unähnlichkeit der Mischkoeffizienten des Pixels i zu seiner Nachbarschaft widerspiegelt.

4.2.5.3 Kombination harter und weicher Klassifikation

Zuletzt soll ein Verfahren erwähnt werden, bei dem mithilfe der spektralen Entmischung ein hartes Klassifikationsergebnis verbessert wird. Das Verfahren ist in drei Schritte unterteilt [162].

Im ersten Schritt wird eine grobe harte Klassifikation aller Pixel mit einer SVM durchgeführt. Alle Pixel, die durch die N -Klassen-Klassifikation nur mit einer geringen Sicherheit einer einzelnen Klasse zuzuordnen sind, werden als gemischt angenommen und in einem zweiten Schritt mithilfe eines Entmischungsalgorithmus entmischt. In einem dritten Schritt wird dann eine örtliche Regularisierung durchgeführt. Hierfür kann beispielsweise *Simulated Annealing* als Optimierungsmethode verwendet werden.

Für die spektrale Entmischung wird vorgeschlagen, als Endmember benachbarte Pixel zu verwenden, welche im ersten Schritt schon als reine Pixel klassifiziert wurden.

Zur Erhöhung der Auflösung wird jedes Pixel in eine größere Anzahl an Pixeln geteilt, welche dann entsprechend der Mischkoeffizienten zugeordnet werden. Das *Simulated Annealing* minimiert eine Kostenfunktion, welche die Summe der Umfänge von Pixelregionen gleicher Klasse darstellt [163].

4.3 Fusion hyperspektraler Bilder

Verschiedene Kamerasysteme können sich in Bezug auf räumliche und spektrale Auflösung stark unterscheiden. Oftmals geht eine hohe räumliche Auflösung mit einer geringeren spektralen Auflösung einher; ebenso haben Kamerasysteme mit einer hohen Anzahl an spektralen Kanälen häufig eine schlechte räumliche Auflösung. Eine Fusion von Aufnahmen mehrerer Kamerasysteme kann dabei helfen, die Vorteile zweier oder mehrerer Aufnahmen zu kombinieren, während die Nachteile möglichst gut ausgeglichen werden. In diesem Abschnitt sollen einige Verfahren erläutert werden, welche die Fusion multi- und hyperspektraler Aufnahmen ermöglichen.

Für eine erfolgreiche Fusion von Aufnahmen sind einige Vorverarbeitungsschritte, wie Bildregistrierung, Interpolation und Histogrammanpassung durchzuführen.

Einen Überblick über verschiedene Verfahren der Bildregistrierung findet sich in [175]. In Bezug auf die Fusion hyperspektraler Aufnahmen mit multispektralen Bildern oder Graubildern muss berücksichtigt werden, dass die physikalischen Eigenschaften der Sensoren sehr unterschiedlich sein können. Dadurch wird die Registrierung erschwert, da die gleiche Szene in unterschiedlichen Spektralbereichen sehr unterschiedlich aussehen kann. Objekte oder Merkmale, die in einer Aufnahme sichtbar sind, können in der anderen fehlen. Im Bereich der Fernerkundung wurden daher eine Vielzahl an verschiedenen Verfahren veröffentlicht, welche auf die spezifische Problemstellung der Registrierung von Satellitenbildern, die häufig von unterschiedlichen Kamerasystemen stammen, eingehen [54, 68, 78, 130, 149, 154, 169].

Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die zu fusionierenden Aufnahmen bereits registriert sind. Auf eine genauere Darstellung der Vorgehensweise bei der Bildregistrierung wird an dieser Stelle verzichtet.

4.3.1 Pansharpening

Aus dem Bereich der Fernerkundung stammt die Problemstellung der Fusion eines multi- oder hyperspektralen Bildes mit einem panchromatischen Bild. Diese deckt einen weiten spektralen Bereich ab, während die einzelnen Kanäle des multi- bzw. hyperspektralen Bildes nur schmale Bandbereiche darstellen. Die räumliche Auflösung des panchromatischen Bildes ist dabei wesentlich feiner als die der multispektralen Aufnahmen. Daher ist das Ziel dieser Fusion, die räumliche Information, welche im multispektralen Bild fehlt, vom panchromatischen Bild zu gewinnen. Da eine niedrige Auflösung im allgemeinen Sprachgebrauch auch als unscharfe Abbildung bezeichnet wird, wird diese Art der Fusion als *Pansharpening* bezeichnet.

Auf einige grundsätzliche Herangehensweisen des Pansharpenings soll nun genauer eingegangen werden. Eine ausführliche Übersicht über Pansharpening-Algorithmen findet sich in [8] und [4], wonach sich die folgende Einteilung orientiert.

Dem Ersetzen von Komponenten liegt die Idee zugrunde, dass das panchromatische Bild die generelle Helligkeit in hoher räumlicher Auflösung widerspiegelt [148]. Daher soll die generelle Helligkeit des multispektralen Bildes mit dem panchromatischen Bild ersetzt werden. Dazu wird das MS-Bild zunächst auf die Auflösung des PAN-Bildes gebracht und anschließend transformiert. Als Transformationen werden beispielsweise die Hauptkomponentenanalyse oder das Gram-Schmidt'sche Orthogonalisierungsverfahren [90] genutzt. Es ist ebenso möglich, bekannte Farbraumtransformationen zu nutzen, welche das Bildsignal als Intensität, Farbwert und Sättigung darstellen. Allerdings ist hierfür als multispektrales Eingangsbild eine dreikanalige Aufnahme nötig [25]. Die Intensitätskomponente des transformierten MS-Bildes wird nun mit dem PAN-Bild ersetzt. Bei der Hauptkomponentenanalyse wird angenommen, dass die erste Hauptkomponente die Information enthält, welche in allen Kanälen vorkommt, also die räumliche Information. Zuletzt muss das Bild mit der entsprechenden Transformation zurücktransformiert werden und man erhält das Fusionsergebnis.

Diese erste Art von Pansharpening-Ansätzen ist weit verbreitet, da sie sehr leicht umzusetzen ist und meist gute Ergebnisse erzielt [2]. Allerdings werden durch die Transformation, welche auf die gesamte Aufnahme global angewendet wird, keine lokalen Unterschiede im Bildsignal berücksichtigt [31, 156].

Eine zweite Gruppe von Pansharpening-Algorithmen berücksichtigt den relativen Beitrag eines spektralen Kanals zum Gesamtsignal des multispektralen Bildes. Jeder Kanal des fusionierten Bildes entspricht dem gewichteten panchromatischen Bild.

Ein dritter Ansatz nutzt den Zusammenhang, dass im panchromatischen hochaufgelösten Bild Signalanteile höherer Frequenz vorhanden sind als im niedriger aufgelösten multispektralen Bild. Die hochfrequenten Anteile werden durch Filterung und Differenzbildung vom panchromatischen Bild extrahiert und dem multispektralen Bild durch gegebenenfalls gewichtete Addition hinzugefügt.

4.3.2 Fusion mithilfe spektraler Entmischung

Neben den beschriebenen Pansharpening-Ansätzen, die eine multi- oder hyperspektrale Aufnahme mit einem panchromatischen Bild fusionieren, sind auch Ansätze interessant, welche die Fusion von einem multispektralen Bild mit einem zweiten erlauben. Eine Möglichkeit ist, hierbei die spektrale Entmischung zu nutzen.

Zunächst soll auf die verwendete Schreibweise näher eingegangen werden. Es gilt, zwei Aufnahmen unterschiedlicher Auflösung zu fusionieren, wie sie in Abbildung 4.2 zu sehen sind. Dabei wird für die Entmischungsverfahren zunächst angenommen, dass sich ein Pixel des niedriger aufgelösten Bildes aus einer ganzzahligen Anzahl an Pixeln des hochaufgelösten Bildes zusammensetzt. Zur besseren Lesbarkeit werden für das niedrig aufgelöste Bild die Abkürzung LR (*low resolution*) und für das hoch aufgelöste Bild die Abkürzung HR (*high resolution*) verwendet. Die Pixel des LR-Bildes in Abbildung 4.2(b) besitzen eine Ausdehnung von 2×3 Pixeln des HR-Bildes in Abbildung 4.2(a).

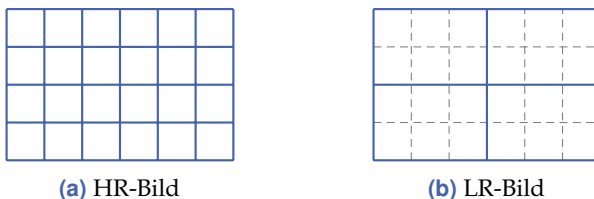


Abbildung 4.2 Darstellung des Pixelgitters einer Aufnahme mit hoher Auflösung (HR) und niedriger Auflösung (LR). Jedes Pixel des niedrig aufgelösten Bildes setzt sich aus einer ganzzahligen Anzahl an Pixeln des hochaufgelösten Bildes zusammen.

Im Folgenden werden einige Verfahren vorgestellt, welche die spektrale Entmischung auf unterschiedliche Weise nutzen, um zwei mehrkanalige Aufnahmen zu fusionieren. Die dargestellten Ansätze beschreiben dabei den aktuellen Stand der Forschung.

4.3.2.1 Überwachte Verfahren

Wie bei normalen Entmischungsverfahren kann zwischen Ansätzen, bei denen die Endmembersignaturen bekannt sind und solchen, die Endmembersignaturen erst finden müssen, unterschieden werden (vgl. Abschnitt 4.2.3). Zunächst sollen Ansätze gezeigt werden, welche überwacht ablaufen und somit auf bekannte Endmembersignaturen zurückgreifen.

Von Gross und Schott wird eine Methode zur Fusion von HR- und LR-Aufnahme vorgestellt, bei der als erstes ein gängiges Entmischen einer hyperspektralen LR-Aufnahme durchgeführt und anschließend mithilfe eines Optimierungsverfahrens sowie bestimmter Nebenbedingungen ein hochaufgelöstes Bild erstellt wird [59]. Aus der spektralen Entmischung resultiert ein Bild in niedriger Auflösung, welches die Mischkoeffizienten der einzelnen Endmember enthält. Mit der vorgeschlagenen Methode können die Mischkoeffizienten in der Auflösung des HR-Bildes gefunden werden. Dies wird an künstlich erstellten Bildern, die aber natürlichen vorkommenden Strukturen (Häuser, Wald, Straßen etc.) nachempfunden sind, gezeigt. Dieser Ansatz gliedert sich in zwei Schritte: Im ersten Schritt wird das hyperspektrale LR-Bild mit bekannten Endmembers und einem linearen Mischmodell entmischt und man erhält Mischkoeffizienten in der niedrigeren räumlichen Auflösung. Im Anschluss daran wird ein Schärfetransport durchgeführt. In diesem Schritt müssen die Mischkoeffizienten auf die Auflösung des höher aufgelösten Bildes gebracht werden. Dazu wird ein nichtlineares Optimierungsverfahren genutzt. Als Kostenfunktion wird die Fehlerquadratsumme des rekonstruierten Bildes gewählt.

Da beide Aufnahmen dieselbe Region beobachten, hängen die Mischkoeffizienten beider Aufnahmen miteinander zusammen. Im Idealfall lassen sich die Nebenbedingungen zur Entmischung erweitern und somit wichtige Zusatzinformation in die Fusion einbringen:

1. **Konsistenz:** Im Mittel müssen die hochaufgelösten Mischkoeffizienten denen des LR-Bildes entsprechen. Dies gilt für den betrachteten Spezialfall, wenn die Pixelregion eines LR-Pixels genau der Region einer bestimmten Anzahl an HR-Pixeln entspricht. Hierbei wird angenommen, dass sich das Signal eines LR-Pixels als

Mischung mehrerer HR-Pixel zusammensetzt. Genauso verhält es sich daher auch mit den Mischkoeffizienten.

2. **Normierung:** Die Mischkoeffizienten eines Pixels müssen in der Summe eins ergeben. Dies gilt sowohl für die HR-Koeffizienten als auch für die LR-Koeffizienten.
3. **Nichtnegativität:** Alle Mischkoeffizienten müssen im Intervall $[0, 1]$ liegen. Diese Nebenbedingung ist aus dem generellen linearen Mischmodell bekannt.

Während der Optimierung werden die Mischkoeffizienten in höherer räumlicher Auflösung bestimmt. Dabei werden die Koeffizienten innerhalb des Raums, welcher durch die Nebenbedingungen aufgespannt wird, gesucht. Dies geschieht mithilfe eines Gradientenverfahrens, das in jedem Schritt Lösungsvektoren auf den Raum projiziert. Ein Vergleich des Verfahrens mit anderen Ansätzen findet sich in [135].

Von Yang et al. wird dieser Ansatz erweitert [170]. Das Verfahren besteht aus zwei Schritten: Zunächst wird eine Entmischung des LR-Bildes durchgeführt und daraus ein panchromatisches Bild durch Integration über MS-Kanäle erzeugt. Die Mischkoeffizienten werden anschließend in HR-Auflösung durch ein Optimierungsverfahren bestimmt, indem eine Gütefunktion minimiert wird. Diese beschreibt den Fehler zwischen dem synthetisierten panchromatischen Bild und dem originalen HR-PAN-Bild. Dieses Verfahren wurde von den Autoren *Improved fusion method based on spectral mixture analysis (IFSMA)* genannt.

Barducci et al. stellen ein Verfahren vor, welches hyperspektrale Bilder unterschiedlicher Auflösung sukzessive entmischt [12]. Dabei werden die Mischkoeffizienten einer groben Auflösung als Nebenbedingung für das Entmischen in nächst feinerer Auflösung verwendet. Als Nebenbedingungen werden dafür die Konsistenz, Normierung und Nichtnegativität verwendet. Mehrere Sensoren oder unterschiedliche spektrale Auflösungen werden nicht berücksichtigt. Durch das sukzessive Lösen wird eine Entmischung gefunden, welche möglichst resistent gegenüber Rauschen ist.

4.3.2.2 Umgekehrte Entmischung

Die umgekehrte Entmischung ist eine weitere Fusionsmethode, welche auf spektraler Entmischung basiert [174]. Die Methode teilt sich in zwei Schritte auf. Zuerst wird das HR-Bild in verschiedene Klassen segmentiert und anschließend das LR-Bild mithilfe der verschiedenen Klassenanteile entmischt. Hierbei sind die Mischkoeffizienten nun für eine bestimmte LR-Region (evtl. nur ein Pixel) bekannt, nicht aber die Spektren oder Signale. Diese werden nun mit einem *Least-Squares*-Ansatz bestimmt. Aus den Klassenzugehörigkeiten im HR-Bild und den entsprechenden Signalen des LR-Bildes lässt sich das Signal des HR-Bildes rekonstruieren. Die Bestimmung der Klassenzugehörigkeiten wird immer nur in einem Bildausschnitt vorgenommen. Dadurch passen sich die Signale der örtlichen Umgebung an und man erhält unterschiedliche Klassen in unterschiedlichen Bildregionen. Der Vorteil dieser Methode liegt darin, dass kein Wissen über die Anzahl der Materialien vorhanden sein muss; außerdem brauchen keine reinen Pixel vorliegen.

Die beschriebene Methode wird von mehreren Autoren für die Fusion von Signalen der Satelliten Landsat TM und MERIS FR genutzt [6, 7, 176]. Dabei werden der Einfluss der Größe des Bildausschnitts und der Anzahl an Klassen für die Segmentierung untersucht.

Sehr ähnlich zu diesem Verfahren ist die Methode, welche Murakami et al. beschreiben [110]. Hier wird ein RGB-Bild in einem ersten Schritt in eine bestimmte Anzahl an Klassen segmentiert. Für jede Klasse wird aus dem hyperspektralen Bild mit niedriger Auflösung ein Spektrum geschätzt, welches im letzten Schritt mit den Klassenzugehörigkeiten des hochaufgelösten RGB-Bildes fusioniert wird. Da ein Pixel zu mehreren Klassen gehören kann, ist dieser Ansatz mit der spektralen Entmischung zu vergleichen.

Yokoya et al. schlagen ein weiteres Verfahren vor, mit dem Aufnahmen unterschiedlicher spektraler und räumlicher Auflösung mithilfe der nichtnegativen Matrixfaktorisierung fusioniert werden können [171]. Dafür wird für jeden Sensor ein lineares Mischmodell angenommen.

4.3.3 Bewertung der Fusionsergebnisse

Um verschiedene Fusionsansätze zu vergleichen, ist es notwendig, deren Ergebnisse objektiv zu vergleichen. Grundsätzlich dienen dazu zwei Kriterien: die Bewertung der Konsistenz sowie der Synthese [164]. Mit Konsistenz ist gemeint, dass ein fusioniertes Bild den Ursprungsbildern entsprechen sollte, wenn es dementsprechend räumlich oder spektral abgetastet oder transformiert wird. Auf der anderen Seite sollte ein fusioniertes Bild einer Aufnahme entsprechen, die mit einem Sensor gemacht wird, welche die entsprechenden räumlichen und spektralen Eigenschaften besitzt. Dies ist die Syntheseeigenschaft.

Während die Konsistenz einer Fusion relativ einfach überprüft werden kann, stellt sich bei der Synthese das Problem, dass eine Aufnahme mit den Eigenschaften des fusionierten Bildes nicht zur Verfügung steht. Um trotzdem die Syntheseeigenschaft eines Fusionsansatzes überprüfen zu können, werden häufig die ursprünglichen Aufnahmen zunächst dezimiert (*downsampling*), um sie im Anschluss zu fusionieren. Anschließend können die Ergebnisse mit den ursprünglichen Aufnahmen verglichen werden.

Für den Vergleich stehen neben dem visuellen Eindruck, welcher häufig subjektiv und schwer zu beschreiben ist, einige quantitative Gütemaße zur Verfügung. Diese unterteilen sich in Maße, welche die spektrale und solche, die die räumliche Güte der Fusion bewerten. Ziel aller Gütemaße ist, die Ähnlichkeit zweier Bilder auszudrücken, wie sie durch die Konsistenz und Synthese gefordert wird.

Für die Bewertung der spektralen Qualität des Fusionsergebnisses eignet sich zunächst der spektrale Winkel als Distanzmaß (vgl. Definition 3.7). Um ein globales Gütemaß zu erhalten, werden die d_{SAM} -Werte aller Pixel gemittelt.

Der Fehler, der durch die Fusion entsteht, lässt sich am einfachsten mit der mittleren quadratischen Abweichung bestimmen. Hierfür wird der *root-mean-square error* (RMSE) über alle Pixel gebildet. Dieser eignet sich insbesondere dann, wenn Mischkoeffizienten bei der Anwendung von spektraler Entmischung verglichen werden sollen.

Die räumlichen Eigenschaften zu bewerten ist dagegen wesentlich schwieriger. Hierfür kann beispielsweise der Verlauf von Kanten evaluiert

werden [126]. Eine Übersicht und Analyse verschiedener *Pansharpening*-Ansätze mit verschiedenen Gütemaßen wird in [105] gezeigt.

4.4 Bandselektion

Das kontinuierliche Spektrum, welches von einer hyperspektralen Kamera abgetastet wird, spiegelt, wie in Abschnitt 2.1.2 beschrieben, wichtige Informationen über die materielle Zusammensetzung von Objekten wider. Es gibt allerdings gute Gründe, nicht das komplette kontinuierliche Spektrum als Merkmal für eine Klassifikation zu nutzen, sondern nur einzelne Kanäle oder auch nur (gewichtet) gemittelte Kanäle heranzuziehen [80]: Erstens ist die Datenmenge durch die hohe Dimensionalität des ursprünglichen, hyperspektralen Bildes sehr groß. Dies stellt hohe Ansprüche an die Datenverarbeitung, welche für Inspektionsaufgaben, bei denen die Entscheidungen in Echtzeit getroffen werden müssen, nicht erfüllt werden können. Ein weiteres Problem, das die hohe Dimensionalität mit sich bringt, ist das Hughes-Phänomen [75]. Dieses beschreibt, wie die Klassifikationsgüte für steigende Dimensionalität ab einem bestimmten Wert wieder abnimmt, sofern die Anzahl an Trainingsdaten gleich bleibt (vgl. Abbildung 4.3).

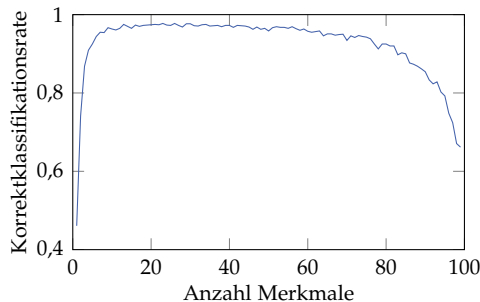


Abbildung 4.3 Hughes-Phänomen: Mit steigender Anzahl an Merkmalen nimmt die Korrektklassifikationsrate zunächst zu, dann aber wieder ab. Klassifikation des Lebensmitteldatensatzes (siehe Abschnitt 5.3.1) mittels LDA und zufällig ausgewählten NIR-Kanälen als Merkmale.

Für Klassifikationsaufgaben hoher Dimensionalität wird daher eine noch höhere Anzahl an Trainingsdaten benötigt, welche ebenfalls wieder einen erheblichen Mess- und Rechenaufwand mit sich bringt und auch nicht immer zur Verfügung steht. Die beiden genannten Herausforderungen, welche die hohe Dimensionalität mit sich bringt, können durch eine Reduktion auf weniger Merkmale umgangen werden.

Ein weiterer Grund für die Nichtberücksichtigung einzelner Kanäle oder Spektralbereiche ist ein niedrigeres Signal-Rausch-Verhältnis einzelner Kanäle aufgrund des Sensors bzw. unerwünschter Effekte, welche sich nur in einem bestimmten Wellenlängenbereich abspielen und das Messsignal verfälschen. Hier seien als Beispiel die Wasserabsorptionsbanden bei 1400 nm und 1900 nm genannt, welche vor allem in der Fernerkundung als atmosphärische Störungen, aber auch in Inspektionsaufgaben berücksichtigt werden müssen, da viele Objekte sowohl trocken als auch nass identifiziert werden müssen [28].

In der hyperspektralen Bildverarbeitung wird die Auswahl einzelner Kanäle oder Spektralbereiche unter dem Begriff Bandselektion behandelt. Die Bandselektion kann auf unterschiedliche Weise durchgeführt werden. Man unterscheidet zwischen Ansätzen, welche einzelne Kanäle des ursprünglichen Bildes auswählen, und solchen, die aus mehreren Kanälen neue Merkmale berechnen. Erstere können als Merkmalsselektionsverfahren aufgefasst werden, letztere als Merkmalsextraktionsverfahren. Merkmalsselektionsverfahren kommen zum Einsatz, wenn das hyperspektrale Bild mit seiner großen Anzahl an Kanälen vorliegt und nun für eine effizientere Datenverarbeitung nur einzelne Kanäle des Bildes verwendet werden sollen. In Inspektionsaufgaben kann dies für eine Erhöhung der Geschwindigkeit genutzt werden; vorausgesetzt es wird eine Kamera verwendet, welche auf dem Multiplexing-Prinzip basiert oder aber erlaubt, nur einzelne Kanäle auszulesen (vgl. Abschnitt 2.3.1). Für die Auswahl einzelner Sensorkanäle können bekannte Merkmalsselektionsverfahren aus Abschnitt 3.2.2.1 verwendet werden.

Eine Einteilung verschiedener Ansätze zur Bandselektion zeigt Abbildung 4.4. Diese werden im Folgenden näher beschrieben.

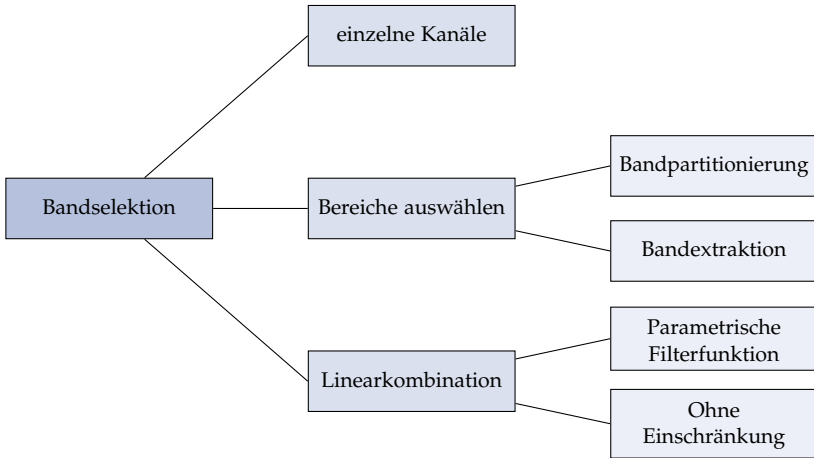


Abbildung 4.4 Einteilung verschiedener Ansätze zur Bandselektion in hyperspektralen Bildern.

4.4.1 Auswahl von Bandbereichen durch Mittelung

Das hyperspektrale Signal kann als Matrix \mathbf{Y} geschrieben werden. Diese setzt sich aus den einzelnen Pixelvektoren $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^N, i = 1, 2, \dots, K$ zusammen, wobei N die Anzahl an spektralen Kanälen darstellt und K die Pixelanzahl ist. Das Matrixelement y_{ij} spiegelt demnach die Reflektanz im Kanal i des j -ten Pixels wider. Aus diesem Bild sollen nun einzelne Kanäle oder eine Kombination von Kanälen ausgewählt werden.

Es sei $\mathbf{Y}^* \in \mathbb{R}^{N^*}$ mit $N^* < N$ das Bild, das durch die Auswahl entstanden ist. Um eine gute Auswahl treffen zu können, muss diese bewertbar sein. Hierbei können sowohl Filter- als auch Wrapper-Ansätze zum Einsatz kommen (vgl. Abschnitt 3.2.2.1), wobei für den Filtereinsatz ein Distanzmaß oder anderes Gütemaß verwendet werden muss. In der Literatur wird häufig der Einsatz von Distanzmaßen, welche auf der Mahalanobis-Distanz basieren, vorgeschlagen [24, 80]. Die Verwendung dieser Distanzmaße ist jedoch nicht immer ideal, was in den Untersuchungen in Abschnitt 6.4.1.1 näher erläutert wird.

Die Auswahl einzelner Kanäle oder zusammenhängender Bereiche soll

nun für die verschiedenen Fälle genauer formuliert werden, wobei jeder Fall auf ein Merkmalsselektionsverfahren zurückgeführt wird, welches mit einem Filter- oder Wrapper-Ansatz umgesetzt werden kann.

4.4.1.1 Auswahl einzelner Sensorkanäle

Der einfachste Fall, die Daten zu reduzieren, ist die Auswahl einzelner Sensorkanäle. Hierzu gilt es, eine Menge $\mathcal{S} = \{s_1, s_2, \dots, s_{N^*}\}$ zu finden, deren Elemente den Indizes der ausgewählten Kanäle entsprechen. Das Signal, welches nur aus diesen Kanälen besteht, setzt sich entsprechend zu

$$\mathbf{Y}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_{s_1} & \mathbf{y}_{s_2} & \dots & \mathbf{y}_{s_{N^*}} \end{bmatrix} \quad (4.49)$$

zusammen.

4.4.1.2 Aufteilen des gesamten Spektralbereichs

Eine zweite Möglichkeit ist, den Spektralbereich des Sensors komplett aufzuteilen, was auch als Bandpartitionierung bezeichnet wird. Vorteil dieses Ansatzes ist, dass möglichst viel Licht auf den Sensor fällt und somit ein höheres Signal-Rausch-Verhältnis zu erwarten ist als bei der Auswahl einzelner Kanäle. Zusätzlich ist die Optimierung oder Suche nach der besten Aufteilung nicht so rechenintensiv wie bei anderen Verfahren, da hier die Anzahl der Parameter den Grenzen zwischen zwei Filtern entspricht. Folglich muss immer ein Parameter weniger als die Anzahl der Filter gesucht werden.

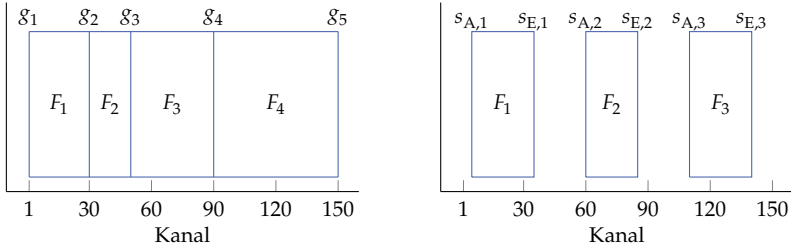
Um die Auswahl mathematisch zu formulieren, werden nun die Kanäle gesucht, welche die Grenze zwischen zwei Bereichen darstellen. Zwischen diesen wird das Signal gemittelt.

Es wird eine Menge $\mathcal{G} = \{g_1, g_2, \dots, g_{N^*+1}\}$ gesucht, wobei der erste Kanal fest als untere Grenze in der Menge enthalten ist ($g_1 = 1$) und für die anderen Indizes

$$g_i < g_j \quad \text{für } i < j, \quad (4.50)$$

$$g_i < N \quad \text{für alle } i = 1, \dots, N^* \quad (4.51)$$

gelten muss. Abbildung 4.5(a) zeigt beispielhaft die Aufteilung des gesamten Spektralbereichs in vier Bereiche.



(a) Bandpartitionierung

(b) Bandextraktion

Abbildung 4.5 Beispielhafte Aufteilung des Spektralbereichs durch Bandpartitionierung und Bandextraktion in vier bzw. drei Bandbereiche.

Die einzelnen Signale der definierten Bandbereiche lassen sich als Mittelung über die Kanäle zwischen zwei benachbarten Indizes berechnen, wobei die untere Schranke eingeschlossen wird. Es gilt somit

$$\mathbf{y}_i^* = \frac{1}{g_{i+1} - g_i} \sum_{k=g_i}^{g_{i+1}-1} \mathbf{y}_k. \quad (4.52)$$

Die Aufteilung des gesamten Spektralbereichs wird auch als Bandpartitionierung bezeichnet. Verschiedene Algorithmen zur Berechnung einer solchen Zerlegung wurden von Chang [28] untersucht.

4.4.1.3 Vereinigung benachbarter Kanäle

Benachbarte Kanäle können auch ohne die Einschränkung, dass der gesamte Spektralbereich genutzt werden soll und sich die Bereiche nicht überlappen dürfen, durch Mittelung zu einem Bandbereich vereinigt werden [145]. Ein Bandbereich wird dabei durch seinen Anfangs- und Endkanal eindeutig bestimmt. Es gilt also, zwei Mengen $\mathcal{S}_A = \{s_{A,1}, s_{A,2}, \dots, s_{A,N^*}\}$ und $\mathcal{S}_E = \{s_{E,1}, s_{E,2}, \dots, s_{E,N^*}\}$ zu finden, wobei der Index des Anfangskanals $s_{A,i}$ kleiner gleich dem Index des ent-

sprechenden Endkanals $s_{E,i}$ sein muss. Durch Mittelung erhält man wiederum die Signale der neuen Bandbereiche:

$$\mathbf{y}_i^* = \frac{1}{s_{E,i} - s_{A,i} + 1} \sum_{k=s_{A,i}}^{s_{E,i}} \mathbf{y}_k. \quad (4.53)$$

In Abbildung 4.5(b) ist eine solche Aufteilung des Spektralbereichs in drei Bandbereiche schematisch dargestellt.

Die oben beschriebenen Ansätze zur Selektion einzelner Kanäle und zur Aufteilung des gesamten Spektralbereichs können als Spezialfälle der letzten Beschreibung aufgefasst werden. Für die Auswahl einzelner Kanäle muss dafür $s_{E,i} = s_{A,i}$ gelten, für das Aufteilen des gesamten Spektrums $s_{E,i} + 1 = s_{A,i+1}$; zudem müssen für die Bandpartitionierung der erste und letzte Kanal enthalten sein: $s_{A,1} = 1$ und $s_{E,N^*} = N$. Für die Umsetzung der Verfahren sei ebenfalls auf [145] verwiesen.

4.4.2 Auswahl von Bandbereichen durch Filter

Die im vorherigen Abschnitt vorgestellten Methoden zur Bandselektion beschreiben den Spezialfall, dass das Signal über einen Bandbereich gemittelt wird. Hier soll der Ansatz auf jegliche Form von Filterfunktionen erweitert werden, indem optische Filter zur Bandselektion herangezogen werden. Dies ermöglicht die direkte Simulation optischer Komponenten eines Inspektionssystems.

Durch ein optisches Filter wird das Licht unterschiedlicher Wellenlänge entsprechend der Transmissionseigenschaften des Filters integriert. Es gilt ohne Berücksichtigung des Ortes und des Winkels

$$g_i = \int_0^{\infty} l(\lambda)r(\lambda)q(\lambda)f_i(\lambda) d\lambda, \quad (4.54)$$

wobei g_i der vom Kanal i gemessene Wert und f_i die Transmissionskurve des Filters i ist. Die Ausdrücke l , r und q stehen für die Spektralverteilung der Lichtquelle, die Reflektanzfunktion des beobachteten Objekts beziehungsweise für die Quanteneffizienz des Sensors. Zusätzlich zur

Gleichung (2.3) zur Bildgewinnung wird hier die Reflektanz des Objekts und die Transmission optischer Filter berücksichtigt.

Eine aufbereitete hyperspektrale Bildaufnahme setzt sich aus den Messwerten y_k zusammen, welche durch Mittelung in einem bestimmten Spektralbereich um eine Wellenlänge λ_k entstehen:

$$y_k = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\lambda_k - \frac{\Delta\lambda}{2}}^{\lambda_k + \frac{\Delta\lambda}{2}} I(\lambda)r(\lambda)q(\lambda) d\lambda. \quad (4.55)$$

Der Wert, der mit einem Sensor mit vorgesetztem optischen Filter gemessen wird, kann daher als Linearkombination aus den hyperspektralen Kanälen aufgefasst werden. Dafür wird die Filterfunktion f_i ebenfalls entsprechend der hyperspektralen Kanäle diskretisiert. Es gilt somit

$$g_i = \mathbf{f}_i^T \mathbf{y}. \quad (4.56)$$

Wird nun eine Kombination aus Filtern \mathbf{f}_i gesucht, so können deren Filterfunktionen in einer Matrix \mathbf{F} zusammengefasst werden. Mit

$$\mathbf{g} = \mathbf{F}^T \mathbf{y} \quad (4.57)$$

ergibt sich ein mehrkanaliges Bildsignal, welches auch als Merkmalsvektor aufgefasst werden kann.

Für die Bandselektion müssen nun die Koeffizienten der Matrix \mathbf{F} gefunden werden. Hierfür gibt es drei Möglichkeiten: 1. die Koeffizienten werden frei gewählt; 2. es werden Designkriterien für die Filter berücksichtigt und nur bestimmte Funktionen realisiert; 3. die Filterfunktionen werden aus einem Katalog an Filtern entnommen.

Da der Suchraum ohne Einschränkungen sehr groß ist, wird der erste Ansatz nicht verfolgt. Stattdessen werden die Filter parametrisiert und nur bestimmte Formen der Filterfunktionen erlaubt.

4.4.2.1 Parametrisierte Filterfunktionen

In den Methoden zur Bandpartitionierung und Bandextraktion wurde bereits eine Möglichkeit zur Parametrisierung von Filterfunktionen vorgestellt. Die Bandbereiche wurden hierbei durch die Start- und Endkanäle dargestellt.

An dieser Stelle sollen zudem gaußförmige Bandpassfilter beschrieben werden, welche sich durch ihre Breite c und ihre zentrale Wellenlänge w charakterisieren lassen. Durch die Parametrisierung der Filterfunktionen wird der Suchraum für die Optimierung stark reduziert [36]. Anstelle der frei wählbaren Filter mit K Koeffizienten werden nun nur zwei Parameter gesucht. Die Modelle sind natürlich nicht auf rechteckförmige und gaußförmige Filter beschränkt. Jegliche Formen, die sich durch Parameter beschreiben lassen, sind denkbar.

