

Entwurfsverfahren für optische Spektralfilter zur Materialanteilsschätzung

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

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

DISSERTATION

von

Wolfgang Krippner, M. Sc.

geb. in Kempten (Allgäu)

Tag der mündl. Prüfung: 20. November 2020
Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. M. Heizmann, KIT
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. C. Stiller, KIT

Vorwort

Diese Arbeit wäre ohne dem Rückhalt vieler Personen nicht möglich gewesen. Allen Personen möchte ich an dieser Stelle danken. Insbesondere spreche ich meinen Dank an Prof. Dr.-Ing. Fernando Puente León für das Ermöglichen und die Betreuung der Promotion aus. Neben unerschöpflichen fachlichen Wissen durfte ich von ihm auch prägende Ansichten über das zwischenmenschliche Leben erfahren. Dankbar bin ich Prof. Dr.-Ing. Michael Heizmann für das Begleiten des Großteils meiner Zeit am Institut für Industrielle Informationstechnik und für die Übernahme des Hauptreferats. Ebenso dankbar bin ich Prof. Dr.-Ing. Christoph Stiller für die Übernahme des Korreferats. In gleicher Weise spreche ich einen herzlichen Dank an die angenehme Zusammenarbeit mit meinen Kollegen am Institut und den Studenten aus, die ich im Rahmen von Abschlussarbeiten betreuen durfte. Die Diskussionen über das eigene Forschungsthema hinaus waren stets bereichernd und belebend für den Alltag.

Weiter bedanke ich mich bei Dr.-Ing. Sebastian Bauer für die gute Zusammenarbeit, die den Beginn der Forschungsarbeiten erleichtert hat. Für die Entscheidung zur Promotion war die Ausbildung im Studium an der Technischen Universität Darmstadt maßgeblich. Dank spreche ich an Dr.-Ing. Stefan Gering und Prof. Dr.-Ing. Jürgen Adamy sowie Viktor Kistner, Dr. rer. nat. Kim Listmann und Prof. Dr.-Ing. Ulrich Konigorski für die intensiven Betreuungen der jeweiligen Abschlussarbeiten aus. Es wurden mir wesentliche Fähigkeiten für das wissenschaftliche Arbeiten vermittelt, die nicht ohne weiteres zu erfahren sind. Dabei blicke ich ebenso auf eine mit viel Freude behaftete gemeinsame Zeit mit den ehemaligen Kommilitonen zurück.

Abschließend bin ich meiner Familie für deren Unterstützung dankbar, gerade in Zeiten, die mit Zweifeln am Erfolg geprägt waren. Ich möchte meiner Mutter Elisabeth und meiner Schwester Silvia besonderen Dank aussprechen.

Kahl am Main, im Dezember 2020

Wolfgang Krippner

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	i
Symbolverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Problemstellung	3
1.3 Eigener Beitrag	6
1.4 Gliederung der Arbeit	7
2 Grundlagen	9
2.1 Mathematische Grundlagen	9
2.1.1 Multivariate Normalverteilung	9
2.1.2 Dirichlet-Verteilung	10
2.1.3 Least-Squares-Schätzer	11
2.1.4 Singulärwertzerlegung (SVD)	13
2.1.5 Diskrete Kosinustransformation	14
2.1.6 Entropie nach Shannon	15
2.2 Klassifikationsverfahren	16
2.2.1 Einführung	17
2.2.2 Fisher'sche Diskriminanzfunktion	18
2.2.3 Support Vector Machine	21
2.2.4 Selbstorganisierende Karten	22
2.2.5 Mittelwertverfahren	25
2.2.6 Beurteilung von Klassifikationsverfahren	26
3 Materialanteilsschätzung basierend auf hyperspektralen Daten	29
3.1 Hyperspektralbild	29
3.2 Spektrale Entmischung	32
3.2.1 Mischmodelle	33

3.2.2	Spektrenvariabilität	36
3.2.3	Unüberwachte spektrale Entmischung	39
3.2.4	Überwachte spektrale Entmischung	41
3.3	Materialanteilsschätzung mit optischen Spektralfiltern	42
4	Entwurf optischer Spektralfilter für die Materialanteilsschätzung	45
4.1	Analytische Formulierung des Spektralfilterentwurfs	45
4.1.1	Optische Spektralfilterung zur Materialanteilsschätzung	48
4.1.2	Herausforderungen an den Entwurf optischer Spektralfilter	49
4.2	Zur optischen spektralen Filterung verwandte Verfahren	52
4.2.1	Gauß-Markov-Schätzer	52
4.2.2	Mixture-Tuned Matched-Filter-Ansatz	53
4.3	Vorverarbeitung mithilfe der diskreten Kosinustransformation	55
4.4	Bandselektion	58
4.4.1	Stand der Technik	59
4.4.2	Bandselektion mit optischer Spektralfilter	60
4.5	Klassifikation von Materialanteilen	66
4.5.1	Stand der Technik	66
4.5.2	Klassifikation quantisierter Materialanteile	67
4.6	Iterative Materialanteilsschätzung	71
4.6.1	Stand der Technik	73
4.6.2	Iterative Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD	77
4.7	Mehrstufige iterative Materialanteilsschätzung	82
4.7.1	Erkennung von Materialien	83
4.7.2	Mehrstufiger Ansatz	87
5	Auswertung	91
5.1	Versuchsaufbau zur Datengewinnung	92
5.2	Datensätze	93
5.2.1	Farbpulvermischungen	94
5.2.2	Quarzsandmischungen	95
5.2.3	Künstlicher Datensatz	100
5.3	Bewertung	103
5.3.1	Parameterwahl	104

5.3.2	Ergebnisse mit Bandselektion	108
5.3.3	Ergebnisse ohne Bandselektion	121
5.4	Fazit	132
6	Zusammenfassung und Ausblick	135
A	Anhang	141
A.1	Mischverhältnisse der Datensätze	141
A.2	Weitere Ergebnisse mit Bandselektion	144
A.2.1	Klassifikation quantisierter Materialanteile	144
A.2.2	Iterative Materialanteilsschätzung	144
	Literaturverzeichnis	155
	Eigene Veröffentlichungen	165
	Betreute studentische Arbeiten	166

Symbolverzeichnis

Allgemeine Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
bzw.	beziehungsweise
ca.	circa
d. h.	das heißt
engl.	englisch
etc.	et cetera (lat. und so weiter)
evtl.	eventuell
ggf.	gegebenenfalls
vgl.	vergleiche
bspw.	beispielsweise
sog.	sogenannte
u. a.	unter anderem
z. B.	zum Beispiel
AOTF	<i>Acousto-Optical Tunable Filter</i>
Bed.	Bedingung
BLMM	bilineares Mischmodell
BS	Bandselektion
DCT	diskrete Kosinustransformation
EMCCD	<i>electron-multiplying charge-coupled device</i>
ESG	Entfernen des spektralen Gleichanteils
FCLS	<i>Fully Constrained Least-Squares</i>
FDA	Fisher'sche Diskriminanzanalyse
FP	falsch positiv
IMS	iterative Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD
KQM	Klassifikation quantisierter Materialanteile
LMM	lineares Mischmodell
LQMM	linear-quadratisches Mischmodell
LVQ	<i>Linear Vector Quantization</i>
MCLS	<i>Modified Constrained Least-Squares</i>

Abkürzung Bedeutung

ME	Materialerkennung
MWV	Mittelwertsverfahren
NMF	nichtnegative Matrix-Faktorisierung
NN	<i>non-negativity</i>
PSE	Verfahren mithilfe der Pseudoinversen
RP	richtig positiv
SOM	selbstorganisierende Karte
STO	<i>sum-to-one</i>
SVD	Singulärwertzerlegung
SVM	<i>Support Vector Machine</i>

Symbole

Lateinische Buchstaben

Symbol Bedeutung

0	Matrix bestehend aus Nullen
A	Materialanteile eines Hyperspektralbilds
a	Materialanteile eines Mischspektrums
a_i	Materialanteil von Material i
a_Q	quantisierter Materialanteil
$\hat{\mathbf{a}}_{GM}$	Gauß-Markov-Schätzer
$\hat{\mathbf{a}}_{GMW}$	Gauß-Markov-Schätzer bei Annahme von weißem Rauschen des Fehlerwerts ϵ
$\hat{\mathbf{a}}_{LS}$	Least-Squares-Schätzer
\mathbf{a}_K	Materialanteile a binär codiert mit 0 für die Klasse vorhanden und 1 für die Klasse nicht vorhanden
\mathbf{a}_{KD}	gewählte Materialanteile im künstlichen Datensatz
\mathbf{a}_K^E	Endergebnis bei der Erkennung von Materialien
\mathbf{a}_K^{KV}	Ergebnis unter Verwendung eines Klassifikationsverfahrens bei der Erkennung von Materialien
\mathbf{a}_K^{SVD}	Ergebnis unter Verwendung der SVD bei der Erkennung von Materialien
$\hat{\mathbf{a}}_{MCLS}$	Materialanteilsschätzung eines Mischspektrums nach dem MCLS-Algorithmus
$\hat{\mathbf{a}}$	Materialanteilsschätzung eines Mischspektrums mit beliebigem Schätzer

Symbol	Bedeutung
\hat{a}_i	Materialanteilsschätzung von Material i mit beliebigem Schätzer
$\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}}$	Materialanteilsschätzung eines Mischspektrums nach dem FCLS-Algorithmus
$\mathbf{a}_{\mathbf{K}}^{\text{SVD}}$	Ergebnis unter Verwendung der SVD bei der Erkennung von Materialien
$\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}s}^{(s+1)}$	Materialanteilsschätzung bei Verwendung von $\tilde{\mathbf{M}}_s^{(s)}$ innerhalb der Iteration s als Kandidat für die Iteration $s + 1$ im IMS-Verfahren
b_{ij}	Koeffizient für die Gewichtung des Hadamard-Produkts der Reinspektren zwischen Material i und Material j
b_l^{A}	Bewertungsgröße des spektralen Bandbereichs l im ersten Verfahren der Bandselektion hinsichtlich ε_l
b_l^{B}	Bewertungsgröße des spektralen Bandbereichs l im zweiten Verfahren der Bandselektion hinsichtlich ε_l
\mathbf{C}_{f}	Intensitätsbild nach Anwendung von optischen Spektralfiltern \mathbf{f}
c_{f}	Intensitätswert nach Anwendung des optischen Spektralfilters \mathbf{f}
$\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$	Autokovarianzmatrix von ε
C	Parameter für die Stärke der Manipulation zur Bestimmung von $\tilde{\mathbf{M}}_s^{(s)}$ im IMS-Verfahren
\mathbf{C}_{MNF}	Autokovarianzmatrix über die im <i>Mixture-Tuned Matched-Filter</i> -Ansatz transformierten Mischspektren einer Mischprobe
\mathbf{y}_{MNF}	Mischspektrum nach Transformation im <i>Mixture-Tuned Matched-Filter</i> -Ansatz
\mathbf{d}	bekanntes Datum $\mathbf{d} \in \mathcal{D}$
\mathcal{D}	bekannter Datensatz
$\bar{\mathbf{d}}$	mittleres Datum
$\Delta\mathbf{M}$	Abweichung zur Reinspektrenmatrix im künstlichen Datensatz
$\bar{\mathbf{d}}_k$	mittleres Datum der Klasse k
$e_k(\cdot)$	Eingangsfunktion der Klasse k im neuronalen Netz
ε_{KD}	Fehlerwert im künstlichen Datensatz
E_{RMS}	Effektivwert des Fehlers der geschätzten Materialanteile
\bar{E}_{RMS}	Effektivwert des Fehlers der geschätzten Materialanteile gemittelt über alle Mischfächer
E_{RMS_o}	Effektivwert des Fehlers der geschätzten Materialanteile im Mischfach o
\mathbf{f}	optisches Spektralfilter
$f_x(\cdot)$	Dichtefunktion von \mathbf{x}
f_x	ganzahliger Frequenzindex

Symbol	Bedeutung
F	Anzahl an optischen Spektralfiltern in einem Iterationsschritt bei der iterativen Materialanteilsschätzung
\mathbf{f}_{f_K}	optisches Spektralfilter bei der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen
F_K	Anzahl an optischen Spektralfiltern bei der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen
$\mathbf{f}_{\text{MNF}i}$	optisches Spektralfilter zur Schätzung des Materialanteils von Material i im <i>Mixture-Tuned Matched-Filter</i> -Ansatz
\mathbf{f}_-	rein negativer Anteil des optischen Spektralfilters \mathbf{f}
\mathbf{f}_+	rein positiver Anteil des optischen Spektralfilters \mathbf{f}
$\mathbf{f}_f^{(s)}$	optisches Spektralfilter im Iterationsschritt s bei der iterativen Materialanteilsschätzung
\mathbf{g}_{FCLS}	Gewichtungsvektor zur Steuerung der Korrektur der Materialanteilsschätzung im FCLS-Algorithmus
H	Entropie nach Shannon
\mathbf{I}_D	Einheitsmatrix der Dimension D
\mathbf{I}_λ	modifizierte Einheitsmatrix mit dem Diagonalelement λ gleich null
J_{FCLS}	Kostenfunktion betrachtet im FCLS-Algorithmus
K	Anzahl an Klassen
k	Klasse k
$k_{q_{\text{SOM}}}$	Klasse des Neurons q_{SOM}
k_z	zugewiesene Klasse
L	Anzahl an spektralen Bandbereichen bei der Bandselektion
l	spektraler Bandbereich l
$l[t]$	Lernrate im Trainingsschritt t
\mathbf{M}	Reinspektrenmatrix
\mathbf{m}_i	Reinspektrum von Material i
\mathcal{M}_i	Reinspektrenbibliothek von Material i
M	Anzahl an Reinspektren für ein Material
$\mathbf{M}_{\mathbf{a}_K}$	Reinspektrenmatrix der in \mathbf{a}_K als nicht vorhanden gekennzeichneten Materialien
\mathbf{T}_{DCT}	Transformationsmatrix für die DCT
\mathbf{T}_{FDA}	Transformationsmatrix innerhalb der FDA
\mathbf{M}_i	Reinspektren aus der Reinspektrenbibliothek \mathcal{M}_i spaltenweise sortiert
\mathbf{M}_{KD}	Reinspektrenmatrix im künstlichen Datensatz
\mathbf{M}_l	Reinspektrenmatrix im spektralen Bandbereich l
$\mathbf{M}_{\mathcal{M}l}$	Reinspektren aller Reinspektrenbibliotheken spaltenweise aneinandergereiht im spektralen Bandbereich l