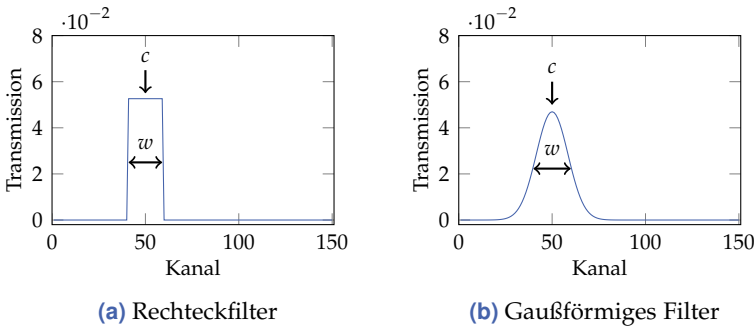


Abbildung 4.6 Transmissionskurven von Bandpassfiltern, welche sich durch die Parameter zentrale Wellenlänge (c) und Filterbreite (w) beschreiben lassen.

Rechteckförmige Filter lassen sich in die eben beschriebenen Bandextraktions- und Bandpartitionsansätze von oben überführen. Gaußförmige Filter werden durch die Filtergleichung

$$f(\lambda; c_i, w_i) = \frac{2\sqrt{2\log 2}}{w_i} \exp\left(-\frac{(c_i - \lambda)^2}{2w_i^2} (2\sqrt{2\log 2})^2\right) \quad (4.58)$$

$$\approx \frac{2,35}{w_i} \exp\left(-\frac{(c_i - \lambda)^2}{2w_i^2} 2,35^2\right) \quad (4.59)$$

beschrieben. Als Filterbreite w wird der *Full-Width-Half-Maximum*-Wert (FWHM) verwendet (vgl. Abbildung 4.6), weshalb in Gleichung (4.58) der Faktor $2\sqrt{2\log 2}$ vorkommt.

Die Filterfunktionen werden entsprechend der mittleren Wellenlängen der einzelnen Kanäle des hyperspektralen Bildes diskretisiert und können dann wieder als Linearkombination der Bildkanäle realisiert werden.

Für die Auswahl einer optimalen Filterkombination für die Trennung verschiedener Materialien können die Filterparameter durch ein Optimierungsverfahren bestimmt werden. Hierzu muss die Trennbarkeit bei einer bestimmten Filterkombination bewertet werden, was in Kapitel 6 gezeigt wird.

5 Messdaten und Simulationsmethoden

In diesem Kapitel wird auf die verwendeten Messdaten und Simulationsmethoden eingegangen. Für die Gewinnung von Messdaten stehen am Fraunhofer-Institut Optronik, Systemtechnik und Bildauswertung (IOSB) mehrere hyperspektrale Aufnahmesysteme zur Verfügung. Mit einem dieser Systeme wurden die Aufnahmen für die Auswertungen dieser Arbeit durchgeführt.

5.1 Laboraufbau

Die Aufnahmen erfolgten mit einem von insgesamt drei Aufnahmesystemen, die sich in ihrem Aufbau sehr ähneln. Sie unterscheiden sich nur in den eingesetzten Kamerasystemen und den damit einhergehenden baulichen Besonderheiten. Der strukturelle Aufbau ist jedoch der gleiche. Dieser besteht jeweils aus der Kombination einer hyperspektralen und einer RGB-Zeilenkamera. Die Messbereiche der hyperspektralen Kameras sind in Tabelle 5.1 aufgeführt.

Tabelle 5.1 Messbereiche der hyperspektralen Kameras.

Kamera	UV	VIS	NIR
Messbereich	200 bis 400 nm	400 bis 1000 nm	970 bis 2500 nm
Kanalanzahl	59	1082	256

Die Aufnahmen für diese Arbeit wurden mit dem NIR-System erstellt, daher beziehen sich die weiteren Ausführungen auf dieses System.

Das Aufnahmesystem besteht aus einem Schiebetisch mit Linearantrieb, auf dem die zu analysierenden Objekte platziert werden können, sowie den beiden Kameras und zugehörigen Beleuchtungssystemen. Außerdem ist ein PC angeschlossen, der als zentrale Steuerungseinheit dient und über Bussysteme mit den Kameras und den anderen Bauteilen verbunden ist. Abbildung 5.1 zeigt den Messaufbau als schematischen Querschnitt.

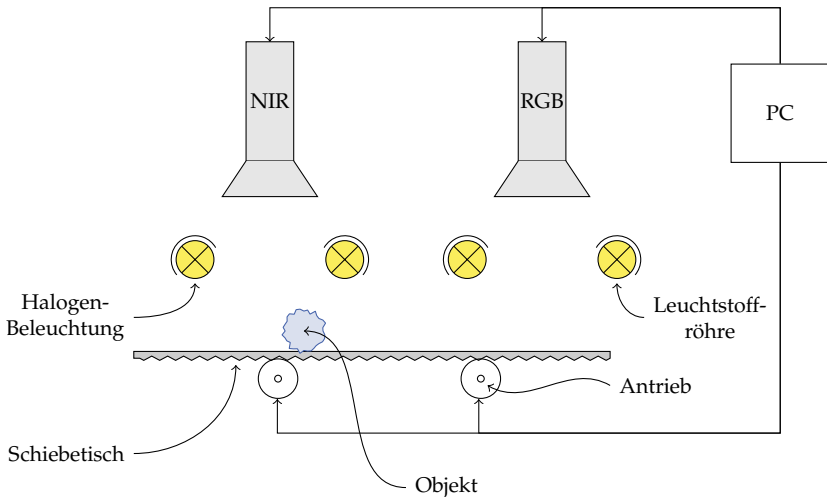


Abbildung 5.1 Schematische Darstellung des Messaufbaus.

Für die unterschiedlichen Spektralbereiche der Kameras werden zwei verschiedene Beleuchtungssysteme eingesetzt. Die Beleuchtung für die Aufnahme im sichtbaren Bereich mit der RGB-Kamera erfolgt mit Leuchtstoffröhren, die Beleuchtung für die hyperspektrale NIR-Aufnahme mit Halogenstrahlern. Die beiden Beleuchtungen sind durch eine Beschattung voneinander getrennt, sodass für jede Kamera von einer separaten Beleuchtung ausgegangen werden kann. Zudem sind die Beleuchtungen als Stabbeleuchtungen ausgeführt, um eine möglichst homogene Beleuchtung über die gesamte Breite des Schiebetisches zu erhalten.

Eine Aufnahme kann vollständig automatisiert ablaufen. Die notwendigen Parameter werden über eine Steuerungssoftware eingegeben. Während einer Aufnahme bewegt sich der Schiebetisch mit konstanter Geschwindigkeit gemäß der Darstellung in Abbildung 5.1 von rechts nach links. Sobald der Tisch eine bestimmte Position erreicht hat, starten die Kameras mit ihrer Aufnahme.

Der Aufbau mit dem Schiebetisch und den Zeilenkameras gleicht der gängigen Implementierung einer Schüttgutsortieranlage (vgl. Abbildung 1.1). Allerdings ist ein Förderband in der Regel wesentlich breiter als der Schiebetisch, dessen Maße 20 cm × 30 cm sind. Die Kameras sind so angebracht, dass die Breite des Messfensters nur etwa zwei Drittel der Breite des Schiebetischs einnehmen, also ca. 15 cm.

Die Parameter der RGB- und der NIR-Kamera sind in Tabelle 5.2 zusammengefasst.

Tabelle 5.2 Ausgewählte Eigenschaften der beiden Kameras des NIR-Messaufbaus.

	RGB	NIR
Name	AViiVA SC2	Spectral Camera SWIR
Hersteller	e2v	Specim
Kanäle	3	256
Pixel/Zeile	1365	320
max. Zeilenrate	14 kHz	100 Hz
Auflösung	8 bit	12 bit
Spektralbereich	400 bis 700 nm	970 bis 2500 nm
Sensormaterial	Silizium	MCT

Einige Parameter des Messaufbaus können frei eingestellt werden und müssen gegebenenfalls für jede Messung angepasst werden, da sie die Messung beeinflussen. So muss die Tischgeschwindigkeit auf die Bildrate der Kameras abgestimmt sein, denn diese beeinflusst die Größe der Pixel in y -Richtung. Zudem muss abhängig von der Reflektanz der untersuchten Objekte und der genutzten Beleuchtung die Integrationszeit gewählt werden, sodass ein zufriedenstellendes Signal-Rausch-Verhältnis erreicht wird und die Kameras nicht in die Sättigung gehen.

In der Steuerungssoftware sind einige Standardparameter hinterlegt, sodass Bildwiederholrate und Tischgeschwindigkeit sowohl für das hyperspektrale Bild als auch für das RGB-Bild quadratische Pixel ergeben. Für die Standardparameter ergibt sich damit eine Pixelgröße des NIR-Bildes von ca. $0,30 \text{ mm} \times 0,30 \text{ mm}$.

Für eine Messung werden zunächst Referenzbilder aufgenommen. Mithilfe der Referenzbilder lässt sich ein Weißabgleich durchführen, sodass die Aufnahmen über den Messaufbau hinaus mit anderen Aufnahmen vergleichbar werden. Auf das Vorgehen beim Weißabgleich wird in Abschnitt 5.2.3 genauer eingegangen.

5.2 Datenaufbereitung

5.2.1 Linearität der hyperspektralen Kamera

Die Linearität der NIR-Kamera lässt sich mit Aufnahmen bei unterschiedlichen Integrationszeiten analysieren. In Abbildung 5.2 ist der Signalwert eines Dunkel- und eines Weißbildes einer Sensorzeile des Sensors, d. h. eines örtlichen Pixels, gezeigt. Es sind deutlich der lineare Bereich des Sensors und die Sättigung zu erkennen. Bei der Wahl der Belichtungszeit muss darauf geachtet werden, dass die Messwerte in diesem Bereich liegen.

5.2.2 Nonuniformity Correction (NUC)

Wie aus Abbildung 5.2 deutlich wird, ist die Empfindlichkeit des Sensors nicht für alle Pixel gleich. Ebenso ist auch der Dunkelstrom abhängig von der Position und Wellenlänge. Um diese Effekte zu berücksichtigen, werden Rohdaten mit der NUC korrigiert. Dies geschieht durch die lineare Abbildung

$$y(i, j) = \alpha_{ij} y_{\text{roh}}(i, j) + \beta_{ij}, \quad (5.1)$$

wobei $y(i, j)$ der Messwert an dem i -ten Pixel und dem j -ten Kanal darstellt. y_{roh} ist das unkorrigierte Rohsignal, α und β sind die Korrekturfaktoren. Die Unterschiede in der Empfindlichkeit werden durch α ausgeglichen, die im Dunkelstrom durch β .

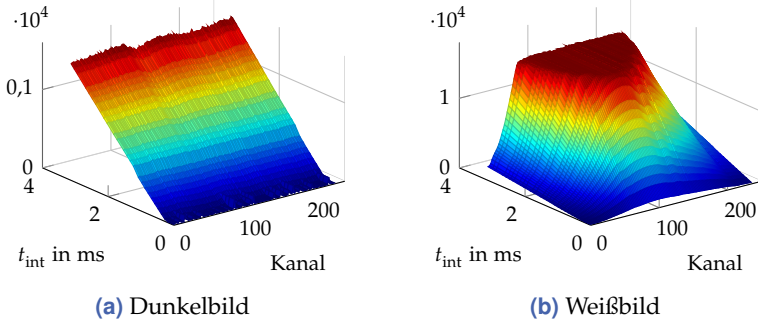


Abbildung 5.2 Linearität der NIR-Kamera. Dargestellt ist der Messwert eines örtlichen Pixels in Abhängigkeit von Integrationszeit t_{int} und spektralem Kanal. Der lineare Bereich der Kamera ist deutlich zu erkennen.

In Abbildung 5.3 ist der Unterschied zwischen den Rohdaten und den korrigierten Daten zu sehen. Das korrigierte Spektrum zeigt einen wesentlich glatteren Verlauf als das Spektrum ohne die NUC.

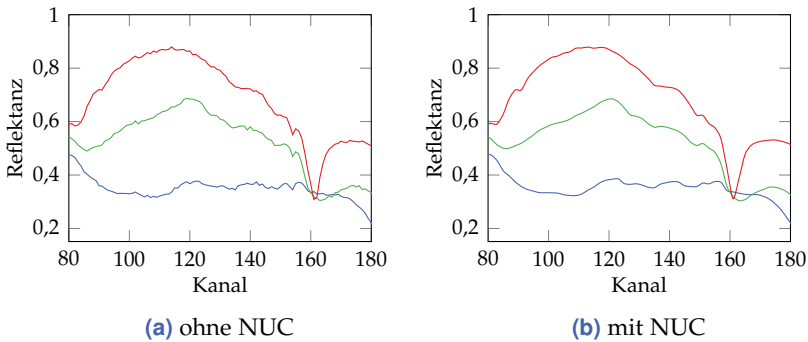


Abbildung 5.3 Eine Auswahl an Spektren vor und nach der Anwendung der NUC.

Für jedes Pixel gelten andere NUC-Koeffizienten. Daher wurde ein Algorithmus zur Ermittlung von α und β anhand einer großen Anzahl an Dunkel- und Weißbildern unterschiedlicher Integrationszeiten entwickelt. Es wird dafür die Empfindlichkeit jedes Pixels durch Re-

gressionsrechnung ermittelt (vgl. Abbildung 5.2). Die örtliche Verteilung der Koeffizienten ist in Abbildung 5.4 zu sehen. Während die Verstärkung α einen kontinuierlichen Verlauf zeigt, alterniert der Wert für die Dunkelstromkorrektur β .

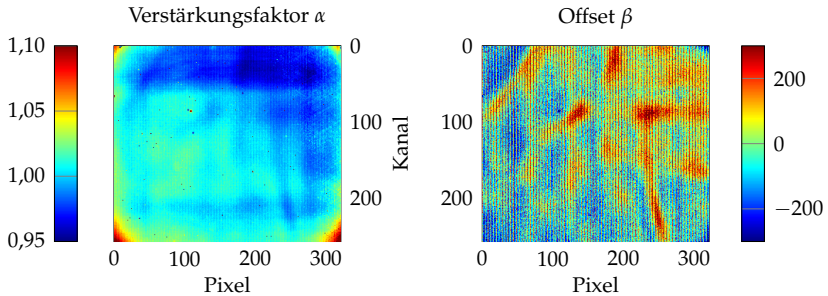


Abbildung 5.4 Örtliche Verteilung der NUC-Koeffizienten.

5.2.3 Weißabgleich

Eine Messung ist neben der Eigenschaften des Sensors, welche durch die NUC korrigiert wurden, auch abhängig von der Quanteneffizienz und Beleuchtung pro spektralem Kanal und deren örtlichen Verteilung. Um die Messung unabhängig vom Aufnahmesystem zu machen und damit eine Vergleichbarkeit mit anderen Messungen zu ermöglichen, muss daher ein Weißabgleich durchgeführt werden.

Der Weißabgleich erfolgt durch Vergleich der Messung mit einer Referenzmessung eines Referenzmaterials. Als Referenzmaterial eignet sich Polytetrafluorethylen (Teflon), da es eine nahezu konstante Reflektanz über den gesamten untersuchten Wellenlängenbereich aufweist, wie es in Abbildung 5.5 zu sehen ist.

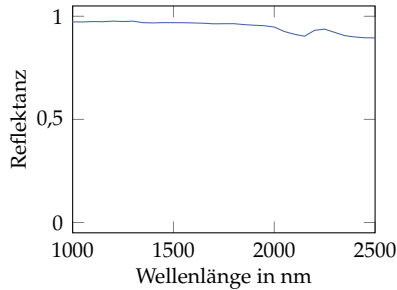


Abbildung 5.5 Reflektanzspektrum von Polytetrafluorethylen.

Für den Weißabgleich wird der Quotient aus der Differenz der Messung und des Dunkelbildes und der Differenz aus Weiß- und Dunkelbild gebildet. Für jedes Pixel mit entsprechenden α und β heißt dies

$$\begin{aligned}
 y_{\text{WB}} &= \frac{y - y_{\text{b}}}{y_{\text{w}} - y_{\text{b}}} \\
 &= \frac{\alpha y_{\text{roh}} + \beta - (\alpha y_{\text{b,roh}} + \beta)}{\alpha y_{\text{w,roh}} + \beta - (\alpha y_{\text{b,roh}} + \beta)} \\
 &= \frac{y_{\text{roh}} - y_{\text{b,roh}}}{y_{\text{w,roh}} - y_{\text{b,roh}}}, \tag{5.2}
 \end{aligned}$$

wobei y_{WB} das weißabgeglichene Signal ist, und y_{w} und y_{b} für das Weiß- bzw. Dunkelbild stehen. Dieser Zusammenhang zeigt, dass die NUC bei Durchführung eines Weißabgleichs nicht erforderlich ist.

Für die Aufnahme des Weiß- und Dunkelbildes werden mehrere Aufnahmen des stabförmigen Referenzmaterials mit geschlossener Blende gemacht. Anschließend wird der Mittelwert dieser Aufnahmen für den Weißabgleich verwendet.

In Abbildung 5.6 ist ein Spektrum ohne Weißabgleich zusammen mit Dunkelbild und Weißbild zu sehen. Daneben ist das weißabgeglichene Spektrum abgebildet. Es ist deutlich zu erkennen, dass der Einfluss der Beleuchtung und der Quanteneffizienz, welcher zu einem niedrigen Signalwert in den äußeren Bereichen des aufgenommenen Spektralbereichs führt, korrigiert wird. Außerdem ist das weißabgeglichene Spektrum

glatter, was zeigt, dass die NUC-Korrektur durch den Weißabgleich funktioniert.

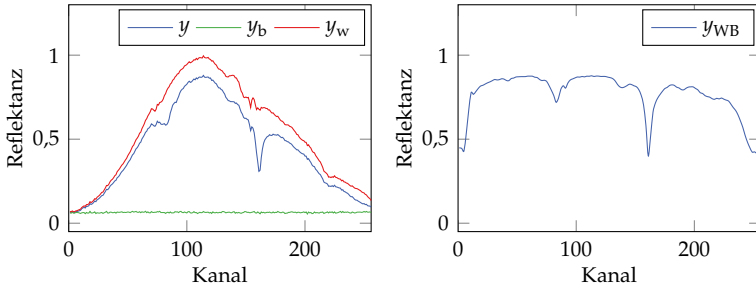


Abbildung 5.6 Eine Spektrum y zusammen mit dem zugehörigen Dunkelbildsignal y_b und dem Weißbildsignal y_w vor (links) und nach (rechts) dem Weißabgleich (y_{WB}).

Für den Weißabgleich, wie er hier gezeigt wurde, ist es erforderlich, dass alle Aufnahmen mit der gleichen Integrationszeit aufgenommen wurden. Häufig ist es bei dunklen Materialien mit kleiner Reflektanz erforderlich, höhere Integrationszeiten zu wählen. Bei diesen wären Messungen des weißen Referenzmaterials jedoch bereits in der Sättigung. Daher wird vorgeschlagen, das Weißbild mit einer anderen Integrationszeit zu verwenden, was sich in der Praxis als gültig herausgestellt hat. Hierfür muss auch ein Dunkelbild mit der entsprechenden Integrationszeit erzeugt werden. Sei t_w die Integrationszeit für das Weißbild und t_y die der eigentlichen Messung, so ergibt sich als Weißabgleich für unterschiedliche Integrationszeiten

$$y_{WB} = \frac{t_w}{t_y} \cdot \frac{y - y_{b1}}{y_w - y_{b2}}. \quad (5.3)$$

y_{b1} und y_{b2} stehen dabei für das Dunkelbild bei Integrationszeit t_y bzw. t_w . Dieses Vorgehen setzt voraus, dass die Kamera im linearen Bereich betrieben wird.

5.2.4 Auswahl gültiger Sensorkanäle

Wie schon in Abbildung 5.6 zu sehen, ist die Empfindlichkeit in den Randbereichen des sensitiven Bereichs sehr klein. Das Rauschen ist aber über den Sensor konstant oder steigt zu den Rändern hin an. Daher ist das Signal-Rausch-Verhältnis in den Randbereichen wesentlich schlechter als im mittleren Bereich (vgl. Abbildung 5.7).

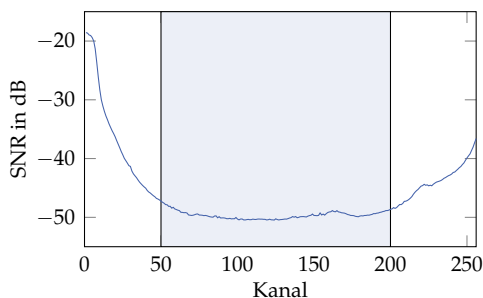


Abbildung 5.7 Abhängigkeit des Signal-Rausch-Verhältnisses vom Sensor-kanal gemittelt über alle Pixel. Zu den Randbereichen steigt das Rauschen an, weshalb der Bereich von Kanal 51 bis 200 mit vergleichsweise konstantem Rauschniveau ausgewählt wird (Markierung).

Um ein ausreichendes Signal-Rausch-Verhältnis für spätere Auswertungen sicherzustellen, wird nur ein Teil der ursprünglich 256 Kanäle genutzt. Die im Folgenden gezeigten Auswertungen basieren auf den Kanälen 51 bis 200, was einem spektralen Bereich von 1222 bis 2162 nm entspricht.

5.2.5 Defekte Pixel

Neben dem Weißabgleich und der Auswahl gültiger Sensorkanäle müssen defekte Pixel erkannt und korrigiert werden. Dies sind meist Pixel, die über- oder unterempfindlich sind und deshalb einen zu hohen oder zu niedrigen Wert anzeigen. Ursache für defekte Pixel sind Fertigungsungenauigkeiten und Alterungsprozesse. Ein Beispiel für die Auswirkung defekter Pixel ist in Abbildung 5.8 zu sehen.

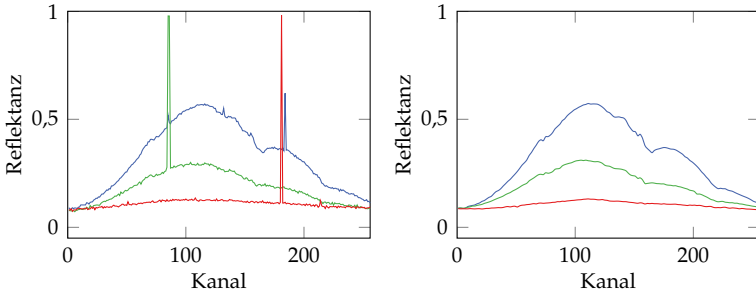


Abbildung 5.8 Eine Auswahl an Spektren mit defekten Pixeln; links vor der Korrektur, rechts nach der Korrektur.

Die defekten Pixel liefern einen Wert, der von den Nachbarpixeln stark abweicht. Im Spektrum sind diese als Ausreißer nach oben oder unten zu erkennen. Häufig treten defekte Pixel nebeneinander auf.

5.2.5.1 Detektion defekter Pixel

Für die Detektion der defekten Pixel kommen zunächst die NUC-Koeffizienten in Betracht, da sich defekte Pixel durch einen besonders hohen Dunkelstrom oder eine sehr kleine oder sehr große Empfindlichkeit auszeichnen und damit in den NUC-Koeffizienten erkennbar sind. Allerdings müssen hierfür zunächst die NUC-Koeffizienten ermittelt werden. Steht nur eine einzelne Aufnahme zur Verfügung, so können mithilfe von Differentialfiltern Ausreißer erkannt und als defekte Pixel identifiziert werden. Dies kann in nur einer Dimension, z. B. in den Verläufen der Spektren, geschehen, oder auch in der gesamten Sensorfläche, wobei dann eine Richtung der spektralen Information und die andere der örtlichen Information entspricht. Als hilfreich hat sich hier auch die Differenzbildung mit einem Median-gefilterten Bild herausgestellt, wodurch defekte Pixel gut erkannt werden können.

5.2.5.2 Umgang mit defekten Pixeln

Mit defekten Pixeln kann auf unterschiedliche Art verfahren werden. Am einfachsten ist, die entsprechenden Messwerte von weiteren Berechnungen auszuschließen. Dies ist vor allem bei Untersuchungen, die nur spektrale Information nutzen, sinnvoll.

Eine andere Möglichkeit dagegen ist, defekte Pixel zu korrigieren und durch andere Messwerte zu ersetzen. Hierbei ist es naheliegend, den Wert als Interpolation benachbarter Messwerte zu wählen. Die Interpolation kann beispielsweise nur in spektrale Richtung erfolgen, was mit kleinem Rechenaufwand bereits gute Ergebnisse bringt, da die Spektren einen relativ glatten Verlauf aufweisen. Daneben ist auch eine Interpolation in zwei oder drei Dimensionen durch Hinzunahme der örtlichen Information möglich. Letztere ist jedoch wesentlich aufwendiger zu implementieren. In Abbildung 5.8 ist das korrigierte Spektrum abgebildet, welches durch Interpolation in spektrale Richtung erzeugt wurde.

5.2.6 Normierung

Für eine bessere Vergleichbarkeit zwischen Aufnahmen sowie den Pixeln einer einzelnen Aufnahme gibt es verschiedene Möglichkeiten, die Messdaten zu normieren. So kann beispielsweise auf den minimalen und maximalen Wert des Spektrums normiert werden. Alle Messdaten sind dann über den gleichen Bereich gespreizt. Eine andere Möglichkeit ist die Normierung auf die Energie des Spektrums oder die Summe aller Kanäle. Zuletzt kann ein Spektrum auch durch Subtraktion des Mittelwerts und Division mit der Standardabweichung normiert werden. Es hat dann den Mittelwert 0 und die Varianz 1.

Der Vorteil der Normierung soll an Beispieldaten in Abbildung 5.9 verdeutlicht werden. Es sind die Spektren eines Materials an unterschiedlichen Positionen gezeigt, welche sich deutlich in der Signalamplitude unterscheiden. Durch die Normierung liegen die einzelnen Realisierungen nahe beieinander und die Gemeinsamkeiten der Spektren werden deutlich.

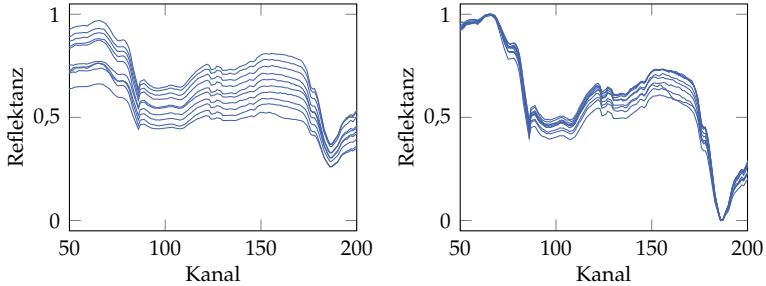


Abbildung 5.9 Mehrere Spektren eines Materials: links ohne Normierung, rechts auf Maximum und Minimum normiert.

5.3 Datensätze

Die Auswertung der verschiedenen Verfahren, welche in dieser Arbeit vorgestellt werden, erfolgt mit mehreren Datensätzen. Die Datensätze wurden so gewählt, dass sie zum einen ein möglichst konkretes Anwendungsbeispiel zur Materialklassifikation in Inspektionsanlagen widerspiegeln. Zum anderen wurde auch berücksichtigt, dass eine Evaluation der Verfahren mit den Datensätzen möglich ist. Insgesamt werden in den nächsten Kapiteln Ergebnisse anhand dreier Messdatensätze vorgestellt, die im Folgenden kurz vorgestellt werden sollen.



(a) einzelne Materialien



(b) Materialien gemischt

Abbildung 5.10 Farbaufnahmen des Lebensmitteldatensatzes.

5.3.1 Lebensmittel

Der Lebensmitteldatensatz spiegelt ein klassisches Sortierproblem wider, welches aus einem Gutprodukt besteht, das von verschiedenen Fremdmaterialien getrennt werden soll. Als Gutmaterial wurden in diesem Fall getrocknete Zwiebeln gewählt, die Fremdmaterialien sind verschiedene Verpackungsmaterialien wie Holz, Kunststoff, Papier oder Paketschnur. Abbildung 5.10 zeigt ein RGB-Bild der verschiedenen Materialien und Abbildung 5.11 die zugehörigen mittleren Spektren.

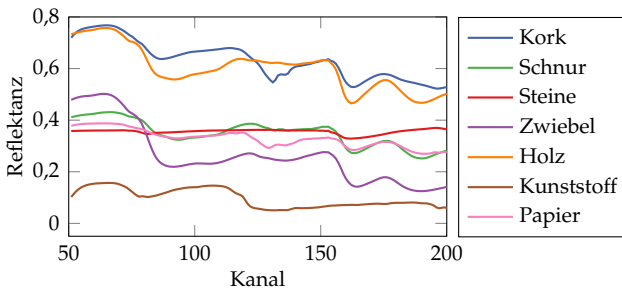


Abbildung 5.11 Mittlere Spektren der einzelnen Materialien des Lebensmitteldatensatzes.

Wie in dem Farbbild zu sehen ist, unterscheiden sich die Materialien im sichtbaren Spektralbereich nur sehr wenig, was in der Abbildung der gemischten Materialien noch deutlicher wird. Da sich die Materialien farblich nur schlecht voneinander abheben, ist eine Analyse im Nahinfrarotbereich naheliegend. Der Datensatz wird in dieser Arbeit für verschiedene Problemstellungen der Bandselektion und harten Klassifikation genutzt.

5.3.2 Minerale

Eine zweite Problemstellung, anhand derer vor allem die Methoden der Bandselektion erprobt werden, ist ein Datensatz mit verschiedenen Mineralen. Die Anwendung von Nahinfrarotkameras im Bergbau gilt als ein zukunftssträchtiges Aufgabengebiet. Abbildung 5.12 zeigt verschiedene

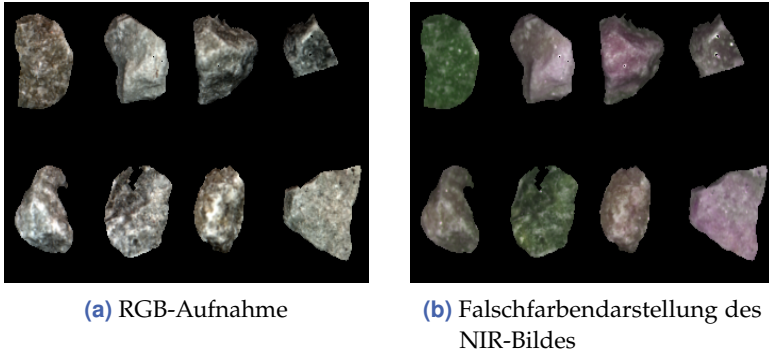


Abbildung 5.12 Einige Beispielobjekte aus dem Mineraldatensatz.

Minerale, wie sie im Bergbau vorkommen und voneinander unterschieden werden sollen. Gleichzeitig ist ein Falschfarbenbild des NIR-Bereichs gezeigt. Es ist allerdings nur ein Teil der Objekte und Problemstellungen abgebildet. Insgesamt wurden mehrere Problemstellungen untersucht, in denen es meist darum ging, ein Material von einem zweiten zu unterscheiden. Daher wird auch an diesem Datensatz hauptsächlich die Klassifikation und Bandselektion untersucht.

5.3.3 Pulver

Mit einem dritten Datensatz können Entmischungsansätze evaluiert werden. Um eine Mischung von Materialien herzustellen, eignen sich Pulver besonders gut. Daher wurde dieser Ansatz gewählt. Der Datensatz besteht aus zwei Aufnahmen, in denen jeweils fünf Materialien in unterschiedlichen Mischungsverhältnissen vorliegen.

In der ersten Aufnahme sind alle Kombinationen der Anteile $a_i \in \{0, 1/4, 1/2, 3/4, 1\}$ vertreten. In der zweiten Aufnahme sind die Mischungsverhältnisse feiner abgestuft: $a_i \in \{1/8, 1/4, 3/8, 1/2\}$, wobei hier in jeder Mischung alle fünf Materialien vertreten sind. Die Normierungsbedingung ist in beiden Aufnahmen erfüllt, d. h. die Anteile summieren sich jeweils zu eins. Aus diesen Bedingungen ergeben sich 70 verschiedene Mischungen für die erste Aufnahme und 40 für die zweite.

Die Mischkoeffizienten sind für die Annahme, dass nur drei Materialien gemischt werden, in Abbildung 5.13 verdeutlicht. Während für die erste Aufnahme alle Verhältnisse gewählt wurden, wurden für die zweite Aufnahme nur die inneren Mischungen gewählt. Die verschiedenen Mischkoeffizienten und die Auflistung der Materialien finden sich im Anhang (siehe A.1).

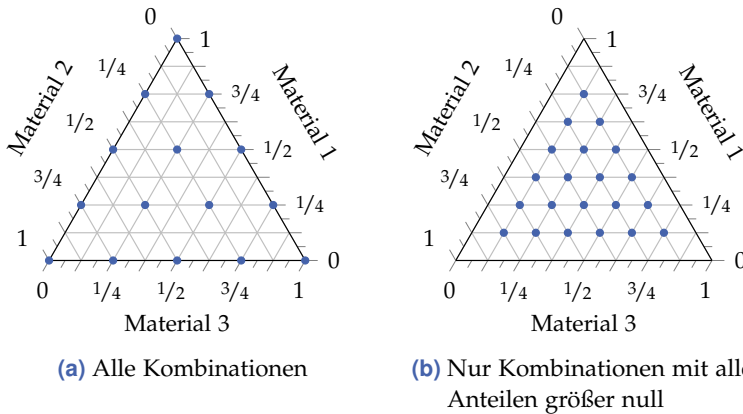


Abbildung 5.13 Verdeutlichung der Mischkoeffizienten am Beispiel von drei Materialien. Die einzelnen Koeffizienten nehmen Werte zwischen null und eins an und summieren sich jeweils zu eins.

Abbildung 5.14 zeigt eine Falschfarbendarstellung der hyperspektralen Aufnahme. Die Mischungen wurden nach Volumenanteilen entsprechend den Mischkoeffizienten erstellt und in einen Behälter mit vielen gleich großen Vertiefungen gefüllt. Die Spektren der einzelnen Materialien sind in Abbildung 5.15 zu sehen.

Die Materialien wurden so gewählt, dass sich die meisten Spektren gut voneinander unterscheiden, aber dass auch manche Spektren sehr nahe aneinander liegen, um die Grenzen der Entmischungsansätze darzustellen.

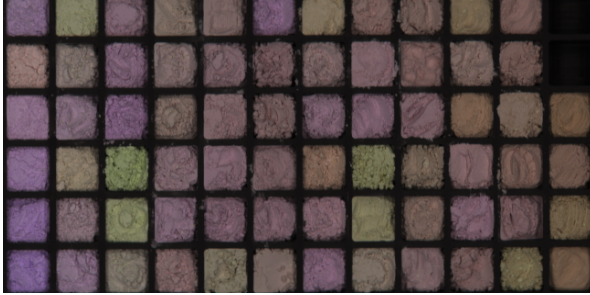


Abbildung 5.14 Falschfarbendarstellung der NIR-Aufnahme des Datensatzes *Pulver 1*. In jeder der 70 Vertiefungen befindet sich eine Mischung aus fünf weißen Pulvern, wobei sich alle Mischungsverhältnisse unterscheiden.

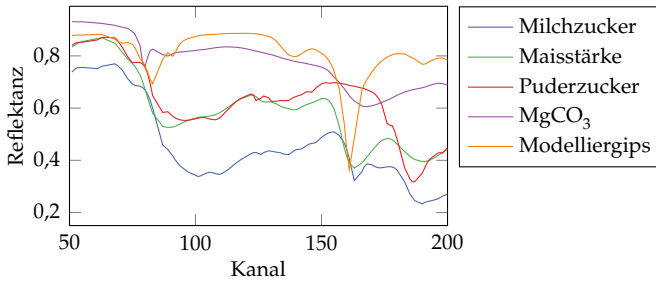


Abbildung 5.15 Mittlere Spektren der einzelnen Materialien des Pulverdatensatzes.

5.4 Umsetzung der Verfahren

In diesem Abschnitt wird auf die Umsetzung der Verfahren sowie die Simulation von Messdaten eingegangen.

5.4.1 Programmierung

Sämtliche Untersuchungen wurden mit dem Softwarepaket *Matlab* umgesetzt, wobei teilweise Realisierungen in C++ verwendet wurden. Für die Untersuchungen von hyperspektralen Daten gibt es schon einige öffentliche Programmpakete. Es wurde hiervon auf die MATLAB Hyperspectral Toolbox zurückgegriffen und diese erweitert [117].

Für die einheitliche Datenhaltung und konsistente Programmierung sowie Auswertung wurden ein objektorientierter Ansatz gewählt, d. h. Klassen für Messungen, Datensätze, Sensoren etc. definiert und in deren Methoden die unterschiedlichen Verfahren und Analysen umgesetzt. Zusätzlich wurde eine Datenbank erstellt, in der alle Messdaten mit zugehörigen Metainformationen abgelegt werden können.