Symbol	Bedeutung
$\mathbf{m}_{\text{MNF}i}$	Reinspektrum von Material i nach Transformation im <i>Mixture-Tuned Matched-Filter</i> -Ansatz
\mathbf{T}_{MNF}	Transformationsmatrix für das <i>Noise-Whitening</i> oder der <i>Minimum-Noise-Fraction</i> -Transformation
$\mathbf{M}^{(s+1)}$	Manipulierte Reinspektrenmatrix benötigt für die Iteration $s + 1$ im IMS-Verfahren
$\tilde{\mathbf{M}}_{\tilde{s}}^{(s)}$	Reinspektrenmatrix der Manipulation \tilde{s} innerhalb der Iteration s im IMS-Verfahren
N	Anzahl an Pixeln eines Hyperspektralbilds
N_x	Anzahl an Pixeln eines Hyperspektralbilds in x -Richtung
N_y	Anzahl an Pixeln eines Hyperspektralbilds in y -Richtung
$N[t]$	Nachbarschaft im Trainingsschritt t
$N_{\mathcal{D}}$	Anzahl an Daten in \mathcal{D}
N_k	Anzahl an Daten der Klasse k
N_{KD}	Anzahl an Realisierungen von Mischspektren mit den Materialanteilen \mathbf{a}_{KD} im künstlichen Datensatz
$\mathcal{N}(\mu_{\mathbf{x}}, \sigma_{\mathbf{x}}^2)$	Normalverteilung
$\mathcal{N}_{q_{\text{SOM}z}}$	Nachbarschaft des Neurons mit größer Ähnlichkeit
O	Anzahl an Mischfächern eines Datensatzes
o	Index für das Mischfach o
P	Anzahl an reinen Materialien
p_z	Wahrscheinlichkeit für das Zufallsereignis z
Q	Anzahl an gewählten Materialanteilstufen
Q_{KD}	Anzahl an gewählten Materialanteilstufen im künstlichen Datensatz
Q_{SOM}	Anzahl an Neuronen innerhalb einer SOM
q_{SOM}	Neuron q_{SOM} innerhalb einer SOM
$q_{\text{SOM}z}$	Neuron mit größer Ähnlichkeit innerhalb einer SOM
\mathbf{R}_{aa}	Autokorrelationsmatrix von \mathbf{a}
$\text{sgn}(\cdot)$	Signumfunktion
\mathbf{S}_k	Streuematrix der Klasse k
$\text{SNR}_{\Delta m_{i\lambda}}$	Signal-Rauschverhältnis zur Bestimmung der Verteilung von ΔM
$\text{SNR}_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}}$	Signal-Rauschverhältnis zur Bestimmung der Verteilung von ε_{KD}
S	maximale Anzahl an Iterationsschritten bei der iterativen Materialanteilsschätzung
s	Iterationsschritt s bei der iterativen Materialanteilsschätzung
t_{FCLS}	iterativ bestimmter Parameter im FCLS-Algorithmus

Symbolverzeichnis

Symbol	Bedeutung
t_{MCLS1}	Parameter im MCLS-Algorithmus zur iterativen Materialanteilschätzung
t_{MCLS2}	Parameter im MCLS-Algorithmus zur iterativen Materialanteilschätzung
T	Anzahl an Trainingsschritten bei der Verwendung einer SOM
t	Trainingsschritt bei der Verwendung einer SOM
\mathbf{U}	linke Singulärvektormatrix
$\mathcal{U}_{\text{hidden}}$	verdeckte Schicht eines neuronalen Netzes
\mathcal{U}_{in}	Eingangsschicht eines neuronalen Netzes
\mathcal{U}_{out}	Ausgangsschicht eines neuronalen Netzes
\mathbf{u}	linker Singulärvektor
\mathbf{V}	rechte Singulärvektormatrix
\mathbf{v}	rechter Singulärvektor
\mathbf{w}_k	Gewichtsvektor der Klasse k im neuronalen Netz
w_{0k}	Schwellenwert der Klasse k im neuronalen Netz
$\mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}$	q_{SOM} -ter Referenzvektor innerhalb einer SOM
\mathbf{x}	Signalfolge
\mathbf{x}	mehrdimensionale Zufallsgröße
x	eindimensionale Zufallsgröße
x_1	Pixelkoordinate in x -Richtung
x_2	Pixelkoordinate in y -Richtung
\mathbf{x}_{DCT}	diskret kosinustransformierte Signalfolge
X	Länge einer Signalfolge
\mathbf{Y}	Hyperspektralbild mit aneinandergereihten Pixeln
y	Mischspektrum
\mathbf{y}_{KD}	Mischspektrum im künstlichen Datensatz
\mathbf{y}_l	Mischspektrum im spektralen Bandbereich l
\mathbf{y}_{MCLS}	erweitertes Mischspektrum im MCLS-Algorithmus zur iterativen Materialanteilsschätzung
\mathbf{y}_μ	Mittelwertsspektrum über die Mischspektren einer Mischprobe
\mathcal{Y}	Hyperspektralbild
\mathcal{Z}	Ereignismenge
z	Zufallsereignis

Griechische Buchstaben

Symbol	Bedeutung
α	Parameter der Dirichlet-Verteilung

Symbol	Bedeutung
$\Gamma(\cdot)$	Gammafunktion
Δ_{NN}	Größe zur Bewertung des Einhaltens der NN-Bedingung
$\bar{\Delta}_{NN}$	Größe zur Bewertung des Einhaltens der NN-Bedingung gemittelt über alle Mischfächer
Δ_{NNo}	Größe zur Bewertung des Einhaltens der NN-Bedingung im Mischfach o
Δ_{STO}	Größe zur Bewertung des Einhaltens der STO-Bedingung
$\bar{\Delta}_{STO}$	Größe zur Bewertung des Einhaltens der STO-Bedingung gemittelt über alle Mischfächer
Δ_{STOo}	Größe zur Bewertung des Einhaltens der STO-Bedingung im Mischfach o
ϵ	Fehlerwert
ϵ_l	Fehlerwert im spektralen Bandbereich l
ϵ_{MCLS1}	Schwellenwert im MCLS-Algorithmus zur iterativen Materialanteilsschätzung
ϵ_{MCLS2}	Schwellenwert im MCLS-Algorithmus zur iterativen Materialanteilsschätzung
A	Anzahl an Wellenlängenkanälen
A_{\max}	maximale Anzahl an Wellenlängenkanälen
λ	Wellenlängenkanalindex oder kontinuierliche Wellenlänge
$\mu_{\mathbf{x}}$	Erwartungswertvektor der mehrdimensionalen Zufallsgröße \mathbf{x}
Σ	Diagonalmatrix der Singulärwerte
$\Sigma_{\mathbf{x}}$	Autokovarianzmatrix der mehrdimensionalen Zufallsgröße \mathbf{x}
$\hat{\Sigma}_b$	Größe für die Variabilität zwischen allen Klassen
$\hat{\Sigma}_w$	Größe für die Variabilität innerhalb aller Klassen
σ	Singulärwert
σ_x^2	Varianz von x
$\phi(\cdot)$	allgemeiner funktionaler Zusammenhang zur Beschreibung eines beliebigen Mischspektrums y

(hochgestellte) Indizes

Index	Bedeutung
$(\bullet)^\dagger$	Pseudoinverse
$(\bullet)^T$	Transponiert

Mathematische Operatoren

Operator	Bedeutung
$\ \cdot\ _2$	Euklidische Norm
$ \cdot $	Determinante
\odot	Hadamard-Produkt

1 Einleitung

1.1 Motivation

In den vergangenen Jahrzehnten ist die Menge an digitalen Bilddaten rasant gewachsen. Zwischen den Jahren 2013 und 2017 kann bspw. annähernd eine Verdoppelung ausgemacht werden. Ein wesentlicher Grund für diese Entwicklung ist die Möglichkeit, mit Smartphones Bildaufnahmen durchzuführen. Diese Geräte sind ein fester Bestandteil im alltäglichen Leben des Großteils der Bevölkerung. Der Beitrag an den weltweit aufgezählten Fotos durch Smartphones lag im Jahr 2017 bei 85% [19]. Bei diesen Bildaufnahmen handelt es sich überwiegend um Farbbilder, die mit den drei Farbkanälen rot, grün und blau in erster Näherung den Seheindruck des menschlichen Auges nachbilden. Aus Sicht der Bildverarbeitung hat der Trend der digitalen Fotografie zur Folge, dass sich für die Verfahren des maschinellen Sehens, neben dem industriellen Einsatz, auch immer mehr Anwendungen im privaten Bereich ergeben. Durch die Omnipräsenz von Bildsensoren wird z. B. eine medizinische Überwachung im eigenen Zuhause denkbar [72].

Der Einsatz von Farbbildern beschränkt sich größtenteils auf die Automatisierung, d. h. die Unterstützung oder Ablöse des Menschen bei Aufgaben, die durch die Fähigkeiten des menschlichen Auges prinzipiell auch gelöst werden können. Bei vielen Problemstellungen in der Medizin, dem Lebensmittelbereich sowie der Industrie im Allgemeinen ist diese Bildinformation nicht ausreichend. Um dennoch mit der Anwendung von bildgebenden Verfahren eine nichtinvasive Lösung bereitzustellen, kann in den Prozess der Bildaufnahme eingegriffen werden. Ein hinsichtlich der Anwendungsmöglichkeiten sehr vielfältiger Weg ist der Ersatz von Farbbildern durch Hyperspektralbilder. Bei diesen wird im Vergleich zu Farbbildern der Wellenlängenbereich wesentlich feiner abgetastet, wodurch an jedem Pixel anstelle der drei Farbwerte ein Spektrum vorhan-

den ist. Mit Hyperspektralbildern ist es möglich, auch Stoffe mit gleicher Farbvalenz zu unterscheiden, falls ihre Spektren verschieden sind [11]. Aufzeichnungen an verschiedenen schmal abgetasteten Wellenlängenbereichen unterscheiden sich oft erheblich. In den Abbildungen 1.1–1.2 sind beispielhaft zwei Aufzeichnungen einer Farbpulvermischung zu sehen, die in Abschnitt 5 untersucht werden. Es öffnet sich der Zugang zur „materialverstehenden Bildverarbeitung“. Die kontaktlose Qualitätskontrolle mit hyperspektralen Daten hat sich im Lebensmittelbereich bei bspw. dem Bestimmen des Reifegrads von Tomaten [86] oder des Zuckergehalts von Weintrauben [71], im industriellen Umfeld bei der Materialsortierung [108] sowie in der Medizin bei Laboranalysen [52] vielfach bewährt.

Eine großflächige Verbreitung in den Alltag von Systemen, die auf hyperspektralen Bilddaten basieren, wie er bei der digitalen Farbaufnahme zu beobachten war, ist bislang nicht erfolgt. Die Hardware für die hyperspektrale Bildgewinnung unterscheidet sich von der für die Farbbildgewinnung. Hyperspektrale Aufnahmesysteme sind meist voluminös und kostspielig, was eine Integration auf bspw. einem Smartphone ohne Minderung bestehender Merkmale verbietet. Die Einsatzmöglichkeiten im Alltag werden zudem durch die vergleichsweise langen Aufnahmezeiten für hyperspektrale Daten eingeschränkt. Weiter nachteilig gegenüber Farbbildern sind das größere Speichervolumen von Hyperspektralbildern und die damit einhergehende wesentlich rechenintensivere Verarbeitung. Auch setzen die für die Auswertung entwickelten Verfahren meist exakt bekannte Umgebungsbedingungen sowie Expertenwissen voraus, um die gesuchten Ergebnisse zu erhalten und deren Vertrauenswürdigkeit einschätzen zu können. Dadurch ist die umfangreiche Verwendung hyperspektraler Daten im privaten Umfeld bis heute nicht möglich.

Im Bestreben, einige dieser Hürden beim Einsatz von Hyperspektralbildern zu überwinden und somit eine Integration im täglichen Leben in Aussicht zu stellen, wurden bereits erste Ansätze unternommen, die sich in unterschiedliche Gruppen einteilen lassen. Eine dieser Gruppen verzichtet auf die Bildgebung und schränkt sich auf die Verwendung von Punktspektren ein. In [63, 74, 94] wird ein Spektrometer im nahen Infrarot verwendet, das Ausmessungen besitzt, die einen mobilen Einsatz als eine Erweiterung für Smartphones ermöglichen. Auch sind kurze Zeiten im Bereich von wenigen Sekunden für die Aufnahme und Auswertung

möglich. Für eine Anwendung, die robust gegenüber stark schwankenden Umgebungsbedingungen ist, wird auf Datenbanken mit bekannten Punktspektren zugegriffen. Die Auswertung neu aufgezeichneter Punktspektren erfolgt durch Abgleich mit dieser Datenbank, meist mithilfe von Verfahren des maschinellen Lernens. Da dies online erfolgt, werden keine weiteren Rechenressourcen vom Gerät des Anwenders verbraucht. Zwar kann der Benutzer eine Voreinstufung der zu untersuchenden Materialprobe vornehmen, unsinnige Ergebnisse können dadurch jedoch nicht ausgeschlossen werden. In [58] wird dagegen eine miniaturisierte Hardware zur Aufnahme von Hyperspektralbildern vorgestellt, die mobile Einsätze, neben Smartphones auch auf bspw. kleinen Flugkörpern, aufgrund des geringen Gewichts erlauben soll. Allerdings sind die örtliche und vor allem spektrale Auflösungen dieser aufgezeichneten Hyperspektralbilder meist stark reduziert, sodass sie für eine Materialanalyse ggf. nicht mehr ausreichend sind. Zudem muss weiterhin eine große Datenmenge ausgewertet werden, wozu neben Hardwareressourcen auch fachliches Wissen zusätzlich erforderlich bleibt. In einem dritten Ansatz werden Hardwareaufbauten entwickelt, die eine angepasste spektrale Aufnahme ermöglichen. Dabei werden sowohl bildgebende [48, 77] als auch nicht bildgebende [13, 87] Ansätze vorgestellt. Bei den ersteren resultieren einzelne Intensitätsbilder, die bereits die gesuchte Information an jedem Pixel enthalten, oder die Information lässt sich leicht extrahieren. Die verwendeten Aufbauten sind aufgrund ihrer Größe nicht mehr für einen mobilen Einsatz, wie er im Alltag gefordert wird, geeignet. Zudem wird für die Anpassung der spektralen Aufnahme eine bekannte Problemstellung benötigt, die eine umfangreiche Untersuchung der Umgebungsbedingungen und teils vor der erstmaligen Anwendung Aufnahmen von Hyperspektralbildern sowie deren rechenintensive Auswertung einschließt.

1.2 Problemstellung

Mit der Zielsetzung, hyperspektrale Information auch im Alltag zu nutzen, ergeben sich zahlreiche offene Problemstellungen. Keiner der im vorherigen Abschnitt präsentierten Ansätze kann diese vollständig lösen. Innerhalb dieser Arbeit wird der Ansatz der angepassten spektralen bildgebenden Aufnahme weiter untersucht, um den Transfer hyperspektraler

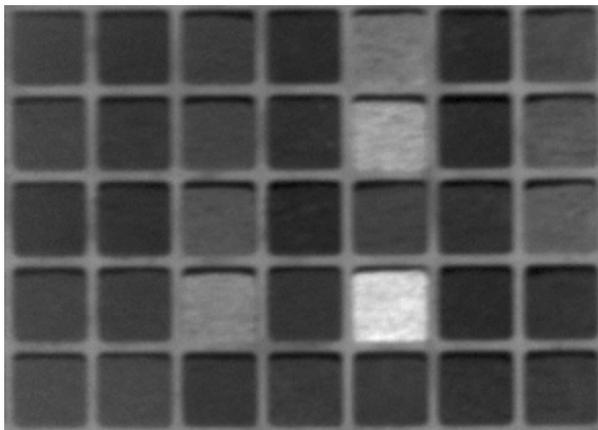


Abbildung 1.1 Intensitätsbild über Mischfächer einer Farbpulvermischung bei 486 nm.

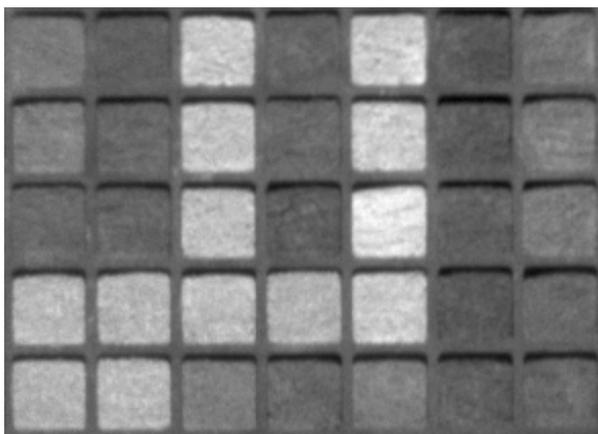


Abbildung 1.2 Intensitätsbild über Mischfächer einer Farbpulvermischung bei 758 nm.

Daten ins tägliche Leben vergleichbar zu Farbbildern in Aussicht zu stellen. Es müssen dafür Entwicklungen sowohl einer geeigneten Hardware als auch methodischer Lösungsansätze vorangetrieben werden. Bei der Hardwareentwicklung bestehen die Herausforderungen in der Größe, dem Gewicht und der möglichst exakten als auch schnellen Realisierung der Anpassung im spektralen Bereich. Diese soll zur Aufzeichnung eines Intensitätsbilds bei möglichst kurzer Belichtungszeit führen, das die gesuchte Information enthält. Die methodischen Lösungsansätze geben die spektrale Anpassung vor, was zukünftig als Entwurf von optischen Spektralfiltern bezeichnet wird. Auch dabei sind Ansprüche, die sich aus einer Anwendung im Alltag ergeben, möglichst eng zu verfolgen. Die Materialanteilsschätzung von Materialmischungen als ein Beispiel der Materialanalyse soll den Anwendungsfall beschreiben. Die folgenden Herausforderungen wurden als notwendige Schritte auf dem Weg zur vielfältigen Einsetzbarkeit identifiziert:

- **Eingeschränktes Wissen:** Lediglich die Reinstoffe mit ihrer jeweiligen spektralen Information sollen bekannt sein. Aus welchen dieser Reinstoffe sich die Mischprobe zusammensetzt, soll unbekannt sein. Auch das Mischverhalten der Reinstoffe soll nur in erster Näherung angenommen werden dürfen.
- **Unbekannte Umgebungsbedingungen:** Die Materialanteilsschätzung soll, soweit es die Ansätze erlauben, mit möglichst wenig Information über die Beleuchtung der Materialprobe auskommen.
- **Breiter Anwenderkreis:** Die Methoden zur Berechnung der optischen Spektralfilter für die Materialanteilsschätzung sollen mit möglichst wenigen festzulegenden Parametern versehen sein. Dadurch kann auch eine Anwendung ohne tieferes Erfahrungswissen erfolgen. Zudem sollen die geschätzten Materialanteile stets interpretierbar für den Anwender sein, was bspw. ausschließlich positive Anteilsschätzungen einbezieht.
- **Ressourceneffizienz:** Die Materialanteilsschätzung soll möglichst effizient im Verbrauch von Hardwareressourcen sein, welche das notwendige Speichervolumen und den Rechenaufwand, gemessen in der Anzahl an auszuwertenden arithmetischen Operationen, berücksichtigen. Als eine Konsequenz soll zu keinem Zeitpunkt eine

hyperspektrale Aufnahme der zu untersuchenden Mischprobe benötigt werden, um so dieses Speichervolumen bereits einzusparen.

1.3 Eigener Beitrag

Bestehende Methoden für eine Materialanteilsschätzung, die mithilfe von optischen Spektralfiltern realisiert werden, können die gestellten Herausforderungen nicht oder nur teilweise erfüllen. Im Rahmen dieser Arbeit konnte ein ganzheitlicher Lösungsansatz entwickelt werden, der sich inhaltlich wie folgt gliedern lässt:

- **Bandselektion:** Nach der gegenwärtigen Literatur ist die Bandselektion ein probates Mittel, um die Materialanteilsschätzung zu verbessern. Es werden dabei gezielt einige Wellenlängenkanäle in den Spektren für die Schätzung ausgewählt. Den betrachteten Wellenlängenkanälen wird bspw. eine geringe Spektrenvariabilität unterstellt oder die Reinspektren der verschiedenen Materialien unterscheiden sich in diesen besonders ausgeprägt voneinander. In dieser Arbeit wurden zwei Methoden entwickelt, welche Bandbereiche, d. h. spektrale Abschnitte fester Länge, auswählen. Dabei werden neben der Spektrenvariabilität auch Abweichungen zum angenommenen linearen Mischverhalten berücksichtigt.
- **Klassifikation quantisierter Materialanteile:** Im Gegensatz zu ähnlichen Verfahren der Literatur wird auf eine kontinuierliche Anteilsschätzung verzichtet und stattdessen eine Bestimmung quantisierter Anteile mithilfe von neuronalen Netzen durchgeführt. Für das Training dieser Klassifikatoren wurden aufgrund der Problemstellung lediglich berechnete Datensätze von Mischspektren verwendet. Das Ergebnis wird durch die Auswertung von nur wenigen Intensitätsbildern mit geringen Rechenkosten erzielt.
- **Iterative Materialanteilsschätzung:** Nur wenige bestehende iterative Methoden sind ebenso mithilfe von optischen Spektralfiltern realisierbar. Bedingungen an die Materialanteile für eine physikalische Interpretation werden bereits berücksichtigt. In dieser Arbeit wurde ein neues iteratives Vorgehen entwickelt, welches eine Verbesserung

der physikalischen Interpretation mit jedem weiteren Iterationsschritt sicherstellt. Zudem wird erstmalig die Spektrenvariabilität gleichzeitig zu der physikalischen Interpretation berücksichtigt.

- **Mehrstufige iterative Materialanteilsschätzung:** Es wird eine Methode zur Materialdetektion entwickelt, d. h. die Erkennung, ob ein Material vorhanden ist. Somit müssen in einer Mischung weniger Materialanteile geschätzt werden. Die Bandbereichsselektion, Materialklassifikation und iterative Materialanteilsschätzung werden anschließend in eine Rahmenstruktur als mehrstufige iterative Materialanteilsschätzung gesetzt.

1.4 Gliederung der Arbeit

Im nachfolgenden Kapitel werden zunächst sämtliche mathematische Grundlagen und einige Klassifikationsverfahren in der für das Verständnis der in dieser Arbeit entwickelten Methoden notwendigen Ausführlichkeit aufgeführt. Daraufhin wird das Problem der Materialanteilsschätzung mithilfe von hyperspektralen Daten in Abschnitt 3 erläutert. Im Mittelpunkt stehen die Schwierigkeiten bei der Schätzung von Materialanteilen, die dadurch entstehen, dass Mischmodelle in vielen Fällen nur in erster Näherung einen Zusammenhang zwischen Hyperspektralbildern und Materialanteilen angeben (siehe Abschnitt 3.2.1). In den Abschnitten 3.2.3–3.3 wird über die un- und überwachte spektrale Entmischung zur Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern hingeführt. Mit der Realisierung von optischen Spektralfiltern in einer Hardware werden keine Hyperspektralbilder mehr aufgezeichnet, dennoch wird in dieser Arbeit die Verwendung von optischen Spektralfiltern anhand von hyperspektralen Daten erläutert (siehe Abschnitte 4.1–4.1.1). Es folgen die einzelnen Beiträge zur Bandselektion in Abschnitt 4.4, der Klassifikation quantisierter Materialanteile in Abschnitt 4.5, zur iterativen Materialanteilsschätzung in Abschnitt 4.6 und der mehrstufigen iterativen Materialanteilsschätzung in Abschnitt 4.7, die insbesondere eine Erweiterung um die Erkennung von Materialien enthält (siehe Abschnitt 4.7.1). Die Beiträge orientieren sich an den in Abschnitt 4.1.2 gesetzten Anforderungen und Zielen, welche von bestehenden Verfahren nicht erreicht werden (siehe Abschnitt 4.2). In

Abschnitt 5 werden die Methoden zum Entwurf optischer Spektralfilter für eine Materialanteilsschätzung ausgewertet, wobei eine Unterteilung in den verwendeten Versuchsaufbau in Abschnitt 5.1, die Datensätze in Abschnitt 5.2 und die Ergebnisse der Materialanteilsschätzungen in Abschnitt 5.3 erfolgt. In Abschnitt 6 werden eine kurze Zusammenfassung zu den wesentlichen Ergebnissen dieser Arbeit gegeben und Vorschläge für zukünftige Untersuchungen genannt.

2 Grundlagen

Die folgenden Grundlagen sind unter Abstimmung mit der Problemstellung sowie den Verfahren in den Kapiteln 3–5 dieser Arbeit ausgewählt. Die Beschreibungen orientieren sich in ihrer jeweiligen Ausführlichkeit an der unteren Grenze, die für das Verständnis der Inhalte notwendig ist. Sofern ein unmittelbarer Zusammenhang vorhanden ist, werden zunächst abstrakte mathematische Größen identisch mit späteren physikalischen Größen bezeichnet.

2.1 Mathematische Grundlagen

Bei der Auswahl eines Schätzverfahrens (siehe Abschnitt 2.1.3) ist die Verteilung des zugrundeliegenden Zufallsprozesses der zu schätzenden Größe von Bedeutung, um bewertende Aussagen über die Schätzung treffen zu können. Mit der Normalverteilung und der Dirichlet-Verteilung werden in den beiden nachfolgenden Abschnitten zwei wichtige Verteilungen vorgestellt.

2.1.1 Multivariate Normalverteilung

Eine Zufallsgröße $x \in \mathbb{R}$ mit dem Erwartungswert μ_x und der Varianz σ_x^2 heißt normalverteilt, falls ihre Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion durch

$$f_x(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \mu_x)^2}{2\sigma_x^2}\right) \quad (2.1)$$

gegeben ist. Eine entsprechend (2.1) verteilte Größe wird als Gauß-verteilt bezeichnet. Eine mehrdimensionale normalverteilte Zufallsgröße $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$

wird durch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}} |\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}})^{\text{T}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}})\right) \quad (2.2)$$

mit dem Erwartungswertvektor $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}}$ und der Autokovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}$ beschrieben. Sowohl die Verteilung von \mathbf{x} als auch von \mathbf{z} sind durch μ_x und σ_x^2 bzw. $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}}$ und $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}$ jeweils vollständig bestimmt. Es folgen die gebräuchlichen Notationen $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mu_x, \sigma_x^2)$ und $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}})$. Falls \mathbf{z} einen Störprozess angibt und gilt $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_{\mathbf{z}}^2 \mathbf{I}_D)$ mit $\sigma_{\mathbf{z}} \in \mathbb{R}$ und \mathbf{I}_D der Einheitsmatrix der Dimension $D \times D$, dann wird \mathbf{z} insbesondere als mittelwertfreies weißes Gauß'sches Rauschen bezeichnet.

Eine besondere Bedeutung wird der Normalverteilung aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes erteilt. Additiv überlagerte Zufallsprozesse unterschiedlicher Verteilungen, wie sie häufig in praktischen Anwendungen auftreten, können in vielen Fällen in guter Näherung durch eine Normalverteilung beschrieben werden [16, 88].

2.1.2 Dirichlet-Verteilung

Die Dirichlet-Verteilung bezieht sich ebenfalls auf die Beschreibung einer mehrdimensionalen Zufallsgröße. Dabei werden an $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_D]^{\text{T}}$ die Bedingungen

$$0 \leq x_d \leq 1 \quad \forall d \in \{1, \dots, D\} \quad (2.3)$$

und

$$\sum_{d=1}^D x_d = 1 \quad (2.4)$$

gestellt, wie sie bspw. auftreten, falls \mathbf{x} relativen Anteilen entspricht. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Dirichlet-Verteilung ist durch

$$f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{\Gamma\left(\sum_{d=1}^D \alpha_d\right)}{\prod_{d=1}^D \Gamma(\alpha_d)} \prod_{d=1}^D x_d^{\alpha_d - 1} \quad (2.5)$$

gegeben mit den Parametern $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_D]^T$ und der Gammafunktion $\Gamma(\cdot)$. Die Parameter α bestimmen die Form von $f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \alpha)$. Aus (2.3)–(2.4) folgt, dass sich alle x_d innerhalb eines $(D - 1)$ -dimensionalen Simplex befinden.

Bei der symmetrischen Dirichlet-Verteilung gilt $\alpha = \alpha_d \forall d$. Wird $\alpha = 1$ gewählt, so sind alle möglichen Werte von \mathbf{x} gleich wahrscheinlich. Für $\alpha < 1$ sind Abweichungen zwischen den x_d wahrscheinlicher. Dagegen führt $\alpha > 1$ zu sich eher ähnelnden x_d [16] (siehe Abb. 2.1).

2.1.3 Least-Squares-Schätzer

Least-Squares-Schätzer sind Verfahren zum Lösen von Parameterschätzaufgaben. Darunter zählt die Suche nach Parametern $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_P]^T$ unter Verwendung von Messergebnissen $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_A]^T$ und der Annahme einer Beziehung zwischen \mathbf{a} und \mathbf{y} . Ein linearer Zusammenhang ist bspw. gegeben durch

$$\mathbf{y} = \mathbf{M} \mathbf{a} + \varepsilon \quad (2.6)$$

mit $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{A \times P}$ deterministisch und der Zufallsgröße ε . Least-Squares-Schätzer minimieren die Summe der quadratischen Fehler:

$$\min_{\mathbf{a}} (\mathbf{y} - \mathbf{M} \mathbf{a})^T (\mathbf{y} - \mathbf{M} \mathbf{a}) . \quad (2.7)$$

Eine Schätzung von \mathbf{a} kann bestimmt werden durch

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}} = \mathbf{M}^\dagger \mathbf{y} \quad (2.8)$$

mit der Pseudoinversen $\mathbf{M}^\dagger = \left(\mathbf{M}^T \mathbf{M} \right)^{-1} \mathbf{M}^T$. Die Genauigkeit der Schätzung $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ ist von (2.6) abhängig. Falls sämtliche Messwerte y_λ , $\lambda = 1, \dots, A$, statistisch unabhängig sind und es sich bei ε um mittelwertfreies weißes Gauß'sches Rauschen handelt, entspricht (2.8) der Maximum-Likelihood-Schätzung von \mathbf{a} . Insbesondere wurde dann nach dem Gauß-Markov-Theorem mit $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ der beste lineare erwartungstreue Schätzer berechnet [16, 93].