5.4.2 Simulation

Ziel der Simulation hyperspektraler Messdaten ist, Messdaten möglichst gut nachzubilden. Simulierte Daten wurden hauptsächlich für die Evaluation der Mischmodelle verwendet. Hierfür müssen Spektren und Mischkoeffizienten modelliert werden.

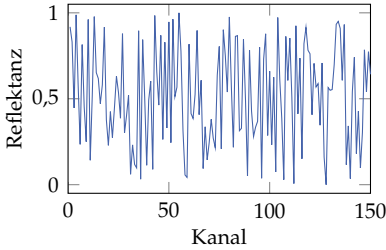
5.4.2.1 Spektren

Zunächst können Spektren aus Messungen extrahiert werden und in einer Simulation neu zusammengefügt werden. Darüber hinaus können auch künstliche Spektren generiert werden. Bei der Verwendung mehrdimensionaler Zufallsvektoren muss allerdings berücksichtigt werden, dass Spektren eine hohe Korrelation benachbarter Kanäle aufweisen.

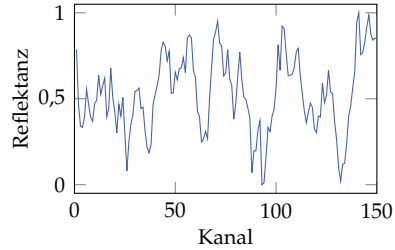
Eine zweite Art der Simulation von Spektren ist physikalisch motiviert. Ein Spektrum entsteht durch die Überlagerung verschiedener Absorpti-

onsbänden. Dies wird durch verschiedene Gaußkurven, die verschoben und gewichtet werden, nachgebildet.

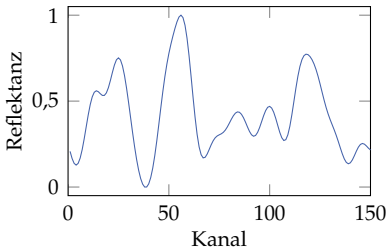
Abbildung 5.16 zeigt verschiedene Spektren, die auf die beschriebenen Arten erzeugt wurden.



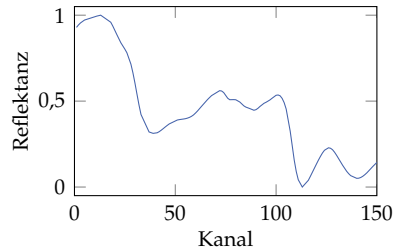
(a) Gleichverteilung



(b) Gleichverteilung mit hoher Korrelation



(c) Überlagerung von Gaußkurven



(d) Gemessenes Spektrum

Abbildung 5.16 Unterschiedlich erzeugte Spektren für die Simulation hyperspektraler Daten.

5.4.2.2 Mischkoeffizienten

Mischkoeffizienten können als Zufallsvariablen einer Dirichlet-Verteilung gezogen werden. Dadurch werden die Normierungs- und Nichtnegativitätsbedingung eingehalten. Für die Auswertung von Regularisierungsansätzen ist es hilfreich, dass bestimmte örtliche Abhängigkeiten zwischen den Koeffizienten bestehen. Hierfür können eine kleine lokale Varianz oder lineare Verläufe gefordert werden.

Um ein festes Beispiel mit fünf verschiedenen Materialien zu haben, wird eine Verteilung aus den Arbeiten von Plaza et al. verwendet [124]. Hierbei sind in jeder Ecke eines Quadrats und in der Mitte reine Materialien vertreten, deren Anteil linear abnimmt (vgl. Abbildung 5.17).

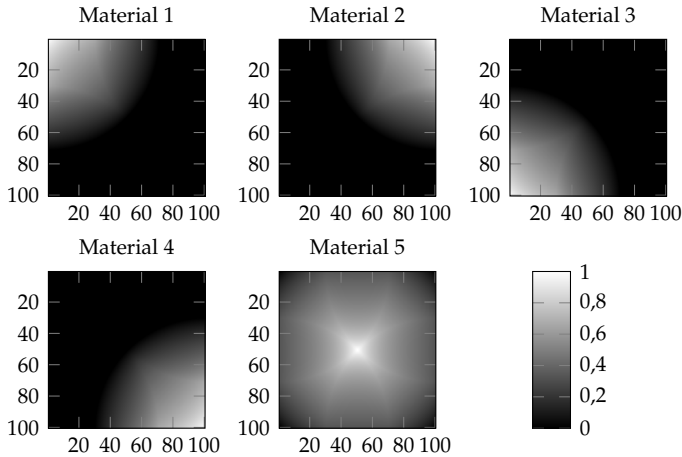


Abbildung 5.17 Örtliche Verteilung der Mischkoeffizienten für fünf Materialien beim Beispieldatensatz *Kreise*. An den vier Ecken und im Zentrum des Quadrats sind reine Materialien vertreten.

Verteilungen von Mischkoeffizienten mit vorgegebener lokaler Varianz werden verwendet, um Regularisierungsansätze zu bewerten, welche die örtliche Varianz berücksichtigen. Hierfür werden ebenfalls Verteilungen zufällig erstellt. Abbildung 5.18 zeigt solche Verteilungen für fünf Materialien bei unterschiedlicher Stärke der Varianz für einen 3×3 Pixel großen Bildausschnitt.

5.4.2.3 Sensorkennlinien

Für die Untersuchung des erweiterten Mischmodells müssen außerdem Sensorkennlinien nachgebildet werden. Hierfür werden für jeden Ka-

nal entweder gauß- oder rechteckförmige Filterkennlinien angenommen. Die Empfindlichkeiten pro Kanal können sich bei multi- oder hyperspektralen Daten ggf. auch überlappen. Außerdem ist eine Normierung, beispielsweise auf die Summe der Kanäle, möglich.

5.4.2.4 Rauschen

Viele Ergebnisse sind abhängig von der Höhe des Rauschens. Dieses wird als additives weißes Rauschen modelliert und dessen Größe als SNR angegeben. Das SNR wird als Verhältnis aus dem 50 %-Wert der Spektren und der Standardabweichung des Rauschens definiert.

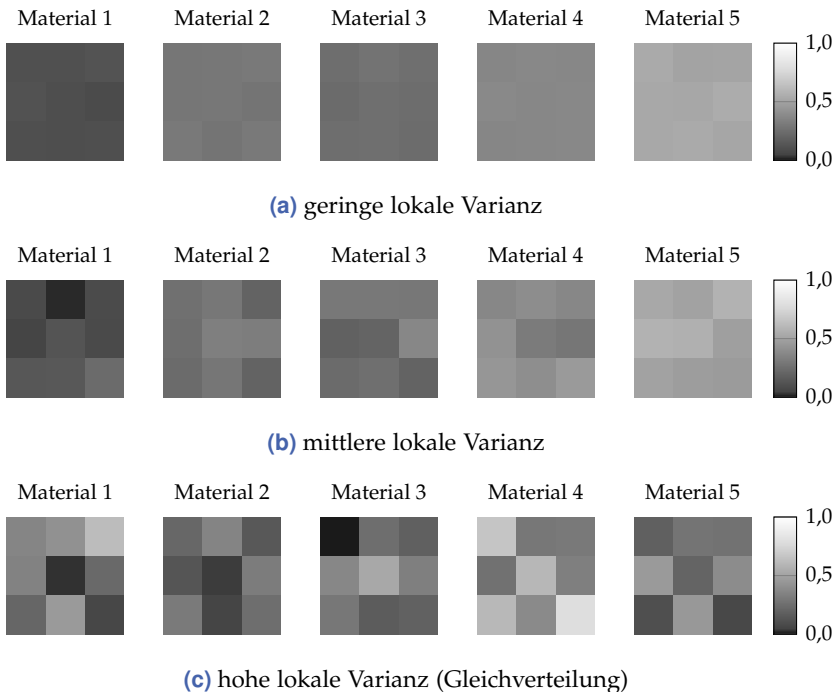


Abbildung 5.18 Simulierte Mischkoeffizienten mit unterschiedlicher lokaler Varianz in einer 3×3 -Pixel-Region.

6 Filterwahl für die Materialklassifikation

6.1 Einführung

Für die Materialklassifikation in Inspektionssystemen ist es häufig notwendig, in kürzester Zeit eine Entscheidung zu treffen. Dies gilt insbesondere für automatische Sortieranlagen, wo nur die Zeit zwischen optischer Bildgewinnung und Ausschussebene zur Verfügung steht. Außerdem ist immer eine möglichst kostengünstige Implementierung gewünscht, welche dennoch ein möglichst gutes Klassifikationsergebnis liefert. Um diese Ziele gleichzeitig zu erfüllen, muss bereits beim Entwurf von Inspektionssystemen Vorwissen über die Inspektionsaufgabe einfließen. Dadurch können die Implementierung spezifisch auf die Aufgabe angepasst und die Anforderungen an Rechenzeit und Kosten erfüllt werden. In diesem Kapitel wird die Filterauswahl als zentraler Teil eines solchen spezifischen Implementierungsentwurfs vorgestellt.

Zur optischen Materialklassifikation kann das Reflektanzspektrum herangezogen werden, da dieses wertvolle Informationen über die chemische Zusammensetzung eines Objekts besitzt (vgl. Abschnitt 2.2). Gleichzeitig ist es in Inspektionssystemen notwendig, dieses Spektrum in räumlicher Auflösung zu kennen. Dies ist zwar mit hyperspektralen Kameras möglich, doch erfüllen diese meist nicht die beschriebenen Anforderungen: Im Vergleich zu multispektralen Kameras sind sie sehr teuer, benötigen lange Belichtungszeiten und die gewonnenen Daten können nur mit hohem Rechenaufwand verarbeitet werden. Aus diesem Grund entstand die Idee, eine hyperspektrale Kamera nur im Labor zu nutzen und dann mithilfe der umfangreichen Informationen, die dabei gewonnen werden, eines oder mehrere optimale optische Filter zu bestimmen. Mit

diesem Ergebnis kann ein Inspektionssystem entworfen und realisiert werden, welches ein problemspezifisches optisches Aufnahmesystem enthält und die obigen Anforderungen erfüllt.

Bei diesem Vorgehen werden verschiedene Sensoren, Beleuchtungen und optische Filter simuliert, indem die hyperspektralen Daten modifiziert werden. Ein optisches Filter mit einer bestimmten Kennlinie entspricht hierbei einer Linearkombination der Kanäle des hyperspektralen Bildes (vgl. Abschnitt 4.4.2.1). Das vorgeschlagene Vorgehen bringt einige Vorteile mit sich:

- Aufnahmen unter kontrollierten Laborbedingungen,
- Erweiterung auf andere Spektralbereiche oder andere physikalischen Effekte möglich,
- Datenbank kann begleitend erstellt werden,
- Expertenwissen kann konzentriert eingesetzt werden,
- hohe Investitionskosten sind nur einmalig zu tätigen,
- keine Entwicklungsarbeit am Ort der Anwendung.

Demgegenüber steht der Nachteil, dass die optischen Eigenschaften des Laboraufbaus denen des Inspektionssystems entsprechen oder diese ineinander überführbar sein müssen. Da eine Anlage aufgrund einer Auswahl an Trainingsobjekten erstellt wird, muss zusätzlich sichergestellt sein, dass diese Objekte die Eigenschaften der Materialien, welche später im Inspektionssystem untersucht werden sollen, ausreichend gut widerspiegeln.

Um aus den aufgenommenen Labordaten eine Filter- oder Sensorauswahl zu treffen, wird auf die Merkmalsextraktions- und -selektionsansätze sowie auf die Bandselektionsverfahren aus Abschnitt 3.2.2.1 bzw. 4.4 zurückgegriffen. Zusätzlich wurden aufgrund der speziellen Anforderungen für die Materialklassifikation in Inspektionssystemen weitere Auswahlverfahren entwickelt und bestehende Ansätze erweitert. Auf diese wird im Folgenden eingegangen, wobei besonderer Wert auf die Robustheit der Lösung gelegt wurde.

Die verschiedenen Verfahren zur Filterwahl sollen anhand des Beispieldatensatzes *Lebensmittel* (vgl. Abschnitt 5.3.1) evaluiert werden. Dieser ist in Abbildung 6.1(a) als RGB-Bild und in NIR-Falschfarbendarstellung ausgewählter Kanäle (Abbildung 6.1(b)) zu sehen. Im RGB-Bild sind die verschiedenen Materialien nur schwer erkennbar, während in der Falschfarbendarstellung Unterschiede deutlich werden.

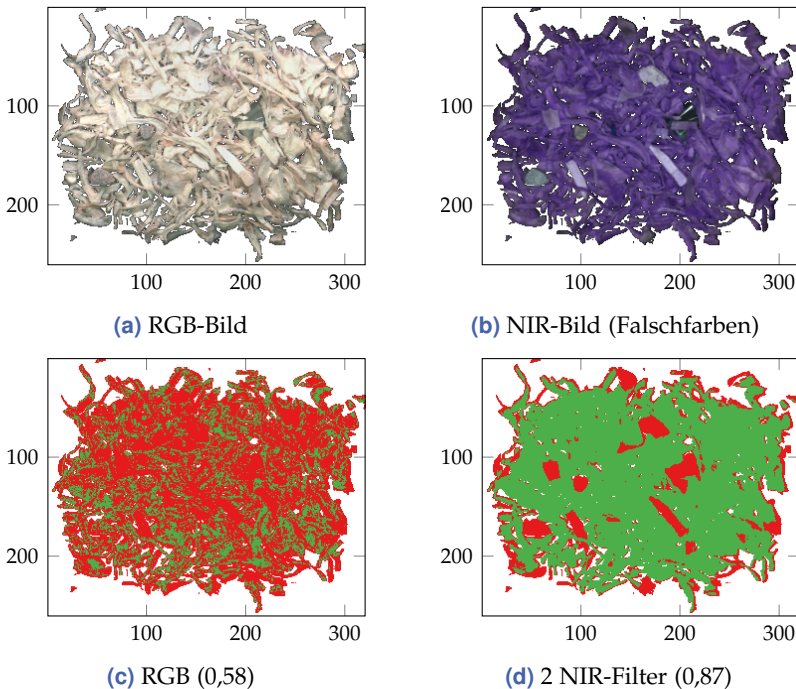


Abbildung 6.1 Aufnahmen und Klassifikation des Beispieldatensatzes *Lebensmittel*: links RGB-Daten, rechts NIR-Daten (Angabe der Klassifikationsraten in Klammern).

In den Abbildungen 6.1(c) und 6.1(d) ist das Ergebnis einer Klassifikation des Datensatzes mittels LDA zu sehen. Insgesamt sollen sechs verschiedene Arten an Materialien unterschieden werden. Die Klassifikation der RGB-Daten liefert nur eine pixelbasierte Klassifikationsrate

von 0,58, während mit nur zwei NIR-Filtern bereits eine Klassifikationsrate von 0,87 erreicht werden kann. Dieses Beispiel zeigt, dass eine Klassifikation im NIR-Bereich für bestimmte Probleme, welche im sichtbaren Spektralbereich nur schwer gelöst werden können, gute Ergebnisse liefern kann.

Noch deutlicher wird der Unterschied zwischen RGB- und NIR-Aufnahmen, wenn die Messdaten in einem Streudiagramm dargestellt werden (Abbildung 6.2). Hier sind jeweils die ersten beiden Hauptkomponenten einer PCA aufgetragen. Im Streudiagramm der NIR-Daten sind die einzelnen Klassen besser getrennt, was eine bessere Klassifikation ermöglicht.

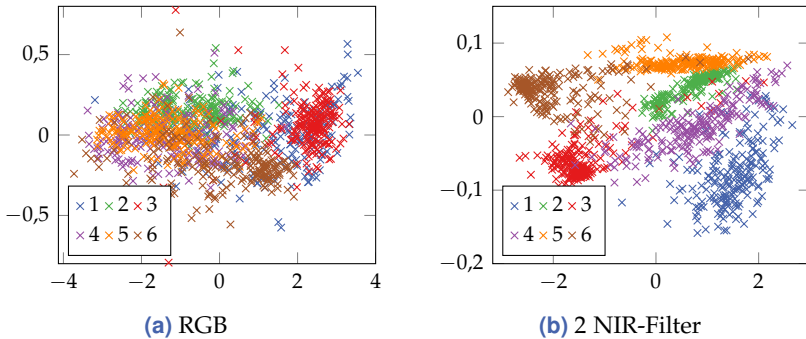


Abbildung 6.2 Streudiagramme für den Lebensmitteldatensatz. Für die Darstellung wurden die ersten beiden Hauptkomponenten einer PCA gewählt.

6.2 Anforderungen an die Filterwahl

Aus der Motivation für eine Filterwahl mittels hyperspektraler Daten beim Entwurf von Inspektionssystemen werden einige Anforderungen an ein solches Verfahren und die zugehörige Lösung deutlich. Um eine möglichst schnelle Klassifikation zu ermöglichen, muss zum einen die Aufnahme schnell erfolgen und zum anderen der Rechenaufwand gering sein. Beides kann durch eine möglichst geringe Anzahl an Sensor-

kanälen erreicht werden. Dadurch lassen sich gleichzeitig die Forderung an geringe Kosten erfüllen, vor allem wenn auf Spektralbereiche mit kostengünstigen Sensoren (vgl. Abschnitt 2.2.2.2) zurückgegriffen wird. Zusätzlich können neben der spezifischen Filterkennlinie auch optische Filter eines Katalogs ausgewählt werden. Hierdurch verringert sich der Investitionsaufwand meist nochmals.

Über den ökonomischen Anforderungen an Schnelligkeit und Kosten steht natürlich das Ziel, eine möglichst gute Klassifikation zu erreichen. Da für die Klassifikation unterschiedliche Ansätze verwendet werden können, hängt die optimale Filterauswahl ggf. vom Klassifikationsalgorithmus ab. Wünschenswert ist daher eine Filterwahl, welche für verschiedene Algorithmen die optimale Wahl ist.

Da die Filterauswahl im Labor geschieht, muss sichergestellt sein, dass die gewünschten Ergebnisse auch in der Anwendung erzielt werden. Daher wird eine möglichst robuste Filterkombination gefordert. Die Filterauswahl soll robust gegenüber drei Haupteinflüssen sein (vgl. Abbildung 6.3).

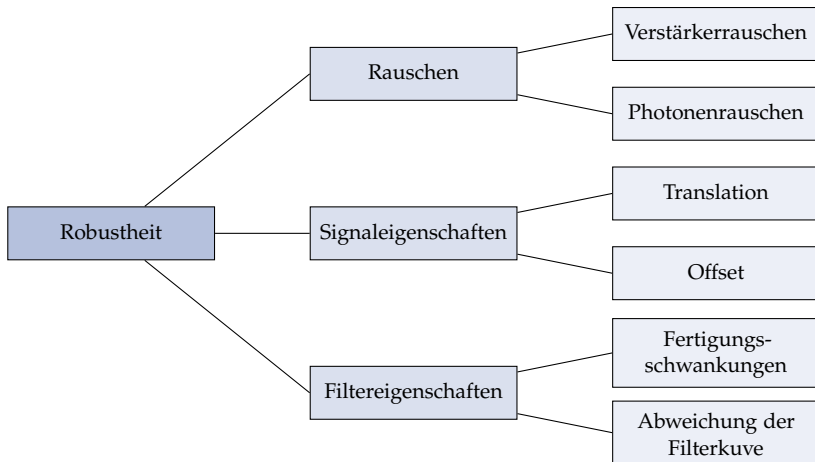


Abbildung 6.3 Robustheit der Filterwahl.

Dies ist zunächst das Signalrauschen, welches sich aus Photonenrauschen, Verstärkerrauschen, Quantisierungsrauschen und weiteren Einflüssen zusammensetzt. Insbesondere Filter mit einem schmalen Durchlassbereich oder einer starken Dämpfung lassen weniger Licht auf den Sensor fallen. Dadurch kommt es zunächst zu einem verringerten Signal-Rausch-Verhältnis aufgrund des Photonenrauschens und anschließend zu zusätzlichem Rauschen aufgrund der höheren Verstärkung der Signale (vgl. Abschnitt 2.3.2.3).

Die Lösung soll außerdem robust gegenüber den Charakteristiken des Sensorsignals sein, welche aufgrund der Messumgebung oder des Inspektionsguts auftreten. Dies können ein Offset oder eine Translation des Messsignals z. B. durch die Luftfeuchte oder die Feuchtigkeit der Objekte sein. Es können aber auch kleine Schwankungen innerhalb der zu sortierenden Objekte auftreten, welche beispielsweise durch verschiedene Chargen hervorgerufen werden. Darunter sind auch Änderungen zu verstehen, die beispielsweise durch Verschmutzung der Linse oder Veränderungen der Beleuchtung entstehen.

Zuletzt soll die Filterwahl an sich robust sein, d. h. eine Abweichung der Filterparameter von den gewählten Parametern sollte einen möglichst geringen Einfluss auf die Klassifikationsgüte haben. Die Abweichungen des Filters von den im Labor bestimmten Parametern können durch Fertigungsschwankungen, Verschmutzung, Abnutzung, fehlerhafte Kalibrierung oder sonstige Veränderungen hervorgerufen werden.

6.3 Auswahl des Klassifikators

Verschiedene Klassifikatoren unterscheiden sich stark in ihrer Funktionsweise. In Kapitel 3.2 wurden bereits einige Klassifikatoren beschrieben, welche hier nun verglichen werden. Hierfür wird der Lebensmitteldatensatz mit verschiedenen Klassifikatoren (LDA, QDA, SVM, kNN und Entscheidungsbaum) und unterschiedlichen Merkmalen klassifiziert. Als Merkmale werden zufällige Kanäle des hyperspektralen Bildes verwendet. In Abbildung 6.4 sind die Klassifikationsraten der verschiedenen Verfahren in Abhängigkeit der Kanalanzahl dargestellt.

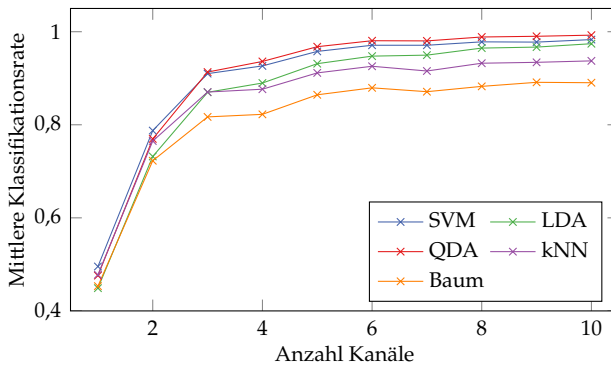


Abbildung 6.4 Mittlere Klassifikationsraten nach einer 10-fachen Kreuzvalidierung verschiedener Klassifikatoren für den Lebensmitteldatensatz bei unterschiedlicher Anzahl an Kanälen.

Für die SVM wurde ein Gauß-Kern verwendet, dessen Parameter mithilfe der *Grid-Search*-Methode und der Kreuzvalidierung bestimmt wurden. Ebenso wurde die Schlupfvariable bestimmt. Bei der kNN wurde $k = 5$ gewählt und keine zusätzliche Prototypenselektion oder -extraktion durchgeführt.

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Klassifikationsrate bei allen Klassifikatoren mit steigender Anzahl an Merkmalen zunimmt. Alle Klassifikationsverfahren zeigen einen ähnlichen Verlauf, wobei der Entscheidungsbaum die geringste Klassifikationsgüte erreicht. Die SVM und die QDA zeigen fast die gleiche Klassifikationsrate und erreichen die besten Ergebnisse.

Im weiteren Verlauf soll das Augenmerk weniger auf den Klassifikationsverfahren, sondern vielmehr auf den Merkmalen liegen. Deshalb werden die weiteren Analysen, falls nicht anders angegeben, der Einfachheit halber mit der linearen Diskriminanzanalyse (vgl. Abschnitt 3.2.3.2) durchgeführt.

6.4 Bewertung einer Filterkombination

Für die Auswahl der Sensoren und der passenden optischen Filter muss jede Filterkombination gesondert bewertet werden. Hierfür können Gütemaße wie Distanzmaße oder Klassifikationsfehler herangezogen werden. Die Bewertung mit Distanzmaßen entspricht dabei einem Filteransatz zur Merkmalsselektion, während der Klassifikationsfehler bei Wrapper-Ansätzen betrachtet wird. Je nach Dimension und Implementierung ist der Wrapper-Ansatz zu rechenaufwendig, weshalb besonderer Wert auf die Bewertung mit Distanzmaßen gelegt wird. Diese sollen die Anforderungen von oben an Trennbarkeit und Robustheit möglichst gut widerspiegeln.

Es werden folgende Gütemaße zur Bewertung der Filterkombinationen herangezogen:

- Mahalanobis-Distanz, Bhattacharyya-Distanz, Jeffreys-Matusita-Distanz (3.1.5.1),
- Histogrammdistanzen (3.1.5.2),
- Transinformation, Relevanz und Redundanz (3.1.2.1 und 3.2.2.1),
- Klassifikationsfehler (3.2).

6.4.1 Eigenschaften der Bhattacharyya- und Mahalanobis-Distanz

Die Mahalanobis-Distanz und die darauf aufbauenden Bhattacharyya- und Jeffrey-Matusita-Distanzen werden häufig für die Bandselektion herangezogen (vgl. Abschnitt 4.4.1), bringen allerdings Nachteile bezüglich der Korrelation der Merkmale und der Robustheit der Filterwahl mit sich. Diese Zusammenhänge werden im Folgenden erläutert.

6.4.1.1 Verteilung der Messdaten im Merkmalsraum

Anhand der Verteilung von Messdaten lassen sich Aussagen über die Klassifikationsgüte treffen. Eine gute Trennbarkeit zeigt sich an einer

geringen Überlappung der Datenwolken zweier Klassen, was gleichbedeutend mit einem geringen Bayes-Fehler ist (vgl. Abschnitt 3.2.3.1). Zur Bestimmung des Bayes-Fehlers müssen die Wahrscheinlichkeitsdichten und die A-priori-Wahrscheinlichkeiten der Klassen allerdings bekannt sein und daher zunächst geschätzt werden. Im Folgenden sollen anschaulich einige Zusammenhänge anhand von 2D-Daten erläutert werden.

Ein großer Abstand zwischen den Klassen ermöglicht eine robuste Klassifikation. In Abbildung 6.5 ist die Verteilung zweier Klassen mit normalverteilten Wahrscheinlichkeitsdichten dargestellt. Der Abstand dieser Daten kann durch den Abstand der Mittelwerte ausgedrückt werden, die Überlappung wird durch die Fläche, welche die Kovarianz-Ellipsen einschließen, deutlich.

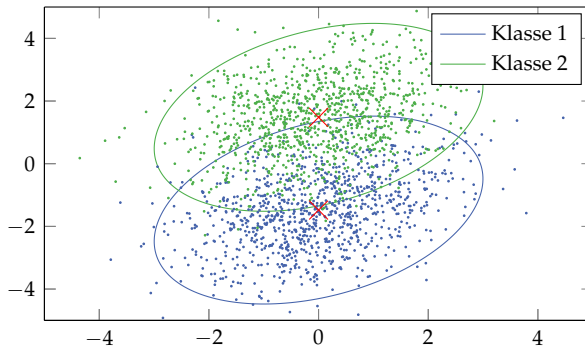


Abbildung 6.5 Normalverteilte Merkmalsvektoren zweier Klassen im zweidimensionalen Merkmalsraum mit den entsprechenden Mittelwerten und $2\text{-}\sigma$ -Ellipsen.

Um die beiden Eigenschaften Abstand und Überlappung in einem Parameter darzustellen, kann die Mahalanobis-Distanz verwendet werden. Für die Berechnung der Mahalanobis-Distanz wird von normalverteilten Merkmalsvektoren mit gleichen Kovarianzmatrizen ausgegangen. Die Mahalanobis-Distanz hängt dann direkt mit dem Bayes-Fehler zusammen. Stimmen diese Annahmen über die Verteilung, liefert die Lineare Diskriminanzanalyse als Klassifikator ebenfalls den Bayes-Fehler. Die Mahalanobis-Distanz ist also ein gutes Maß, um die Trennbarkeit zu

bewerten, vorausgesetzt die Daten sind normalverteilt.

Sind die Annahmen jedoch falsch, so kann die Mahalanobis-Distanz irreführende Ergebnisse liefern. Dies wird in Abbildung 6.6 gezeigt.

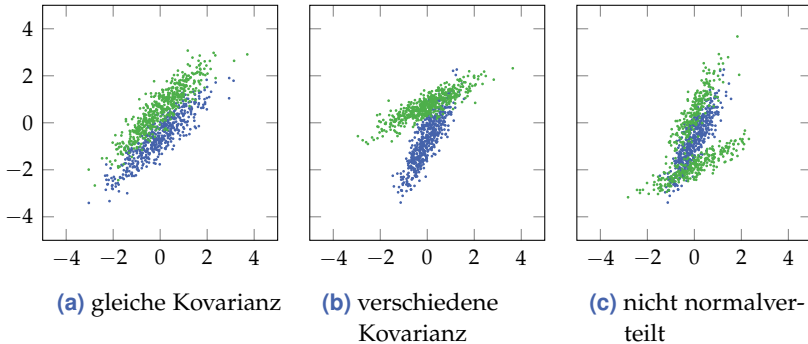


Abbildung 6.6 Merkmalsvektoren zweier Klassen mit drei verschiedenen Verteilungen. Die Verteilungen weisen alle die gleiche Mahalanobis-Distanz auf.

Hier sind die Merkmalsvektoren für jeweils zwei Klassen als Datenwolken dargestellt. Einmal handelt es sich um Merkmale, welche normalverteilt sind und eine gemeinsame Kovarianzmatrix besitzen. Das mittlere Bild zeigt normalverteilte Daten, die allerdings unterschiedliche Kovarianzmatrizen aufweisen. Zuletzt werden nicht normalverteilte Messdaten gezeigt. In allen drei Fällen ergibt sich die gleiche Mahalanobis-Distanz, wobei bei unterschiedlichen Kovarianzmatrizen jeweils das Mittel der Kovarianzen der beiden Klassen verwendet wurde. Es stellt sich nun die Frage, ob alle drei Verteilungen gleich gewünscht sind, oder ob eine den anderen vorzuziehen ist. Dies wird im Folgenden durch die Betrachtung der Korrelation der Merkmale beantwortet.

6.4.1.2 Korrelation der Merkmalsvektoren

Später vorgestellte Untersuchungen haben gezeigt, dass verschiedene Filterselektionsansätze zu sehr stark korrelierten Messdaten tendieren, wenn als Gütemaß die Mahalanobis-Distanz oder der Klassifikationsfehler verwendet wird. Die Zusammenhänge der zwischen Mahalanobis-

Distanz und der Korrelation verschiedener Merkmale sowie deren Auswirkungen auf die Klassifikation werden in diesem Abschnitt erläutert.

In Abbildung 6.7 sind wiederum drei Beispiele für die Verteilung von zweidimensionalen Merkmalsvektoren gezeigt. Diesmal gilt für alle Daten die Annahme der Normalverteilung mit identischen Kovarianzmatrizen. Die Korrelation ρ (vgl. Gleichung (3.18)) der beiden Merkmale nimmt von links nach rechts zu und der Abstand zwischen den Mittelwerten der Klassen wird geringer. Alle drei Verteilungen haben die gleiche Mahalanobis-Distanz bzw. den gleichen Bayes-Fehler. Allerdings ist die erste Verteilung wesentlich besser für eine Klassifikation geeignet als die anderen beiden, da hiermit eine robustere Klassifikation möglich ist. Dies soll an weiteren Beispielen gezeigt werden.

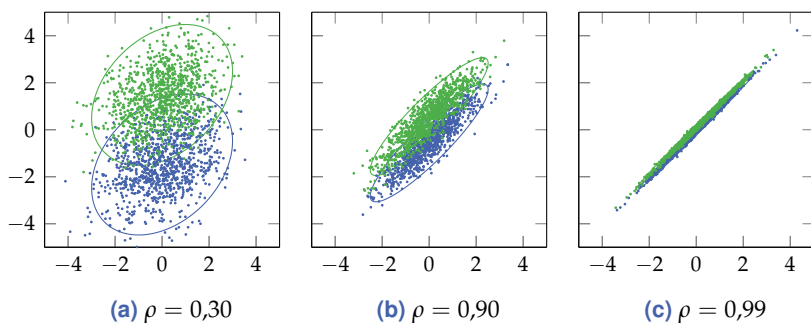


Abbildung 6.7 Drei Normalverteilungen mit unterschiedlicher Korrelation der Variablen. Die Kovarianzmatrizen sind für beide Klassen jeweils gleich. Alle drei Verteilungen haben den gleichen Bayes-Fehler.

Eine Reihe von normalverteilten Datenwolken mit gleichem Bayes-Fehler und unterschiedlicher Korrelation wird verschiedenen Einflüssen ausgesetzt und mithilfe einer LDA klassifiziert. Ohne die Einflüsse würde die Klassifikation denselben Bayes-Fehler liefern. Die Einflüsse sind ein additives Rauschen, die Diskretisierung der Merkmale und ein Offset der Merkmale, also eine Translation der Datenwolken. Sie stehen für die Veränderung der Messdaten und Sensoren, wie sie in Abschnitt 6.6 beschrieben werden.

Abbildung 6.8 zeigt den Einfluss von Rauschen, das den normalverteilten Daten hinzugefügt wurde. Je stärker die beiden Merkmale miteinander korreliert sind, desto stärker wirkt sich das Rauschen auf die Klassifikationsrate aus. Das Rauschen wird dabei als Signal-Rausch-Verhältnis in dB angegeben. Mit niedrigem Rauschen wird bei der Klassifikation ein Bayes-Fehler von 10 % erreicht, bei höherem Rauschen sinkt die Klassifikationsrate mit der Korrelation bis auf 50 % ab.

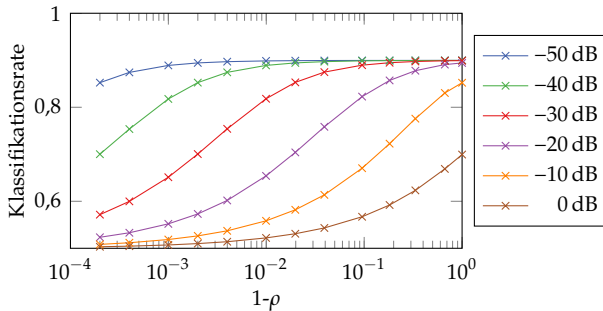


Abbildung 6.8 Abhängigkeit der Klassifikationsrate (LDA) von der Korrelation der Merkmale und dem Rauschen. Die Korrelation wird durch den Korrelationskoeffizienten ρ ausgedrückt, das Rauschen als Signal-Rausch-Verhältnis in dB.

Der Einfluss einer Translation auf die Daten, welcher im realen System durch Verschmutzung oder ähnliche Effekte entstehen könnte, ist in Abbildung 6.9 dargestellt. Der Offset wird als Anteil des Messbereichs aufgeführt. Es ist deutlich zu erkennen, dass stärker korrelierte Messdaten wesentlich empfindlicher auf eine Verschiebung der Daten reagieren. Bereits bei kleinen Verschiebungen von 1 % des Messbereichs nimmt die Klassifikationsgüte stark ab.

In Abbildung 6.10 wird der Einfluss einer geringeren diskreten Auflösung der Daten auf die Klassifikationsrate gezeigt. Während in der Laborumgebung mit sehr hochauflösten Daten gearbeitet werden kann (14 bit), ist ein solcher Einsatz unter realen Bedingungen in Inspektionsanlagen mit Echtzeitanforderungen nicht möglich. Daher ist gefordert, dass die Klassifikation auch bei Diskretisierungen mit weniger Stufen

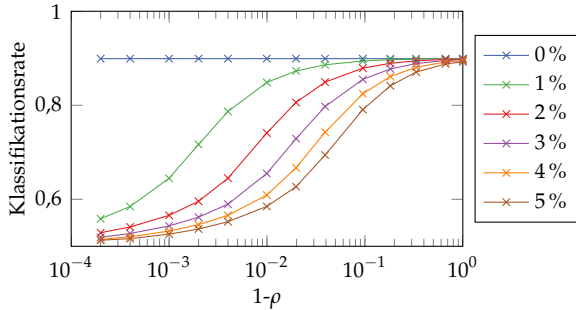


Abbildung 6.9 Abhängigkeit der Klassifikationsrate (LDA) von der Korrelation der Merkmale ρ und einem Offset der Merkmale als Anteil des Messbereichs.

gute Ergebnisse liefert. Es zeigt sich, dass mit unkorrelierten Messdaten die Klassifikationsrate durch die Diskretisierung geringer absinkt als mit stark korrelierten Daten. Der Verlauf gleicht der Darstellung in Abbildung 6.8, wo der Einfluss des Rauschens gezeigt wurde. Dies ist naheliegend, da die Diskretisierung auch durch Addition eines Quantisierungsrauschens beschrieben werden kann.

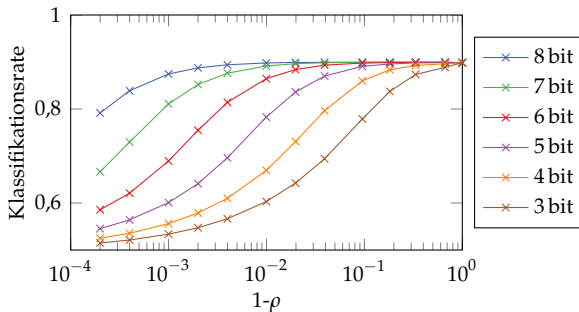


Abbildung 6.10 Abhängigkeit der Klassifikationsrate (LDA) von der Korrelation der Merkmale ρ und der Diskretisierung in bit.

Aus den Betrachtungen wird deutlich, dass die Mahalanobis-Distanz und andere Distanzmaße, welche mit ihr verwandt sind und häufig angewendet werden (Bhattacharyya-Distanz, Jeffreys-Matusita-Distanz), nicht immer geeignet sind, um sowohl Trennbarkeit als auch Robustheit der Klassifikation zu bewerten, da sie den Grad der Korrelation der Merkmale nicht berücksichtigen, obwohl dieser wie gezeigt einen großen Einfluss auf die Robustheit der Klassifikation hat. Um die Robustheit der Klassifikation mit in das Gütemaß einfließen zu lassen, gibt es zwei Möglichkeiten. Zum einen können ähnliche Variationen wie oben für die Messdaten durchgeführt und bewertet werden, zum anderen kann anstelle der Mahalanobis-Distanz ein anderes Gütemaß verwendet werden, welches von vornherein die Robustheit in Form der Unkorreliertheit berücksichtigt. Ein solches Distanzmaß stellt beispielsweise die Überlappung von Histogrammen dar.

6.4.2 Histogrammüberlappung als Distanzmaß

Für den Vergleich von Histogrammen und die Bewertung ihrer Distanz gibt es bereits eine Reihe von Ansätzen, wie sie in Abschnitt 3.1.5.2 beschrieben wurden. Histogrammbasierte Distanzmaße haben den Vorteil, dass kein Vorwissen über die Verteilung der Messdaten eingebracht werden muss. Die Auswertung erfolgt allein auf den Messdaten und deren Häufigkeiten.

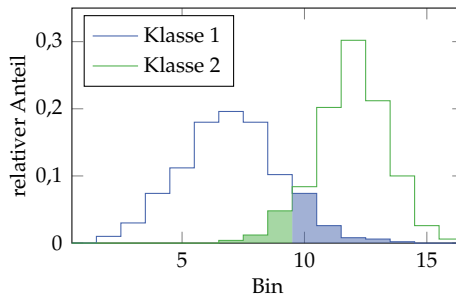


Abbildung 6.11 Überlappung zweier Histogramme verschiedener Klassen.
($D_{\cap} = 0,90$)

Mithilfe des Distanzmaßes sollen zwei Eigenschaften abgebildet werden: die Trennbarkeit und die Robustheit. Die Trennbarkeit lässt sich anhand der Überlappung der Histogramme verschiedener Klassen beschreiben. Abbildung 6.11 zeigt für den eindimensionalen Fall die Histogramme zweier Klassen. Dieser entspricht dem Bayes-Fehler, wenn die Histogramme als diskrete Wahrscheinlichkeitsdichten aufgefasst werden.

Anhand der Überlappung verschiedener Klassen bei unterschiedlichen Bingrößen lässt sich die Robustheit der Klassifikation bewerten. Abbildung 6.12 zeigt für zwei verschiedene Verteilungen die Bingrenzen mit unterschiedlichen Bingrößen.

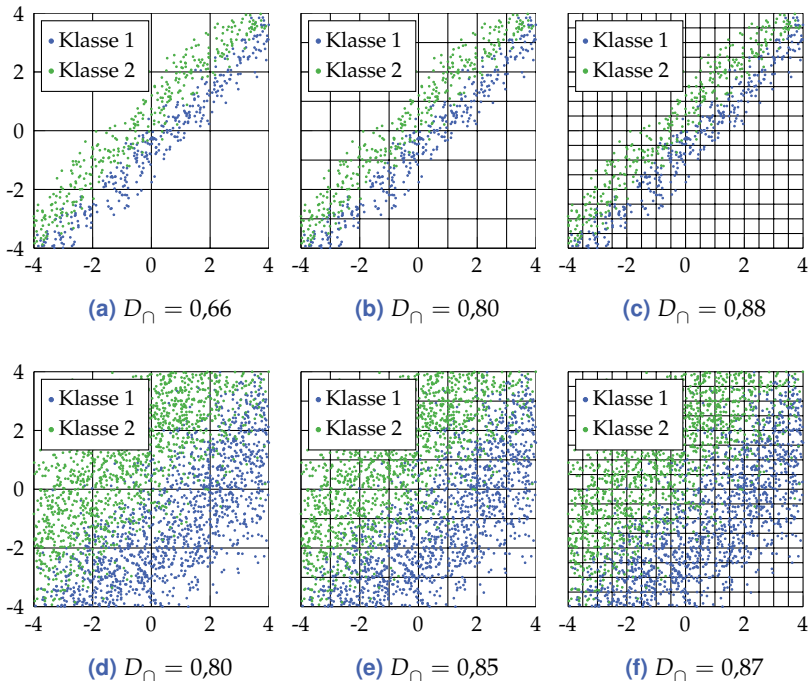


Abbildung 6.12 Unterschiedliche Überlappung zweidimensionaler Histogramme bei unterschiedlichen Binanzahlen und unterschiedlich starker Korrelation der Merkmale (oben stark, unten schwächer).

Der Bayes-Fehler ist wie oben 0,10, d. h. es sollte $D_{\cap} = 0,90$ gelten. Es zeigt sich, dass es zu unterschiedlichen Überlappungen bei verschiedenen Bingrößen kommt. Aus den aufgeführten Überlappungen wird deutlich, dass bei korrelierten Merkmalen eine geringere Binanzahl zu stärkerer Überlappung führt, während bei weniger korrelierten Merkmalen auch mit großen Bins nur eine kleine Überlappung gemessen wird. Da die unteren Verteilungen eine geringere Überlappung bei den größten Bins zeigen, wird die Klassifikation dieser Daten robuster als diejenige der ersten Zeile sein.

Das Gütemaß D_{\cap} soll nun mit den obigen Darstellungen zur Mahalanobis-Distanz verglichen werden. Dazu ist die Histogrammüberlappung für verschiedene Bingrößen und unterschiedliche Korrelationen in Abbildung 6.13 gezeigt. Mit erhöhter Korrelation sinkt das Gütemaß D_{\cap} stark ab, während die Mahalanobis-Distanz gleich bleibt. Je größer die Bins sind, desto stärker ist dieser Effekt. Wie oben gezeigt, ist eine möglichst hohe Bewertung unkorrelierter Merkmale gewünscht, weshalb sich dieses Gütemaß besser als die häufig verwendete Mahalanobis-Distanz eignet.

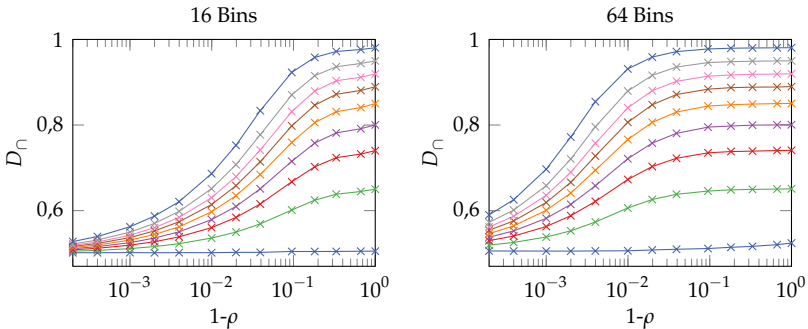


Abbildung 6.13 Überlappung der Histogramme D_{\cap} zweier Normalverteilungen mit konstantem Bayes-Fehler. Jede Kurve entspricht einem bestimmten Bayes-Fehler, welcher sich bei $\rho = 0$ ablesen lässt. Je geringer die Korrelation ρ der Merkmale, desto größer ist das Distanzmaß D_{\cap} . Bei geringer Binanzahl hat die Korrelation einen stärkeren Einfluss.

Kombination von Histogrammen mit unterschiedlicher Bingerößen

Die Überlappungen für verschiedene Bingerößen und -verteilungen können in einem Wert zusammengefasst werden. Es sei D_i das Distanzmaß bei der i -ten Bingeröße, so lassen sich beispielsweise die Distanzmaße

$$\sum D_i, \quad \sum \alpha_i D_i, \quad \min D_i \quad \text{und} \quad \max D_i \quad (6.1)$$

definieren. Die ersten beiden entsprechen der Summe bzw. Linearkombination der einzelnen Distanzen; die nächsten beiden der minimalen oder maximalen Distanz.

Mit dem beschriebenen Verfahren wurde ein Maß gefunden, welches datengetrieben die Trennbarkeit sowie die Robustheit der Klassifikation bewertet. Allerdings bringt dieses Verfahren auch Nachteile mit sich, und so muss an dieser Stelle auf den relativ hohen Rechenaufwand der D_{\cap} -Distanz hingewiesen werden. Dieser ist abhängig von der Anzahl an Merkmalen: Für eine hohe Anzahl steigt die Binanzahl und eine sinnvolle Aussage mithilfe von Histogrammen ist nur möglich, wenn eine sehr große Datenmenge vorliegt. Dementsprechend steigt der Berechnungsaufwand der Histogramme erheblich.

Ein großer Vorteil der D_{\cap} -Distanz ist allerdings, dass neben der Aussage über die Trennbarkeit auch zugleich ein Klassifikator in Form einer *Lookup table* (LUT) bestimmt wird, wenn die Zuordnung der Bins zu den Klassen als Klassifikator verwendet wird. Diese Art der Klassifikation kann im Einsatz mit sehr geringem Aufwand umgesetzt werden und ermöglicht eine sehr schnelle Klassifikation, wie sie in vielen Inspektionssystemen gefordert wird. Da die Größe der LUT wiederum begrenzt ist, steht diese Möglichkeit nur zur Verfügung, wenn die Dimension des Merkmalsvektors, d. h. die Anzahl der Filter, klein ist.

6.4.3 Bewertung mittels mRMR-Maß

Eine Bewertung der Klassentrennbarkeit ist auch mit den informationstheoretischen Maßen D_{rel} , D_{red} und D_{mRMR} möglich (vgl. Abschnitt 3.2.2.1). Für Normalverteilungen lassen sich Entropie und Transinformation der klassenbedingten Wahrscheinlichkeiten berechnen.

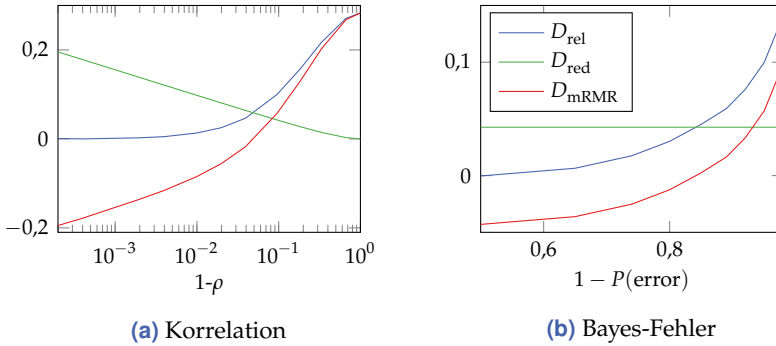


Abbildung 6.14 Relevanz, Redundanz und mRMR-Maß einer bivariaten Normalverteilung in Abhängigkeit der Korrelation ρ und des Bayes-Fehlers.

Der Einfluss der Korrelation auf die Distanzmaße ist in Abbildung 6.14 gezeigt. Während die Relevanz der Merkmale durch die Korrelation abnimmt, steigt die Redundanz erwartungsgemäß deutlich an. Dadurch wird die Korrelation durch D_{mRMR} noch stärker gewichtet. Den höchsten Wert erhält man für unkorrelierte Merkmale. Die Redundanz ist unabhängig vom Bayes-Fehler, während die Relevanz der Merkmale mit sinkendem Bayes-Fehler steigt.

6.4.4 Bewertung anhand des Klassifikationsfehlers

Neben den genannten Distanzmaßen kann für die Merkmalsselektion mithilfe des Wrapper-Ansatzes auch der Klassifikationsfehler als Möglichkeit für die Bewertung der Filterauswahl verwendet werden. Hierfür muss anhand der Messdaten ein Klassifikator parametrisiert und evaluiert werden. Dies geschieht durch Aufteilen der Messdaten in einen Trainings- und Testdatensatz. Um belastbare Aussagen auch bei kleinen Datenmengen treffen zu können, wird eine Kreuzvalidierung durchgeführt. Als Klassifikatoren kommen die in Abschnitt 3.2 beschriebenen Verfahren zum Einsatz.

6.5 Realisierung der Filterwahl

Für die Auswahl oder den Entwurf von Filtern für ein spezielles Klassifikationsproblem können die verschiedenen Ansätze zur Bandselektion gewählt werden, welche in Abschnitt 4.4 vorgestellt wurden. Hierzu zählen Verfahren, die durch Merkmalsselektion das Spektrum in unterschiedliche Bereiche aufteilen oder einzelne Kanäle des hyperspektralen Bildes verbinden, um verschiedene Filter zu bestimmen. Des Weiteren existieren Ansätze, welche die Filter parametrisieren und die Parameter des Filters suchen.

Für die Suche nach den besten Parametern einer Filterkombination können nun unterschiedliche Verfahren eingesetzt werden: Bei allen gilt es, ein bestimmtes Gütemaß zu maximieren. An dieser Stelle soll auf drei Ansätze eingegangen werden:

- die vollständige Suche,
- die globale Optimierung,
- die sequentielle Auswahl.

6.5.1 Vollständige Suche

Die vollständige Suche nach der optimalen Filterkombination ist nur für kleine Filteranzahlen möglich, da je nach Feinheit der Diskretisierung des Parameterraums eine sehr große Anzahl an Parameterkombinationen ausgewertet werden muss. Wie später gezeigt wird, ist es aber ohne Probleme möglich, für drei Filter eine Suche mit ausreichender Feinheit durchzuführen. Häufig sind Filterkombinationen aus zwei oder drei Filtern gesucht, denn diese ermöglichen den Einsatz von einfachen Algorithmen, wie sie beispielsweise bei der Auswertung von RGB-Sensoren verwendet werden. Dadurch kann die Lösung in bestehende Softwarelayouts eingepflegt werden, und eine Weiterentwicklung für den Umgang mit höherdimensionalen Merkmalsvektoren ist nicht notwendig. Zudem kann ein Sensor mit drei Kanälen relativ einfach durch Strahlteiler realisiert werden (vgl. Abbildung 2.5).

Auch die Diskretisierung muss keinen Nachteil darstellen. So kann anstelle einer äquidistanten Aufteilung des Parameterraums auch eine Menge an Parametern entsprechend einem Herstellerkatalog ausgewählt werden. Dadurch sind sehr kostengünstige Lösungen möglich, sofern die Suche auf Standardfilter reduziert wird. Der Einfachheit halber werden hier nur gaußförmige Filter verwendet; diese Ansätze können jedoch beliebig erweitert werden.

Durch die Filterauswahl soll allerdings nicht nur eine gute Klassifikation, sondern auch ein robustes Ergebnis sichergestellt werden. Um dies mit der vollständigen Suche zu erreichen, muss diese noch erweitert werden.

Die Robustheit gegenüber Veränderungen des Signals wird bereits durch die Verwendung des in Abschnitt 6.4.2 vorgestellten Distanzmaßes berücksichtigt. Eine Lösung soll zudem robust gegenüber Filterschwankungen, d. h. Veränderungen der Filterparameter, sein. Dies wird in Abschnitt 6.6 genauer beschrieben. Zunächst wird allerdings auf die Filterauswahl eingegangen.

6.5.1.1 Suche nach einem Filter

Es seien die Parameter eines einzelnen Filters äquidistant quantisiert. Nun lässt sich das Gütemaß für alle Parameterkombinationen darstellen. Dies ist in Abbildung 6.15 für den Beispieldatensatz *Lebensmittel* gezeigt, wobei die Parameter für zentrale Wellenlänge und Filterbreite in Kanälen dargestellt werden. Das linke Bild zeigt das Gütemaß als Gebirge, im rechten ist die Höhe des Gütemaßes als Farbwert codiert.

Es sind deutlich Bereiche mit unterschiedlichem Gütemaß zu erkennen. Das globale Maximum des Gütemaßes ist nun einfach zu ermitteln. Je nach Gütemaß stellt dieses allerdings nur die Trennbarkeit (beispielsweise bei Verwendung der Klassifikationsgüte) dar, nicht aber die Robustheit.

Nicht jede Kombination von Filterbreite w und zentraler Wellenlänge c kann untersucht werden, da nur ein bestimmter spektraler Bereich mit dem hyperspektralen Bild aufgezeichnet wurde. Es wird daher an die

Parameter die Bedingung

$$\frac{1}{2}w + c_{\min} \leq c \leq c_{\max} - \frac{1}{2}w \quad (6.2)$$

gestellt, wobei c_{\min} und c_{\max} die minimale bzw. maximale zentrale Wellenlänge darstellen. Dies bedeutet, dass die Transmissionskurven der Filter bei Rechteckfiltern komplett und bei Gaußkurven zum großen Teil innerhalb des aufgezeichneten Spektralbereichs liegen müssen. Wegen dieser Bedingung sind in Abbildung 6.15 (rechts) in den Randbereichen keine Werte eingezeichnet.

In der Darstellung ist ebenfalls zu erkennen, dass sich das Optimum bei sehr schmalen Filtern befindet. Dies ist allerdings von Nachteil für die Robustheit gegenüber Rauschen, worauf in Abschnitt 6.6 genauer eingegangen werden soll.

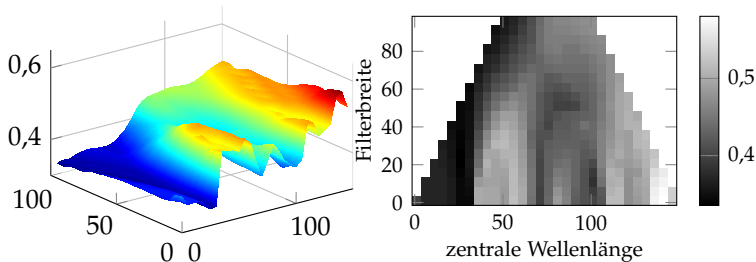


Abbildung 6.15 Distanzmaß D_0 für den Lebensmitteldatensatz mit einem Filter für unterschiedliche Kombinationen aus zentraler Wellenlänge und Filterbreite für gaußförmige Filter (Angaben in Kanälen); links: Darstellung als Gebirge; rechts: Gütemaß farblich codiert, ungültige Filter sind ausgeblendet.

6.5.1.2 Suche nach zwei Filtern

Für die Suche nach zwei Filtern wurde ausgehend von der obigen Darstellung des Gütemaßes eine weitere Darstellung entwickelt. Jedes der beiden gesuchten Filter lässt sich durch die Parameter zentrale Wellenlänge und Filterbreite beschreiben. Nun werden für eine bestimmte

Kombination zweier zentraler Wellenlängen alle Filterkombinationen entsprechend den unterschiedlichen Filterbreiten dargestellt. Dies ist in Abbildung 6.16 zu sehen.

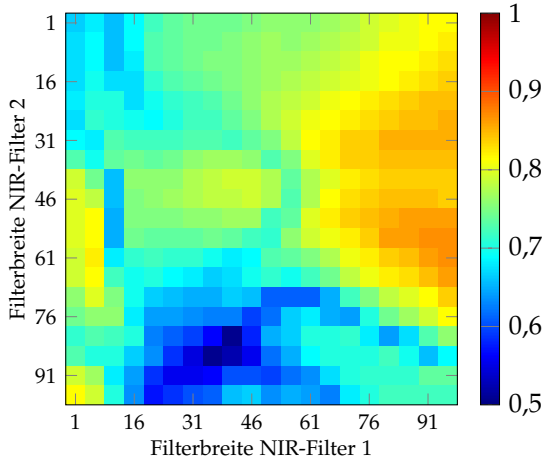


Abbildung 6.16 Gütemaß für zwei Filter mit gleicher zentralen Wellenlänge und unterschiedlicher Filterbreite.

Für alle anderen Kombinationen an zentralen Wellenlängen werden die entsprechenden Darstellungen gebildet und wie in Abbildung 6.17 angeordnet. Auf den Achsen ist jeweils die zentrale Wellenlänge der Filter dargestellt. In den einzelnen Quadraten stellen die Achsen die Filterbreiten dar. Das globale Optimum ohne Berücksichtigung weiterer Bedingungen ist in Abbildung 6.17 mit einem Kreuz markiert.

Einige weitere Anmerkungen sollen zu dieser Darstellung gemacht werden. Das Gütemaß ist unabhängig von der Reihenfolge der Sensoren, weshalb die linke untere Hälfte der Darstellung nicht ausgefüllt ist. Außerdem sind ähnlich wie bei der Suche nach einem Filter auch hier manche Filter nicht erlaubt und liegen deshalb außerhalb des Suchraums. Diese können gegebenenfalls ausgeblendet und das Ergebnis zusammengeschieben werden (vgl. Abbildung 6.18). Durch das Zusammenschieben wird der Lösungsraum wesentlich übersichtlicher dargestellt.

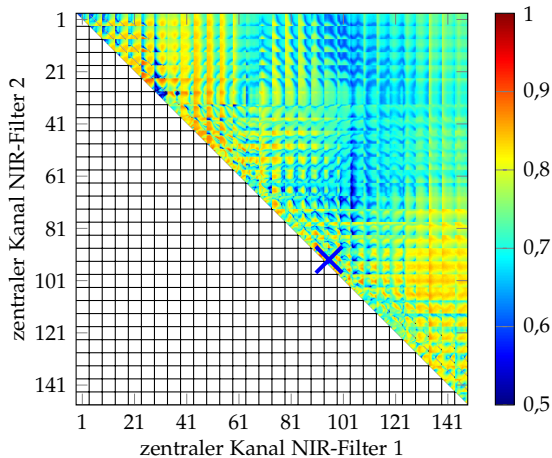


Abbildung 6.17 Klassifikationsrate des Lebensmitteldatensatzes mit zwei Filtern.

Diese Darstellung ist äußerst hilfreich, um die Kombination zweier Filter zu bewerten, da sie das Gütemaß für den gesamten Parameterraum auf einen Blick darstellt. Für die Auswahl einer bestimmten Filterkombination können nun verschiedene Kriterien genutzt und zusätzliches Vorwissen eines Experten leicht eingebracht werden. Beispielsweise ist es oft der Fall, dass die Sensorgüte in den Randbereichen abnimmt (vgl. Abbildung 5.7) oder bestimmte Filter unterschiedliche Kosten mit sich bringen. Unter diesen Bedingungen kann dann eine optimale Lösung bestimmt werden.

Zu den Informationen bezüglich Trennbarkeit, Robustheit und Kosten kann außerdem empirisches Wissen und Erfahrung in die Entscheidung mit einfließen. Zur weiteren Unterstützung können für einzelne Filterkombinationen zusätzliche Informationen wie die Verteilung der Daten im Merkmalsraum oder Histogramme angezeigt werden. Der Vorteil ist dabei, dass Experten bisher ähnliche Tätigkeiten vornehmen, um Merkmale auszuwählen und Klassifikatoren zu parametrisieren.

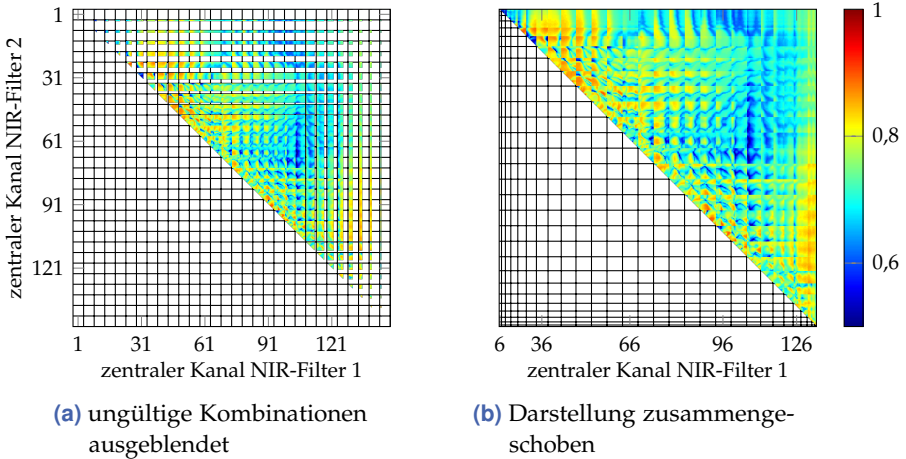


Abbildung 6.18 Klassifikation mit zwei Filtern. Nicht alle Kombinationen an Filtern sind gültig.

6.5.1.3 Suche nach drei und mehr Filtern

Für drei und mehr Filter ist eine manuelle Vorauswahl nicht möglich, da keine Darstellung entsprechend den obigen Ausführungen gefunden werden konnte und ein Experte mit einer Betrachtung von höherdimensionalen Räumen überfordert wäre. Daher muss spätestens hierfür auf eine automatische Auswahl zurückgegriffen werden. Diese kann sequentiell oder mit einem globalen Optimierungsverfahren erfolgen, die im Folgenden beschrieben werden.

6.5.2 Filterwahl mit globalen Optimierungsverfahren

Neben der vollständigen Suche stehen globale Optimierungsverfahren zur Verfügung, um eine Filterkombination zu finden. Diese haben den Vorteil, dass der Parameterraum nicht diskretisiert werden muss und der Rechenaufwand mit der Filteranzahl nur gering steigt. Für die Optimierung muss ein Gütemaß definiert werden, welches die Anforderungen an die Filterkombination möglichst gut widerspiegelt.

Als Optimierungsverfahren werden hier die beiden in Abschnitt 3.4 vorgestellten Verfahren – Simulated Annealing und evolutionäre Algorithmen – verwendet.

In Abbildung 6.19 ist für die beiden Optimierungsverfahren der Verlauf der Optimierung dargestellt. Die Unterschiede zwischen Simulated Annealing und dem evolutionären Algorithmus sind deutlich zu erkennen. Während beim Simulated Annealing zu jeder Iteration nur ein Wert berechnet wird, ist beim evolutionären Algorithmus die Population zu sehen. Nach einigen Iterationen konvergieren die Algorithmen zu einer Lösung.

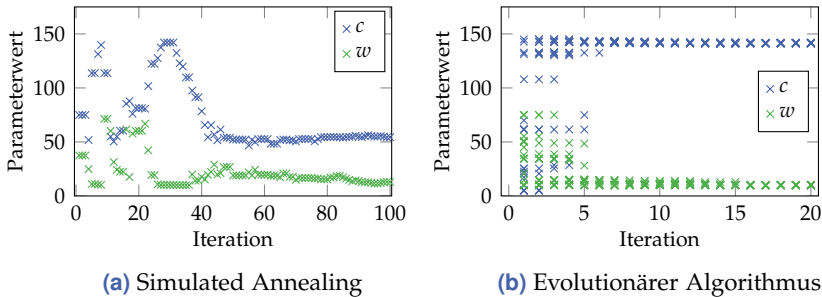


Abbildung 6.19 Verlauf einer Optimierung für ein Filter mit zwei Parametern mit Simulated Annealing und dem evolutionären Algorithmus. Die Algorithmen konvergieren zu unterschiedlichen Parameterkombinationen.

Es ist zu erkennen, dass die beiden Ansätze bei dieser Realisierung nicht zum gleichen Wertepaar konvergieren. Allerdings sind die zugehörigen Werte des Gütemaßes nahezu identisch. Es ist also davon auszugehen, dass mehrere sehr ähnliche lokale Extrema existieren. Welche der Lösungen bevorzugt werden sollte, wird später durch Hinzunahme der Robustheit erläutert.

Die Vorteile des Einsatzes von Optimierungsverfahren sind die schnellere Suche und geringere Anzahl an Auswertungen des Gütemaßes. Die Beschränkung des Suchraums lässt sich leicht in die Optimierungsverfahren einbauen. Der größte Vorteil ist jedoch, dass sich die Verfahren auf beliebige Dimensionen, d. h. auf beliebig viele Filter ausweiten lassen. Zusätzlich können Nebenbedingungen, wie beispielsweise Forderungen an

die Robustheit der Lösung, eingebaut werden. Dies wird in Abschnitt 6.6 gezeigt.

Allerdings bringen die Optimierungsverfahren natürlich auch Nachteile mit sich. So erlauben die Ergebnisse keinen vollständigen Überblick über den Lösungsraum und das Vorgehen zur Optimierung ist für den Anwender nicht nachvollziehbar. Des Weiteren ist eine Parametrisierung der Optimierungsverfahren notwendig, welche unter Umständen sehr aufwendig sein kann.

Bei der Suche mit globalen Optimierungsverfahren können die Filterfunktionen auch durch mehr als zwei Parameter beschrieben werden. Dadurch können auch kompliziertere Filterfunktionen in die Betrachtungen aufgenommen werden. Ein weiterer Vorteil ist der vollständig automatische Ablauf der Verfahren. Ein Eingreifen eines Experten ist nicht notwendig.

6.5.3 Sequentielle Filterwahl

Wie schon erwähnt, bietet die sequentielle Filterwahl die Möglichkeit, mehr als zwei Filter mit den bei der vollständigen Suche verwendeten Methoden auszuwählen. Dazu wird in jedem Schritt dasjenige Filter hinzugenommen, welches zur größten Verbesserung des Gütemaßes beiträgt. Die entsprechenden Ansätze, wie beispielsweise die *sequential forward selection*, sind in Abschnitt 3.2.2.1 beschrieben.

Zu den sequentiellen Ansätzen zählen auch die Bandpartitionierung und Bandextraktion, welche konkret für die Filterwahl mit hyperspektralen Daten empfohlen werden [28, 145] (vgl. Abschnitt 4.4.1).

6.6 Robustheit der Filterwahl

Wie bereits mehrfach erwähnt, ist die Robustheit der Filterwahl wichtig. Daher soll in diesem Abschnitt darauf eingegangen werden, wie eine Filterwahl realisiert werden kann, welche diese Anforderungen erfüllt (vgl. Abschnitt 6.2). Diese lassen sich in Robustheit gegenüber Sensorrauschen, Translation der Merkmale und Filtereigenschaften unterteilen.

6.6.1 Sensorrauschen

Um eine Klassifikation zu ermöglichen, welche möglichst robust gegenüber Rauscheinflüssen ist, muss möglichst viel Licht auf den Sensor fallen. Dies bedeutet, dass Filter mit einem breiten Durchlassbereich bevorzugt werden sollten. Der Zusammenhang zwischen der Filterbreite und der Klassifikationsgüte unter dem Einfluss von Rauschen wird in Abbildung 6.20 deutlich.

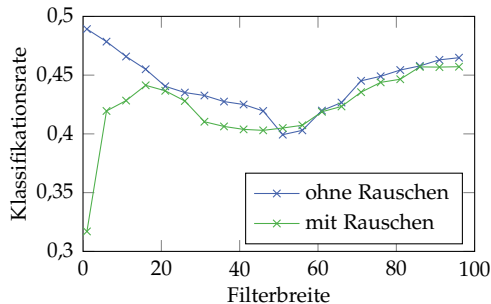


Abbildung 6.20 Abhängigkeit der Klassifikationsgüte bei einem NIR-Filter mit vorgegebener zentraler Wellenlänge von der Filterbreite bei additivem Rauschen (Lebensmitteldatensatz, zentrale Wellenlänge $c = 81$).

Hier ist die Klassifikationsrate für ein Filter mit konstanter zentraler Wellenlänge, aber variabler Filterbreite mit und ohne additivem Rauschen aufgetragen. Die Rauschleistung wurde dabei abhängig von der Filterbreite nach dem in Abschnitt 2.3.2.3 gezeigten Zusammenhang für das Photonenrauschen gewählt. Die Klassifikationsrate bei schmalen Filtern ist unter dem Einfluss von Rauschen wesentlich geringer als ohne Rauschen. Dagegen hat das Rauschen bei breiten Filtern nahezu keinen Einfluss.

Um den Einfluss von Rauschen bei der Filterwahl zu berücksichtigen, können die Messdaten, auf Grundlage derer die Filterwahl erfolgt, mit mittelwertfreiem Rauschen belegt werden. Dadurch wird erreicht, dass breite Filter bevorzugt ausgewählt werden. Abbildung 6.21 zeigt das so gefundene Gütemaß für die Auswahl eines Filters, wobei das Maximum

des Gütemaßes nun bei einem breiteren Filter liegt, als es ohne Rauschen der Fall ist.

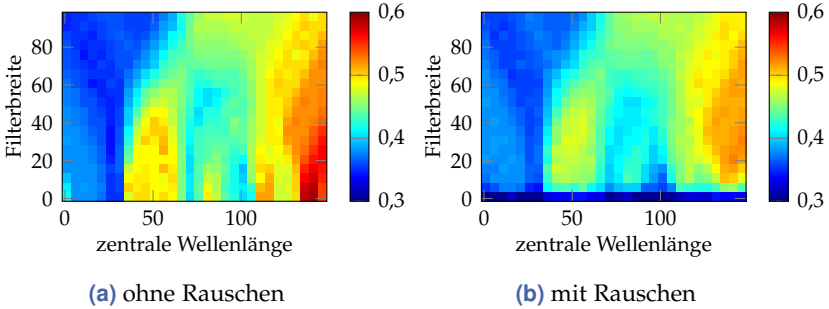


Abbildung 6.21 Abhängigkeit der Güte der Klassifikation mit einem NIR-Filter von additivem Rauschen.

Der Ansatz lässt sich auf die unterschiedlichen Verfahren zur Filterwahl übertragen, wodurch nun auch bei der sequentiellen Auswahl oder der globalen Optimierung eine Lösung gefunden wird, welche breitere Filter bevorzugt. Die so gefundenen Filterkurven zeigt Abbildung 6.22.

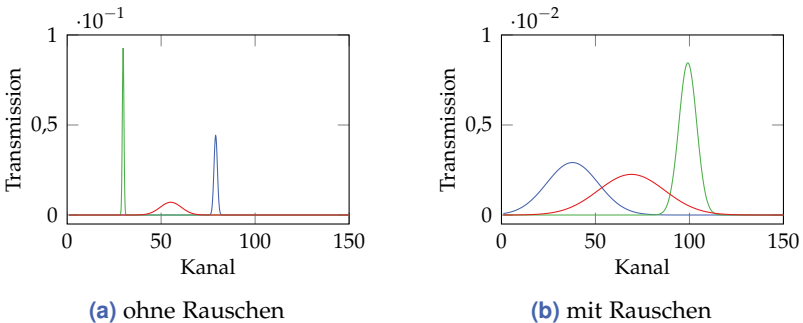


Abbildung 6.22 Filterfunktionen als Ergebnis des evolutionären Algorithmus. Die Berücksichtigung des Rauschens führt zu breiteren Durchlassbereichen.

6.6.2 Offset

Zudem soll die Filterwahl auch robust gegenüber einer Translation der Messdaten durch Veränderungen im Aufnahmesystem, wie beispielsweise durch Verschmutzung oder Abnutzung, sein. In Abschnitt 6.4.1.2 wurde mit simulierten Daten bereits gezeigt, dass die gängigen Distanzmaße (Bhattacharyya-Distanz, Jeffrey-Matusita-Distanz) keine robuste Trennung ermöglichen. Stattdessen wurden die D_{\cap} -Distanz und das mRMR-Maß vorgeschlagen, um robustere Merkmale herauszufinden.