Abseits der klassischen Statistik können die Parameter \mathbf{a} als Zufallsgrößen betrachtet werden. Dadurch befindet sich die Parameterschätz Aufgabe

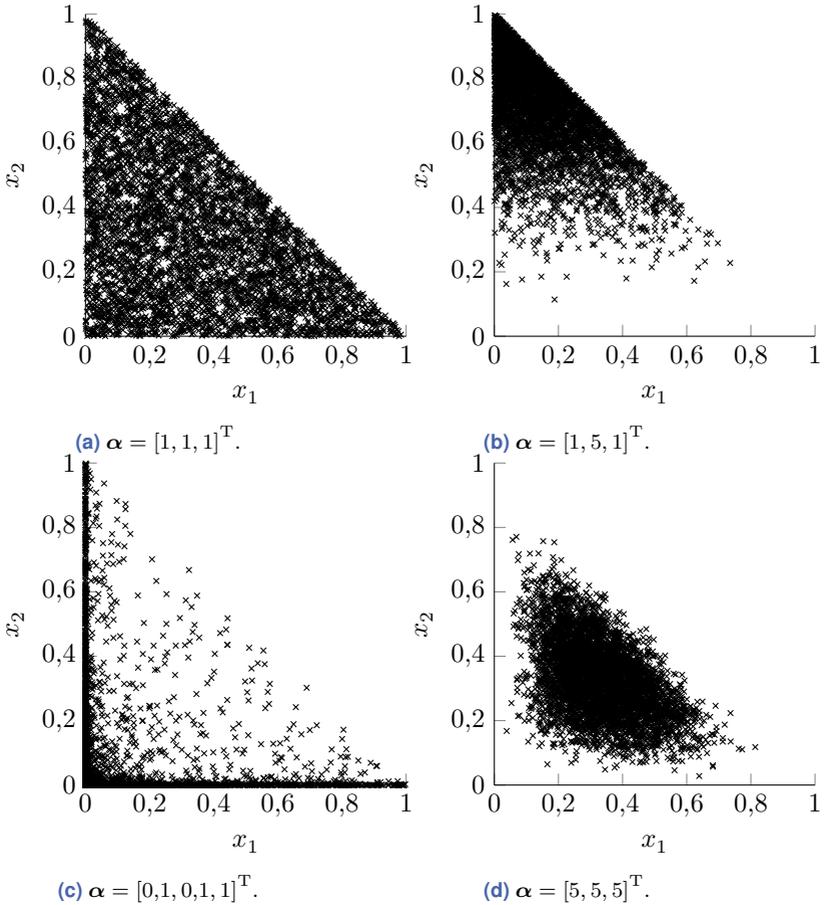


Abbildung 2.1 Beispielhafte Realisierungen der Dirichlet-Verteilung mit $\alpha \in \mathbb{R}^3$ sowie unterschiedlicher Wahl von α .

innerhalb der Bayes'schen Statistik [23]. Bei bekannter Statistik von \mathbf{a} durch die Autokorrelationsmatrix \mathbf{R}_{aa} sowie vorliegender Autokovarianzmatrix $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$ von ε kann über die Annahme (2.6) für die Schätzung von \mathbf{a} anstelle von (2.8) der Gauß-Markov-Schätzer

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{GM}} = \left(\mathbf{M}^T \mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}^{-1} \mathbf{M} + \mathbf{R}_{aa}^{-1} \right)^{-1} \mathbf{M}^T \mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}^{-1} \mathbf{y} \quad (2.9)$$

angewendet werden [67]. Dabei minimiert $\hat{\mathbf{a}}_{\text{GM}}$ den Erwartungswert des quadratischen Fehlers:

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{GM}} = \min_{\hat{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^P} E \left\{ (\mathbf{a} - \hat{\mathbf{a}})^T (\mathbf{a} - \hat{\mathbf{a}}) \right\}. \quad (2.10)$$

Die Schätzungen $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ und $\hat{\mathbf{a}}_{\text{GM}}$ unterscheiden sich somit nicht nur bei dem benötigten Wissen zur Berechnung, sondern auch in den Gütekriterien, die jeweils minimiert werden sollen.

2.1.4 Singulärwertzerlegung (SVD)

Die Singulärwertzerlegung (SVD) [33, 46] kann z. B. für das Lösen von linearen Ausgleichsproblemen, die schlecht konditioniert oder singulär sind, benutzt werden. Eine weitere Einsatzmöglichkeit der SVD ist die numerische Bestimmung des Rangs sowie die Niedrigrangapproximation einer Matrix, wodurch bspw. die Datenkompression von Bildern ermöglicht wird [37].

Mithilfe der SVD wird eine Matrix $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{A \times P}$, $A \geq P$, als Produkt von Matrizen dargestellt:

$$\mathbf{M} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_A] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_P & \\ & & & \mathbf{0} \end{bmatrix} [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_P]^T = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T, \quad (2.11)$$

wobei $\mathbf{0}$ eine Matrix bestehend aus Nullen geeigneter Dimension ist. In (2.11) sind die linke Singulärvektormatrix $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{A \times A}$ und die rechte Singulärvektormatrix $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{P \times P}$ jeweils orthogonal. Im Gegensatz zu \mathbf{U} und \mathbf{V} sind die Singulärwerte $\sigma_1, \dots, \sigma_P$ eindeutig bestimmt und es gilt $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_P \geq 0$. Durch das Verhältnis der Singulärwerte σ_1 und

σ_P kann bspw. die Kondition von \mathbf{M} bestimmt werden, was in dieser Arbeit jedoch nicht von Bedeutung ist, da stets von gut konditionierten Matrizen ausgegangen wird. In Abschnitt 4 wird stattdessen der Zusammenhang zwischen den Singulärwerten sowie \mathbf{U} und \mathbf{V} nach

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^P \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T \quad (2.12)$$

vielfach genutzt. Aus (2.12) geht hervor, dass durch die ersten P Spalten von \mathbf{U} eine orthonormale Basis der linearen Abbildung mit \mathbf{M} gegeben ist.

Eine weitere wichtige Beobachtung ist die Auswirkung einer Skalierung mit $c \in \mathbb{R}$ von \mathbf{M} auf deren SVD. Es gilt

$$c\mathbf{M} = c\mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T = \mathbf{U}c\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T = \mathbf{U}\tilde{\mathbf{\Sigma}}\mathbf{V}^T \quad (2.13)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{\Sigma}} = \begin{bmatrix} c\sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & c\sigma_P \end{bmatrix}, \quad (2.14)$$

da \mathbf{U} und \mathbf{V} weiterhin orthogonal sind. Folglich ist die Größe der Singulärwerte nicht invariant gegenüber einer Skalierung von \mathbf{M} . Auch wird letztendlich die Spektralnorm von \mathbf{M} gerade durch σ_1 bestimmt [110]. Beim Entwurf von Bewertungsgrößen für die Bandselektion (siehe Abschnitt 4.4.2) ist die SVD ein wichtiger Bestandteil. Durch eine Normierung der Singulärwerte werden hier aufgrund von (2.13) Vergleiche ermöglicht, die auch sinnvoll bei zugrundeliegenden Matrizen unterschiedlicher Größenordnungen bleiben.

2.1.5 Diskrete Kosinustransformation

Zu den diskreten Frequenztransformationen gehört die diskrete Kosinustransformation (DCT). Dabei wird eine Signalfolge $\mathbf{x} = [x_0, \dots, x_{X-1}]^T$ in ihre spektralen Komponenten $\mathbf{x}_{\text{DCT}} = [x_{\text{DCT}f_0}, \dots, x_{\text{DCT}f_{X-1}}]^T$ an den diskreten Frequenzen f_0, \dots, f_{X-1} transformiert. In der Bildverarbeitung kann die DCT, vergleichbar zur SVD, für die Kompression von Bildern angewendet werden [89, 106].

Diskrete Frequenztransformationen ergeben sich aus gewichteten Summen trigonometrischer Funktionen, wobei bei der DCT lediglich Kosinusfunktionen auftreten:

$$x_{\text{DCT}f_x} = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{X}} \sum_{x=0}^{X-1} x_x & \text{für } f_x = 0, \\ \sqrt{\frac{2}{X}} \sum_{x=0}^{X-1} x_x \cos\left(\frac{\pi}{X} \left(x + \frac{1}{2}\right) f_x\right) & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.15)$$

Folglich ist die DCT reell. Durch unterschiedliche Wahl der Vorfaktoren ergeben sich mehrere gebräuchliche Berechnungsvorschriften für die DCT. Die Berechnung nach (2.15) erlaubt eine Angabe der DCT als orthogonale Transformation [2, 20]:

$$\mathbf{x}_{\text{DCT}} = \mathbf{T}_{\text{DCT}} \mathbf{x}, \quad (2.16)$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{T}_{\text{DCT}}^T \mathbf{x}_{\text{DCT}}. \quad (2.17)$$

Dabei sind in $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{X \times X}$ zeilenweise die Vorfaktoren der Summanden in den einzelnen Frequenzen aus (2.15) enthalten, d. h. $\sqrt{\frac{1}{X}}$ in der ersten Zeile für $f_x = 0$ und $\sqrt{\frac{2}{X}} \cos\left(\frac{\pi}{X} \left(x + \frac{1}{2}\right) f_x\right)$ in der $f_x + 1$ -ten Zeile und $x + 1$ -ten Spalte.

Die Realisierung der DCT als Matrixmultiplikation ermöglicht eine Verwendung der DCT innerhalb dieser Arbeit, da über diese Form ein Zusammenhang zu optischen Spektralfiltern hergestellt werden kann (siehe Abschnitt 4.1). Beispielsweise kann der im Folgenden behandelte Informationsgehalt nicht nur für \mathbf{x} , sondern auch für \mathbf{x}_{DCT} untersucht werden.

2.1.6 Entropie nach Shannon

Um Information oder komplementär die Ungewissheit für Zufallsgrößen zu quantifizieren, kann neben weiteren Größen die Entropie nach Shannon verwendet werden [12, 95]. Die Entropie nach Shannon für eine diskrete Zufallsgröße x lautet

$$H = - \sum_{z \in \mathcal{Z}} p_z \log_2 p_z. \quad (2.18)$$

Als diskret wird in diesem Zusammenhang die Eigenschaft bezeichnet, dass x nur eine endliche Anzahl an Werten annehmen kann. In (2.18) werden diesen Werten Zufallsereignisse z der Ereignismenge \mathcal{Z} mit den Wahrscheinlichkeiten p_z zugeordnet. Der Ausdruck $-\log_2 p_z$ in (2.18) gibt den Informationsgehalt des Zufallsereignisses z an und besitzt, ebenso wie die Entropie aufgrund der Basis zwei der Logarithmusfunktion, die Einheit *bit*. Die Entropie nach Shannon besagt somit, welche Länge einer binären Zeichenkette im Mittel mindestens notwendig ist, um die in x enthaltene Information zu beschreiben.

Eine Veranschaulichung der Entropie sowie des Informationsgehalts bietet folgende Beobachtung: Zufallsereignisse mit hohen Wahrscheinlichkeiten besitzen einen niedrigen Informationsgehalt, $-\log_2 p_z \approx 0$. Diese Zufallsereignisse besitzen eine geringe Ungewissheit und sie liefern einen geringen Beitrag zur Entropie. Umgekehrt führt das Eintreten von Zufallsereignissen mit niedrigen Wahrscheinlichkeiten zur merklichen Reduktion der Ungewissheit. Diese Zufallsereignisse besitzen jeweils einen hohen Informationsgehalt und folglich einen hohen Beitrag an der Entropie.

Die Entropie nach Shannon findet in dieser Arbeit Einsatz, um Ungewissheiten im bereitgestellten Wissen in Form der Spektrenvariabilität (siehe Abschnitt 3.2.2) zu quantifizieren und infolgedessen Bestandteile mit hoher Ungewissheit in der weiteren Betrachtung auszuschließen.

2.2 Klassifikationsverfahren

Durch Klassifikationsverfahren ist es möglich, Eingangsdaten unbekannter Klassenzugehörigkeit bekannten Klassen zuzuordnen. Erfolgt diese Zuordnung neuer Daten nach Regeln, die mithilfe von verfügbaren Datensätzen bestimmt wurden, handelt es sich um Verfahren des maschinellen Lernens. Nachfolgend wird ein Überblick angeboten, der Gemeinsamkeiten der in dieser Arbeit verwendeten Klassifikationsverfahren darlegt. So nutzen als eine Gemeinsamkeit sämtliche Verfahren die bekannten Klassenzugehörigkeiten in den verfügbaren Datensätzen für die Bestimmung der Regeln zur Klassifikation (sog. überwachtes Lernen).

2.2.1 Einführung

Bei Klassifikationsaufgaben mit K Klassen gilt es, Eingangsdaten $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_A]^T$ unbekannter Klassenzugehörigkeit jeweils einer Klasse $k, k = 1, \dots, K$, korrekt zuzuweisen. Mathematisch können die hier betrachteten Verfahren durch K Eingangsfunktionen

$$e_k(\mathbf{y}) = \mathbf{w}_k^T \mathbf{y} + w_{0k}, \quad (2.19)$$

mit den Gewichten $\tilde{\mathbf{w}}_k^T = [\mathbf{w}_k^T, w_{0k}] \in \mathbb{R}^{A+1}$ der Klasse k sowie der Ausgangsfunktion

$$k_z = \arg \max_k e_k(\mathbf{y}) = \arg \max_k (\mathbf{w}_k^T \mathbf{y} + w_{0k}) \quad (2.20)$$

beschrieben werden. Das Gewicht w_{0k} beschreibt in (2.19) einen Schwellenwert und beträgt bei manchen Klassifikationsverfahren stets null. In (2.20) bezeichnet k_z die \mathbf{y} zugewiesene Klasse. Dieses Vorgehen kann auch als neuronales Netz der Struktur in Abb. 2.2 interpretiert werden [43]. Dabei bilden \mathbf{y} die Eingangsschicht \mathcal{U}_{in} , (2.19) die Ausgänge der Neuronen der verdeckten Schicht $\mathcal{U}_{\text{hidden}}$ und (2.20) der einzige Ausgang der Ausgangsschicht \mathcal{U}_{out} .

Die Unterschiede der nachfolgend erläuterten Klassifikationsverfahren bestehen darin, welche Anzahl K tatsächlich benötigt wird und wie die Gewichte $\tilde{\mathbf{w}}_k$ der Eingangsfunktionen bestimmt werden. Dabei kann eine grobe Unterteilung in zwei Gruppen bereits vorgenommen werden, insofern Mehrklassenprobleme mit $K > 2$ behandelt werden. Zur ersten Gruppe zählen die selbstorganisierenden Karten (SOM) und das Mittelwertverfahren (MWV). Bei dieser ist eine Unterscheidung zwischen einer binären Klassifikationsaufgabe und einem Mehrklassenproblem nicht notwendig. Der zweiten Gruppe sind die Fisher'sche Diskriminanzfunktion (FDA) sowie die Support Vector Machine (SVM) angehörig. Für diese Verfahren muss ein Mehrklassenproblem in mehrere binäre Klassifikationsaufgaben unterteilt werden, wodurch allgemein für die Anzahl dieser Teilklassen $K' \geq K$ gilt. Der größte Wert der resultierenden K' Unterscheidungen soll das Ergebnis liefern, was auf (2.19) und (2.20) zurückgeführt werden kann [75].

Für die Unterteilung eines Mehrklassenproblems in binäre Klassifikationsaufgaben können, neben weiteren, die Ansätze *one-vs.-all* oder

one-vs.-one verwendet werden. Bei *one-vs.-one* wird der Datensatz paarweise in Daten der Klasse k sowie einer weiteren Klasse \bar{k} , $\bar{k} \neq k$ und $\bar{k} = 1, \dots, K - 1$, unterteilt. Es muss für jedes dieser Paare eine Eingangsfunktion (2.19) bestimmt werden. Nach diesem Prinzip sind insgesamt

$$K' = \frac{K(K-1)}{2} \geq K \quad \text{für } K > 2 \quad (2.21)$$

Eingangsfunktionen und somit Neuronen in der verdeckten Schicht notwendig. Bei *one-vs.-all* werden dagegen alle nicht der Klasse k zugehörigen Daten in eine einzige weitere Klasse zusammengefasst, wodurch sich die Anzahl K nicht erhöht. In beiden Fällen kann weiterhin (2.20) verwendet werden, um die Klassenzuweisung zu erhalten.

Nach [92] ragt kein Ansatz zur Übertragung von Mehrklassenproblemen auf binäre Klassifikationsverfahren bezüglich einer zufriedenstellenden Klassifikation (siehe Abschnitt 2.2.6) bei der Auswertung verschiedener Problemstellungen heraus. Da in Abschnitt 4.5.2 eine niedrigere Anzahl an Klassen auch zu weniger benötigten optischen Spektralfiltern führen wird, kommt in dieser Arbeit ausschließlich der *one-vs.-all* Ansatz zum Einsatz. Dennoch kann sich die Anzahl an Neuronen der verdeckten Schicht im Allgemeinen von der Klassenanzahl im Datensatz unterscheiden, da diese von dem gewählten Klassifikationsverfahren selbst abhängig ist (siehe bspw. Abschnitt 2.2.4).