Diese Distanzen sollen mit dem Wrapper-Ansatz auf ihre Robustheit gegenüber Translation untersucht werden. Hierfür werden die durch Filter extrahierten Merkmale in verschiedene Richtungen verschoben und aus diesen Verschiebungen der Mittelwert berechnet. Abbildung 6.23 zeigt den Verlauf der Klassifikationsrate für Filter, welche in einer vollständigen Suche als beste Filterkombination unter dem jeweiligen Distanzmaß gewählt wurden.

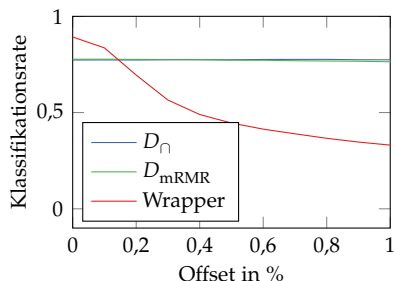


Abbildung 6.23 Einfluss des Gütemaßes für die Filterauswahl bezüglich einer Translation der Merkmale. Gezeigt ist die Klassifikationsrate mit LDA für die beste Filterkombination mit dem entsprechenden Gütemaß.

Es ist zu erkennen, dass für einen kleinen Offset der Wrapper-Ansatz eine größere Klassifikationsrate liefert als die anderen Ansätze. Allerdings fällt die Klassifikationsrate mit steigender Translation der Daten stark ab. Anders ist dies bei den Distanzmaßen. Hier bleibt die Klassifikationsrate über weite Bereiche konstant, wobei kein Unterschied zwischen D_{\cap} und D_{mRMR} auszumachen ist.

6.6.3 Filterschwankungen

Die Robustheit gegenüber Filterschwankungen kann anhand der Darstellungen in Abbildung 6.24 bewertet werden. Ein Filter, für dessen Parameter das Gütemaß in einem engen Tal oder auf einem spitzen Berg liegt, ist nicht robust gegenüber Schwankungen des Filters, denn bereits kleine Abweichungen der Parameter, was einer benachbarten Parameterkombination entspricht, resultieren in starken Änderungen des Gütemaßes. Für ein robustes Ergebnis sollten die Parameter daher auf einem Plateau liegen, da in diesem Fall die Unterschiede zu benachbarten Filtern am geringsten ausfallen.

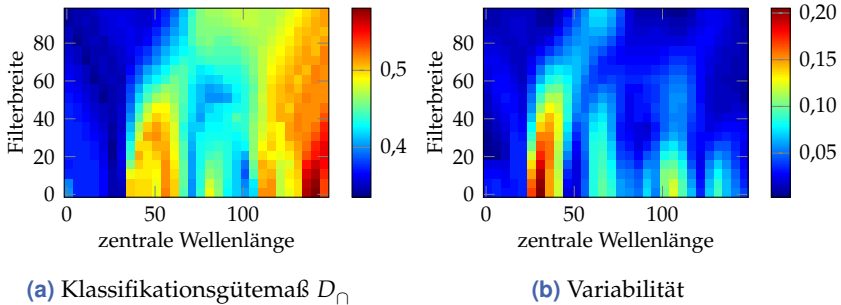


Abbildung 6.24 Bewertung der Robustheit der Klassifikationsrate für ein Filter anhand der Standardabweichung der benachbarten Filter.

Um zu bewerten, wie stark sich Filterschwankungen auswirken, kann ein Maß für die Variabilität, wie es in Abschnitt 3.4.3 beschrieben ist, verwendet werden. In Abbildung 6.24(b) ist die lokale Standardabweichung des Gütemaßes für jedes Filter aufgetragen. Filterkombinationen mit geringer Robustheit gegenüber Filterschwankungen und solche mit starker Abhängigkeit sind deutlich erkennbar.

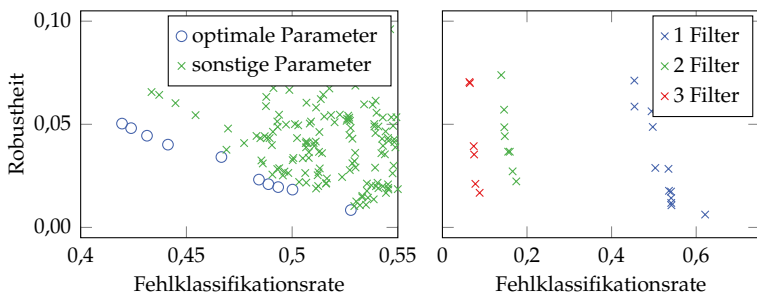
Das Variabilitätsmaß muss nun mit dem ursprünglichen Gütemaß kombiniert werden. Hierfür können beispielsweise eine gewichtete Summe oder ein Produkt der beiden Größen verwendet werden:

$$d_{\text{ges}} = d + \alpha \Delta d \quad \text{oder} \quad d_{\text{ges}} = d \cdot \Delta d^\alpha, \quad (6.3)$$

wobei d das ursprüngliche Gütemaß und Δd das Variabilitätsmaß darstellen. Mit dem Parameter α kann der Einfluss des Variabilitätsmaßes gesteuert werden.

Eine zweite Möglichkeit ist, eine Optimierung nach Mehrfachkriterien durchzuführen. Hierfür eignet sich die globale Optimierung mit dem evolutionären Algorithmus (vgl. Abschnitt 3.4.3). In einer solchen Optimierung werden gleichzeitig die Robustheit sowie das Gütemaß maximiert und man erhält als Ergebnis eine Auswahl an optimalen Filterparametern (Pareto-Front). Es ist nun Aufgabe des Anwenders, eine bestimmte Parameterkombination auszuwählen und dabei die gegenläufigen Eigenschaften Robustheit und Klassifikationsrate abzuwägen.

In Abbildung 6.25 sind Pareto-Fronten aus der vollständigen Suche für ein Filter und als Ergebnis des evolutionären Algorithmus für unterschiedliche Filterzahlen dargestellt.



(a) 1 Filter (Wertepaare aus Abbildung 6.24)

(b) Pareto-Fronten des evolutionären Algorithmus für unterschiedliche Filteranzahl

Abbildung 6.25 Pareto-Fronten für die Bewertung der Fehlklassifikationsrate und der Robustheit gegenüber Filterschwankungen. Als Robustheitsmaß wird die Standardabweichung der Klassifikationsrate verwendet.

6.6.4 Weitere Nebenbedingungen

Neben der guten Trennbarkeit und der Robustheit wird auch eine möglichst kostengünstige Realisierung gefordert. Die Kosten einer Implementierung können ebenfalls als Gütemaß in die Filterwahl einfließen; entweder grob durch die Begrenzung auf einen Teilbereich, beispielsweise durch die Fokussierung auf den Bereich eines bestimmten Sensormaterials, oder auf die vermuteten Kosten der einzelnen Realisierungen. Die Kosten können auch in einer Optimierung, wie es für die Robustheit gegenüber Filterschwankungen gezeigt wurde, berücksichtigt werden.

6.6.5 Abschließende Bewertung

Die verschiedenen Ansätze zur Bewertung einer Filterkombination sollen nun unter den unterschiedlichen Einflüssen evaluiert werden. Dazu wurden mit einem evolutionären Algorithmus für die verschiedenen Gütemaße jeweils die optimalen Filterkombinationen aus zwei Filtern bestimmt. Mit diesem wurde der Beispieldatensatz unter verschiedenen Einflüssen klassifiziert: unter Rauschen, mit einem Offset sowie unter beiden Einflüssen. Zum Vergleich wurden auch die Ergebnisse ohne Einflüsse berechnet.

Als Gütemaße zur Bewertung einer Filterkombination wurden als Distanzmaß die D_{\cap} -Distanz, der D_{mRMR} -Wert sowie die Jeffreys-Matusita-Distanz verwendet. Zusätzlich zu den Distanzmaßen wurde die Klassifikationsrate als Gütemaß verwendet, was einem Wrapper-Ansatz entspricht. Die Filterauswahl wurde mit den originalen hyperspektralen Daten sowie mit verrauschten Daten durchgeführt. Jede Filterkombination wurde dabei mit der LDA klassifiziert, wobei eine zehnfache Kreuzvalidierung vorgenommen wurde. Das gesamte Vorgehen wurde zudem nochmals zehnmal wiederholt, um den Einfluss der Optimierung durch den evolutionären Algorithmus zu ermitteln. Die Auswertung erfolgte dann durch Mittelung der Ergebnisse dieser Wiederholungen; eine Aussage über die Konsistenz der Ergebnisse wird über die Standardabweichung vorgenommen. Das Rauschen wurde mit 20 dB angenommen, der Offset als 1 % des Messbereichs.

Tabelle 6.1 LDA-Klassifikationsraten des Beispieldatensatzes mit zwei Filtern bei unterschiedlichen Einflüssen auf die Merkmale. Die Filterwahl erfolgt mithilfe des evolutionären Algorithmus und verschiedenen Gütemaßen. Angegeben sind Mittelwerte und Standardabweichungen (in Klammern) einer zehnfachen Wiederholung des gesamten Vorgehens.

(a) mit unverrauschten Daten

Einfluss	Wrapper	Filter		
		JM-Distanz	D_{mRMR}	D_{\cap}
ohne	0,86 (0,01)	0,86 (0,02)	0,77 (0,01)	0,79 (0,02)
Rauschen	0,35 (0,06)	0,26 (0,07)	0,58 (0,02)	0,62 (0,03)
Offset	0,68 (0,09)	0,47 (0,19)	0,76 (0,01)	0,78 (0,01)
Rauschen und Offset	0,34 (0,06)	0,25 (0,06)	0,59 (0,02)	0,61 (0,02)

(b) mit verrauschten Daten

Einfluss	Wrapper	Filter		
		JM-Distanz	D_{mRMR}	D_{\cap}
ohne	0,79 (0,03)	0,75 (0,03)	0,74 (0,03)	0,76 (0,04)
Rauschen	0,52 (0,09)	0,56 (0,09)	0,54 (0,02)	0,55 (0,04)
Offset	0,74 (0,03)	0,72 (0,06)	0,73 (0,03)	0,75 (0,03)
Rauschen und Offset	0,52 (0,09)	0,55 (0,09)	0,54 (0,01)	0,55 (0,03)

Beim Vergleich der Tabellen 6.1 zeigt sich zunächst, dass der Wrapper-Ansatz und die Filterwahl mit der Jeffreys-Matusita-Distanz ohne die Einflüsse Rauschen oder Offset die besten und identische Ergebnisse liefern. Dies ist nachvollziehbar, da die Jeffreys-Matusita-Distanz und die lineare Diskriminanzanalyse zusammenhängen und bei normalverteilten Daten gleichbedeutend sind.

Werden die Messdaten allerdings mit einem additiven Rauschen oder einem Offset belegt, so sinkt die Klassifikationsrate, falls diese Einflüsse bei der Filterwahl nicht berücksichtigt wurden, stark ab.

Es ist zu erwarten, dass die Filterwahl-Ansätze, welche Sensorrauschen bei der Bewertung einer Filterkombination berücksichtigen, robuster

gegenüber Rauschen sind. Dies ist auch der Fall, was der Vergleich von Tabelle 6.1(a) und Tabelle 6.1(b) zeigt.

Ein ähnliches Verhalten zeigt sich bei der Bewertung der Robustheit gegenüber einer Translation. Hier sind die Distanzmaße D_{\cap} und D_{mRMR} klar im Vorteil gegenüber den anderen Distanzmaßen sowie dem Wrapper-Ansatz.

Das Endergebnis soll nochmals an einem Streudiagramm verdeutlicht werden, welches in Abbildung 6.26 zu sehen ist. Während beim Wrapper-Ansatz Filter ausgewählt werden, welche zu sehr stark korrelierten Merkmalen führen, zeigt sich beim D_{mRMR} -Maß eine breit gestreute Verteilung der Merkmalspunkte.

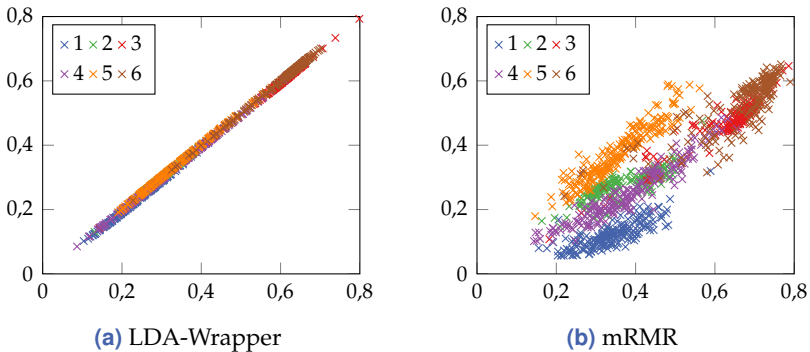


Abbildung 6.26 Streudiagramme für den Lebensmitteldatensatz mit unterschiedlichen Filterselektionsalgorithmen. Mit mRMR sind die Daten wesentlich breiter verteilt als beim Wrapper-Ansatz.

Genauso haben Rauschen und die Diskretisierung auf das Klassifikationsergebnis beim Wrapper-Ansatz großen Einfluss, während die Klassifikationsraten mit Merkmalen, welche mit den Histogramm- oder mRMR-Maßen ausgewählt wurden, wesentlich unempfindlicher ist (vgl. Abbildung 6.27).

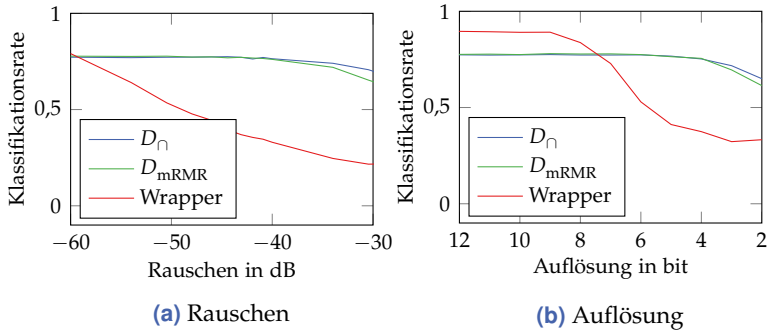


Abbildung 6.27 Abhängigkeit der Klassifikationsrate von verschiedenen Einflüssen bei unterschiedlichen Methoden zur Filterwahl.

6.7 Zusammenfassung Filterwahl

In diesem Kapitel wurden verschiedene Distanzmaße und Verfahren auf ihre Verwendung zur Filterwahl getestet und bewertet. Dabei wurde vor dem Hintergrund des Einsatzes in automatischen Inspektionsanlagen argumentiert und entsprechende Anforderungen an eine Filterwahl gestellt: nämlich möglichst wenige Kanäle und eine hohe Robustheit gegenüber verschiedenen Einflüssen. Aus den Untersuchungen wurde eine Methodik entwickelt, welche eine robuste Filterwahl ermöglicht.

Kernstück ist dabei das Distanzmaß, welches die Robustheit bereits mit bewertet. Hierfür wurden die Histogrammüberlappung mit unterschiedlichen Bingrößen zusammen mit dem mRMR-Maß als geeignete Distanzmaße identifiziert, wobei sich die Histogrammüberlappung als genauso leistungsfähig gezeigt hat und darüber hinaus schneller zu berechnen ist.

Zudem wurden verschiedene Strategien zur Auswahl von Filtern vorgestellt und miteinander verglichen. Für die Auswahl zweier Filter aus einer Menge von Filtern, welche sich durch zentrale Wellenlänge und Filterbreite parametrisieren lassen, wurde eine hilfreiche Darstellung gefunden, die eine gute Übersicht über sämtliche Filterkombinationen liefert und bei einer manuellen Auswahl unterstützen kann.

Daneben wurde vorgeschlagen, globale Optimierungsverfahren wie evolutionäre Algorithmen für die Auswahl zu verwenden. Diese bringen den Vorteil mit sich, dass mehrere Gütemaße gleichzeitig minimiert werden können, was beispielhaft an der Fehlklassifikationsrate und der Robustheit gegenüber Filterschwankungen gezeigt wurde. Als Ergebnis einer solchen Optimierung wird eine Pareto-Front geliefert, die eine Menge an Lösungen enthält, aus dieser nun der Anwender eine Konfiguration auswählen kann.

Sämtliche Verfahren und Auswertungen wurden an dem Lebensmittel Datensatz durchgeführt. Die hier gezeigten Ergebnisse lassen sich leicht übertragen und erweitern. Beispielsweise ist eine genauere Parametrisierung der Filterfunktionen möglich, sodass Einschränkungen bezüglich der Fertigung solcher Filter mit einfließen können. Genauso ist eine Betrachtung der Kosten einzelner Realisierungen naheliegend.

Um eine wirtschaftlich optimale Entscheidung bezüglich einer Sensor-konfiguration treffen zu können, müssten neben den oben erwähnten Betrachtungen auch noch das wirtschaftliche Risiko einer Fehlklassifikation in Form von Kostenfunktionen für einzelne Materialien berücksichtigt werden.

7 Erweitertes Mischmodell

In Abschnitt 4.2 wurden bereits verschiedene Verfahren zur Entmischung hyperspektraler und multispektraler Daten vorgestellt. Mit den meisten dieser Verfahren wird jedes Pixel eines Bildes einzeln entmischt und die örtlichen Einflüsse der Nachbarschaft gehen daher nicht in das Entmischungsergebnis ein. Die Verfahren unterscheiden sich durch die berücksichtigten Nebenbedingungen und die Entmischungsalgorithmen, welche die Entmischung beispielsweise als inverses Problem oder als Parameterschätzproblem auffassen.

Neben den Entmischungsalgorithmen, welche punktweise arbeiten, wurden auch Ansätze zur Auflösungserhöhung und Fusion von verschiedenen Aufnahmen erläutert. Bei der Auflösungserhöhung werden teilweise Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Pixeln berücksichtigt. Die Fusion von Bilddaten verschiedener Sensoren wurde ebenfalls vorgestellt. Hier konnte zwischen den Ansätzen zum *Pansharpening*, mit denen ein multi- oder hyperspektrales Bild mit einem Graubild fusioniert wird, und Ansätzen, welche mehrkanalige Aufnahmen fusionieren, unterschieden werden.

In diesem Abschnitt wird nun ein neuartiges, erweitertes Mischmodell und die zugehörige Entmischungsmethode vorgestellt, welche es erlaubt, verschiedene Nebenbedingungen in einem Entmischungsansatz zu vereinen. Dabei sollen sowohl Signale mehrerer Sensoren verwendet werden können, als auch durch die zusätzlichen Sensoren eine höhere Auflösung erreicht werden. Als Beispielszenario sei hierfür an die Nachteile einer hyperspektralen Aufnahme erinnert, welche hauptsächlich in der geringen räumlichen Auflösung und niedrigen Bildrate liegen. Bei einer Anwendung in der Sichtprüfung, bei der eine Zeilenkamera eingesetzt wird, führt letztere ebenfalls zu einer niedrigen räumlichen Auflösung. Reicht diese Auflösung nicht aus, muss die räumliche Information auf einem anderen Weg gewonnen werden. Eine Möglichkeit hierfür ist,

eine zweite Aufnahme zu verwenden, welche eine geringere spektrale Auflösung besitzt, dafür aber eine höhere räumliche Auflösung liefert. Beide Aufnahmen müssen dann fusioniert werden.

Die hier vorgestellte Methode erreicht dies durch Verwendung eines gemeinsamen Mischmodells, das die Charakteristiken der einzelnen Sensoren widerspiegelt und gleichzeitig eine Entmischung ermöglicht. Das Besondere ist hierbei, dass nicht ein bereits berechnetes Entmischungsergebnis durch Hinzunahme einer weiteren Aufnahme verbessert wird, sondern dass beide oder auch mehr als zwei Aufnahmen gleichzeitig entmischt werden. Das so gewonnene Ergebnis berücksichtigt die Zusammenhänge zwischen den Sensoren in Bezug auf die räumlichen als auch die spektralen Eigenschaften. Dadurch ist es möglich, ein besseres Entmischungsergebnis zu erzielen als mit den bekannten Verfahren.

Das erweiterte Mischmodell soll nun in den folgenden Abschnitten vorgestellt und diskutiert werden. Zunächst wird dafür das lineare Mischmodell erweitert, um die Eigenschaften der Sensoren zu beschreiben. Dabei wird in die örtliche Mischung und die spektrale Mischung unterteilt. Anschließend wird gezeigt, wie in dem Modell die Aufnahmen mehrerer unterschiedlicher Sensoren vereint werden können. Die verschiedenen Eigenschaften des erweiterten Mischmodells und die Möglichkeiten zur Entmischung werden dann ausführlich beschrieben und an Daten evaluiert. Es wird außerdem auf die Möglichkeit eingegangen, wie die spektralen und örtlichen Eigenschaften zu wählen sind, sodass ein möglichst gutes Entmischungsergebnis erzielt werden kann. Diese Herangehensweise ist vergleichbar mit den behandelten Filterauswahl- und Bandselektionsansätzen aus dem vorherigen Kapitel.

7.1 Mathematische Beschreibung

Bisher wurde mit den in Abschnitt 4.2.1 beschriebenen Mischmodellen meist jedes Pixel einzeln entmischt. Dabei wurden Nachbarschaftsbeziehungen kaum oder gar nicht berücksichtigt. Mit dem erweiterten Mischmodell soll eine Fusion von Bildsignalen unterschiedlicher Sensoren und eine Auflösungsverbesserung erreicht werden. Hierfür ist es unerlässlich, die Beziehungen zwischen den verschiedenen Orten

der Bilder zu berücksichtigen. Für das erweiterte Modell werden diese Beziehungen als zusätzliche Mischungen beschrieben.

Für die Erweiterung des linearen Mischmodells werden die Mischungen in die örtliche und die spektrale Mischung unterteilt. Die örtliche Mischung beschreibt dabei, welchen Einfluss die Position und der optische Pfad auf das Bildsignal haben. Das Material hat auf die örtliche Mischung keinen Einfluss. Mithilfe der örtlichen Mischung können die Zusammenhänge der Sensoreigenschaften wie unterschiedliche Auflösungen und Ausrichtungen mehrerer Sensoren sowie Einflüsse wie Bewegungsunschärfe beschrieben werden.

Die spektrale Mischung berücksichtigt dagegen die spektralen Eigenschaften des Sensors, also die spektrale Sensitivität sowie die Anzahl der Sensorkanäle. Durch die spektrale und die örtliche Mischung lässt sich der Sensor ausreichend genau beschreiben. Wie die beiden Mischungen mathematisch definiert und in das lineare Mischmodell aufgenommen werden können, wird im Folgenden beschrieben.

Zunächst muss eine geeignete mathematische Darstellung für die Mischung gewählt werden. An dieser Stelle wird der Einfachheit halber sofort eine diskrete Darstellung verwendet, da diese näher an der späteren Implementierung liegt und Zusammenhänge leichter beschreiben lässt. Auf Ausführungen mit kontinuierlichen Orts- und Wellenlängenvariablen wird hier verzichtet.

Für die diskrete Darstellung wird eine Grundauflösung für den Ort und die Wellenlänge verwendet. Diese Auflösung ist höher als die Auflösungen der betrachteten Sensoren, weshalb deren Eigenschaften später immer in Bezug auf die Grundauflösung beschrieben werden können. Abbildung 7.1 zeigt eine Bildszene mit den Pixelmustern zweier Sensoren und die zugehörige räumliche Grundauflösung.

In der Grundauflösung lässt sich die Bildentstehung mithilfe des linearen Mischmodells folgendermaßen beschreiben:

$$\mathbf{Y}_0 = \mathbf{X}_0 \cdot \mathbf{A}_0, \quad (7.1)$$

wobei \mathbf{X}_0 die Endmembersignaturen und \mathbf{A}_0 die Mischkoeffizienten darstellen. Der Index $_0$ gibt an, dass es sich bei den Größen um Darstellungen in der Grundauflösung handelt. Das Signal \mathbf{Y}_0 ist rein hypothetischer

Natur und stellt kein gemessenes Sensorsignal dar. Es beschreibt vielmehr das Bildsignal, welches man in der spektralen und räumlichen Grundauflösung erhalten würde.

Es gilt $\mathbf{A}_0 \in \mathbb{R}^{N \times L}$, $\mathbf{X}_0 \in \mathbb{R}^{M \times N}$ und $\mathbf{Y}_0 \in \mathbb{R}^{M \times L}$, mit der Endmembrananzahl N , der Pixelanzahl L und der Anzahl an spektralen Kanälen M . Das Bildsignal und die Mischkoeffizienten sind dabei Matrizen, welche pro Spalte die Bildpunkte darstellen.

Ausgehend von dieser Grundauflösung werden nun die örtliche und die spektrale Mischung definiert. Ziel ist es hierbei, für jeden Sensor k eine entsprechende Beziehung

$$\mathbf{Y}_k = \mathbf{X}_k \cdot \mathbf{A}_k \quad (7.2)$$

zu finden.

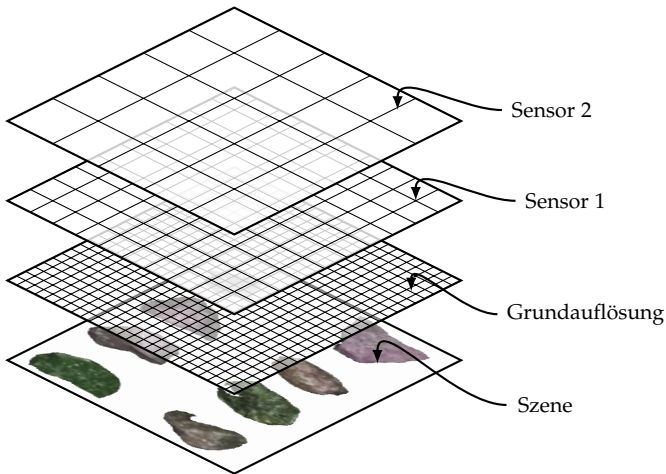


Abbildung 7.1 Unterschiedliche räumliche Auflösung der Sensoren führt zu einer örtlichen Mischung der Signale.

7.1.1 Örtliche Mischung

Die örtliche Mischung beschreibt den Einfluss des optischen Pfads sowie der Auflösung und der Position des Sensors auf das Bildsignal. Dies wird allgemein mithilfe der Übertragungsfunktion dargestellt. Die Übertragungsfunktion ist eine Abbildung

$$f_k : \mathbb{R}^{1 \times L_0} \rightarrow \mathbb{R}^{1 \times L_k}, \quad \mathbf{A}_0 \mapsto \mathbf{A}_k \quad (7.3)$$

vom Raum $\mathbb{R}^{1 \times L_0}$ in den Raum $\mathbb{R}^{1 \times L_k}$. Der Index k beschreibt die Zugehörigkeit zum k -ten Sensor.

Die Übertragungsfunktion beschreibt dabei, wie sich das Pixel des k -ten Sensors aus den Pixeln in der Grundauflösung zusammensetzt. Durch verschiedene Annahmen und Einschränkungen kann die Übertragungsfunktion weiter beschrieben werden. So ergeben sich folgende Spezialfälle.

Ist f_k eine lineare Funktion, so gilt der Zusammenhang

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{A}_0 \mathbf{B}_k \quad (7.4)$$

mit der örtlichen Mischmatrix \mathbf{B}_k . Es gilt $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{L_0 \times L_k}$; \mathbf{B} ist also eine Matrix, deren Spaltenanzahl der Anzahl an Pixeln entspricht. Sie ist in der Regel dünnbesetzt, d. h. die Werte eines Pixels setzen sich nur aus einer geringen Anzahl an (benachbarten) Pixeln der Grundauflösung zusammen.

Werden für die Berechnung nur Pixel der Nachbarschaft berücksichtigt und ist die Übertragungsfunktion zusätzlich verschiebungsinvariant, so kann der Zusammenhang (7.4) auch als Faltung mit einem entsprechenden Filterkern \mathbf{b} dargestellt werden. Der Filterkern \mathbf{b} gibt dann die Koeffizienten der Mischung an. Allerdings bleibt die räumliche Auflösung durch die Faltung gleich. Eine geringere Auflösung nach der Mischung bzw. Filterung erhält man durch anschließende Dezimation.

Zur einfacheren Berechnung kann die Faltung im Ortsfrequenzraum durchgeführt werden. Dazu werden das Signal und die Filterkerne mit-

hilfe der Fouriertransformation transformiert:

$$\mathbf{a}_k = \mathbf{b}_k ** \mathbf{a}_0 \quad (7.5)$$

$$\mathcal{F}\{\mathbf{a}_k\} = \mathcal{F}\{\mathbf{b}_k\} \cdot \mathcal{F}\{\mathbf{a}_0\} . \quad (7.6)$$

Diese Darstellung hat den Vorteil, dass sie einfacher und effizienter zu berechnen ist.

Die Form und der Inhalt der Matrix \mathbf{B}_k und des Filterkerns \mathbf{b}_k hängen von der Sensorkonfiguration ab. Generell wird angenommen, dass sich die örtliche Mischung auf jedes Material gleich auswirkt, aber für einzelne Sensorkanäle unterschiedlich sein kann. Sensoren mit unterschiedlichen Mischmatrizen pro Kanal werden dafür als verschiedene einzelne Sensoren modelliert.

Beispiel 7.1: Örtliche Mischung

Die verschiedenen Konfigurationen sollen anhand dreier fiktiver Sensoren – einem hyperspektralen, einem multispektralen und einem panchromatischen Sensor – gezeigt werden. Der hyperspektrale Sensor mittelt dabei über einen Bereich von 6×4 Pixel und der multispektrale über einen Bereich von 2×2 Pixeln, während der panchromatische die Grundaufösung besitzt. Es ergeben sich daraus die örtliche Mischmatrizen geschrieben als Filterkerne zu

$$\mathbf{b}_{\text{hyper}} = \frac{1}{24} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_{\text{multi}} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{b}_{\text{pan}} = [1] . \quad (7.7)$$

7.1.2 Spektrale Mischung

Die spektrale Mischung lässt sich auf ähnliche Weise beschreiben wie die örtliche Mischung. Ein optischer Sensor hat eine bestimmte Quan-

teneffizienz, welche abhängig von der Wellenlänge ist. Vereinfacht gilt

$$y_k = \int x(\lambda) c_k(\lambda) d\lambda, \quad (7.8)$$

wobei y_k das Sensorsignal, $x(\lambda)$ das einfallende Licht mit der Wellenlänge λ ist, und $c_k(\lambda)$ die zugehörige Quanteneffizienz des Sensors zusammengefasst mit der Filterkennlinie und Übertragungseigenschaft des optischen Kanals darstellt (vgl. Gleichungen (2.3) und (4.54)).

Auf die Integration über den Ort und die Belichtungsdauer wird hier verzichtet. Durch Diskretisierung dieser Gleichung erhält man die Grundgleichung für die spektrale Mischung:

$$y_k = \mathbf{c}_k^T \cdot \mathbf{x}. \quad (7.9)$$

Weist ein Sensor mehrere Kanäle auf, wie es beispielsweise bei multi- und hyperspektralen Sensoren der Fall ist, so kann die Quanteneffizienz für jeden Kanal unterschiedlich sein. Man erhält dann mehrere Gleichungen, die sich in einer Gleichung zusammenfassen lassen:

$$y_{ki} = \mathbf{c}_{ki}^T \cdot \mathbf{x} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{y}_k = \mathbf{C}_k \cdot \mathbf{x}. \quad (7.10)$$

Es gilt $\mathbf{y}_k \in \mathbb{R}^{M_k \times 1}$, $\mathbf{C}_k \in \mathbb{R}^{M_k \times M_0}$ und $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{M_0 \times 1}$. Hierbei bezeichnen M_0 die Anzahl an Abtastwerten des Reflektanzspektrums in der Grundauflösung und M_k die Anzahl der Kanäle des Sensors k .

Beispiel 7.2: Spektrale Mischung

Das Beispiel mit einem hyperspektralen, einem multispektralen und einem panchromatischen Sensor soll sehr vereinfacht wieder aufgenommen werden. Der hyperspektrale Sensor habe genau so viele Kanäle wie die spektrale Grundauflösung. Der multispektrale Sensor soll einen RGB-Sensor darstellen und hat daher drei Kanäle, während der panchromatische Sensor über den gesamten Spektralbereich mitte.

Mit einer Grundauflösung von $M_0 = 9$ Kanälen ergeben sich dann beispielsweise die folgenden spektralen Mischmatrizen:

$$\mathbf{C}_{\text{hyper}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (7.11)$$

$$\mathbf{C}_{\text{multi}} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \text{ und} \quad (7.12)$$

$$\mathbf{C}_{\text{pan}} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (7.13)$$

$$(7.14)$$

Jede Zeile der Matrix \mathbf{C} entspricht einem Sensorkanal. Für alle Kanäle eines Sensors wird dieselbe örtliche Mischmatrix angenommen. Es gibt jedoch Fälle, wo diese Annahme nicht gilt, sondern jeder Sensorkanal auch eine bestimmte örtliche Abhängigkeit aufweist. Ein Beispiel ist ein RGB-Sensor mit einem Bayer-Pattern. Hier setzt sich das Ergebnis jedes Sensorkanals aus Pixeln an unterschiedlichen Orten zusammen, wie im folgenden Beispiel dargestellt.

Beispiel 7.3: Bayer-Pattern

Anhand des Bayer-Patterns in Abbildung 2.5 lassen sich die örtlichen Mischmatrizen für die einzelnen Kanäle ablesen:

$$\mathbf{b}_R = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_G = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{bmatrix} \text{ und } \mathbf{b}_B = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (7.15)$$

Ähnlich wie für die örtliche Mischmatrix gilt auch für die spektrale Mischmatrix eine Normierungsbedingung. Damit jeder Kanal eines Sensors gleich stark gewichtet wird, wird auf die Zeilensumme normiert.

Bei der späteren Kombination von Sensoren kann es durchaus zu unterschiedlichen Gewichtungen der Sensoren kommen, was gleichzeitig verschiedenen Empfindlichkeiten oder Dynamiken entspricht. Genauso ist ein unterschiedliches Rauschverhalten möglich. Diese Eigenschaften werden an späterer Stelle gesondert betrachtet.

Durch die spektrale Mischung lässt sich schlussendlich der Zusammenhang

$$\mathbf{X}_k = \mathbf{C}_k \mathbf{X}_0 \quad (7.16)$$

definieren.

7.2 Kombination mehrerer Sensoren

Durch die oben vorgestellte Notation und Unterteilung in spektrale und örtliche Mischung können verschiedene Sensoren in einem Modell kombiniert werden. Dies ermöglicht die gleichzeitige Entmischung und Fusion der Messdaten mehrerer Sensoren. Um mehrere Sensoren zu kombinieren, muss die spektrale und örtliche Grundauflösung M_0 bzw. L_0 für alle Sensoren gleich sein. Gegebenenfalls müssen die einzelnen Modelle auf ein gemeinsames Modell gebracht werden.

Die spektralen und örtlichen Mischmatrizen \mathbf{B} und \mathbf{C} werden als bekannt vorausgesetzt und lassen sich – falls nötig – aus der Impulsantwort oder Übertragungsfunktion des Sensors beziehungsweise den spektralen Charakteristiken ablesen.

Allgemein gilt für den Sensor k das Modell

$$\mathbf{Y}_k = \mathbf{C}_k \mathbf{X}_0 \mathbf{A}_0 \mathbf{B}_k, \quad (7.17)$$

welches sich aus den Gleichungen (7.4) und (7.16) zusammensetzt. Um nun mehrere Modelle kombinieren zu können, hilft eine Umformung der Gleichung (7.17) mithilfe des Kronecker-Produkts \otimes :

$$\text{vec}\{\mathbf{Y}_k\} = \mathbf{B}_k^T \otimes (\mathbf{C}_k \mathbf{X}_k) \text{vec}\{\mathbf{A}_0\}. \quad (7.18)$$

Definition 7.1: Kronecker-Produkt

Das Kronecker-Produkt zweier Matrizen \mathbf{U} und \mathbf{V} mit den Elementen u_{ij} bzw. v_{ij} ist definiert als (vgl. [23])

$$\mathbf{U} \otimes \mathbf{V} = \begin{bmatrix} u_{11} \mathbf{V} & u_{12} \mathbf{V} & \dots \\ u_{21} \mathbf{V} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \end{bmatrix}. \quad (7.19)$$

In (7.18) wird die Beziehung

$$\mathbf{U} \mathbf{P} \mathbf{V} = \mathbf{Q} \quad (7.20)$$

$$\left(\mathbf{V}^T \otimes \mathbf{U} \right) \text{vec}\{\mathbf{P}\} = \text{vec}\{\mathbf{Q}\} \quad (7.21)$$

ausgenutzt. Der Operator $\text{vec}\{\cdot\}$ beschreibt hierbei die Darstellung einer Matrix als Spaltenvektor durch Anordnen ihrer Spaltenvektoren übereinander. Anstelle von $\text{vec}\{\mathbf{Y}_k\}$ und $\text{vec}\{\mathbf{A}_0\}$ wird in Zukunft die Schreibweise $\bar{\mathbf{y}}_k$ bzw. $\bar{\mathbf{a}}_0$ verwendet.