Aufgrund von (2.19) handelt es sich stets um lineare Klassifikatoren. Bei den folgenden Klassifikationsverfahren sind zum Teil nichtlineare Ausprägungen möglich. Die jeweiligen Beschreibungen beschränken sich jedoch auf die lineare Form, da auch nur diese innerhalb von dieser Arbeit nützlich sein wird (siehe Abschnitt 4.1.2).

2.2.2 Fisher'sche Diskriminanzfunktion

Die FDA verfolgt den Ansatz, die Klassifikation in einem transformierten Raum durchzuführen, in welchem zwischen den Klassen leichter unterschieden werden kann. Mithilfe des bekannten Datensatzes wird die dazu benötigte lineare Abbildung bestimmt. Es wird dabei zum einen eine geringe Klassenvariabilität innerhalb der einzelnen Klassen angestrebt. Zum anderen soll eine hohe Variabilität zwischen den verschiedenen Klassen

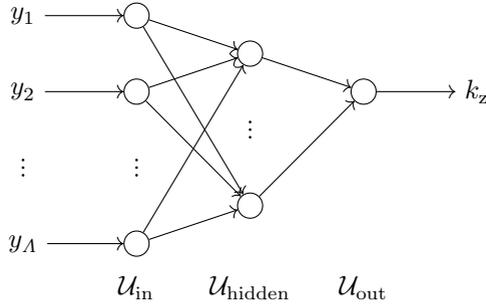


Abbildung 2.2 Interpretation der Klassifikationsverfahren als neuronales Netz mit \mathbf{y} als Eingang der Eingangsschicht \mathcal{U}_{in} , einer verdeckten Schicht $\mathcal{U}_{\text{hidden}}$ und dem Ausgang k_z als Ergebnis der Ausgangsschicht \mathcal{U}_{out} [70].

vorherrschten. Dadurch soll die Zuordnung neuer, ebenfalls transformierter Eingangsdaten mithilfe eines festgelegten Abstandsmaßes ermöglicht werden.

Die Maximierung des sog. Fisher'schen Kriteriums liefert die Transformationsmatrix in den gesuchten Raum:

$$J(\mathbf{T}_{\text{FDA}}) = \frac{|\mathbf{T}_{\text{FDA}}^T \hat{\Sigma}_{\text{b}} \mathbf{T}_{\text{FDA}}|}{|\mathbf{T}_{\text{FDA}}^T \hat{\Sigma}_{\text{w}} \mathbf{T}_{\text{FDA}}|} \quad (2.22)$$

[16]. Dabei beschreibt $\hat{\Sigma}_{\text{w}}$ die Variabilität in den einzelnen Klassen durch die Summe der Streumatrizen jeder Klasse:

$$\hat{\Sigma}_{\text{w}} = \mathbf{S}_1 + \dots + \mathbf{S}_K = \sum_{k=1}^K \sum_{\mathbf{d} \in \mathcal{D}_k} (\mathbf{d} - \bar{\mathbf{d}}_k) (\mathbf{d} - \bar{\mathbf{d}}_k)^T. \quad (2.23)$$

Die Variabilität zwischen den Klassen wird dagegen mit

$$\hat{\Sigma}_{\text{b}} = \sum_{k=1}^K N_k (\bar{\mathbf{d}}_k - \bar{\mathbf{d}}) (\bar{\mathbf{d}}_k - \bar{\mathbf{d}})^T \quad (2.24)$$

bewertet. In (2.23) bezeichnet $\bar{\mathbf{d}}_k$ den Mittelwert der Menge \mathcal{D}_k der Daten

\mathbf{d} des gesamten Datensatzes \mathcal{D} , die der Klasse k zugehören:

$$\bar{\mathbf{d}}_k = \frac{1}{N_k} \sum_{\mathbf{d} \in \mathcal{D}_k} \mathbf{d} \quad (2.25)$$

mit $N_k = |\mathcal{D}_k|$. In (2.24) wird mit $\bar{\mathbf{d}}$ dagegen der Mittelwert aller Daten der Anzahl $N_{\mathcal{D}} = |\mathcal{D}|$ angegeben:

$$\bar{\mathbf{d}} = \frac{1}{N_{\mathcal{D}}} \sum_{\mathbf{d} \in \mathcal{D}} \mathbf{d}. \quad (2.26)$$

Das Maximum von (2.22) ist die Lösung des verallgemeinerten Eigenwertproblems

$$\hat{\Sigma}_{\mathbf{b}} \mathbf{T}_{\text{FDA}} = \sigma \hat{\Sigma}_{\mathbf{w}} \mathbf{T}_{\text{FDA}}. \quad (2.27)$$

Da $\hat{\Sigma}_{\mathbf{w}}$ sich aus der Summe von K Matrizen berechnet und $K \leq N_{\mathcal{D}} - 1$ angenommen wird, folgt $\text{rang}(\mathbf{T}_{\text{FDA}}) \leq K - 1$ als die Dimension des transformierten Raums und somit die Anzahl an Merkmalen zur Unterscheidung zwischen den Klassen.

Als Abstandsmaß zur Zuordnung der Eingangsdaten in eine Klasse soll die quadratische euklidische Distanz eingesetzt werden. Unter Berücksichtigung der berechneten Transformation \mathbf{T}_{FDA} folgt für die zugewiesene Klasse über die FDA

$$k_z = \arg \min_k \sum_{\lambda=1}^A (y'_\lambda - \bar{d}'_{k\lambda})^2, \quad (2.28)$$

wobei $\mathbf{y}' = \mathbf{T}_{\text{FDA}}^T \mathbf{y}$ und $\bar{\mathbf{d}}'_k = \mathbf{T}_{\text{FDA}}^T \bar{\mathbf{d}}_k$. In Abschnitt 4.5.2 wird gezeigt, dass (2.28) in die Form von (2.20) äquivalent geschrieben werden kann. Folglich ist insbesondere eine Beschreibung nach (2.19) und (2.20) der Klassifikation mithilfe der FDA möglich.

Die FDA zeichnet sich durch ihre Einfachheit, schnelle Umsetzung und vergleichbare Ergebnisse auch bei der Anwendung verschiedener Datensätze aus. Dagegen ist die FDA nicht optimal im Sinne einer minimalen Falschklassifikationsrate. Die FDA verfolgt einzig das Ziel, den mittleren quadratischen Abstand zwischen den Klassen im transformierten Raum zu maximieren [75].

2.2.3 Support Vector Machine

Die SVM versucht, genauso wie die FDA, den Merkmalsraum der Dimension λ in Gebiete nach den Klassen im bekannten Datensatz zu unterteilen. Dazu sollen Trennhyperebenen bestimmt werden, die bei einem binären Klassifikationsproblem die Klassenzugehörigkeit nach (2.19) angeben. Es soll insbesondere gelten

$$\operatorname{sgn}(e_k(\mathbf{y})) = \begin{cases} 1 & \text{für } k_{\mathbf{y}} = k, \\ -1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.29)$$

mit $k_{\mathbf{y}}$ als Klassenbezeichnung von \mathbf{y} . Die Wahrscheinlichkeit, dass sich \mathbf{y} genau auf einer Trennhyperebene, beschrieben mit \mathbf{w}_k und w_{0k} , befindet, d. h. $e_k(\mathbf{y}) = 0$, beträgt null. Deshalb kann dieser Fall einer beliebigen Klasse zugeordnet werden.

Ziel der SVM ist es, die Trennhyperebene so zu bestimmen, dass diese einen maximalen Rand zu den nächstgelegenen Merkmalsvektoren (sog. Supportvektoren) besitzt (siehe Abb. 2.3). Es lässt sich zeigen, dass sich dieser maximale Rand bei Betrachtung einer binären Entscheidung für die Klasse k bei minimaler Norm von $\tilde{\mathbf{w}}_k^T = [\mathbf{w}_k^T, w_{0k}]$ und Berücksichtigung der richtigen Klassenzuweisung ergibt [31]. Dadurch ist mithilfe der bekannten Daten $\mathbf{d}_{n_{\mathcal{D}}}$ die Trennhyperebene bestimmt nach

$$\begin{aligned} \arg \min_{\mathbf{w}_k, w_{0k}} & \quad \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{w}}_k^T \tilde{\mathbf{w}}_k \\ \text{unter} & \quad \operatorname{sgn}(e_k(\mathbf{d}_{n_{\mathcal{D}}})) (\mathbf{w}_k^T \mathbf{d}_{n_{\mathcal{D}}} + w_{0k}) \geq 1, \quad n_{\mathcal{D}} = 1, \dots, N_{\mathcal{D}}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Für die Erweiterung der SVM auf ein Mehrklassenproblem nach dem Prinzip *one-vs.-all* wird für sämtliche K binäre Entscheidungsfälle eine Trennhyperebene mithilfe von (2.30) bestimmt. Die Entscheidung erfolgt für die Klasse k mit dem maximalen Abstand des neuen Eingabedatums \mathbf{y} zur Trennhyperebene, d. h. (2.20). Da die Trennhyperebenen sich als Lösungen getrennter Optimierungsprobleme ergeben, ist das Prinzip des maximalen Randes zu den Supportvektoren nur in dem jeweiligen binären Klassifikationsproblem enthalten. In [59] werden mehrere Verfahren vorgeschlagen, die eine Klassifizierung mit SVMs erlauben und auch bei

Mehrklassenproblemen nur ein einziges Optimierungsproblem ansetzen. Die auf diese Weise bestimmten SVMs weisen in der Anwendung jedoch keine eindeutige Verbesserung in der Genauigkeit der Klassifikation im Vergleich zu den SVMs auf, die sich aus dem Lösen von K getrennten Optimierungsproblemen ergeben.

Der SVM wird eine hohe Generalisierungsfähigkeit zugeschrieben, da die für das Klassifikationsergebnis entscheidenden Trennhyperebenen lediglich auf einige wenige Supportvektoren beruhen. Weiter ist (2.30) konvex. Dadurch muss keine Maßnahme für eine geeignete Initialisierung getroffen werden, was sich bei vielfältigen Anwendungsfällen als Vorteil erweisen kann. Bemerkenswerterweise führt die FDA zum gleichen Ergebnis wie die SVM, falls bei der FDA ausschließlich die Supportvektoren als bekannter Datensatz verwendet werden. Die SVM in der hier gezeigten Variante liefert zufriedenstellende Ergebnisse bei linear separierbaren Trainingsdaten, die das Klassifikationsproblem möglichst genau wiedergeben. Um auch für nichtlinear separierbare Problemstellungen mit der SVM genaue Klassifikationen in Aussicht zu stellen, werden bspw. im Training sog. Schlupfvariablen eingeführt oder mithilfe von Kernels eine nichtlineare Transformation bestimmt, in deren Abbild eine lineare Separation der Trainingsdaten wieder möglich ist [16, 75].

2.2.4 Selbstorganisierende Karten

Bei der SOM handelt es sich um ein neuronales Netz mit dem gleichen Aufbau in Schichten wie Abb. 2.2. Die Anzahl an Neuronen der verdeckten Schicht der SOM Q_{SOM} unterscheidet sich meist von der Klassenanzahl K des Datensatzes. In der Regel wird $Q_{\text{SOM}} \geq K$ gewählt. Neben der Anzahl an Neuronen in der verdeckten Schicht ist bei der SOM auch die Anordnung der Neuronen $q_{\text{SOM}}, q_{\text{SOM}} = 1, \dots, Q_{\text{SOM}}$, d. h. die Topologie dieser, entscheidend. Meist wird die zweidimensionale Struktur einer Karte angesetzt (siehe Abb. 2.4). Das ursprüngliche Anwendungsgebiet der SOM ist das *Clustering*, d. h. es sollen mithilfe eines bekannten Datensatzes *Cluster* ermittelt werden. Eine möglicherweise gegebene Information der Klassenzugehörigkeit in diesen Daten wird nicht berücksichtigt (sog. unüberwachtes Lernen). Das Anwenden der SOM auf unbekannte, meist hochdimensionale Eingangsdaten kann dann als eine Dimensionsreduktion betrachtet werden, wobei sich eine Visualisierung aufgrund der Struk-

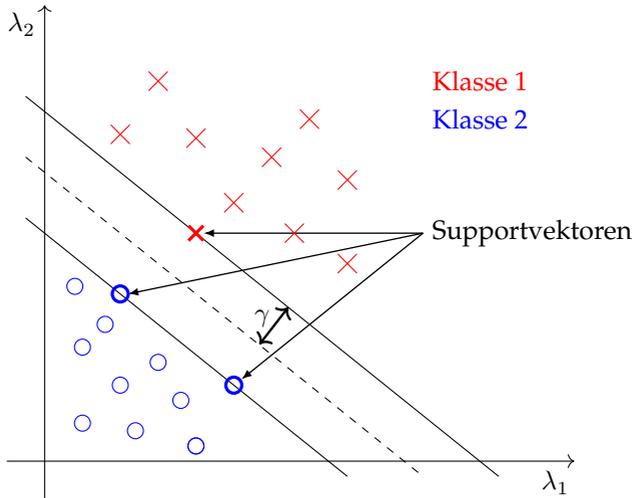


Abbildung 2.3 Optimale Trennhyperebene für Zwei-Klassen-Problem (gestrichelt) mit maximalem Rand γ . Die nächstgelegenen Merkmalsvektoren (Supportvektoren) sind fett dargestellt [31].

tur der SOM anbietet. Dies ist möglich, da die Anwendung der SOM den Topologie erhaltenden Abbildungen zugehörig ist [68, 70].