Durch die Darstellung in (7.18) sind nun die Gleichungen aller Sensoren in die gleiche Form gebracht worden und können zusammengefügt werden. Dies geschieht durch Anordnen der Matrizen übereinander sowie Zusammenfassen der Matrizen:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{y}}_1 \\ \bar{\mathbf{y}}_2 \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{y}}_K \end{bmatrix}}_{\hat{\mathbf{y}}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^T \otimes (\mathbf{C}_1 \mathbf{X}_0) \\ \mathbf{B}_2^T \otimes (\mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0) \\ \vdots \\ \mathbf{B}_K^T \otimes (\mathbf{C}_K \mathbf{X}_0) \end{bmatrix}}_{\hat{\mathbf{X}}} \cdot \bar{\mathbf{a}}_0, \quad (7.22)$$

$$\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{X}} \cdot \bar{\mathbf{a}}_0. \quad (7.23)$$

Das erweiterte Mischmodell weist dieselbe Struktur auf wie das ursprüngliche lineare Mischmodell (vgl. (4.3)). Der Vektor $\hat{\mathbf{y}}$ enthält alle Messdaten der K Sensoren, der Vektor $\bar{\mathbf{a}}_0$ alle Mischkoeffizienten in der Grundaufösung. Die spektralen und örtlichen Eigenschaften der unterschiedlichen Sensoren sowie die Signaturen der einzelnen Materialien sind in der erweiterten Mischmatrix $\hat{\mathbf{X}}$ zusammengefasst:

Es gilt $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{\hat{L} \times 1}$, $\bar{\mathbf{a}}_0 \in \mathbb{R}^{N L_0 \times 1}$ und $\hat{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{\hat{L} \times \hat{L}_0}$ mit $\hat{L} = \sum_{k=1}^K L_k M_k$.

Die Nebenbedingung der Konsistenz, welche bei der Fusion von Bildern unterschiedlicher Auflösung gelten muss (vgl. Abschnitt 4.3.2), ist durch dieses Zusammenfügen der verschiedenen Mischmodelle und die Verwendung der örtlichen und spektralen Eigenschaften der Sensoren bereits implizit im Modell berücksichtigt.

7.3 Entmischung mit dem erweiterten Mischmodell

Da das erweiterte Mischmodell dem gängigen linearen Mischmodell gleicht, können dieselben Entmischungsansätze verwendet werden, welche bereits in Abschnitt 4.2.3 beschrieben wurden. Eine Besonderheit ist hierbei, dass das Mischmodell so umgeformt wurde, dass alle Mischkoeffizienten auf einmal bestimmt werden müssen. Ist das Bild in viele Teilprobleme gleicher Auflösung aufteilbar und sind diese unabhängig voneinander, so können diese Teilmodelle einzeln gelöst werden. Meist ist dies ein Bildausschnitt, der durch die Größen der örtlichen Mischmatrizen der unterschiedlichen Sensoren vorgegeben wird. Die Zellgröße ist hierbei das kleinste gemeinsame Vielfache der einzelnen Zeilen- und Spaltenanzahl. Im Beispiel mit dem hyperspektralen, multispektralen und panchromatischen Sensor wäre dies die Größe 6×4 Pixel.

Das beschriebene erweiterte Mischmodell kann als inverses Problem aufgefasst werden, dessen Lösbarkeit davon abhängt, ob es sich um ein gut oder schlecht gestelltes Problem handelt (vgl. Abschnitt 3.3). Dies ist am Rang der erweiterten Mischmatrix $\hat{\mathbf{X}}$ erkennbar.

Für den Fall mit zwei Sensoren, $K = 2$, gilt für den Rang (vgl. [157]):

$$\begin{aligned} \text{rang} \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^T \otimes (\mathbf{C}_1 \mathbf{X}_0) \\ \mathbf{B}_2^T \otimes (\mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0) \end{bmatrix} &\geq \text{rang } \mathbf{B}_1^T \text{ rang} \begin{bmatrix} (\mathbf{C}_1 \mathbf{X}_0) \\ (\mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0) \end{bmatrix} \\ &\quad - \text{rang } \mathbf{B}_1^T \text{ rang } (\mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0) \\ &\quad + \text{rang } \mathbf{B}_2^T \text{ rang } (\mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0). \end{aligned} \quad (7.24)$$

Mit diesem Zusammenhang lässt sich der Rang nach unten abschätzen. In die andere Richtung gilt:

$$\begin{aligned} \text{rang} \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1^T \otimes (\mathbf{C}_1 \mathbf{X}_0) \\ \mathbf{B}_2^T \otimes (\mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0) \end{bmatrix} &\leq \text{rang} \mathbf{B}_1^T \otimes (\mathbf{C}_1 \mathbf{X}_0) + \text{rang} \mathbf{B}_2^T \otimes (\mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0) \\ &= \text{rang} \mathbf{B}_1^T \text{ rang } \mathbf{C}_1 \mathbf{X}_0 + \text{rang} \mathbf{B}_2^T \text{ rang } \mathbf{C}_2 \mathbf{X}_0 \\ &\leq L_1 \min \{M_1, N\} + L_2 \min \{M_2, N\} . \quad (7.25) \end{aligned}$$

Man kann außerdem davon ausgehen, dass die Matrix \mathbf{X}_0 vollen Rang besitzt, welcher der Anzahl an Endmembers N entspricht.

Hat die Matrix $\hat{\mathbf{X}}$ vollen Rang, so ist das Problem gut gestellt und eine Entmischung kann mit den herkömmlichen Entmischungsansätzen vorgenommen werden. Besitzt sie dagegen keinen vollen Rang, handelt es sich um ein schlecht gestelltes Problem und es müssen zusätzliche Annahmen und Randbedingungen für eine erfolgreiche Entmischung herangezogen werden.

Der Rang der Mischmatrix des erweiterten Modells $\hat{\mathbf{X}}$ hängt von der Form der Endmemberspektren, der Sensorkennlinien und der örtlichen Mischung ab, welche durch die Matrizen \mathbf{X} , \mathbf{C} und \mathbf{B} beschrieben werden. Auf die Möglichkeiten, die Konditionierung des Entmischungsproblems anzupassen, wird in den folgenden Abschnitten eingegangen.

7.3.1 Anpassung der örtlichen Auflösung

Ein schlecht gestelltes Entmischungsproblem kann oftmals in ein besser gestelltes Problem umgewandelt werden, indem die örtliche Auflösung, in der die Mischkoeffizienten gefunden werden sollen, angepasst wird. Die Entmischung wird dann nicht mehr in der Grundauflösung durchgeführt, sondern in einer größeren Auflösung. Dadurch bleiben zwar nicht mehr unbedingt die Vorteile der Auflösungserhöhung gewahrt, welche das erweiterte Mischmodell mit sich bringt, dennoch liefert dieses Vorgehen eine einfache und zufriedenstellende Fusion der Signale einzelner Sensoren und eine gleichzeitige Entmischung.

Der einfachste Fall, die örtliche Auflösung des Mischproblems zu verringern, ist die Annahme, dass bestimmte Mischkoeffizienten den

gleichen Wert annehmen. Dies ist beispielsweise bei Koeffizienten in einer bestimmten Region sinnvoll. Das Mischproblem

$$\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}}_0 \quad (7.26)$$

wird hierbei durch Aufsummieren der entsprechenden Spalten der Matrix $\hat{\mathbf{X}}$ angepasst.

Allgemein lässt sich eine neue Mischmatrix \mathbf{M} definieren, welche die ursprünglichen Mischkoeffizienten in der Grundauflösung transformiert:

$$\bar{\mathbf{a}}_0 = \mathbf{M}\bar{\mathbf{a}}^* . \quad (7.27)$$

Neben der Annahme, dass Mischkoeffizienten den gleichen Wert annehmen, ist natürlich auch jede Linearkombination von Mischkoeffizienten möglich. Das angepasste Entmischungsproblem lautet dann

$$\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{X}}\mathbf{M}\bar{\mathbf{a}}^* , \quad (7.28)$$

wobei nun nur noch die Mischkoeffizienten $\bar{\mathbf{a}}^*$ gefunden werden müssen und die Konditionierung des Problems vom Rang des Matrixproduktes $\hat{\mathbf{X}}\mathbf{M}$ abhängt. Inwiefern die Auflösung verringert werden muss, hängt von dem jeweiligen Problem ab. Häufig reicht es aus, die Auflösung nur geringfügig zu verringern, um dann mit zusätzlichen Regularisierungsansätzen ein zufriedenstellendes Ergebnis zu erhalten. Diese Ansätze werden in Abschnitt 4.2.3.1 behandelt.

Mit dem beschriebenen Vorgehen ist es generell auch möglich, Mischkoeffizienten verschiedener Endmember zusammenzufassen. Dies ist dann ein sinnvoller Weg, wenn beispielsweise nur die Summe von zwei Endmembers von Interesse, eine Aufschlüsselung nach den einzelnen Endmembers aber nicht notwendig ist.

Die Entmischung in einer geringeren örtlichen Auflösung soll an dem Beispiel von oben verdeutlicht werden. Abbildung 7.2 zeigt den Rang der erweiterten Mischmatrix in Abhängigkeit der Entmischungsauflösung für die Fusion des hyperspektralen, multispektralen und panchromatischen Sensors aus Beispiel 7.1 und 7.2. Zusätzlich ist die Anzahl der Mischkoeffizienten dargestellt. Die Berechnung des Rangs kann ohne oder mit Berücksichtigung der Normierungsbedingung, d. h. dass sich

alle Mischkoeffizienten eines Pixels zu eins summieren, erfolgen. Durch Hinzunahme dieser Bedingung erhöht sich der Rang der Mischmatrix. Ab einer Zellgröße von 2×2 Pixeln ist das Beispielpblem überbestimmt und der Rang der Matrix entspricht der Anzahl an zu bestimmenden Mischkoeffizienten.

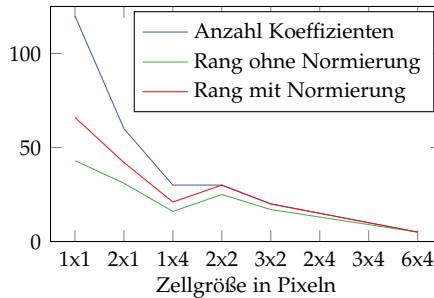
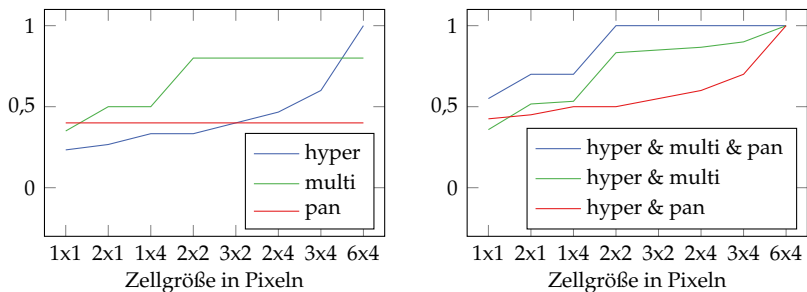


Abbildung 7.2 Abhängigkeit des Rangs der erweiterten Mischmatrix von der Entmischungsaufösung im Vergleich zur Anzahl an Mischkoeffizienten pro Zelle bei der Kombination eines hyperspektralen, multispektralen und panchromatischen Sensors. Ab einer Zellgröße von 2×2 Pixeln hat die Matrix vollen Rang. Die Normierungsbedingung führt zu einer Erhöhung des Rangs.

Für die Bewertung eines Mischproblems ist das Verhältnis aus Rang und Mischkoeffizientenanzahl interessant, da es ausdrückt, wie viel Information aus zusätzlichen Randbedingungen einfließen muss. In Abbildung 7.3 ist dieses Verhältnis in Abhängigkeit der Zellgröße für die einzelnen Sensoren und für verschiedene Kombinationen der Sensoren gezeigt. Es wird deutlich, dass die einzelnen multispektralen und panchromatischen Sensoren nie den vollen Rang erreichen, da ihre spektrale Auflösung nicht ausreichend hoch ist. Beim panchromatischen Sensor steigt das Verhältnis mit der größeren Auflösung nicht an, da dieser Sensor die Grundaufösung besitzt.

Bei der Kombination des hyperspektralen Sensors mit dem multispektralen wird der volle Rang schon vor der grössten Auflösung erreicht. Die Hinzunahme des panchromatischen Sensors führt zu einer kleinen Erhöhung des Rangs.



(a) einzelne Sensoren

(b) Kombination mehrerer Sensoren

Abbildung 7.3 Verhältnis des Rangs der erweiterten Mischmatrix zu der Anzahl an Mischkoeffizienten in Abhängigkeit der Entmischungsauflösung.

7.3.2 Anpassung der Filterkennlinien

Statt die Auflösung der Mischkoeffizienten anzupassen, können auch die spektralen Mischmatrizen der verschiedenen Sensoren angepasst werden, um den Rang der Matrix \hat{X} zu erhöhen. Allerdings ist dies im Gegensatz zum anderen Verfahren gleichbedeutend mit einer Veränderung des Aufnahmesystems durch Verwendung einer anderen Kamera oder anderer optischer Filter und somit nicht ohne Weiteres möglich. Trotzdem ist dieser Ansatz sehr hilfreich, denn es kann somit schon beim Entwurf des Aufnahmesystems auf die spätere Problemstellung Rücksicht genommen werden. Bei bestimmten Kameras lassen sich Aufnahmeparameter nachträglich verändern. So kann beispielsweise bei einigen hyperspektralen Kameras eine Auswahl an spektralen Kanälen getroffen werden, welches einer Veränderung der spektralen Mischmatrizen gleichkommt. Meistens kann hierdurch auch die Bildwiederholrate der Kamera erhöht werden, was bei einem Zeilenscanaufbau eine Veränderung der örtlichen Auflösung mit sich bringt (vgl. Abschnitt 2.3.2.2).

Das Anpassen der Sensorkennlinien entspricht der Bandselektion aus Kapitel 6, nur dass nun eine möglichst gute Entmischung an Stelle einer Klassifikation oder Trennung gefordert wird. Der Einfachheit halber wird das Vorgehen hier für das lineare Mischmodell ohne Erweiterung gezeigt.

Das Mischmodell wird durch die spektrale Mischmatrix erweitert (vgl. (7.16)):

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{X}\mathbf{a} . \quad (7.29)$$

Es stellt sich nun die Frage, wie \mathbf{C} gewählt werden muss, um eine möglichst gute Entmischung zu erzielen.

Es kann generell gefordert werden, dass das Produkt $\mathbf{C}\mathbf{X}$ vollen Rang aufweisen soll. Dies ist allerdings nur dann möglich, wenn die Anzahl an Sensorkanälen mindestens der Endmemberanzahl entspricht.

Die Konditionierung des Entmischungsproblems lässt sich mithilfe der Konditionszahl der Matrix $\hat{\mathbf{X}}$ bewerten. Eine Optimierung der Filterkurven kann dann entsprechend der Konditionierung erfolgen. Ein analoges Vorgehen wie zu den Ansätzen aus Abschnitt 6.5 ist ebenfalls möglich.

7.3.3 Regularisierung

Mit den Ansätzen aus den beiden vorherigen Abschnitten kann die Dimension des Entmischungsproblems reduziert werden. Doch sind die Kompromisse, die hierbei eingegangen werden, nicht immer möglich oder zielführend. In diesem Fall muss das schlecht gestellte Problem regularisiert werden. Hierfür stehen verschiedene Ansätze zur Verfügung.

Nebenbedingungen für den Lösungsraum

Zunächst stellen die Nebenbedingungen aus Abschnitt 4.2.1.1, d. h. die Normierungs- und Nichtnegativitätsbedingung, bereits eine Einschränkung des Lösungsraums dar. Je nach Umsetzung der Normierungsbedingung kann entweder der Rang der Mischmatrix erhöht oder die Anzahl der Entmischungskoeffizienten erniedrigt werden. Ersteres ist bei dem Ansatz nach Abschnitt 4.2.3.1 möglich, Letzteres geschieht beim Ersetzen eines Mischkoeffizienten durch eins minus die Summe aller anderen Mischkoeffizienten an einer Stelle. Der Einfluss der Normierungsbedingung wurde beispielsweise in Abbildung 7.2 gezeigt.

Tichonow-Regularisierung

Durch die Tichonow-Regularisierung (vgl. Abschnitt 4.2.3.1) können weitere Nebenbedingungen berücksichtigt werden, wobei der Ausdruck

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2 + \delta \|\mathbf{R}\mathbf{a}\|^2 \rightarrow \min \quad (7.30)$$

minimiert. Mit der Matrix \mathbf{R} kann beliebiges Vorwissen über die Mischkoeffizienten in die Entmischung einfließen. Der einfachste Fall ist hierbei eine Einheitsmatrix $\mathbf{R} = \mathbf{1}$. Dadurch wird eine Lösung mit möglichst kleiner L_2 -Norm gesucht. Wird allerdings gleichzeitig die Normierungsbedingung gefordert, so hat dieses Vorgehen eine Gleichverteilung aller Mischkoeffizienten zur Folge.

In vielen Fällen ist davon auszugehen, dass sich die Mischkoeffizienten nicht stark von den Koeffizienten an benachbarten Pixeln unterscheiden. Fasst man die Mischkoeffizienten als zweidimensionales Signal auf, so hat dieses nur niedrige Frequenzanteile. Wählt man die Matrix \mathbf{R} nun so, dass hochfrequente Anteile extrahiert werden, wird durch die Regularisierung eine niederfrequente Lösung gefunden. Wichtig ist hierbei zu beachten, dass die L_2 -Norm des Ausdrucks $\mathbf{R}\mathbf{a}$ minimiert wird.

Ein Beispiel für ein solches Filter \mathbf{R} ist die lokale Varianz, d. h. die Varianz der Mischkoeffizienten in einem bestimmten Bereich. Allerdings soll nicht die Varianz aller Mischkoeffizienten minimiert werden, sondern nur die Varianz innerhalb eines Endmembers, also für jedes einzelne Material. Das Vorgehen hierfür soll an einem Beispiel gezeigt werden.

Beispiel 7.4: Berechnung der lokalen Varianz

Um die Stichprobenvarianz der Elemente eines Vektors $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^N$ in der Form $\|\mathbf{R}\mathbf{a}\|^2$ zu berechnen, muss

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{N} \mathbf{1} \right) \quad (7.31)$$

gelten. Für $N = 3$ gilt beispielsweise

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 0,75 & -0,25 & -0,25 & -0,25 \\ -0,25 & 0,75 & -0,25 & -0,25 \\ -0,25 & -0,25 & 0,75 & -0,25 \\ -0,25 & -0,25 & -0,25 & 0,75 \end{bmatrix}. \quad (7.32)$$

Für die Berechnung der Summe der lokalen Varianz pro Endmember kann die Matrix \mathbf{R} entsprechend angepasst und erweitert werden.

Auf diese Weise können beliebige lineare Filter, die sich in der Form \mathbf{Ra} darstellen lassen und deren L_2 -Norm minimiert werden soll, realisiert werden. Denkbar sind hierfür beispielsweise das Laplace-Filter oder ein LoG-Filter.

L_1 -Norm

Neben der Tichonow-Regularisierung kann auch die Regularisierung mit der L_1 -Norm hilfreich sein. Hierbei wird der Ausdruck

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{Xa}\|_2^2 + \delta \|f(\mathbf{a})\|_1^2 \rightarrow \min \quad (7.33)$$

minimiert, wobei mit der Funktion $f(\cdot)$ das Vorwissen eingebracht wird. Wird wiederum davon ausgegangen, dass benachbarte Pixel ähnliche Werte annehmen, so kann mit der Funktion $f(\cdot)$ der Betrag der Differenz benachbarter Pixel extrahiert werden. Dieser Ansatz ist ähnlich zu der oben beschriebenen lokalen Varianz. Allerdings wird nun die L_1 -Norm minimiert, d. h. die Summe der absoluten Differenzen. Dies hat zur Folge, dass benachbarte Mischkoeffizienten ähnliche Werte annehmen, aber dennoch Sprünge zugelassen werden. Dieser Ansatz ist als *Total-Variation-Regularisierung* aus dem Bereich der Bildrestauration und dem *Compressed Sensing* bekannt [138]. Für die Entmischung sind diese Annahmen recht naheliegend, da sich die materielle Zusammensetzung eines Objekts sprunghaft ändern kann, aber in anderen Regionen eher gleichbleibende Zusammensetzungen aufzeigt [62].

Mithilfe der L_1 -Norm können auch Entmischungen gefunden werden, welche jedes Pixel aus möglichst wenigen Materialien darstellen lassen, also dünnbesetzt sind. Allerdings ist dieses Vorgehen bei gleichzeitiger Anwendung der Normierungsbedingung nicht zielführend, da die L_1 -Norm der Entmischungskoeffizienten konstant gleich eins gefordert wird. In diesem Fall muss eine Lösung gefunden werden, bei der viele Mischkoeffizienten möglichst nahe null liegen. Hierfür können die Ansätze aus [77] für *Sparse Unmixing* genutzt werden.

Regularisierung mit Split-Bregman-Algorithmus

Für die Regularisierung mit L_1 -Norm nach Gleichung (7.33) muss zunächst die Funktion $f(\mathbf{a})$ näher bestimmt werden. Ein geeigneter Ansatz ist die Verwendung der Differenz zu den Nachbarpixeln. Für die Nachbarschaft zu den Nachbarpixeln oben und unten sowie rechts und links können einzelne lineare Funktionen aufgestellt werden. Es ergibt sich daraus eine gemeinsame Matrix

$$\mathbf{K} = [\mathbf{K}_o \quad \mathbf{K}_u \quad \mathbf{K}_l \quad \mathbf{K}_r], \quad (7.34)$$

mit der alle Differenzen zwischen den Mischkoeffizienten berechnet werden können:

$$f(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\mathbf{K}\|_1. \quad (7.35)$$

Die einzelnen Matrizen \mathbf{K}_i entsprechen linearen Operatoren, welche auch als Faltung oder mithilfe der Fourier-Transformation umgesetzt werden können. Beispielsweise wäre der Filterkern für die Berechnung der Differenz zum linken Nachbarpixel

$$k_l = [0 \quad 1 \quad -1]. \quad (7.36)$$

Die anderen Filter können entsprechend definiert werden. Durch diese Darstellung reduziert sich der Aufwand des Algorithmus deutlich.

Mit dem linearen Operator gilt es nun, das Problem

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{A}\|_2^2 + \delta \|\mathbf{A}\mathbf{K}\|_1 \rightarrow \min \quad (7.37)$$

mit den Randbedingungen

$$\mathbf{1}^T \mathbf{A} = \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \mathbf{A} \geq 0 \quad (7.38)$$

zu lösen.

Um die beiden Gütekriterien (Rekonstruktionsfehler und Glattheit) zu trennen, wird von Chen et al. vorgeschlagen, die Split-Bregman-Methode [56] zu nutzen [32]. Dadurch lässt sich das Optimierungsproblem (7.37) umstellen zu

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{A}\|_2^2 + \delta \|\mathbf{U}\|_1 \rightarrow \min \quad (7.39)$$

$$\text{mit} \quad \mathbf{V} = \mathbf{A} \quad \text{und} \quad \mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{K} \quad (7.40)$$

und mithilfe eines iterativen Algorithmus lösen. In jedem Iterationsschritt werden dabei die Matrizen \mathbf{A} , \mathbf{U} und \mathbf{V} neu bestimmt. Besonders ist hierbei, dass abwechselnd eine Entmischung und eine Korrektur durchgeführt werden. Die Entmischung kann dabei effizient pro Pixel oder Bildzelle durchgeführt werden, ohne dass die örtlichen Zusammenhänge berücksichtigt werden. Diese werden erst durch die Korrektur bei der Berechnung von \mathbf{U} und \mathbf{V} verwendet. Für die Schätzung der Mischkoeffizienten \mathbf{A} kann ein beliebiges Entmischungsverfahren genutzt werden (vgl. Abschnitt 4.2.3). Für eine detaillierte Beschreibung des Vorgehens sei auf die erwähnten Arbeiten verwiesen [32, 56].

7.4 Evaluation des erweiterten Mischmodells

In diesem Abschnitt sollen verschiedene Eigenschaften des vorgestellten erweiterten Mischmodells dargestellt werden. Dazu wird die Entmischung mit verschiedenen Testdaten evaluiert, wobei sowohl Messdaten (Pulverdatensatz) als auch Simulationen verwendet werden. Ziel ist es, die Vor- und Nachteile des vorgestellten Modells herauszuarbeiten.

7.4.1 Voruntersuchungen

Zunächst werden die Ergebnisse einiger Voruntersuchungen präsentiert, welche zur Lösung des erweiterten Mischmodells hilfreich sind.

7.4.1.1 Entmischungsverfahren

Entmischungsverfahren lassen sich in überwachte und unüberwachte Verfahren unterteilen, je nachdem, ob Endmembersignaturen vorgegeben oder während der Entmischung erst bestimmt werden. In Abbildung 7.4 ist das Ergebnis einer Entmischung des Pulverdatensatzes mit dem überwachten NCLS- und dem unüberwachten NMF-Algorithmus dargestellt (vgl. Abschnitte 4.2.3.1 bzw. 4.2.3.4). Die Ergebnisse sind sich sehr ähnlich. Im Vergleich mit den bekannten, wahren Mischanteilen fällt allerdings auf, dass die einzelnen kachelförmigen Flächen nicht homogen sind, sondern einzelne verteilte Punkte aufweisen. Dies ist besonders gut im

vierten Material bei der Entmischung mit NCLS zu sehen. Diese Beobachtung zeugt davon, dass sich die verschiedenen Pulver nicht optimal vermischt haben. Daher ist ein Vergleich mit der vermeintlichen Ground Truth nur teilweise aussagekräftig.

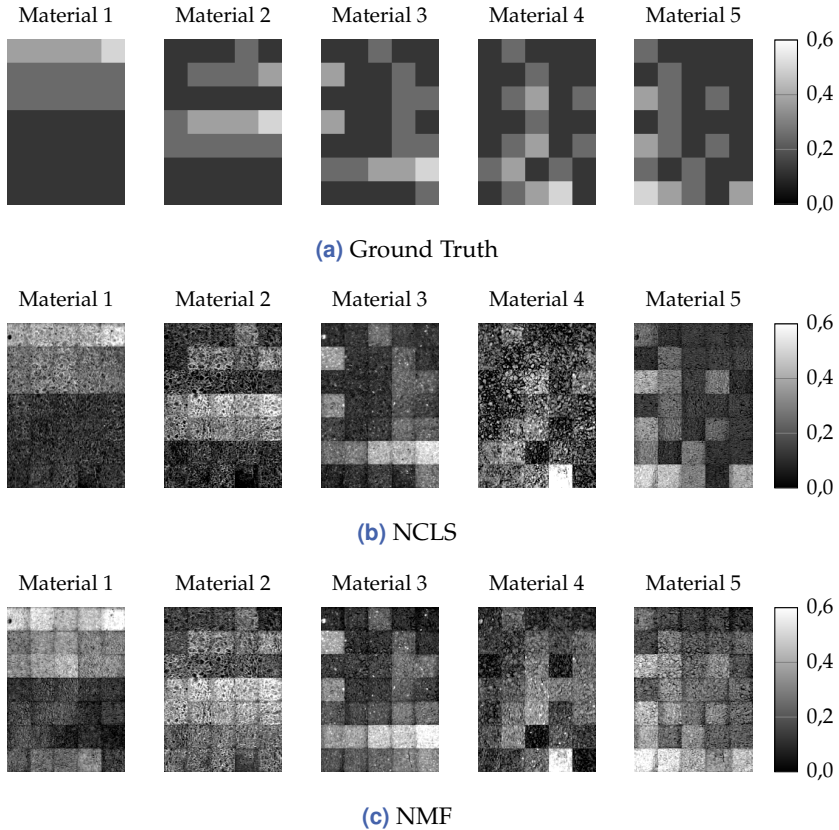


Abbildung 7.4 Entmischungsergebnis des Pulverdatensatzes mit unterschiedlichen Entmischungsverfahren.

Um die Verfahren quantitativ zu bewerten, werden daher zusätzlich Simulationsdaten mit zufälligen Mischkoeffizienten entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 5.4.2.2 ausgewertet. Als Endmembersignatu-

ren werden hierfür dieselben Spektren verwendet wie für die gezeigte überwachte Entmischung. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.1 dargestellt. Es werden sowohl der Rekonstruktionsfehler als auch die Mischkoeffizienten mithilfe des RMSE bewertet.

Tabelle 7.1 Vergleich zwischen Entmischungsverfahren (RMSE).

		UCLS	NCLS	FCLS
Messdaten	RMSE (A)	$1,03 \cdot 10^{-1}$	$9,38 \cdot 10^{-2}$	$9,41 \cdot 10^{-2}$
	RMSE (Y)	$8,57 \cdot 10^{-3}$	$8,75 \cdot 10^{-3}$	$8,77 \cdot 10^{-3}$
Simulation	RMSE (A)	$7,44 \cdot 10^{-2}$	$4,56 \cdot 10^{-2}$	$4,59 \cdot 10^{-2}$
	RMSE (Y)	$5,00 \cdot 10^{-2}$	$5,03 \cdot 10^{-2}$	$5,04 \cdot 10^{-2}$

Es zeigt sich, dass der Rekonstruktionsfehler RMSE (Y), welcher auch das Gütemaß, nach dem optimiert wird, darstellt, unabhängig vom Verfahren ist. Anders ist dies bei den Mischkoeffizienten. Hier zeigt sich, dass durch Hinzunahme der Nichtnegativitätsbedingung eine bessere Entmischung möglich ist. Allerdings bringt die Normierungsbedingung beim FCLS-Algorithmus keinen weiteren Vorteil, was an der hohen Überbestimmtheit des Problems liegt. Später wird sich zeigen, dass der FCLS-Ansatz durchaus vorteilhaft ist, wenn nur wenige Kanäle zur Verfügung stehen.

Mit den Pulver-Messdaten kann nun auch überprüft werden, ob das LMM gültig ist, oder ob nichtlineare Modelle Vorteile mit sich bringen. Hierfür werden die Daten mit den nichtlinearen Mischmodellen FM, GBM und PPNM (vgl. Abschnitt 4.2.1) entmischt (siehe Tabelle 7.2). Es zeigt sich allerdings, dass die Entmischung mit nichtlinearen Modellen nur beim PPNM geringfügige Verbesserungen mit sich bringt. Dies kann zum einen an der fehlerhaften Mischung der Pulver liegen, oder aber die Aussage stützen, dass hauptsächlich lineare Effekte Einfluss auf das Signal haben. Auf eine Auswertung von simulierten Daten wird hier verzichtet, da immer jener Entmischungsansatz der beste ist, welcher zum Mischmodell passt. Ein Vergleich der linearen und nichtlinearen Modelle mit simulierten Daten ist daher nicht aussagekräftig.

Tabelle 7.2 Vergleich zwischen linearen und nichtlinearen Mischmodellen.

	LMM	FM	GBM	PPNM
RMSE (A)	$9,41 \cdot 10^{-2}$	$1,03 \cdot 10^{-1}$	$9,40 \cdot 10^{-2}$	$9,36 \cdot 10^{-2}$
RMSE (Y)	$8,77 \cdot 10^{-3}$	$8,96 \cdot 10^{-3}$	$8,77 \cdot 10^{-3}$	$8,72 \cdot 10^{-3}$

7.4.1.2 Einfluss der Endmembersignaturen

Für überwachte Entmischungsverfahren muss bereits vorab eine Auswahl an Endmembersignaturen getroffen werden, und auch bei unüberwachten Verfahren sollten Endmembersignaturen zur Initialisierung zur Verfügung stehen. Wie in Abschnitt 4.2.2.2 beschrieben, können hierfür verschiedene Ansätze verwendet werden. In Abbildung 7.5 werden aus dem Pulverdatensatz selektierte und extrahierte Signaturen mit den gemittelten Spektren der reinen Stoffe verglichen.

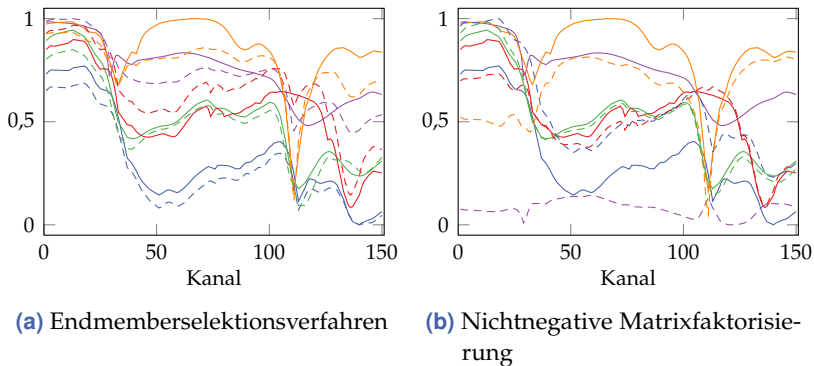


Abbildung 7.5 Vergleich von Selektions- und Extraktionsverfahren zur Bestimmung von Endmembersignaturen aus dem Pulverdatensatz. Dargestellt sind die *Ground Truth* als Mittelwert der reinen Spektren (durchgezogen) und die bestimmten Endmember (gestrichelt).

Das Ergebnis der Endmemberselektion mit dem VCA-Ansatz zeigt Abbildung 7.5(a). Die Verläufe der selektierten und gemittelten Spektren sind sich recht ähnlich und eine Zuordnung zwischen den unterschiedlichen Materialien ist möglich. Als Extraktionsverfahren wurde ein

NMF-Algorithmus mit zufälliger Initialisierung gewählt. Das Ergebnis ist in Abbildung 7.5(b) dargestellt. Hier sind nur wenige Signaturen den gemittelten Spektren zuzuordnen.

Für den Vergleich des Einflusses und der Konsistenz der einzelnen Selektionsverfahren ist in Abbildung 7.6 der Rekonstruktions- und Entmischungsfehler bei zufälligen Daten dargestellt. Das VCA-Verfahren zeigt dabei die kleinste Streuung und beste Entmischung, weshalb zur Identifikation reiner Pixel in einer Mischung dieses Verfahren verwendet wird.

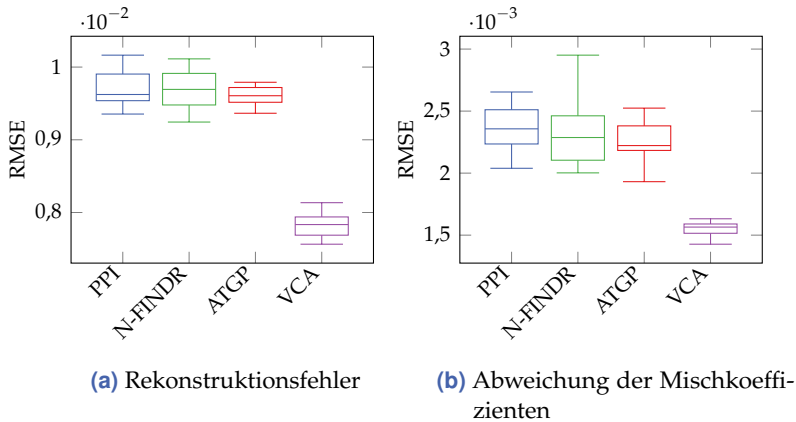
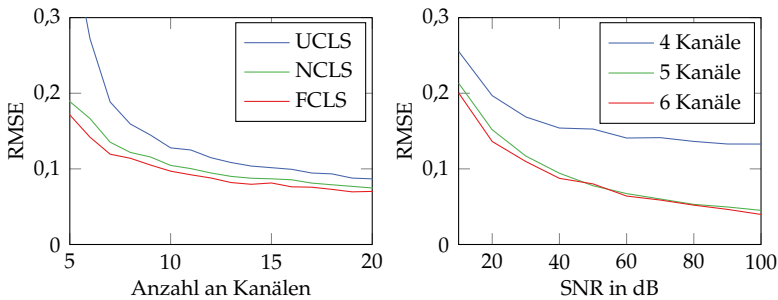


Abbildung 7.6 Vergleich von Selektionsverfahren zur Bestimmung von Endmembersignaturen.