Die Erstellung einer SOM besteht zum einen aus der Wahl der Größe und der Struktur, die durch die Nachbarschaftsbeziehung zwischen den einzelnen Neuronen bestimmt wird. Zum anderen ist ein Lernverfahren festzulegen. Im Gegensatz zur FDA und SVM werden dabei die Daten des bekannten Datensatzes der Reihe nach behandelt, weshalb das Erzeugen der SOM auch als Training bezeichnet wird. Zunächst wird jedem Neuron ein beliebiger Referenzvektor $\mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}} \in \mathbb{R}^A$ zugeordnet. Nach dem Training sollen Neuronen in enger Nachbarschaft auch ähnliche Referenzvektoren besitzen. Durch den Einbezug der Nachbarschaft beim Anpassen von $\mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}$ innerhalb von jedem Trainingsschritt $t, t = 1, \dots, T$, wird dies verfolgt. Zwei häufig verwendete Nachbarschaften sind in Abb. 2.4 zu sehen. Die Größe der Nachbarschaft nimmt im Verlauf des Trainings ab. Indem sowohl jedem Referenzvektor zu Beginn eine Klasse zugeteilt wird und die Klassenzugehörigkeit jedes Trainingsdatums bei der weiteren Anpassung der Referenzvektoren berücksichtigt wird, kann mit der SOM

auch ein überwachtes Lernen stattfinden. Die *Supervised-SOM* behandelt die Klasseninformation als weitere Dimensionen in den Eingangsdaten sowie Referenzvektoren und codiert diese numerisch. Nach dem Training entsprechen die Werte dieser Dimension der Referenzvektoren in den meisten Fällen keiner Codierung einer Klasse mehr, wodurch die Klassifizierung unbekannter Eingangsdaten durch Zuordnung eines Neurons der so trainierten SOM nicht möglich ist. Eine Abwandlung der SOM, die auch eine Klassifikation neuer Daten nach dem Training sicherstellt, ist die *Linear Vector Quantization (LVQ)-SOM*. Das Anpassen der Referenzvektoren innerhalb des Trainings erfolgt zweistufig. Zuerst wird für das im Trainingsschritt t betrachtete Datum $\mathbf{d}[t]$ das Neuron mit größter Ähnlichkeit gesucht:

$$\begin{aligned}
 q_{\text{SOMz}} &= \arg \min_{q_{\text{SOM}}} \|\mathbf{d}[t] - \mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t]\|_2 \\
 &= \arg \min_{q_{\text{SOM}}} \sqrt{\sum_{\lambda=1}^A (d_{\lambda}[t] - w_{q_{\text{SOM}}\lambda}[t])^2}. \tag{2.31}
 \end{aligned}$$

Neben der euklidischen Distanz sind in (2.31) beliebige andere Distanzmaße möglich. Danach werden die Referenzvektoren $\mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t]$ in Abhängigkeit ihrer Klassenzugehörigkeit $k_{q_{\text{SOM}}}$, der Klassenzugehörigkeit des betrachteten Datums k_d und der Nachbarschaft zu q_{SOMz} , $\mathcal{N}_{q_{\text{SOMz}}}[t]$, angepasst:

$$\mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t+1] = \begin{cases} \mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t] + l[t](\mathbf{d}[t] - \mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t]) \\ \text{für } k_{q_{\text{SOM}}} = k_d \text{ und } q_{\text{SOM}} \in \mathcal{N}_{q_{\text{SOMz}}}[t], \\ \mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t] - l[t](\mathbf{d}[t] - \mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t]) \\ \text{für } k_{q_{\text{SOM}}} \neq k_d \text{ und } q_{\text{SOM}} \in \mathcal{N}_{q_{\text{SOMz}}}[t], \\ \mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t] \quad \text{für } q_{\text{SOM}} \notin \mathcal{N}_{q_{\text{SOMz}}}[t]. \end{cases} \tag{2.32}$$

Es folgt eine Normierung von $\mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t+1]$ vor dem Übergang zum nächsten Trainingsschritt. Dadurch ist es möglich, bei der Anwendung unbekannter Daten auch das Skalarprodukt als Ähnlichkeitsmaß anstelle der euklidischen Distanz in (2.31) einzusetzen (siehe Abschnitt 4.5.2). Mithilfe der in t monoton fallenden Lernrate $0 < l[t] < 1$ wird die Stärke der Annäherung bzw. Abstoßung der Referenzvektoren gesteuert. Da auch

die Größe der Nachbarschaft $\mathcal{N}_{q_{\text{SOMz}}}[t]$ mit t abnimmt, werden im Verlauf des Trainings zunehmend konstante Werte für $\mathbf{w}_{q_{\text{SOM}}}[t]$ erreicht. Die Topologie mit ähnlichen Referenzvektoren eng benachbarter Neuronen wird durch eine große Nachbarschaft zu Beginn des Trainings begünstigt. Beim Training der LVQ-SOM wird im Allgemeinen der Datensatz mehrfach angewendet, weshalb $T > N_{\mathcal{D}}$ gilt.

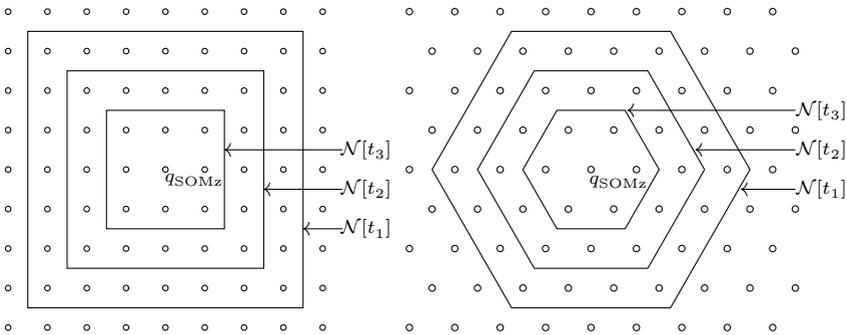
Die Klassifikation neuer Eingangsdaten erfolgt bei der LVQ-SOM durch (2.31). Im Gegensatz zur FDA und SVM treten keine Schwellenwerte auf. Da die Größe der SOM, d. h. die Anzahl an Neuronen, meist höher ist als die Klassenanzahl, wird eine Klasse durch mehr als ein Neuron repräsentiert. Durch diese Redundanz kann ggf. eine richtige Klassifikation auch bei stärkeren Abweichungen zwischen dem zum Training verwendeten Datensatz und neuen Eingangsdaten erreicht werden.

Neben dem gezeigten Ablauf zum Erstellen einer LVQ-SOM existieren zahlreiche Abwandlungen. Es können bspw. anstelle scharfer Grenzen zur Festlegung der Nachbarschaft auch unscharfe Grenzen betrachtet werden, indem eine Gaußfunktion zur Beschreibung der Nachbarschaft verwendet wird. Das Ergebnis des Trainings bei der LVQ-SOM ist im Vergleich zu den anderen vorgestellten Klassifikationsverfahren nicht nur vom Datensatz abhängig. Zwei Beispiele sind die Anzahl an Neuronen einer Klasse, die bestimmt werden muss, sowie eine sinnvoll zu wählende Initialisierung der Referenzvektoren. Das nachfolgende MWV besitzt wie die FDA und SVM keine solcher zusätzlichen Freiheitsgrade.

2.2.5 Mittelwertsverfahren

Das MWV verfolgt genau den Aufbau eines neuronalen Netzes nach Abb. 2.2. Gegenüber den bisher gezeigten Klassifikationsverfahren stellt das MWV einen sehr pragmatischen Ansatz dar, um die Gewichte der Neuronen zu bestimmen. Die Anzahl an Neuronen ist durch K festgelegt. Aufgrund der Einfachheit wird das MWV als Referenzverfahren betrachtet. An den Ergebnissen des MWV kann beurteilt werden, ob ein Mehraufwand z. B. mit der LVQ-SOM vertretbar ist [141].

Für die Schwellenwerte im MWV gilt $w_{0k} = 0$. Die Gewichte \mathbf{w}_k werden durch die normierten Mittelwerte jeder Klasse im bekannten Datensatz



(a) Rechtwinklige Anordnung.

(b) Hexagonale Anordnung.

Abbildung 2.4 Rechtwinklige (a) und hexagonale (b) Gitterstruktur der Ausgangsneuronen mit verschiedenen Nachbarschaften $\mathcal{N}[t]$ um das Gewinnerneuron q_{SOMz} [69].

(vgl. (2.25)) bestimmt:

$$\mathbf{w}_k = \frac{1}{\|\bar{\mathbf{d}}_k\|} \bar{\mathbf{d}}_k. \quad (2.33)$$

Die Klassifikation neuer Eingangsdaten erfolgt durch (2.20). Damit entspricht die Klassenzuweisung der Zuordnung nach dem Mittelwert der Klasse mit größter Ähnlichkeit. Aufgrund der Normierung in (2.33) ist das Ergebnis dieser größten Ähnlichkeit über das Skalarprodukt gleich der kleinsten euklidischen Distanz (Abschnitt 4.5.2).

Die Gewichte des MWV bieten sich insbesondere als eine sinnvolle Initialisierung der Referenzvektoren der LVQ-SOM im Training an.

2.2.6 Beurteilung von Klassifikationsverfahren

Für die Beurteilung von Klassifikatoren können unterschiedliche Bewertungsmaße betrachtet werden. Bei binären Klassifikatoren werden diese überwiegend mithilfe von Verhältnissen von Häufigkeiten angegeben, um somit quantitative Größen vorliegen zu haben. Wird die Zugehörigkeit einer Klasse als positiv und ansonsten als negativ gekennzeichnet, sind dabei bedeutende Häufigkeitswerte die Anzahl an richtig positiv (*RP*), falsch positiv (*FP*), richtig negativ und falsch negativ bestimmten Daten.

Die Bestimmung solcher Bewertungsmaße setzt somit Daten mit der Kenntnis über deren wahren Klassenzugehörigkeiten voraus. Aus den genannten Häufigkeiten lassen sich Maße wie die Konfusionsmatrix, Sensitivität (engl. *recall*), Spezifität oder auch kombinierte Größen wie das F-Maß bestimmen. Für diese Arbeit ist der positive Vorhersagewert (engl. *precision*)

$$\text{Precision} = \frac{RP}{RP + FP} \quad (2.34)$$

das Bewertungsmaß von größter Bedeutung (siehe Abschnitt 4.7.1). Mit diesem kann quantitativ angegeben werden, wie wahrscheinlich es ist, dass die durch den Klassifikator der positiven Klasse zugeordneten Daten tatsächlich dieser Klasse angehören. Falls die Auswirkungen einer falschen Klassifikation in die positive Klasse mit stärkeren Nachteilen verbunden sind als die einer falschen Klassifikation in die negative Klasse, wird ein Klassifikator mit einer hohen Precision bevorzugt. Weitere Bewertungsmaße des Klassifikators können dagegen ggf. von geringerer Bedeutung sein [8, 78].

3 Materialanteilsschätzung basierend auf hyperspektralen Daten

Im Folgenden wird eine Einführung in Hyperspektralbilder gegeben. Darauf wird die spektrale Entmischung als ein übergeordnetes Gebiet der Materialanteilsschätzung vorgestellt. Es folgt über die hier enthaltenen Problemstellungen die Hinführung zur spektralen Entmischung mit optischen Spektralfiltern, worauf die weiteren Inhalte aufbauen.

3.1 Hyperspektralbild

Hyperspektralbilder unterscheiden sich von RGB-Bildern durch ihre spektrale Auflösung. Während bei RGB-Bildern das sichtbare Spektrum in den drei Farbkanälen Rot, Grün und Blau abgetastet wird, erfolgt bei Hyperspektralbildern eine Abtastung in bis zu mehreren hundert schmalbandigen Kanälen (siehe Abbildungen 3.1–3.2). Damit liegt an jedem Pixel ein Spektrum vor. Für die Darstellung dieser hyperspektralen Daten wird häufig ein Datenwürfel verwendet, der als Kanten die beiden räumlichen Dimensionen und die spektrale Dimension besitzt. Die Einträge dieses Würfels können in Form von Intensitätswerten oder Reflektanzwerten, d. h. dem Quotienten aus reflektierter Photonenzahl R_λ und eintreffender Photonenzahl E_λ jedes Wellenlängenkanals λ , vorliegen (siehe Abb. 3.3). Der Reflektanzwert am Pixel (x_1, x_2) für λ bestimmt sich zu

$$y_\lambda = \frac{R_\lambda}{E_\lambda}, \tag{3.1}$$

wobei die Ortsabhängigkeit zur Vereinfachung der Notation unterdrückt wird.

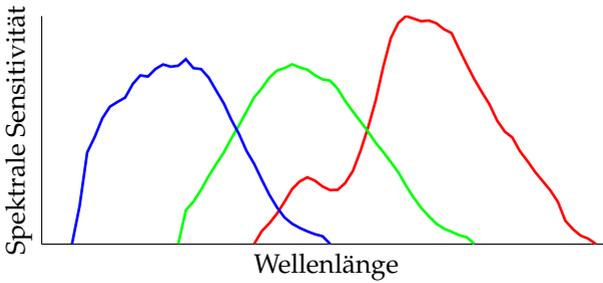


Abbildung 3.1 Typische spektrale Sensitivität des Sensors einer Farbkamera für die Gewinnung der drei Farbwerte Rot, Grün und Blau.

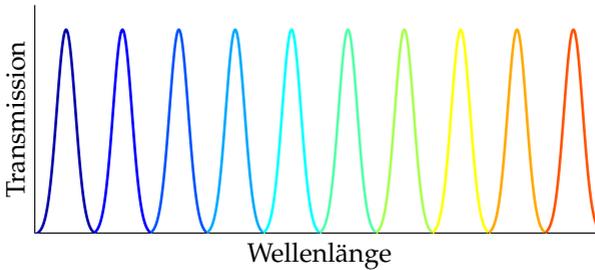


Abbildung 3.2 Schematische Aufteilung des spektralen Bereichs als Verteilung der Transmission zur Gewinnung eines Hyperspektralbilds. Die Anzahl an Maxima entspricht der Anzahl an betrachteten schmalbandigen Bereichen. Häufig auftretende Überlappungen der einzelnen Bereiche sind nicht dargestellt.

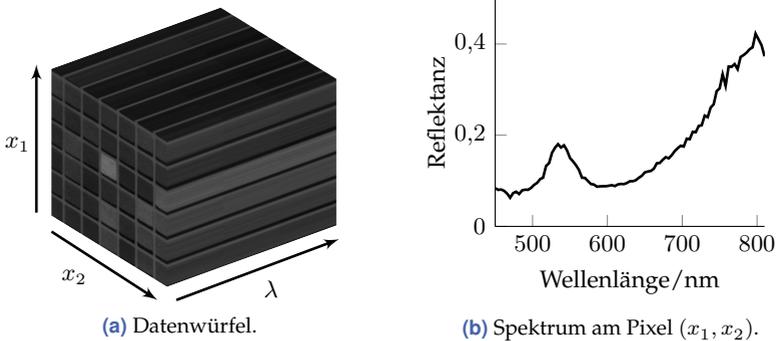


Abbildung 3.3 Darstellung eines Hyperspektralbilds als Datenwürfel in den beiden räumlichen Dimensionen x_1, x_2 sowie der spektralen Dimension λ in (a). Beispiel eines Spektrums an einem Pixel in (b).

Die bildgebende Gewinnung hyperspektraler Daten kann ohne Scannen durch eine sog. Schnappschussaufnahme, räumlich-spektrales Scannen, räumliches Scannen oder spektrales Scannen erfolgen [49]. Die Schnappschussaufnahme ist meist sowohl in ihrer örtlichen als auch spektralen Auflösung sehr gering, weshalb diese nicht weiter behandelt wird. Bei den verbleibenden Verfahren erfolgt sequentiell die Aufnahme einzelner Intensitätsbilder, wobei jede Aufzeichnung zu einem anderen Bereich des hyperspektralen Datenwürfels beiträgt. Beim räumlichen Scannen liefert ein Intensitätsbild die Spektren entlang einer räumlichen Richtung, während die andere festgehalten wird. Das spektrale Scannen wird in dieser Arbeit zur Aufzeichnung von Hyperspektralbildern genutzt (siehe Abschnitt 5.1) und steht dem Ansatz der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern nahe. Dabei wird ein fester Wellenlängenbereich in Λ_{\max} Wellenlängenkanäle nahezu konstanter Breite unterteilt. Mit einem einstellbaren Spektralfilter wird der Reihe nach jeder Bereich mithilfe eines Bandpasses abgefahren. Es wird für jeden Bereich ein Intensitätsbild mit einem sich hinter dem Spektralfilter befindlichen Bildsensor bei einer festgelegten Belichtungszeit aufgezeichnet. Die so erhaltenen Λ_{\max} Intensitätsbilder ergeben übereinander gelegt das Hyperspektralbild der Szene.

Im Gegensatz zur Spektroskopie, bei welcher einzelne Punktspektren betrachten werden, kann durch Hyperspektralbilder eine orts aufgelöste

Untersuchung der aufgezeichneten Szene erfolgen. Prinzipiell ist es hierbei möglich, weiterhin Methoden der Spektroskopie anzuwenden, indem jedes Pixelspektrum losgelöst betrachtet wird. Ebenso können Methoden der Bildverarbeitung für orts aufgelöste Bilder auf alle Pixel eines Wellenlängenkanals angewendet werden. Der gleichzeitige Einbezug aller Dimensionen eines Hyperspektralbilds hat sich in vergangenen Arbeiten [10, 25, 62, 91, 115] als am aussichtsreichsten herausgestellt, um die gesuchte Information zu extrahieren. Dabei war stets die spektrale Entmischung Gegenstand der Untersuchungen.

3.2 Spektrale Entmischung

Erste Anwendungen hyperspektraler Bilder fanden in der Fernerkundung statt. Dabei werden mithilfe von luftgestützten hyperspektralen Kameras Aufnahmen entlang der Erdoberfläche durchgeführt. Ziel ist die Bestimmung der Anteile von Objekten an der Oberfläche, wie z. B. Gebäuden, Gewässern und Pflanzen. Aufgrund der hohen Entfernung des Bildsensors zur Szene ist die örtliche Auflösung meist gering. Ein Pixel entspricht einer Abmessung von einigen Metern. Dadurch treten Pixel auf, an welchen sich mehrere und auch verschiedene Objekte befinden. Spektren dieser Pixel ergeben sich aus der Überlagerung der Spektren der einzelnen Objekte, wobei diese Mischspektren u. a. von den Flächenanteilen der einzelnen Objekte abhängig sind.

Mit der Weiterentwicklung hyperspektraler Aufnahmesysteme wuchs auch deren Anwendungsgebiet. Die hinzugekommenen Einsatzgebiete Medizin, Lebensmitteltechnik und Industrie besitzen maßgebliche Unterschiede zum Einsatz in der Fernerkundung [40]. Bei diesen Anwendungen weisen die Hyperspektralbilder eine sehr viel höhere Ortsauflösung auf. Gleichmaßen ist die räumliche Ausdehnung der hier auftretenden reinen Materialien, die nun die Rolle der Objekte einnehmen, deutlich geringer. Es ergeben sich weiterhin Pixel mit Mischspektren, die aus den Spektren einzelner Materialien zusammengesetzt sind. Mit dem bloßen Auge kann in den meisten Fällen nicht zwischen vermischten und reinen Materialien unterschieden werden.

Die spektrale Entmischung verfolgt die Aufgabe, die Anteile der reinen Materialien an einem jeden Pixel und, je nach Anwendungsfall, auch deren

Spektren zu schätzen. Dafür wird meist nicht nur Gebrauch von den aufgezeichneten Mischspektren gemacht, sondern auch ein mathematischer Zusammenhang für die Beschreibung der Mischspektren angenommen. Die nachfolgenden Mischmodelle geben diesen wieder. Die Materialanteilsschätzung ist somit ein Teilgebiet der spektralen Entmischung und eine Problemstellung der hyperspektralen Bildverarbeitung. Um an die Verwendung von optischen Spektralfiltern für das Lösen dieser Aufgabe heranzuführen (siehe Abschnitt 3.3), werden in den Abschnitten 3.2.3–3.2.4 zwei Teilgebiete der spektralen Entmischung vorgestellt.

3.2.1 Mischmodelle

Es existieren dutzende Mischmodelle, um Mischspektren anhand von Spektren reiner Materialien zu beschreiben. Die Reihenfolge der folgenden Einführung einiger dieser Mischmodelle erfolgt nach zunehmender Komplexität. Es wurde eine Auswahl der meistverbreiteten Mischmodelle getroffen. Alle diese Mischmodelle weisen bereits eine gewisse Distanz von einer nah an den physikalischen Hintergrund angelehnten Beschreibung des Zustandekommens von Mischspektren auf. Ein Einblick in die Vielfalt der Mischmodelle kann trotz der Einschränkung auf nur wenige Mischmodelle gewonnen werden, da Überführungen der Modelle ineinander durch Restriktionen einzelner Parameter teilweise möglich sind.

3.2.1.1 Lineares Mischmodell

Das lineare Mischmodell (LMM) stammt aus der ursprünglichen Anwendung von Hyperspektralbildern in der Fernerkundung. Bei diesem wird das Mischspektrum \mathbf{y} eines Pixels in $\lambda \leq \lambda_{\max}$ Wellenlängenkanälen betrachtet und durch die lineare Überlagerung der Spektren der P reinen Materialien \mathbf{m}_i , gewichtet mit den zugehörigen Materialanteilen a_i , $i = 1, \dots, P$, beschrieben:

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^P \mathbf{m}_i a_i + \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{M} \mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (3.2)$$

Dabei geben $\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_P] \in \mathbb{R}^{\lambda \times P}$ die Reinspektrenmatrix und $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_P]^T$ den Anteilsvektor an. Das Gewicht a_i wird meist als

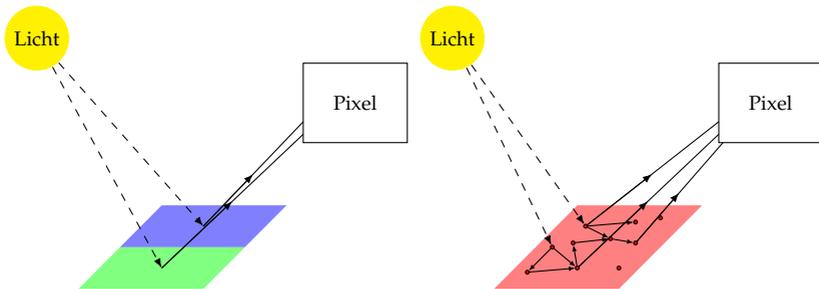
die anteilige Fläche interpretiert, die Material i an dem betrachteten Pixel einnimmt. Folglich werden an a_i die *Sum-to-one* (STO)-Bedingung

$$\sum_{i=1}^P a_i = 1 \tag{3.3}$$

und die *Non-negativity* (NN)-Bedingung

$$a_i \geq 0 \quad \forall i \tag{3.4}$$

für eine physikalische Interpretation gestellt. Dem LMM unterliegen die folgenden Annahmen: Jedes Material kann durch ein einziges Reinspektrum repräsentiert werden [40, 44, 65]. Auf dem Weg eines Photons von der Lichtquelle zum Bildsensor tritt keine Mehrfachreflexion auf; jedes Photon interagiert mit nur einem Material (siehe Abb. 3.4 links). Damit gleichbedeutend ergibt sich das Mischspektrum \mathbf{y} aufgrund einer Materialmischung auf makroskopischer Ebene [98]. Die Annahmen werden z. B. dann erfüllt, falls die räumlichen Ausdehnungen der einzelnen Materialien in der Größenordnung des Vielfaches der aufgezeichneten Wellenlängen sind sowie eine planare Anordnung vorliegt [60].



(a) Makroskopische Mischung.

(b) Mikroskopische Mischung.

Abbildung 3.4 Verschiedene Arten der Überlagerung von Reinspektren: Es werden die Pfade der Photonen von der Lichtquelle über die Materialmischung zu einem Kamerapixel skizziert. In (a) kann das lineare Mischmodell angenommen werden, während in (b) eine nichtlineare Überlagerung der Reinspektren zu erwarten ist [39].

Abweichungen zu der rein linearen Überlagerung der Reinspektren \mathbf{m}_i in (3.2) werden durch $\varepsilon \in \mathbb{R}^A$ berücksichtigt. Falls sämtliche Annahmen

des LMM erfüllt werden, entspricht ε dem Messrauschen, welches unvermeidlich bei bildgebenden Aufnahmen auftritt. Dabei wird das Modell der Bildgewinnung nach dem EMVA-1288-Standard [61] angenommen. Dadurch ist ε die Realisierung einer Λ -dimensionalen Zufallsgröße. Diese ergibt sich aus der Addition unabhängiger Zufallsgrößen mit jeweils unterschiedlichen Wahrscheinlichkeitsdichten. Nach dem zentralen Grenzwertsatz folgen die Einträge in ε der Beschreibung von Zufallsgrößen, welche unkorreliert sowie normalverteilt mit jeweils gleicher Varianz sind (siehe Bemerkung Abschnitt 2.1.1).

3.2.1.2 Nichtlineare Mischmodelle

Um eine Beschreibung von hyperspektralen Daten auch in komplexeren Mischszenarien zu ermöglichen, die nicht durch das LMM abgedeckt werden, wurden nichtlineare Mischmodelle entwickelt. Grundsätzlich lassen sich diese unterscheiden in Mischmodelle, die durch physikalische Zusammenhänge begründet werden, und Mischmodelle, die lediglich allgemeinere mathematische Zusammenhänge als das LMM erlauben. Zu den physikalisch motivierten Mischmodellen zählt bspw. das Hapke-Modell [55], das aus der Strahlungstransporttheorie entstanden ist und insbesondere Effekte der Mehrfachstreuung berücksichtigt (siehe Abb. 3.4 rechts). Allgemeinere mathematische Beschreibungsfähigkeiten werden dagegen mit dem bilinearen Mischmodell (BLMM) [3]

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^P \mathbf{m}_i a_i + \sum_{i=1}^{P-1} \sum_{j=i+1}^P \mathbf{m}_i \odot \mathbf{m}_j b_{ij} + \varepsilon \quad (3.5)$$

und dem linear-quadratischen Mischmodell (LQMM) [80]

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^P \mathbf{m}_i a_i + \sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^P \mathbf{m}_i \odot \mathbf{m}_j b_{ij} + \varepsilon \quad (3.6)$$

erzielt. Werden zusätzlich Einschränkungen an die Parameter b_{ij} in (3.5) getroffen, so ergeben sich weitere Mischmodelle, wie das Nascimento-Modell [83], das Fan-Modell [42] oder das generalisierte-bilineare Mischmodell [54].

Den nichtlinearen Mischmodellen nachteilig ist die im Verhältnis zum LMM geringere Einfachheit. Das Hapke-Modell erfordert eine nichtlineare Transformation, um auf Strahldichten abzubilden. Zudem wird Zusatzwissen über die Aufnahmebedingungen und die zu untersuchende Materialmischung benötigt. Dazu zählen die exakten Positionen der Lichtquelle und des Bildsensors sowie materialspezifische Größen, wie die Dichte und das Volumen. Im angestrebten Anwendungsgebiet dieser Arbeit (siehe Abschnitt 1.2) soll dieses Wissen nicht vorausgesetzt werden. Prinzipiell können die physikalischen Parameter im Hapke-Modell auch zunächst nicht festgelegt werden. Stattdessen werden diese als, neben den Materialanteilen, weitere Unbekannte interpretiert. Ohne einen physikalischen Bezug zu nehmen, sind diese Parameter gleichgestellt mit den unbekanntem Parametern im BLMM und LQMM. Die Materialanteilsschätzung erweitert sich somit um die Bestimmung dieser Größen. Jedoch ist häufig auch bei bestmöglicher Parameterwahl eine exakte Beschreibung des Mischspektrums, d. h. ϵ nimmt kleine Werte an, nicht zwangsläufig gegeben.

Aus diesen Gründen wird in Anlehnung an [5, 40, 41] in dieser Arbeit die spektrale Entmischung in beiden Fällen, sowohl mit als auch ohne Verwendung von optischen Spektralfiltern, nur auf Grundlage des LMM betrachtet. Nichtlinearen Mischeffekten soll stattdessen mit ϵ in (3.2) Genüge getan werden. Auch die nachfolgend eingeführte Spektrenvariabilität wird zunächst ausschließlich auf diese Weise berücksichtigt. Eine genaue Materialanteilsschätzung soll, trotz dieser einfachen Mischmodellannahme, durch die in Kapitel 4 entwickelten Vorgehensweisen für den Entwurf der optischen Spektralfilter ermöglicht werden.

3.2.2 Spektrenvariabilität

Die vorgestellten Mischmodelle enthalten in ihren jeweiligen Ausprägungen für jedes reine Material genau ein Spektrum. Werden jedoch die aufgezeichneten Spektren eines Materials bspw. räumlich, d. h. an mehreren Pixeln, oder auch zu unterschiedlichen Aufnahmezeitpunkten miteinander verglichen, so können oftmals Unterschiede zwischen den Spektren ausgemacht werden [9, 99], die nicht durch unterschiedliche Realisierungen des Messrauschens des bildgebenden Aufnahmeverfahrens erklärbar sind (siehe Abb. 3.5). Diese sich so ergebende Vielfalt an Reinspektren

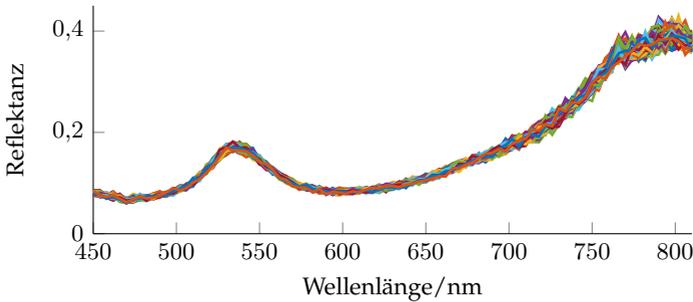


Abbildung 3.5 Spektren des Farbpulvers Chromoxid-Grün aufgezeichnet an 100 Pixeln als Beispiel für die Spektrenvariabilität. Durch die Wahl unterschiedlicher Farben für die einzelnen Spektren werden die unterschiedlichen spektralen Verläufe deutlich.

wird als *Spektrenvariabilität* bezeichnet. Jedem Material wird, neben dem Reinspektrum \mathbf{m}_i , eine Reinspektrenbibliothek

$$\mathcal{M}_i = \{\mathbf{m}_{i1}, \dots, \mathbf{m}_{iM}\} \in \mathbb{R}^{A \times M} \quad (3.7)$$

zugewiesen mit der Größe der Reinspektrenbibliothek M . Beim LMM ist das Reinspektrum \mathbf{m}_i meist durch das Mittelwertsspektrum aus \mathcal{M}_i gegeben [103]:

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \mathbf{m}_{im} . \quad (3.8)$$

Folglich können sich aufgrund der Spektrenvariabilität Abweichungen des Mischspektrums \mathbf{y} zu der linearen Überlagerung der Spektren der reinen Materialien ergeben. Es wird mit \mathbf{m}_i nicht jedem Material das bestmögliche Reinspektrum im Sinne der Beschreibung von \mathbf{y} durch das LMM mit möglichst kleinem ε zugeteilt. Diese Abweichungen sind von den Materialanteilen abhängig. In Abschnitt 5.2.3 werden solche materialanteilsabhängigen Abweichungen beim Modellieren von Datensätzen mit Mischspektren berücksichtigt.

Als Ursachen der Spektrenvariabilität können zum einen inhomogene Materialeigenschaften genannt werden. Beispielsweise kann sich die Oberflächenstruktur örtlich von Pixel zu Pixel unterscheiden. Auch können sich über die Zeit verändernde Umgebungsbedingungen, wie Luftfeuchtigkeit

oder Alterungsprozesse, zu einer Veränderung des Reflektanzverhaltens der Materialien führen. Zum anderen kann die Spektrenvariabilität durch nicht gleichbleibende Aufnahmebedingungen verursacht oder verstärkt werden. Die Beleuchtung ist oftmals weder zeitlich noch räumlich konstant. Es kann sich bspw. der Winkel der Beleuchtung über der Szene ändern. In der Fernerkundung werden zudem Veränderungen in der Atmosphäre als Gründe für eine Spektrenvariabilität aufgezählt [47, 85], welche in dem Anwendungsgebiet dieser Arbeit nicht von Bedeutung sind.