7.4.1.3 Einfluss des Sensors

In Bezug auf die Untersuchungen zur Bandselektion soll auch der Einfluss der Sensorkennlinie anhand der Kanalanzahl gezeigt werden. Abbildung 7.7(a) zeigt den Entmischungsfehler für verschiedene Least-Squares-Verfahren in Abhängigkeit der Kanalanzahl. Je kleiner die Kanalanzahl, desto schlechter wird das Entmischungsergebnis. Die Entmischung ist außerdem vom Rauschniveau der Sensoren abhängig. Dies zeigt Abbildung 7.7(b) für unterschiedliche Kanalanzahlen und unterschiedliches

Rauschen. Es zeigt sich, dass die Entmischung recht ähnlich ist, wenn das Problem gut gestellt ist, d. h. in diesem Fall mindestens fünf Kanäle zur Verfügung stehen. Werden nur vier Kanäle verwendet, so führt dies zu einer wesentlich schlechteren Entmischung. Bei der kombinierten Entmischung mit mehreren Sensoren wird sich im Folgenden zeigen, dass solche Sensoren mit zu geringer Kanalanzahl trotzdem einen Beitrag zur Entmischung leisten können.



(a) Einfluss des Algorithmus

(b) Einfluss des Rauschens

Abbildung 7.7 Einfluss der Kanalanzahl, des Rauschens und des Entmischungsalgorithmus auf die Entmischung von fünf Endmembern.

7.4.1.4 Regularisierung

Als letzter Aspekt der Voruntersuchungen soll die Regularisierung mithilfe der L_1 -Norm der Vierernachbarschaft der Mischkoeffizienten analysiert werden. Zur Umsetzung wird der Split-Bregman-Ansatz (vgl. Abschnitt 7.3.3) verwendet. Dieses iterative Verfahren entmischt zunächst ohne Berücksichtigung der örtlichen Anordnung und verbessert dann in jedem Schritt die örtliche Verteilung der Anteilsmatrizen.

In Abbildung 7.8 ist der Verlauf einer solchen Optimierung für den Pulverdatensatz zu sehen. Es zeigt sich, dass nicht nur der RMSE der Mischkoeffizienten erwartungsgemäß sinkt, da die Ground Truth stückweise konstante Werte besitzt, sondern dass auch der Rekonstruktionsfehler während der Optimierung abnimmt. Man kann also davon ausgehen,

dass das Ergebnis nach der Optimierung und Berücksichtigung der örtlichen Zusammenhänge eine bessere Entmischung liefert als ohne Regularisierung.

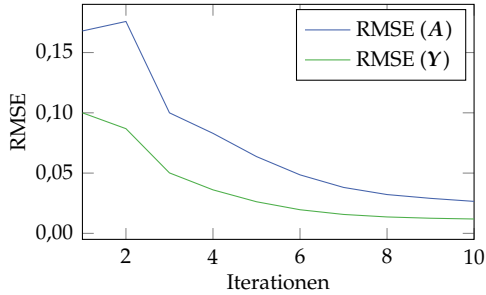


Abbildung 7.8 Verlauf der Gütemaße bei der Entmischung eines unterbestimmten Systems mit der Split-Bergman-Methode.

Die gefundenen Mischkoeffizienten zu Beginn und zum Ende der Optimierung sind in Abbildung 7.9 dargestellt. Die wesentlichen glatteren Verläufe der Mischkoeffizienten nach der Optimierung werden dabei deutlich. Bei der kombinierten Entmischung wird auf diese Art der Regularisierung sowie auf die Regularisierung zweiter Ordnung mithilfe der lokalen Varianz zurückgegriffen, um unterbestimmte Entmischungsprobleme zu lösen.

7.4.2 Analyse mit simulierten Daten

Für das erweiterte Mischmodell werden zunächst einige Eigenschaften anhand simulierter Daten herausgearbeitet, bevor in Abschnitt 7.4.3 eine Auswertung mit Messdaten erfolgt. Bei der Simulation werden zufällige Mischmatrizen genutzt. Diese können ggf. eine vorgegebene lokale Varianz aufweisen (vgl. Abschnitt 5.4.2.2). Die dargestellten Ergebnisse sind dabei jeweils gemittelte Werte von 100 Wiederholungen des gleichen Experiments. Für die Mischung werden jeweils die fünf Endmembersignaturen verwendet, welche bereits oben Anwendung fanden. Es müssen daher die Anteile von fünf Materialien gefunden werden.

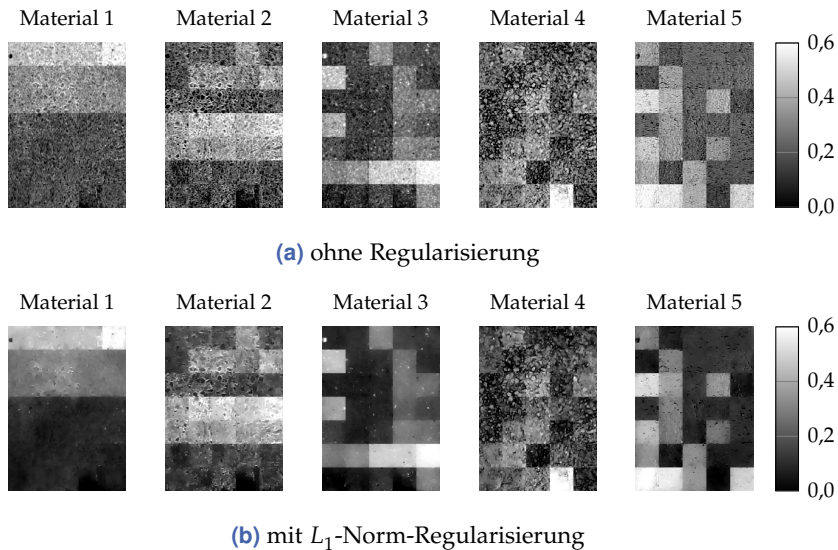


Abbildung 7.9 Vergleich des Entmischungsergebnis mit und ohne örtliche Regularisierung mithilfe der L_1 -Norm.

Als Erstes soll dargestellt werden, dass mithilfe des vorgestellten Modells zur kombinierten Entmischung der Signale mehrerer Sensoren eine Verbesserung des Entmischungsergebnis erzielt werden kann. Dies zeigt Abbildung 7.10. Hier ist die Kombination eines multispektralen Sensors mit unterschiedlicher Kanalanzahl mit jeweils einem dreikanaligem Sensor sowie einem panchromatischen Sensor dargestellt. Ersterer steht hierbei für einen RGB-Sensor, letzterer für eine Graubildkamera.

Die räumliche Auflösung aller Sensoren ist dabei identisch, sodass es zu keiner räumlichen Mischung kommt. Es zeigt sich, dass durch Hinzunahme des dreikanaligen Sensors, der alleine zu keiner guten Entmischung führen kann, eine Verbesserung des Entmischungsfehlers erreicht wird. Der panchromatische Sensor führt allerdings zu keiner weiteren Verbesserung.

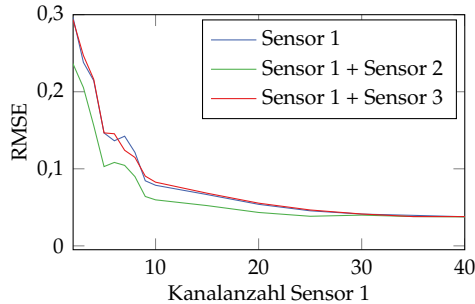
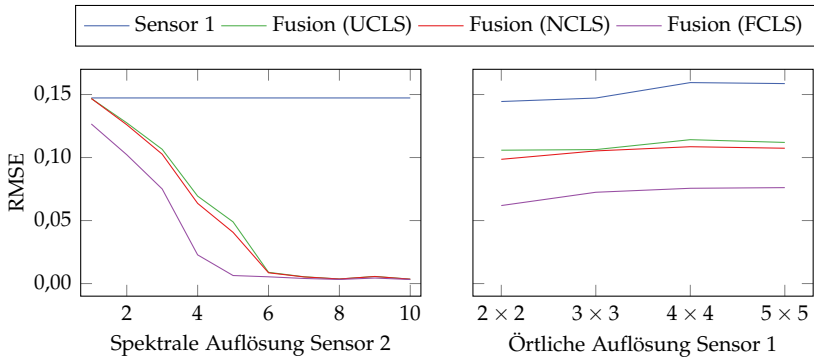


Abbildung 7.10 Verbesserte Entmischung durch Hinzunahme eines zusätzlichen Sensors. Sensor 1: Multispektraler Sensor mit variabler Kanalanzahl, Sensor 2: 3-kanaliger Sensor (z. B. RGB), Sensor 3: Panchromatischer Sensor (Graubild). Die Sensoren besitzen die gleiche örtliche Auflösung.

Die Kombination zweier Sensoren mit unterschiedlicher spektraler, aber auch unterschiedlicher räumlicher Auflösung wird in Abbildung 7.11 dargestellt. Sensor 1 ist jeweils ein hyperspektraler Sensor mit 100 Kanälen.

In Abbildung 7.11(a) ist der Einfluss der spektralen Auflösung des zweiten Sensors dargestellt. Die räumliche Auflösung des zweiten Sensors ist dabei die Grundauflösung von 1×1 Pixel, die des hyperspektralen Sensors 3×3 . Je höher die spektrale Auflösung, d. h. die Anzahl der Kanäle des zweiten Sensors ist, desto besser ist das Entmischungsergebnis. Der Unterschied der Entmischungsansätze wird hierbei besonders deutlich, da mit dem FCLS-Algorithmus eine vergleichbare Entmischungsgüte mit bereits einem Kanal weniger zu vergleichbaren Ergebnissen wie bei UCLS oder NCLS führt. Zusätzlich ist ein Vergleich mit der Entmischung ohne Kombination möglich. Es zeigt sich, dass je nach Auflösung des zweiten Sensors eine deutliche Verbesserung möglich ist.

Für Abbildung 7.11(b) wird nun die spektrale Auflösung des Sensors 2 bei drei Kanälen konstant gehalten und stattdessen die räumliche Auflösung des hyperspektralen Sensors variiert. Wie erwartet wird die Entmischung mit abnehmender räumlicher Auflösung schlechter. Allerdings ist bei jeder räumlichen Auflösung eine Verbesserung möglich.



(a) Einfluss der spektralen Auflösung

(b) Einfluss der räumlichen Auflösung

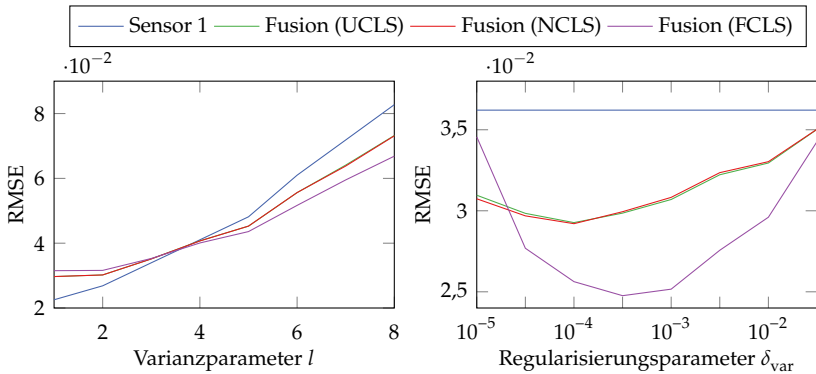
Abbildung 7.11 Kombination eines hyperspektralen Sensors (Sensor 1) mit einem multispektralen Sensor (Sensor 2): Entmischungsergebnis des kombinierten Modells mit verschiedenen Entmischungsalgorithmen im Vergleich zu dem Entmischungsergebnis des einzelnen hyperspektralen Sensors in Abhängigkeit der spektralen Auflösung des multispektralen Sensors sowie der räumlichen Auflösung des hyperspektralen Sensors.

Die gezeigten Zusammenhänge sind nochmals quantitativ in Tabelle 7.3 dargestellt. Hier werden drei Kombinationen unterschieden und jeweils die Entmischungsfehler für die einzelnen Sensoren und die Kombination aufgetragen. Es zeigt sich in allen Fällen eine Verbesserung des Entmischungsergebnisses durch die kombinierte Entmischung.

Tabelle 7.3 Entmischungsgüte in Abhängigkeit der Sensorkonfiguration.

örtliche Auflösung		spektrale Auflösung		RMSE		
Sensor 1	Sensor 2	Sensor 1	Sensor 2	Sensor 1	Sensor 2	Sensor 1 & 2
1 × 1	1 × 1	100	5	0,06	0,13	0,03
2 × 2	1 × 1	100	5	0,31	0,13	0,09
2 × 2	1 × 1	100	3	0,31	0,20	0,16

Zuletzt soll auf die Möglichkeit der Regularisierung mithilfe der lokalen Varianz eingegangen werden. Hierfür wurden verschiedene Messdaten unterschiedlicher räumlicher Varianz erzeugt. In Abbildung 7.12(a) ist die Abhängigkeit des Entmischungsfehlers von der örtlichen Varianz gezeigt. Je geringer die Varianz, desto besser ist das Entmischungsergebnis, da dann die räumliche Mischung keinen so großen Einfluss nimmt. Interessant ist, dass sich die zusätzliche Normierungsbedingung beim FCLS-Ansatz bei geringer Varianz negativ auswirkt.



(a) Einfluss der lokalen Varianz (die Varianz einer 3×3 -Pixel-Region ist proportional zu $\exp l$)

(b) Einfluss des Regularisierungsparameters δ_{var}

Abbildung 7.12 Entmischungsergebnis bei der kombinierten Entmischung mit Varianz-Regularisierung.

Um die Varianz bei der Entmischung zu berücksichtigen, muss der Regularisierungsparameter δ_{var} (vgl. Gleichung (7.30)) passend gewählt werden. Abbildung 7.12(b) zeigt den Einfluss des Parameters auf eine Entmischung. Der Entmischungsfehler zeigt bei einem bestimmten Parameterwert ein Minimum auf. Es hat sich gezeigt, dass zur Bestimmung des optimalen δ_{var} der Rekonstruktionsfehler herangezogen werden kann.

7.4.3 Analyse mit Messdaten

Das erweiterte Mischmodell zur kombinierten Entmischung von mehreren Sensoren soll nun anhand von Messdaten getestet werden. Es wird die Kombination eines multispektralen Sensors mit drei spektralen Kanälen und eines hyperspektralen Sensors mit 100 Kanälen untersucht. Die räumlichen Auflösungen der Sensoren sind 1×2 bzw. 4×4 Pixel. Abbildung 7.13 zeigt eine Basiszelle mit den entsprechenden Pixelgrößen der beiden Sensoren.

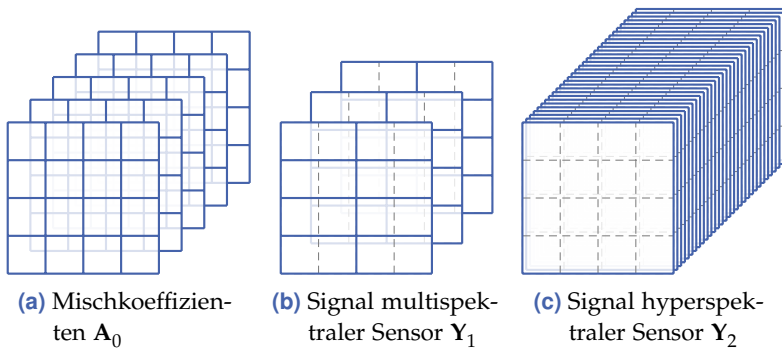


Abbildung 7.13 Zusammensetzung einer Basiszelle durch die Signale zweier Sensoren mit unterschiedlicher räumlicher und spektraler Auflösung.

Für die Realisierung der unterschiedlichen spektralen Auflösung wurden aus dem aufgenommenen hyperspektralen Bild drei Kanäle für das Signal Y_1 und 100 Kanäle für das Signal Y_2 verwendet. Die unterschiedliche räumliche Auflösung wurde durch entsprechende Unterabtastung erreicht. Da die Mischungen aus fünf verschiedenen Materialien bestehen, ist eine Entmischung mithilfe des Signals Y_1 alleine nicht möglich.

Als Referenz für die Entmischung in Grundauflösung wird das ursprüngliche Bild mit 150 Kanälen mithilfe des FCLS-Verfahrens entmischt. Die Ergebnisse können mit diesen Mischkoeffizienten verglichen werden.

Anstelle einer Fusion oder kombinierten Entmischung kann auch das hyperspektrale Signal Y_2 alleine entmischt werden. Man erhält dadurch ein Bild, welches in beide Richtungen vierfach unterabgetastet ist. Durch Interpolation kann dieses auf die Grundauflösung gebracht werden und

ebenfalls mit der Entmischung verglichen werden. Es ist zu erwarten, dass die kombinierte Entmischung eine klare Verbesserung liefert.

Tabelle 7.4 zeigt die Entmischungsergebnisse der verschiedenen Verfahren anhand des RMSE. Zum Vergleich des eigenen Verfahrens werden das IFSMA und die sukzessive Entmischung herangezogen (vgl. Abschnitt 4.3.2). Der RMSE-Wert ist für verschiedene örtliche Auflösungen dargestellt. Hieran kann die Konsistenz-Eigenschaft der Entmischungsansätze bewertet werden. Es wird deutlich, dass die kombinierte Entmischung mit dem entwickelten Mischmodell durch die Berücksichtigung von spektraler und örtlicher Mischung die beste Entmischung erreicht. Zusätzlich wird nur bei der kombinierten Entmischung das Ergebnis bei größerer Auflösung deutlich besser. Anhand dieser Werte lässt sich feststellen, dass das vorgestellte Mischmodell den anderen Ansätzen überlegen ist.

Tabelle 7.4 Vergleich des erweiterten Mischmodells mit anderen Fusionsmethoden anhand des RMSE in unterschiedlichen Auflösungen.

	Interp.	Sukz. Entmischung	IFSMA	komb. Entmischung
$\text{RMSE}(\mathbf{A})_{1 \times 1}$	0,15	0,16	0,17	0,09
$\text{RMSE}(\mathbf{A})_{1 \times 2}$	0,15	0,15	0,16	0,08
$\text{RMSE}(\mathbf{A})_{4 \times 4}$	0,14	0,14	0,15	0,05

7.5 Zusammenfassung Mischmodell

In diesem Kapitel wurde eine Erweiterung des linearen Mischmodells präsentiert, welche die spektralen und räumlichen Eigenschaften der Sensoren berücksichtigt. Es konnte eine geeignete Darstellung gefunden werden, um die Signalentstehung mehrerer Sensoren in einem Modell zusammenzuführen. Die Sensoren können dabei unterschiedliche räumliche und spektrale Auflösungen besitzen.

Durch das erweiterte Mischmodell ist es nun möglich, die Signale mehrerer Sensoren gleichzeitig zu entmischen. Als Entmischungsverfahren können bekannte Entmischungsverfahren verwendet werden, da das erweiterte Mischmodell in seiner Form dem LMM gleicht. Implizit werden

in dem Modell Randbedingungen wie die Normierung und Konsistenz berücksichtigt.

Es wurden verschiedene Möglichkeiten entwickelt, wie das inverse Problem der Entmischung mit dem erweiterten Mischmodell regularisiert werden kann. Dabei hat sich die Minimierung der lokalen Varianz mit einer Tichonow-Regularisierung sowie die L_1 -Regularisierung mittels Split-Bregman-Algorithmus als nützlich herausgestellt. Des Weiteren wurde gezeigt, wie die Sensorcharakteristik oder die Entmischungsauflösung angepasst werden müssen, um die Konditionierung des inversen Problems zu beeinflussen.

Zur Bewertung des entwickelten Mischmodells wurden sowohl Simulationsdaten als auch Messungen herangezogen. Dabei wurde jeweils die Mischung von fünf Materialien untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass durch die Kombination mehrerer Sensoren das Entmischungsergebnis deutlich verbessert werden kann. Im Vergleich mit anderen Methoden stellte sich das vorgestellte Verfahren als vorteilhaft heraus.

8 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden verschiedene Methoden zur Auswertung hyperspektraler Bildaufnahmen im Nahinfrarotbereich untersucht. Dabei wurden mehrere Verfahren zur Materialklassifikation in Inspektionssystemen entwickelt, vorgestellt und evaluiert. Die entwickelten Methoden lassen sich grob in zwei Ansätze aufteilen. Im ersten werden hyperspektrale Aufnahmen nur im Labor gewonnen, um hiermit den Entwurf von problemangepassten Kamerasystemen und insbesondere die Wahl optimaler optischer Filter zu ermöglichen. Im anderen werden hyperspektrale Kameras zusammen mit anderen Sensoren eingesetzt, um anhand der spektralen Entmischung auf Materialanteile zu schließen. Alle Ansätze wurden an verschiedenen Mess- und Simulationsdaten evaluiert.

8.1 Filterwahl

Verschiedener Verfahren zur Filterauswahl und für den Filterentwurf mithilfe hyperspektraler Daten wurden untersucht, um die Trennbarkeit von Klassen unterschiedlicher Materialien zu bewerten. Hierbei kamen verschiedene Distanzmaße in Betracht. Einige haben sich als ungeeignet herausgestellt, da durch sie stark korrelierte Merkmale extrahiert werden, welche anfällig auf Veränderungen reagieren. Diese Änderungen sind beispielsweise Rauschen, Parameterschwankungen oder Veränderungen des Signals durch fehlerhafte Sensorkalibrierung.

Es wurde daher ein systematisches Vorgehen vorgeschlagen, mit welchem eine robuste Filterkombination gefunden werden kann. Hierfür wurde als Distanzmaß die Histogrammüberlappung bei unterschiedlichen Bingerößen gewählt, welche ähnliche Ergebnisse liefert wie das mRMR-Maß.

Für die Wahl zweier Filter wurde eine Darstellung der Distanzmaße gefunden, welche den Anwender bei der Wahl der Filterkombination unterstützen. Zusätzlich wurde eine globale Optimierung der Trennbarkeit untersucht. Hierbei stellten sich evolutionäre Algorithmen als hilfreiches Verfahren heraus. Mit ihnen kann eine Pareto-Optimierung durchgeführt werden, wodurch konkurrierende Ziele wie die Klassentrennbarkeit und die Robustheit vom Anwender abgewogen werden können. Dadurch steht dem Anwender für verschiedene Randbedingungen eine optimale Filterkombination zur Verfügung.

8.2 Erweitertes Mischmodell

Das lineare Mischmodell wurde um verschiedene Sensoreigenschaften erweitert, sodass eine gleichzeitige Entmischung der Daten mehrerer Sensoren durchgeführt werden kann. Das erweiterte Mischmodell ermöglicht, dass die geringe räumliche Auflösung und die niedrige Geschwindigkeit einer hyperspektralen Kamera durch die Kombination mit multispektralen Kameras höherer räumlicher, aber geringerer spektraler Auflösung ausgeglichen werden kann. Hierzu werden die spektralen Eigenschaften, sprich die Quanteneffizienz, Sensorkennlinie und Kanalanzahl, aber auch Beleuchtung als spektrale Mischung modelliert. Die räumlichen Eigenschaften, welche durch die Übertragungsfunktion, das Abbildungsverhalten und verschiedene räumliche Auflösungen dargestellt werden können, werden in einer örtlichen Mischung zusammengefasst. Die gleichzeitige Entmischung führt durch die Berücksichtigung der Sensorcharakteristik zur impliziten Fusion der Sensordaten und zu einem Entmischungsergebnis, welches in der Regel eine feinere räumliche Auflösung aufweist als bei der Verwendung eines hyperspektralen Sensors.

Das erweiterte Mischmodell wurde anhand von Simulations- und Messdaten umfangreich untersucht. Beim Vergleich mit herkömmlichen Entmischungs- und Fusionsansätzen zeigte sich eine deutliche Verbesserung durch die zusätzlichen Modellannahmen. Es wurden zudem Möglichkeiten aufgezeigt, wie zusätzliche Informationen durch verschiedene Regularisierungsansätze eingebracht werden können.

Durch das entwickelte Mischmodell ist es möglich, die Vorteile unterschiedlicher Kameras zu nutzen und die Nachteile auszugleichen. Dies erlaubt den Einsatz der spektralen Entmischung auch in zeitkritischen Anwendungen, wie beispielsweise in optischen Inspektionssystemen.

8.3 Ausblick

Die vorgestellten Ergebnisse lassen teilweise Raum für weitere Verbesserungen oder unbeantwortete Forschungsfragen. Einige sollen an dieser Stelle aufgeführt werden.

Während der Untersuchungen zur Filterwahl wurden hauptsächlich rechteck- und gaußförmige Filter genutzt. In der Praxis zeigen optische Filter wesentlich komplexere Transmissionskurven auf. Dies ist insbesondere bei Interferenzfiltern, welche aus vielen dünnen Schichten bestehen, der Fall. Diese komplexere Form kann ausgenutzt werden, um die Trennung von Materialien zu optimieren. Daher wird vorgeschlagen, die Filter in Abhängigkeit der Anwendung zu entwerfen. Dabei könnte das physikalische Modell eines Filters sowie dessen Herstellungskosten berücksichtigt werden. Die dargestellten Optimierungsverfahren ließen sich auf ein solches Modell problemlos anwenden.

Außerdem wurde in dieser Arbeit nicht betrachtet, in welcher Weise optische Filter in das Aufnahmesystem integriert werden können. Hierbei kommt der Einsatz gängiger Filter vor der Linse in Betracht, oder aber die Applikation von Filtern direkt auf dem Sensorchip. Diese Abwägung muss gesondert getroffen werden.

Für die Bewertung der Trennbarkeit von Objekten unterschiedlicher Materialklassen ist das Spektrum eine sehr wichtige Eigenschaft, doch können auch andere Merkmale hilfreich sein. Bei der Klassifikation von Objekten unterschiedlicher Materialklassen wurden nur Methoden untersucht, welche für jedes Pixel eine Entscheidung treffen. In der Praxis wird meist eine Entscheidung pro Objekt getroffen. Hierbei können neben dem Spektrum andere Merkmale, wie beispielsweise geometrische, hilfreiche diskriminierende Information liefern. Wie mit der Kombination aus den pixelbasierten spektralen Merkmalen und anderen objektbasier-

ten Merkmalen eine möglichst gute Objektklassifikation erfolgen kann, müsste ggf. weiter untersucht werden.

Bei der Materialklassifikation in Inspektionsanlagen steht man immer wieder vor der Herausforderung, die Parametrisierung der Klassifikatoren durchzuführen. Dieser Prozess wird als Einlernen bezeichnet. Mit Methoden des *Active Learning* oder der Anomaliedetektion kann dieser Prozess verbessert werden. Des Weiteren ist häufig bei der Trennung von Materialien nur eine Gutklasse bekannt, aus der jegliche Fremdmaterialien herausgefiltert werden sollen. Durch Verwendung eines Einklassenklassifikators kann dieses Problem gelöst werden. Erste Untersuchungen der Anomaliedetektion und der 1-Klassen-SVM haben sich als nützlich erwiesen und sollten fortgeführt werden.

Bei der Verwendung des erweiterten Mischmodells wurden hauptsächlich überwachte Entmischungsansätze betrachtet, in denen die Materialsignaturen der reinen Stoffe bekannt sind. Das Modell ließe sich auf unüberwachte Ansätze erweitern, wie beispielsweise auf die NMF. Außerdem wurde das Modell bis jetzt auf lineare Mischvorgänge begrenzt. Bei Untersuchungen konnte zwar kein Vorteil von nichtlinearen Mischmodellen bei der Entmischung von Messdaten festgestellt werden, doch sind für eine abschließende Bewertung zusätzliche Versuche nötig. Prinzipiell kann das erweiterte Mischmodell auch auf nichtlineare Mischmodelle, wie das generalisierte bilineare Mischmodell, übertragen werden.

Anhang

A.1 Messdaten

Pulverdatensatz

Die Mischkoeffizienten des Pulverdatensatzes zeigt Abbildung A.1. Die Materialien sind in Tabelle A.1 aufgelistet.

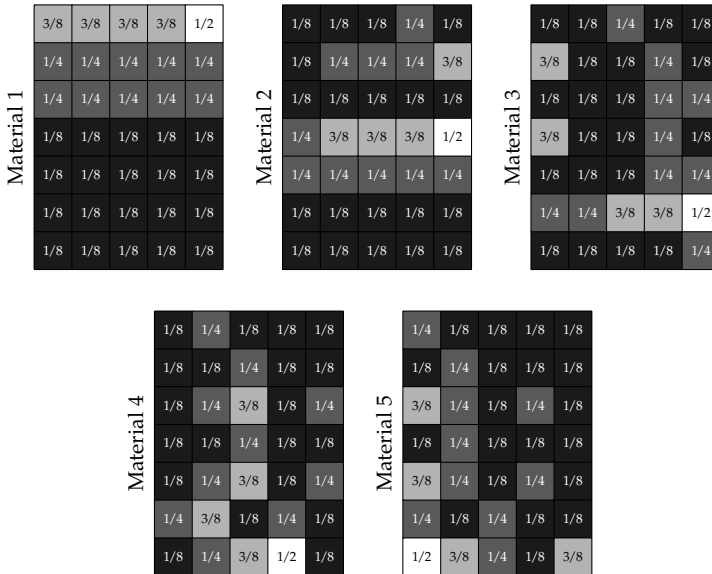


Abbildung A.1 Mischkoeffizienten im Pulverdatensatz.

Tabelle A.1 Materialien des Pulverdatensatzes.

Material 1	Milchzucker
Material 2	Maisstärke
Material 3	Puderzucker
Material 4	Magnesiumcarbonat
Material 5	Modelliergips

Literaturverzeichnis

- [1] **Adams, J. B., M. O. Smith** und **P. E. Johnson**. *Spectral Mixture Modeling: A New Analysis of Rock and Soil Types at the Viking Lander 1 Site*. In: *Journal of Geophysical Research* 91.B8 (1986), S. 8098–8112.
- [2] **Aiazzi, B., S. Baronti** und **M. Selva**. *Improving Component Substitution Pansharpening through Multivariate Regression of MS+ Pan Data*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 45.10 (2007), S. 3230–3239.
- [3] **Aikio, M.** *Hyperspectral Prism-Grating-Prism Imaging Spectrograph*. Diss. Technical Research Centre of Finland, 2001.
- [4] **Alparone, L. et al.** *Comparison of Pansharpening Algorithms: Outcome of the 2006 GRS-S Data-Fusion Contest*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 45.10 (2007), S. 3012–3021.
- [5] **Altmann, Y. et al.** *Supervised Nonlinear Spectral Unmixing using a Postnonlinear Mixing Model for Hyperspectral Imagery*. In: *IEEE Transactions on Image Processing* 21.6 (2012), S. 3017–3025.
- [6] **Amorós-López, J. et al.** *Multi-Resolution Spatial Unmixing for MERIS and Landsat Image Fusion*. In: *2010 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. IEEE, 2010, S. 3672–3675.
- [7] **Amorós-López, J. et al.** *Regularized Multiresolution Spatial Unmixing for ENVISAT/MERIS and Landsat/TM Image Fusion*. In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 8.5 (2011), S. 844–848.
- [8] **Amro, I. et al.** *A Survey of Classical Methods and New Trends in Pansharpening of Multispectral Images*. In: *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing* 79 (2011), S. 1–22.
- [9] **Ariana, D., D. Guyer** und **B. Shrestha**. *Integrating Multispectral Reflectance and Fluorescence Imaging for Defect Detection on Apples*. In: *Computers and Electronics in Agriculture* 50.2 (2006), S. 148–161.
- [10] **Ashton, E.** und **A. Schaum**. *Algorithms for the Detection of Sub-Pixel Targets in Multispectral Imagery*. In: *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing* 64.7 (1998), S. 723–731.

- [11] **Atkinson, P.** *Resolution Manipulation and Sub-Pixel Mapping*. In: *Remote Sensing Image Analysis: Including the Spatial Domain*. Hrsg. von **Jong, S. M. de** und **F. D. van der Meer**. Heidelberg: Springer, 2006. Kap. 4, S. 51–70.
- [12] **Barducci, A. et al.** *Multi-Resolution Least-Squares Spectral Unmixing Algorithm for Subpixel Classification of Hyperspectral Images*. In: *IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium 2003*. Bd. 3. C. IEEE, 2003, S. 1799–1801.
- [13] **Bayliss, J., J. A. Gualtieri** und **R. F. Crompt**. *Analyzing Hyperspectral Data with Independent Component Analysis*. In: *Proceedings of the SPIE AIPR Workshop*. 1997, S. 133–143.
- [14] **Beyerer, J., F. Puente León** und **C. Frese**. *Automatische Sichtprüfung*. Heidelberg: Springer, 2012.
- [15] **Bhattacharyya, A.** *On a Measure of Divergence Between Two Multinomial Populations*. In: *Sankhya: The Indian Journal of Statistics* 7.4 (1946), S. 401–406.
- [16] **Bioucas Dias, J. M.** und **A. Plaza**. *An Overview on Hyperspectral Unmixing: Geometrical, Statistical, and Sparse Regression Based Approaches*. In: *2011 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. IEEE, 2011, S. 1135–1138.
- [17] **Bioucas Dias, J. M. et al.** *Hyperspectral Unmixing Overview: Geometrical, Statistical, and Sparse Regression-Based Approaches*. In: *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 5.2 (2012), S. 354–379.
- [18] **Bishop, C. M.** *Pattern Recognition and Machine Learning*. New York: Springer, 2007.
- [19] **Boardman, J. W., F. A. Kruse** und **R. O. Green**. *Mapping Target Signatures via Partial Unmixing of AVIRIS Data*. In: *Summaries of the VI JPL Airborne Earth Science Workshop*. 1995.
- [20] **Borel, C. C.** und **S. A. W. Gerstl**. *Nonlinear Spectral Mixing Models for Vegetative and Soil Surfaces*. In: *Remote Sensing of Environment* 47 (1994), S. 403–416.
- [21] **Botev, Z. I., J. F. Grotowski** und **D. P. Kroese**. *Kernel Density Estimation via Diffusion*. In: *The Annals of Statistics* 38.5 (2010), S. 2916–2957.
- [22] **Bro, R.** und **S. De Jong**. *A Fast Non-Negativity-Constrained Least Squares Algorithm*. In: *Journal of Chemometrics* 11.5 (1997), S. 393–401.

- [23] **Bronstein, I. N. et al.** *Taschenbuch der Mathematik*. 6. Aufl. Frankfurt a. M.: Verlag Harri Deutsch, 2005.
- [24] **Bruzzone, L., F. Roli und S. B. Serpico.** *An Extension of the Jeffreys-Matusita Distance to Multiclass Cases for Feature Selection*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 33.6 (1995), S. 1318–1321.
- [25] **Carper, W. J., T. M. Lillesand und P. W. Kiefer.** *The Use of Intensity-Hue Saturation Transformations for Merging SPOT Panchromatic and Multispectral Image Data*. In: *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing* 56.4 (1990), S. 459–467.
- [26] **Casella, G. und E. George.** *Explaining the Gibbs Sampler*. In: *The American Statistician* 46.3 (1992), S. 167–174.
- [27] **Cerny, V.** *Thermodynamical Approach to the Traveling Salesman Problem: An Efficient Simulation Algorithm*. In: *Journal of Optimization Theory and Applications* 45.1 (1985), S. 41–51.
- [28] **Chang, C.-I.** *Hyperspectral Data Exploitation: Theory and Applications*. 1. Aufl. Hoboken: John Wiley & Sons, 2007, S. 440.
- [29] **Chang, C.-I. und Q. Du.** *Estimation of Number of Spectrally Distinct Signal Sources in Hyperspectral Imagery*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 42.3 (2004), S. 608–619.
- [30] **Chang, C.-I. und D. Heinz.** *Constrained Subpixel Target Detection for Remotely Sensed Imagery*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 38.3 (2000), S. 1144–1159.
- [31] **Chavez, P. S., S. C. Sides und J. A. Anderson.** *Comparison of Three Different Methods to Merge Multiresolution and Multispectral Data- Landsat TM and SPOT Panchromatic*. In: *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing* 57.3 (1991), S. 295–303.
- [32] **Chen, J., C. Richard und P. Honeine.** *Nonlinear Estimation of Material Abundances in Hyperspectral Images With L1-Norm Spatial Regularization*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 52.5 (2014), S. 2654–2665.
- [33] **Costa, C. et al.** *Shape Analysis of Agricultural Products: A Review of Recent Research Advances and Potential Application to Computer Vision*. In: *Food and Bioprocess Technology* 4.5 (2011), S. 673–692.
- [34] **Cubero, S. et al.** *Advances in Machine Vision Applications for Automatic Inspection and Quality Evaluation of Fruits and Vegetables*. In: *Food and Bioprocess Technology* 4 (2011), S. 487–504.

- [35] **Dalm, M. et al.** *Application of Near-Infrared Spectroscopy to Sensor Based Sorting of a Porphyry Copper Ore.* In: *Minerals Engineering* 58 (2014), S. 7–16.
- [36] **De Backer, S. et al.** *A Band Selection Technique for Spectral Classification.* In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 2.3 (2005), S. 319–323.
- [37] *DIN 5031-7:1984-01 Strahlungsphysik im optischen Bereich und Lichttechnik; Teil 7: Benennung der Wellenlängenbereiche.* DIN, 1984.
- [38] **Dobigeon, N., J.-Y. Tourneret** und **C.-I. Chang.** *Semi-Supervised Linear Spectral Unmixing using a Hierarchical Bayesian Model for Hyperspectral Imagery.* In: *IEEE Transactions on Signal Processing* 56.7 (2008), S. 2684–2695.
- [39] **Dobigeon, N. et al.** *Joint Bayesian Endmember Extraction and Linear Unmixing for Hyperspectral Imagery.* In: *IEEE Transactions on Signal Processing* 57.11 (2009), S. 4355–4368.
- [40] **Duda, R. O., P. E. Hart** und **D. G. Stork.** *Pattern Classification.* 2. Aufl. New York: John Wiley & Sons, 2000.
- [41] **Eches, O., N. Dobigeon** und **J.-Y. Tourneret.** *Estimating the Number of Endmembers in Hyperspectral Images using the Normal Compositional Model and a Hierarchical Bayesian Algorithm.* In: *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing* 4.3 (2010), S. 582–591.
- [42] **European Machine Vision Association,** *EMVA Standard 1288 for Characterization of Image Sensors and Cameras.* Bd. 3.0. 2010.
- [43] **Falguera, V., N. Aliguer** und **M. Falguera.** *An Integrated Approach to Current Trends in Food Consumption: Moving Toward Functional and Organic Products?* In: *Food Control* 26.2 (2012), S. 274–281.
- [44] **Fan, W. et al.** *Comparative Study Between a New Nonlinear Model and Common Linear Model for Analysing Laboratory Simulated Forest Hyperspectral Data.* In: *International Journal of Remote Sensing* 30.11 (2009), S. 2951–2962.
- [45] **Fauvel, M. et al.** *Spectral and Spatial Classification of Hyperspectral Data Using SVMs and Morphological Profiles.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 46.11 (2008), S. 3804–3814.
- [46] **Feng, Y.-Z.** und **D.-W. Sun.** *Application of Hyperspectral Imaging in Food Safety Inspection and Control: A Review.* In: *Critical reviews in food science and nutrition* 52.11 (2012), S. 1039–1058.
- [47] **Fisher, R.** *The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems.* In: *Annals of Eugenics* 7 (1936), S. 179–188.

- [48] **Foody, G. M.** *Sub-Pixel Methods in Remote Sensing*. In: *Remote Sensing Image Analysis: Including The Spatial Domain*. Hrsg. von **Jong, S. M. de** und **F. D. van der Meer**. Heidelberg: Springer, 2006. Kap. 3, S. 37–49.
- [49] **Foody, G. M.** und **P. M. Atkinson**. *Uncertainty in Remote Sensing and GIS*. Chichester: John Wiley & Sons, 2002.
- [50] **García, S. et al.** *Prototype Selection for Nearest Neighbor Classification: Taxonomy and Empirical Study*. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 34.3 (2012), S. 417–435.
- [51] **García-Allende, P. B. et al.** *Quality Control of Industrial Processes by Combining a Hyperspectral Sensor and Fisher's Linear Discriminant Analysis*. In: *Sensors and Actuators B* 129.2 (2008), S. 977–984.
- [52] **Gardner, J. et al.** *Good Practice of Near Infrared Sorting of Plastic Packaging*. Techn. Ber. May. Axion Consulting, 2010.
- [53] **Gemini Observatory Northern Operations Center**, *IR Transmission Spectra*. 2014.
- [54] **Gerçek, D. et al.** *An Automated Fine Registration of Multisensor Remote Sensing*. In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*. 2012, S. 1361–1364.
- [55] **Goetz, A. F.** *Three Decades of Hyperspectral Remote Sensing of the Earth: A Personal View*. In: *Remote Sensing of Environment* 113 (2009), S. 5–16.
- [56] **Goldstein, T.** und **S. Osher**. *The Split Bregman Method for L1-Regularized Problems*. In: *SIAM Journal on Imaging Sciences* 2.2 (2009), S. 323–343.
- [57] **Green, A. A. et al.** *A Transformation for Ordering Multispectral Data in Terms of Image Quality with Implications for Noise Removal*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 26.1 (1988), S. 65–74.
- [58] **Gross, H. N.** und **J. R. Schott**. *Application of Spatial Resolution Enhancement and Spectral Mixture Analysis to Hyperspectral Images*. In: *SPIE Optical Science, Engineering, and Instrumentation Annual Meeting*. 1996, S. 30–41.
- [59] **Gross, H. N.** und **J. R. Schott**. *Application of Spectral Mixture Analysis and Image Fusion Techniques for Image Sharpening*. In: *Remote Sensing of Environment* 63.2 (1998), S. 85–94.
- [60] **Groß, W.** und **W. Middelman**. *Sparseness Inducing Initialization for Non-negative Matrix Factorization in Hyperspectral Data*. In: *32. Wissenschaftlich-Technische Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Photogrammetrie, Fernerkundung und Geoinformation*. Bd. 21. 2012, S. 1–9.

- [61] **Grupo de Inteligencia**, *Hyperspectral Imagery Synthesis (EIAs) Toolbox*. Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU). 2012.
- [62] **Guo, Z., T. Wittman** und **S. Osher**. *L1 Unmixing and its Application to Hyperspectral Image Enhancement*. In: *Proc. SPIE 7334, Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery XV*. Bd. 7334. Bellingham, WA: SPIE, 2009, S. 1–9.
- [63] **Guyon, I.** und **A. Elisseeff**. *An Introduction to Variable and Feature Selection*. In: *The Journal of Machine Learning Research* 3 (2003), S. 1157–1182.
- [64] **Haboudane, D. et al.** *Hyperspectral Vegetation Indices and Novel Algorithms for Predicting Green LAI of Crop Canopies: Modeling and Validation in the Context of Precision Agriculture*. In: *Remote Sensing of Environment* 90.3 (2004), S. 337–352.
- [65] **Hadamard, J.** *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*. New York: Yale University Press, 1923.
- [66] **Halimi, A. et al.** *Nonlinear Unmixing of Hyperspectral Images Using a Generalized Bilinear Model*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 49.11 (2011), S. 4153–4162.
- [67] **Hamamatsu**, *Characteristics and Use of Infrared Detectors*. Techn. Ber. 2011.
- [68] **Hasan, M., M. R. Pickering** und **X. Jia**. *Modified SIFT for Multi-Modal Remote Sensing Image Registration*. In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*. 2012, S. 2348–2351.
- [69] **Hastie, T., R. Tibshirani** und **J. Friedman**. *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Prediction*. Bd. 27. 2. New York: Springer, 2009.
- [70] **Healey, G.** und **R. Kondepudy**. *Radiometric CCD Camera Calibration and Noise Estimation*. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 16.3 (1994), S. 267–276.
- [71] **Heinz, D. C.** und **C.-I. Chang**. *Fully Constrained Least Squares Linear Spectral Mixture Analysis Method for Material Quantification in Hyperspectral Imagery*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 39.3 (2001), S. 529–545.
- [72] **Hellinger, E.** *Neue Begründung der Theorie quadratischer Formen von unendlichvielen Veränderlichen*. In: *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 136 (1909), S. 210–271.

- [73] **Hertel, I.** und **C. Schulz.** *Atome, Moleküle und optische Physik.* Heidelberg: Springer, 2008.
- [74] **Heylen, R.** und **P. Scheunders.** *Estimating the Number of Endmembers in Hyperspectral Imagery with Nearest Neighbor Distances.* In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS).* 2012, S. 1377–1380.
- [75] **Hughes, G. F.** *On the Mean Accuracy of Statistical Pattern Recognizers.* In: *IEEE Transactions on Information Theory* 14.1 (1968), S. 55–63.
- [76] **Ifarraguerri, A.** und **C.-I. Chang.** *Multispectral and Hyperspectral Image Analysis with Convex Cones.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 37.2 (1999), S. 756–770.
- [77] **lordache, M.** *Sparse Unmixing of Hyperspectral Data.* In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 49.6 (2011), S. 2014–2039.
- [78] **Iwasaki, A. et al.** *Similarity Measure for Spatial-Spectral Registration in Hyperspectral Era.* In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS).* 2012, S. 1757–1760.
- [79] **Jähne, B.** *Digitale Bildverarbeitung.* 7. Aufl. Heidelberg: Springer, 2012.
- [80] **Jia, X., B.-C. Kuo** und **M. M. Crawford.** *Feature Mining for Hyperspectral Image Classification.* In: *Proceedings of the IEEE* 101.3 (2013), S. 676–697.
- [81] **Jia, X.** und **J. A. Richards.** *Segmented Principal Components Transformation for Efficient Hyperspectral Remote-Sensing Image Display and Classification.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 37.1 (1999), S. 538–542.
- [82] **Jin, Y.** und **B. Sendhoff.** *Trade-Off Between Performance and Robustness: An Evolutionary Multiobjective Approach.* In: *Evolutionary Multi-Criterion Optimization* (2003), S. 237–252.
- [83] **Jondral, F.** und **A. Wiesler.** *Wahrscheinlichkeitsrechnung und stochastische Prozesse.* 2., durchg. Stuttgart: Teubner, 2002.
- [84] **Kaiser, G.** und **W. Schneider.** *Estimation of Sensor Point Spread Function by Spatial Subpixel Analysis.* In: *International Journal of Remote Sensing* 29.7 (2008), S. 2137–2155.
- [85] **Keshava, N.** *Distance Metrics and Band Selection in Hyperspectral Processing with Applications to Material Identification and Spectral Libraries.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 42.7 (2004), S. 1552–1565.
- [86] **Keshava, N.** und **J. Mustard.** *Spectral unmixing.* In: *IEEE Signal Processing Magazine* 19.1 (2002), S. 44–57.

- [87] **Kirkpatrick, S., C. D. Gelatt** und **M. P. Vecchi**. *Optimization by Simulated Annealing*. In: *Science* 220.4598 (1983), S. 671–860.
- [88] **Kraskov, A., H. Stögbauer** und **P. Grassberger**. *Estimating Mutual Information*. In: *Physical Review E* 69.6 (2004), S. 1–16.
- [89] **Kriegler, F. J. et al.** *Preprocessing Transformations and their Effects on Multispectral Recognition*. In: *Remote Sensing of Environment*, VI. Bd. 1. 1969, S. 97.
- [90] **Laben, C. A.** und **B. V. Brower**. *Process for enhancing the spatial resolution of multispectral imagery using pan-sharpening*. 6011875. 2000.
- [91] **Lambert, J. B. et al.** *Spektroskopie*. 2. Aufl. München: Person Education, 2012.
- [92] **Lang, F.** und **P. Lang**. *Basiswissen Physiologie*. 2. Aufl. Heidelberg: Springer, 2007, S. 487.
- [93] **Lee, D. D.** und **H. S. Seung**. *Learning the Parts of Objects by Non-Negative Matrix Factorization*. In: *Nature* 401 (1999), S. 788–791.
- [94] **Lee, D. D.** und **H. S. Seung**. *Algorithms for Non-Negative Matrix Factorization*. In: *Advances in Neural Information Processing Systems* 13 (2000), S. 556–562.
- [95] **Lee, J. B., A. S. Woodyatt** und **M. Berman**. *Enhancement of High Spectral Resolution Remote-Sensing Data by a Noise-Adjusted Principal Components Transform*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 28.3 (1990), S. 295–304.
- [96] **Leitner, R. et al.** *NIR Spectral Imaging for the Industrial Detection of Flame-Retardant Additives in Polymers*. In: *Sensorgestützte Sortierung 2010*. 2010, S. 1–11.
- [97] **Ling, F. et al.** *Subpixel Land Cover Mapping by Integrating Spectral and Spatial Information of Remotely Sensed Imagery*. In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 9.3 (2012), S. 408–412.
- [98] **Lu, G.** und **B. Fei**. *Medical Hyperspectral Imaging: A Review*. In: *Journal of Biomedical Optics* 19.1 (2014), S. 1–23.
- [99] **Lucas, P. W. et al.** *Evolution and Function of Routine Trichromatic Vision in Primates*. In: *International Journal of Organic Evolution* 57.11 (2003), S. 2636–2643.

- [100] **Luckow-Markward, S. et al.** *Spectral Imaging in Process Analytics using Chemometrics and First Principles*. In: OCM 2013-Optical Characterization of Materials-conference proceedings. Hrsg. von **Beyerer, J., F. Puente León** und **T. Längle**. KIT Scientific Publishing, 2013, S. 1.
- [101] **Luo, B. et al.** *Empirical Automatic Estimation of the Number of Endmembers in Hyperspectral Images*. In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 10.1 (2013), S. 24–28.
- [102] **Lyon, R. C. et al.** *Near-Infrared Spectral Imaging for Quality Assurance of Pharmaceutical Products: Analysis of Tablets to Assess Powder Blend Homogeneity*. In: *AAPS PharmSciTech* 3.3 (2002), S. 1–15.
- [103] **Ma, L., M. M. Crawford** und **J. Tian**. *Local Manifold Learning-Based k-Nearest-Neighbor for Hyperspectral Image Classification*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 48.11 (2010), S. 4099–4109.
- [104] **Madejová, J.** *FTIR Techniques in Clay Mineral Studies*. In: *Vibrational Spectroscopy* 31.1 (2003), S. 1–10.
- [105] **Marcello, J., A. Medina** und **F. Eugenio**. *Evaluation of Spatial and Spectral Effectiveness of Pixel-Level Fusion Techniques*. In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 10.3 (2013), S. 432–436.
- [106] **Meer, F. D. van der et al.** *Multi- and Hyperspectral Geologic Remote Sensing: A Review*. In: *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation* 14.1 (2012), S. 112–128.
- [107] **Melgani, F.** und **L. Bruzzone**. *Classification of Hyperspectral Remote Sensing Images With Support Vector Machines*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 42.8 (2004), S. 1778–1790.
- [108] **Meschede, D.**, Hrsg. *Gerthsen Physik*. 24. Aufl. Heidelberg: Springer, 2010.
- [109] **Mianji, F. A., Y. Zhang** und **A. Babakhani**. *Resolution Enhancement of Hyperspectral Imagery Through Spatial-Spectral Data Fusion*. In: *2nd International Workshop on Nonlinear Dynamics and Synchronization*. 2009, S. 186–193.
- [110] **Murakami, Y., M. Yamaguchi** und **N. Ohyama**. *Class-Based Spectral Reconstruction based on Unmixing of Low-Resolution Spectral Information*. In: *Journal of the Optical Society of America* 28.7 (2011), S. 1470–1481.
- [111] **Naganathan, G. K. et al.** *Visible/Near-Infrared Hyperspectral Imaging for Beef Tenderness Prediction*. In: *Computers and Electronics in Agriculture* 64.2 (2008), S. 225–233.

- [112] **Nascimento, J. M. P.** und **J. M. Bioucas Dias.** *Vertex Component Analysis: A Fast Algorithm to Unmix Hyperspectral Data.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 43.4 (2005), S. 898–910.
- [113] **Nascimento, J. M. P.** und **J. M. Bioucas Dias.** *Nonlinear Mixture Model for Hyperspectral Unmixing.* In: *Proc. SPIE 7477, Image and Signal Processing for Remote Sensing XV.* 2009.
- [114] **Neville, R. A. et al.** *Automatic Endmember Extraction from Hyperspectral Data for Mineral Exploration.* In: *Proceedings of the 21st Canadian Symposium on Remote Sensing.* June. 1999, S. 21–24.
- [115] **Norton, P.** *HgCdTe Infrared Detectors.* In: *Opto-Electronics Review* 10.3 (2002), S. 159–174.
- [116] **Okrusch, M.** und **S. Matthes.** *Mineralogie.* Bd. 8. Heidelberg: Springer, 2010.
- [117] **Open Source,** *MATLAB Hyperspectral Toolbox, Version 0.07.* 2012.
- [118] **Otto, M.** *Analytische Chemie.* 4. Aufl. Weinheim: Wiley-VCH, 2011.
- [119] **Pal, M.** und **P. M. Mather.** *An Assessment of the Effectiveness of Decision Tree Methods for Land Cover Classification.* In: *Remote Sensing of Environment* 86.4 (2003), S. 554–565.
- [120] **Parzen, E.** *On Estimation of a Probability Density Function and Mode.* In: *The Annals of Mathematical Statistics* 33.3 (1962), S. 1065–1076.
- [121] **Pauca, V. P., J. Piper** und **R. J. Plemmons.** *Nonnegative Matrix Factorization for Spectral Data Analysis.* In: *Linear Algebra and its Applications* 416 (2006), S. 29–47.
- [122] **Paul, D. et al.** *Vorrichtung und Verfahren zur optischen Sortierung von Schüttgut.* EP 2537 598 B1. 2007.
- [123] **Peng, H., F. Long** und **C. Ding.** *Feature Selection Based on Mutual Information: Criteria of Max-Dependency, Max-Relevance, and Min-Redundancy.* In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 27.8 (2005), S. 1226–1238.
- [124] **Plaza, A. et al.** *A Quantitative and Comparative Analysis of Endmember Extraction Algorithms from Hyperspectral Data.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 42.3 (2004), S. 650–663.
- [125] **Plaza, J. et al.** *Joint Linear/Nonlinear Spectral Unmixing of Hyperspectral Image Data.* In: *IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium* 2007. IEEE, 2007, S. 4037–4040.

- [126] **Pradhan, P. S. et al.** *Estimation of the Number of Decomposition Levels for a Wavelet-Based Multiresolution Multisensor Image Fusion*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 44.12 (2006), S. 3674–3686.
- [127] **Prasad, S. und L. M. Bruce.** *Limitations of Principal Components Analysis for Hyperspectral Target Recognition*. In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 5.4 (2008), S. 625–629.
- [128] **Pudil, P., J. Novovičová und J. Kittler.** *Floating search methods in feature selection*. In: *Pattern Recognition Letters* 15 (1994), S. 1119–1125.
- [129] **Puente León, F. und U. Kiencke.** *Messtechnik*. 9. Aufl. Heidelberg: Springer, 2012.
- [130] **Qingqing, H. et al.** *Improved Registration Method for Infrared and Visible Remote Sensing Image using NCSCT and SIFT*. In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*. Bd. 2. 1. 2012, S. 2360–2363.
- [131] *Richtlinie 2002/96/EG des europäischen Parlaments und des Rates über Elektro- und Elektronik-Altgeräte*. EU, 2003.
- [132] *Richtlinie 2008/98/EG des Europäischen Parlaments und des Rates über Abfälle und zur Aufhebung bestimmter Richtlinien*. EU, 2008.
- [133] **Rieder, A.** *Keine Probleme mit inversen Problemen*. Wiesbaden: Vieweg und Teubner Verlag, 2003.
- [134] **Robben, M. et al.** *NIR Spectral Imaging in the Minerals Industry*. In: *Tagungsband des 15. Workshops Farbbildverarbeitung*. Hrsg. von **Stanke, G.** und **M. Pochanke**. 2009, S. 107–114.
- [135] **Robinson, G., H. N. Gross und J. R. Schott.** *Evaluation of Two Applications of Spectral Mixing Models to Image Fusion*. In: *Remote Sensing of Environment* 71.3 (2000), S. 272–281.
- [136] **Rosenblatt, M.** *Remarks on Some Nonparametric Estimates of a Density Function*. In: *The Annals of Mathematical Statistics* 27.3 (1956), S. 832–837.
- [137] **Rubner, Y., C. Tomasi und L. Guibas.** *The Earth Mover's Distance as a Metric for Image Retrieval*. In: *International Journal of Computer Vision* 40.2 (2000), S. 99–121.
- [138] **Rudin, L., S. Osher und E. Fatemi.** *Nonlinear Total Variation Based Noise Removal Algorithms*. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 60 (1992), S. 259–268.

- [139] **Schaffernicht, E. et al.** *On Estimating Mutual Information for Feature Selection*. In: *ICANN 2010, Part I, LNCS 6352*. Hrsg. von **Diamantaras, K., W. Duch** und **L. Iliadis**. 2010, S. 362–367.
- [140] **Schölkopf, B. et al.** *Estimating the Support of a High-Dimensional Distribution*. In: *Neural Computation* 13.7 (2001), S. 1443–1471.
- [141] **Schowengerd, R. A.** *Remote Sensing Models and Methods for Image Processing*. 3. Aufl. London: Elsevier, 2007.
- [142] **Schulz-Mirbach, H.** *Anwendung von Invarianzprinzipien zur Merkmalgewinnung in der Mustererkennung*. Düsseldorf: VDI-Verlag, 1995.
- [143] **Scott, D. W.** *On Optimal and Data-Based Histograms*. In: *Biometrika* 66.3 (1979), S. 605.
- [144] **Scott, D.** *Multivariate Density Estimation: Theory, Practice, and Visualization*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2009.
- [145] **Serpico, S. B.** und **G. Moser**. *Extraction of Spectral Channels From Hyperspectral Images for Classification Purposes*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 45.2 (2007), S. 484–495.
- [146] **Serranti, S., A. Gargiulo** und **G. Bonifazi**. *Characterization of Post-Consumer Polyolefin Wastes by Hyperspectral Imaging for Quality Control in Recycling Processes*. In: *Waste Management* 31.11 (2011), S. 2217–2227.
- [147] **Shannon, C.** *A Mathematical Theory of Communication*. In: *The Bell System Technical Journal* 27 (1948), S. 379–423.
- [148] **Shettigara, V. K.** *A Generalized Component Substitution Technique for Spatial Enhancement of Multispectral Images using a Higher Resolution Data Set*. In: *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing* 58.5 (1992), S. 561–567.
- [149] **Shi, Y. et al.** *Image Registration Based on Optimized Energy Analysis of Feature Points*. In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*. 2010. 2012, S. 408–411.
- [150] **Singer, R. B.** und **T. B. McCord**. *Mars: Large Scale Mixing of Bright and Dark Surface Materials and Implications for Analysis of Spectral Reflectance*. In: *Lunar and Planetary Science Conference Proceedings*. Bd. 10. 1979, S. 1835–1848.
- [151] **Skrabal, P. M.** *Spektroskopie: Eine methodenübergreifende Darstellung vom UV- bis zum NMR-Bereich*. Zürich: vdf Hochschulverlag AG an der ETH Zürich, 2009.

- [152] **Sun, Z.-L. et al.** *Using FCMC, FVS, and PCA Techniques for Feature Extraction of Multispectral Images.* In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 2.2 (2005), S. 108–112.
- [153] **SurrIDGE, A. K., D. Osorio und N. I. Mundy.** *Evolution and Selection of Trichromatic Vision in Primates.* In: *Trends in Ecology & Evolution* 18.4 (2003), S. 198–205.
- [154] **Tao, C., Z. Zou und H. Sun.** *High-Resolution Satellite Image Registration using Local Feature and Contour Fragment.* In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS).* 2012, S. 2344–2347.
- [155] **Tatem, A. et al.** *Super-Resolution Target Identification from Remotely Sensed Images Using a Hopfield Neural Network.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 39.4 (2001), S. 781–796.
- [156] **Thomas, C. et al.** *Synthesis of Multispectral Images to High Spatial Resolution: A Critical Review of Fusion Methods Based on Remote Sensing Physics.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 46.5 (2008), S. 1301–1312.
- [157] **Tian, Y.** *Some Rank Equalities and Inequalities for Kronecker Products of Matrices.* In: *Linear and Multilinear Algebra* 53.6 (2005), S. 445–454.
- [158] **Tikhonov, A. N. und V. Y. Arsenin.** *Solution of Ill-Posed Problems.* 8. Aufl. Washington, D.C.: Winston, 1977.
- [159] **Triguero, I. et al.** *A Taxonomy and Experimental Study on Prototype Generation for Nearest Neighbor Classification.* In: *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part C: Applications and Reviews* 42.1 (2012), S. 86–100.
- [160] **Veganzones, M. a. und M. Grana.** *On the Validation of a Spectral/Spatial CBIR System for Hyperspectral Images.* In: *3rd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS).* IEEE, 2011, S. 1–4.
- [161] **Verhoeve, J. und R. De Wulf.** *Land Cover Mapping at Sub-Pixel Scales using Linear Optimization Techniques.* In: *Remote Sensing of Environment* 79 (2002), S. 96–104.
- [162] **Villa, A. et al.** *Spectral Unmixing for the Classification of Hyperspectral Images at a Finer Spatial Resolution.* In: *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing* 5.3 (2011), S. 521–533.
- [163] **Villa, A. et al.** *Unsupervised Classification and Spectral Unmixing for Sub-Pixel Labelling.* In: *2011 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium.* IEEE, 2011, S. 71–74.

- [164] **Wald, L., T. Ranchin** und **M. Mangolini**. *Fusion of Satellite Images of Different Spatial Resolutions: Assessing the Quality of Resulting Images*. In: *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing* 63.6 (1997), S. 691–699.
- [165] **Wang, Z. et al.** *Image Quality Assessment: From Error Visibility to Structural Similarity*. In: *IEEE Transactions on Image Processing* 13.4 (2004), S. 600–612.
- [166] **Weicker, K.** *Evolutionäre Algorithmen*. 2. Aufl. Stuttgart: Teubner, 2002.
- [167] **Winter, M. E.** *N-FINDR: An Algorithm for Fast Autonomous Spectral End-member Determination in Hyperspectral Data*. In: *Proc. SPIE 3753, Imaging Spectrometry V*, 266. Hrsg. von **Descour, M. R.** und **S. S. Shen**. International Society for Optics und Photonics, 1999, S. 266–275.
- [168] **Yan, L. et al.** *Combining Spatial and Spectral Information to Improve Crop/Weed Discrimination Algorithms*. In: *Proc. of SPIE-IS&T Electronic Imaging Processing: Machine Vision Applications V*. Hrsg. von **Bingham, P. R.** und **E. Y. Lam**. Bd. 8300. 2012, S. 1–8.
- [169] **Yang, J. et al.** *A Remote Sensing Imagery Automatic Feature Registration Method Based on Mean-Shift*. In: *IEEE 2012 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*. 2012, S. 2364–2367.
- [170] **Yang, W. et al.** *Practical Image Fusion Method Based on Spectral Mixture Analysis*. In: *Science China Information Sciences* 53.6 (2010), S. 1277–1286.
- [171] **Yokoya, N., T. Yairi** und **A. Iwasaki**. *Coupled Nonnegative Matrix Factorization Unmixing for Hyperspectral and Multispectral Data Fusion*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 50.2 (2012), S. 528–537.
- [172] **Zare, A.** *Spatial-Spectral Unmixing using Fuzzy Local Information*. In: *2011 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. 5. IEEE, 2011, S. 1139–1142.
- [173] **Zare, A.** und **P. Gader**. *Piece-wise Convex Spatial-Spectral Unmixing of Hyperspectral Imagery using Possibilistic and Fuzzy Clustering*. In: *2011 IEEE International Conference on Fuzzy Systems*. IEEE, 2011, S. 741–746.
- [174] **Zhukov, B. et al.** *Unmixing-Based Multisensor Multiresolution Image Fusion*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 37.3 (1999), S. 1212–1226.
- [175] **Zitová, B.** und **J. Flusser**. *Image Registration Methods: A Survey*. In: *Image and Vision Computing* 21.11 (2003), S. 977–1000.
- [176] **Zurita-Milla, R., J. Clevers** und **M. Schaepman**. *Unmixing-Based Landsat TM and MERIS FR Data Fusion*. In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 5.3 (2008), S. 453–457.

Eigene Veröffentlichungen

- [177] **Christ, K., M. Michelsburg, K. Back, A. Eidam und U. Kiencke.** *Möglichkeiten zur Injektorkalibrierung mit Hilfe von Klopfensensoren bei der Benzin-Direkteinspritzung.* In: *Sensoren und Messsysteme.* Berlin, Offenbach: VDE Verlag, 2010, S. 374–379.
- [178] **Gruna, R., K.-u. Vieth, M. Michelsburg und F. Puente León.** *Hyperspectral Imaging - From Laboratory to In-Line Food Sorting.* In: *2nd International Workshop on Image Analysis in Agriculture 2010.* August. CIGR. Budapest, Hungary, 2010, S. 79–90.
- [179] **Michelsburg, M., R. Gruna, K.-U. Vieth und F. Puente León.** *Spektrale Bandselektion beim Entwurf automatischer Sortieranlagen.* In: *Forum Bildverarbeitung 2010.* Hrsg. von **Puente León, F.** und **M. Heizmann.** Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2010, S. 131–141.
- [180] **Michelsburg, M., R. Gruna, K.-U. Vieth und F. Puente León.** *Spektrale Bandselektion für das Filterdesign optischer Inspektionssysteme.* In: *Technisches Messen 78.9 (2011),* S. 384–390.
- [181] **Michelsburg, M., T. Fehrenbach und F. Puente León.** *Measuring Ionizing Radiation with a Mobile Device.* In: *Multimedia on Mobile Devices 2012; and Multimedia Content Access: Algorithms and Systems VI.* Hrsg. von **Creutzburg, R., D. Akopian, C. G. M. Snoek, N. Sebe und L. Kennedy.** Bd. 8304. Bellingham, WA: SPIE, 2012, 83040A.
- [182] **Michelsburg, M. und F. Puente León.** *Materialbasierte Entmischung von Bildsignalen unterschiedlicher spektraler und räumlicher Auflösung.* In: *Forum Bildverarbeitung 2012.* Hrsg. von **Puente León, F.** und **M. Heizmann.** Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2012, S. 143–154.
- [183] **Michelsburg, M., T.-T. Le, K.-U. Vieth, T. Längle, G. Struck und F. Puente León.** *From Experiments to Realizations: Hyper-Spectral Systems.* In: *Sensor Based Sorting 2012.* Aachen, 2012, S. 1–10.
- [184] **Michelsburg, M. und F. Puente León.** *Combined Spatial and Spectral Unmixing of Image Signals for Material Recognition in Automated Inspection Systems.* In: *Videometrics, Range Imaging, and Applications XII; and Automated Visual Inspection.* Hrsg. von **Remondino, F., M. R. Shortis, J. Beyerer und F. Puente León.** Bd. 8791. Bellingham, WA: SPIE, 2013.

- [185] **Michelsburg, M.** und **F. Puente León.** *Spectral and Spatial Unmixing for Material Recognition in Sorting Plants.* In: *Optical Characterization of Materials 2013.* Hrsg. von **Beyerer, J., F. Puente León** und **T. Längle.** Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2013, S. 179–190.
- [186] **Bauer, S., J. Stefan, M. Michelsburg, T. Längle** und **F. Puente León.** *Robustness Improvement of Hyperspectral Image Unmixing by Spatial Second-Order Regularization.* In: *IEEE Transactions on Image Processing* Accepted for publication (2014).
- [187] **Bauer, S., J. Stefan, M. Michelsburg** und **F. Puente León.** *Verbesserung der Entmischung hyperspektraler Bilder durch den Einbezug räumlicher Information.* In: *XXVIII. Messtechnisches Symposium des Arbeitskreises der Hochschullehrer für Messtechnik e.V.* Aachen: Shaker Verlag, 2014.

Studentische Arbeiten

- [188] **Dongmo, W.** *Kalibrierung einer virtuellen Kamera.* Studienarbeit, KIT, 2011.
- [189] **Fehrenbach, T.** *Detektion ionisierender Strahlung mit einer Consumer-Kamera.* Bachelorarbeit, KIT, 2011.
- [190] **Le, T.-T.** *Analyse von Kunststoffen mittels hyperspektraler Daten.* Studienarbeit, KIT, 2011.
- [191] **Le, T.-T.** *Evaluation verschiedener Distanzmaße zur Merkmalsselektion aus hyperspektralen NIR-Daten.* Diplomarbeit, KIT, 2011.
- [192] **Marahati, M.** *Vergleich verschiedener Verfahren zur Bandselektion aus hyperspektralen Bildern.* Diplomarbeit, KIT, 2011.
- [193] **Martynek, L.** *Untersuchung von Verfahren zur Merkmalsextraktion aus hyperspektralen Daten.* Bachelorarbeit, KIT, 2011.
- [194] **Ranjbar, M.** *Segmentierung und Anomaliedetektion in hyperspektralen Bildern mit Hilfe der Clusteranalyse.* Masterarbeit, KIT, 2014.
- [195] **Riem, K.** *Klassifikation von hyperspektralen Bildern mit Hilfe von Support Vector Machines.* Studienarbeit, KIT, 2011.
- [196] **Walther, M.** *Farbtransformation zur hardwareunabhängigen Klassifizierung von Schüttgütern.* Bachelorarbeit, KIT, 2012.

Forschungsberichte aus der Industriellen Informationstechnik (ISSN 2190-6629)

**Institut für Industrielle Informationstechnik
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)**

Hrsg.: Prof. Dr.-Ing. Fernando Puente León, Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Dostert

Die Bände sind unter www.ksp.kit.edu als PDF frei verfügbar oder als Druckausgabe bestellbar.

- Band 1 Pérez Grassi, Ana
**Variable illumination and invariant features for detecting
and classifying varnish defects.** (2010)
ISBN 978-3-86644-537-6
- Band 2 Christ, Konrad
**Kalibrierung von Magnet-Injektoren für Benzin-
Direkteinspritzsysteme mittels Körperschall.** (2011)
ISBN 978-3-86644-718-9
- Band 3 Sandmair, Andreas
**Konzepte zur Trennung von Sprachsignalen in
unterbestimmten Szenarien.** (2011)
ISBN 978-3-86644-744-8
- Band 4 Bauer, Michael
**Vergleich von Mehrträger-Übertragungsverfahren und
Entwurfskriterien für neuartige Powerline-Kommunikationssysteme
zur Realisierung von Smart Grids.** (2012)
ISBN 978-3-86644-779-0
- Band 5 Kruse, Marco
**Mehrobjekt-Zustandsschätzung mit verteilten Sensorträgern
am Beispiel der Umfeldwahrnehmung im Straßenverkehr** (2013)
ISBN 978-3-86644-982-4
- Band 6 Dudeck, Sven
**Kamerabasierte In-situ-Überwachung gepulster
Laserschweißprozesse** (2013)
ISBN 978-3-7315-0019-3
- Band 7 Liu, Wenqing
**Emulation of Narrowband Powerline Data Transmission Channels
and Evaluation of PLC Systems** (2013)
ISBN 978-3-7315-0071-1

Hrsg.: Prof. Dr.-Ing. Fernando Puente León, Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Dostert

- Band 8 Otto, Carola
Fusion of Data from Heterogeneous Sensors with Distributed Fields of View and Situation Evaluation for Advanced Driver Assistance Systems. (2013)
ISBN 978-3-7315-0073-5
- Band 9 Wang, Limeng
Image Analysis and Evaluation of Cylinder Bore Surfaces in Micrographs. (2014)
ISBN 978-3-7315-0239-5
- Band 10 Michelsburg, Matthias
Materialklassifikation in optischen Inspektionssystemen mithilfe hyperspektraler Daten. (2014)
ISBN 978-3-7315-0273-9

ISSN 2190-6629
ISBN 978-3-7315-0273-9

ISBN 978-3-7315-0273-9



9 783731 502739 >