Im Allgemeinen kann die Spektrenvariabilität bei Verwendung des LMM zu ungenau geschätzten Materialanteilen führen [1, 7, 105], unabhängig von dem Vorliegen eines aufgezeichneten Hyperspektralbilds der Mischprobe. Um diesen Effekt zu schmälern, wurden zahlreiche Verfahren entwickelt, die sich in vier Kategorien einteilen lassen. In der ersten wird vorgeschlagen, mehrere LMMs zu betrachten [90]. Für jedes dieser LMMs wird eine andere Reinspektrenmatrix \mathbf{M} gebildet, indem jeweils verschiedene Reinspektren aus den Reinspektrenbibliotheken $\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_P$ ausgewählt werden. Es ergeben sich dadurch auch bei kleinen P schnell zahlreiche Kombinationsmöglichkeiten für die Reinspektren und somit viele verschiedene LMMs. Für ein Mischspektrum werden mit diesen LMMs Materialanteile geschätzt. Um das Einhalten der STO- und NN-Bedingungen zu gewährleisten, werden die Materialanteilsschätzungen weiter verarbeitet, z. B. mit einer Normalisierung. Darauf wird ein Mischspektrum mit der jeweiligen Schätzung und dem entsprechenden LMM berechnet. Das LMM, dessen berechnetes Mischspektrum die geringsten Abweichungen zu \mathbf{y} ergibt, wird schließlich ausgewählt. Da diese Vorgehensweise zahlreiche Anteilsschätzungen für jedes Pixel erfordert, wird sie als rechnerisch äußerst aufwändig eingestuft. Eine weitere Möglichkeit zur Reduktion der ggf. nachteiligen Auswirkung der Spektrenvariabilität auf die Materialanteilsschätzung bietet eine Bandselektion [6, 102] (siehe auch Abschnitt 4.4). Es werden nur die Bänder, d. h. Wellenlängenkanäle, verwendet, die eine geringe Intra-Klassenvariabilität und gleichzeitig eine hohe Inter-Klassenvariabilität besitzen [118]. Die Intra-Klassenvariabilität bezieht sich dabei auf die Reinspektrenbibliothek eines Materials \mathcal{M}_i , während die Inter-Klassenvariabilität sämtliche Reinspektrenbibliotheken berücksichtigt. Meist werden diese Klassenvariabilitäten durch Berech-

nung von Stichprobenvarianzen ausgedrückt. Mit dem Verhältnis dieser Größen kann eine Bewertung der einzelnen Bänder erfolgen. In der dritten Kategorie werden Transformationen in spektraler Richtung [104, 113], wie beispielsweise das Bilden der ersten oder zweiten spektralen Ableitung [35, 117], eingesetzt. Diese sind ebenso wie die spektrale Gewichtung [28, 101] als letzte Kategorie mit verhältnismäßig geringem rechnerischen Aufwand verbunden. Bevor die Materialanteile geschätzt werden, wird bei der spektralen Gewichtung jedes Band unterschiedlich gewichtet. Für die Bestimmung der benötigten Gewichte wird oftmals erneut das Verhältnis zwischen Intra-Klassenvariabilität und Inter-Klassenvariabilität verwendet. Die zuvor genannte Bandselektion kann auch als spektrale Gewichtung interpretiert werden, falls die Gewichtung mit ausschließlich binären Gewichten erfolgt.

Es ist zu erwarten, dass die Spektrenvariabilität für präzise Materialanteilsschätzungen miteinbezogen werden muss. Mithilfe von optischen Spektralfiltern lassen sich unmittelbar Verfahren wie die Bandselektion oder die spektrale Transformation und Gewichtung realisieren (siehe Abschnitt 4). In sämtlichen Anwendungsfällen der oben genannten Verfahren zur Reduktion des Einflusses der Spektrenvariabilität ist eine Beschreibung der Mischspektren durch das LMM mit geringen Abweichungen ϵ möglich. Dies ist nicht ohne Weiteres stets gegeben und trifft insbesondere nicht auf alle betrachteten Mischproben innerhalb dieser Arbeit zu (siehe Abschnitt 5.2). In den Abschnitten 4.4–4.6 werden deshalb neue Ansätze vorgestellt, die die Berücksichtigung der Spektrenvariabilität bei der Schätzung von Materialanteilen mithilfe von optischen Spektralfiltern ebenfalls ermöglichen.

3.2.3 Unüberwachte spektrale Entmischung

Wird ein Vergleich der unüberwachten spektralen Entmischung mit der überwachten spektralen Entmischung und der Materialanteilsschätzung mit optischen Spektralfiltern angestellt, ist festzuhalten, dass die unüberwachte spektrale Entmischung am wenigsten Wissen im Mischmodell voraussetzt. Eine schematische Übersicht dieser drei Ansätze wird in Abb. 3.6 gezeigt. Ziel der unüberwachten spektralen Entmischung ist die gleichzeitige Bestimmung der Reinspektren und der Materialanteile an allen Pixeln [14]. Dazu wird die Aufnahme eines Hyperspektralbilds

$\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y \times A}$ mit der Anzahl an Pixeln in den räumlichen Richtungen N_x, N_y benötigt (siehe Abb. 3.6). Sowohl in der unüberwachten spektralen Entmischung als auch der überwachten spektralen Entmischung ist die Anzahl an Materialien bekannt oder wurde vorab mit einem geeigneten Ansatz bestimmt [85]. Da \mathcal{Y} aufgezeichnet wurde, können vor der spektralen Entmischung datenvorverarbeitende Schritte unter Verwendung der Information aus dem gesamten Datenwürfel durchgeführt werden. Häufig wird ausgenutzt, dass sich die Daten in einem niedriger dimensionalen Raum befinden. Der Rang der Reinspektrenmatrix \mathbf{M} gibt nach dem LMM die Dimension dieses Raums vor. Zudem können Maßnahmen zur Rauschunterdrückung, wie z. B. *Noise-Whitening* [26], und Methoden des *Compressed-Sensings* [34] Anwendung finden, da \mathcal{Y} vorliegt.

Um bei der unüberwachten spektralen Entmischung alle $N = N_x \cdot N_y$ Pixel für die Bestimmung der Reinspektren und Materialanteile zu betrachten, wird das LMM meist zu der Matrixgleichung

$$\mathbf{Y} = \mathbf{M} \mathbf{A} \tag{3.9}$$

erweitert, wobei Abweichungen zu den rein linearen Überlagerungen der Reinspektren nicht gesondert aufgeführt sind. Die hyperspektrale Aufzeichnung \mathcal{Y} wird dazu umsortiert in $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{A \times N}$, sodass sämtliche Mischspektren spaltenweise auftreten. Demnach sind die Materialanteile in $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{P \times N}$ zeilenweise enthalten.

Aus (3.9) folgt, dass die unüberwachte spektrale Entmischung einem Spezialfall der *Blind-Source-Separation* entspricht. Aufgrund der Nichtnegativität sämtlicher zu bestimmender Matrizen bieten sich insbesondere Lösungsansätze der Nichtnegativen-Matrix-Faktorisierung an [30, 73]. Meist wird dazu (3.2) in ein zu minimierendes Gütemaß umgeschrieben, wobei die Entscheidung für eine geeignete Matrixnorm getroffen werden muss. Es ergibt sich ein nicht-konvexes, schlecht gestelltes Optimierungsproblem [45]. Durch Hinzunahme von Zusatzwissen in Form von Regularisierungstermen können oftmals dennoch zufriedenstellende Lösungen für \mathbf{M} und \mathbf{A} erreicht werden. Dazu zählen physikalisch bedingte Einschränkungen an die Materialanteile und Reinspektren sowie Annahmen, wie z. B. dass sich Materialanteile benachbarter Pixel nur wenig unterscheiden.

In dieser Arbeit beschränken sich die Einblicke in die unüberwachte spektrale Entmischung und die nachfolgende überwachte spektrale

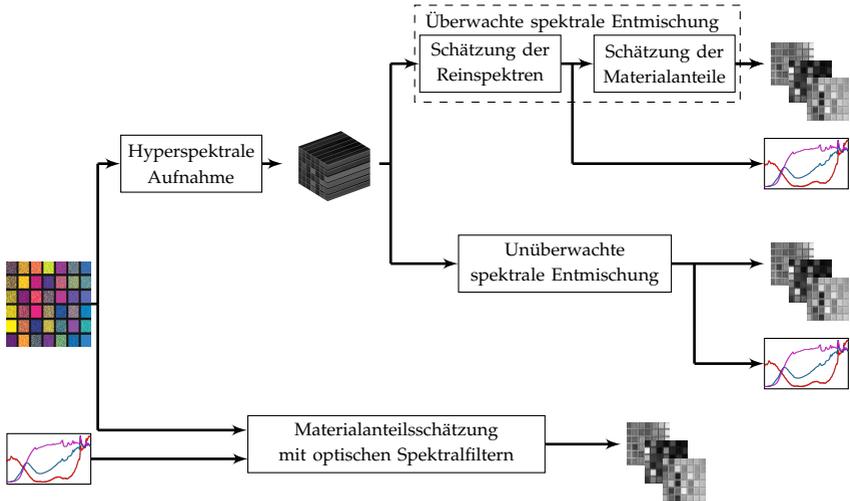


Abbildung 3.6 Vergleich zwischen der überwachten und unüberwachten spektralen Entmischung sowie der spektralen Entmischung mit optischen Spektralfiltern: Während sowohl bei der überwachten als auch unüberwachten spektralen Entmischung eine hyperspektrale Aufnahme für die Schätzung von Materialanteilen benötigt wird, kann auf diese im Ansatz mit optischen Spektralfiltern verzichtet werden.

Entmischung auf oberflächliche Betrachtungen, wobei jeweils nur das LMM enthalten ist. Es existieren zahlreiche weitere Ansätze unter der Verwendung von nichtlinearen Mischmodellen sowie, davon losgelöst, statistischen Verfahren [57].

3.2.4 Überwachte spektrale Entmischung

Im Gegensatz zur unüberwachten spektralen Entmischung wird bei der überwachten spektralen Entmischung keine simultane Bestimmung der Reinspektren und der Materialanteile verfolgt. Stattdessen werden drei mögliche, verschiedene Ausgangsgegebenheiten betrachtet, in denen sich die überwachte spektrale Entmischung befinden kann. In sämtlichen Sze-

narien liegt auch hier eine hyperspektrale Aufnahme vor (siehe Abb. 3.6).

Im ersten Fall sind weder M noch A bekannt. Es wird jedoch zuerst M bestimmt und erst in einem nächsten Schritt A berechnet. Da diese Vorgehensweise ebenso das Lösen nicht-konvexer Optimierungsprobleme erfordert, ist das Ergebnis von der Wahl sinnvoller Initialisierungen abhängig. Um diese Wahl zu vereinfachen, werden bei manchen Verfahren Ergebnisse wiederverwendet, die mithilfe von Methoden der unüberwachten spektralen Entmischung erzielt wurden [51]. Im zweiten Fall sind die Reinspektren und somit M bereits bekannt. Es müssen nur noch die Materialanteile A bestimmt werden. Eine Bibliothek an Reinspektren wird im dritten Fall vorausgesetzt. Dieser Fall wird auch als semi-überwachte spektrale Entmischung bezeichnet. Es werden mithilfe der Bibliothek an Reinspektren nacheinander M und A bestimmt [38, 97].

Das Wissen über M bzw. die Bibliotheken an Reinspektren, das in den beiden letzten Fällen vorausgesetzt wird, ist meist das Ergebnis sog. Reinspektren-Extraktions-Algorithmen. Diese basieren häufig auf geometrischen Betrachtungen: Aufgrund der Beschreibung durch das LMM sowie den STO- und NN-Bedingungen liegt \mathcal{Y} in einem $(A - 1)$ dimensional Simplex [32]. Falls Pixel nur ein Material abdecken, bilden die Spektren dieser Pixel die Ecken des Simplex und können so als Reinspektren extrahiert werden. Ohne diese Pixel erweist sich die Bestimmung der Reinspektren als deutlich herausfordernder. Tiefer greifende Methoden sind z. B. in [14, 15, 85] zu finden.

3.3 Materialanteilsschätzung mit optischen Spektralfiltern

Bei der spektralen Entmischung mit optischen Spektralfiltern wird kein Hyperspektralbild aufgezeichnet und verarbeitet (siehe Abb. 3.6). Im Bezug auf die unüberwachte spektrale Entmischung und die überwachte spektrale Entmischung können Ähnlichkeiten insofern ausgemacht werden, dass auch bei der Verwendung von optischen Spektralfiltern das LMM angenommen wird. Es wird weiter vorausgesetzt, dass eine Reinspektrenmatrix M bekannt ist. Zusätzlich sollen Reinspektrenbibliotheken \mathcal{M}_i vorliegen, wie in Abschnitt 3.2.2 eingeführt. Dadurch zeigen sich weite-

re Gemeinsamkeiten zur überwachten spektralen Entmischung. Bei dieser sind jedoch die Reinspektrenbibliotheken meist nicht bereits nach den einzelnen Materialien aufgeteilt, sondern es liegt eine einzige Bibliothek an Reinspektren für sämtliche Materialien vor. Die Reinspektrenbibliotheken M_i sollen bei der Materialanteilsschätzung mit optischen Spektralfiltern durch abgelegte, vergangene hyperspektrale Aufzeichnungen über Pixel mit nur einem Material verfügbar sein.

In beiden Varianten der spektralen Entmischung treten häufig Vorverarbeitungsschritte, wie eine Dimensionsreduktion, auf. Dadurch lässt sich zum einen der Nutzsignalanteil erhöhen. Zum anderen können auf diese Weise die Rechenkosten, welche beim Lösen der jeweiligen Optimierungsprobleme zur Bestimmung der Matrizen M und A entstehen, reduziert werden. Auf die Materialanteilsschätzung mit optischen Spektralfiltern sind solche Schritte zur Signalaufbereitung nicht unmittelbar übertragbar, da auf die Aufzeichnung eines hyperspektralen Datenwürfels verzichtet wird und somit dieser nicht bereit liegt. Es sind jedoch durch den Einsatz von optischen Spektralfiltern Maßnahmen zur Reduktion des Rechenaufwands nicht notwendig. Die Rechenkosten und auch die Menge an aufzuzeichnenden Daten sind bereits erheblich reduziert (siehe Abschnitt 4.1).

Ziel der spektralen Entmischung mit optischen Spektralfiltern ist die Aufzeichnung von nur wenigen Intensitätsbildern, die die gesuchten Materialanteilsschätzungen bereits enthalten oder eine Bestimmung der Materialanteile mit wenig zusätzlichem Aufwand zulassen. Dadurch orientiert sich der rechnerische Aufwand im Wesentlichen an der Anzahl an benötigten Aufzeichnungen. Der Aufwand bezüglich der Rechenkosten als auch des Speicherplatzbedarfs bei der jeweiligen spektralen Entmischung unter Verwendung von \mathcal{Y} bemisst sich dagegen stets, neben der Pixelanzahl, auch an der Anzahl an betrachteten Wellenlängenkanälen. Diese Invarianz gegenüber der spektralen Dimension bei der Anwendung von optischen Spektralfiltern ist bei Ansätzen der optischen Regression [87] zu beobachten, wobei hier lediglich Punktspektren betrachtet werden und somit keine orts aufgelösten Ergebnisse vorliegen.

Im nachfolgenden Abschnitt wird der Entwurf von optischen Spektralfiltern behandelt, was die zentrale Herausforderung bei der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern beschreibt. Es können

dabei unterschiedlichste Strategien verfolgt werden. Im Gegensatz zu vergleichbaren Ansätzen des *multivariate optical Computing* [84, 100] muss in dieser Arbeit mit einem stark eingeschränkten Vorwissen umgegangen werden. Der tatsächliche mathematische Zusammenhang zwischen den Mischspektren, Reinspektren und Materialanteilen ist im Vergleich zu [84, 100] nur in grober Näherung bekannt bzw. an die Annahme des LMM mit ungewisser Höhe an Abweichungen gekoppelt.

4 Entwurf optischer Spektralfilter für die Materialanteilsschätzung

Für die Berechnung von optischen Spektralfiltern muss zunächst die Bedeutung ihrer Anwendung aus mathematischer Sicht geklärt werden. Anschließend wird diskutiert, wie optische Spektralfilter zur Materialanteilsschätzung eingesetzt werden können. Die darauffolgenden Herausforderungen an den Entwurf von optischen Spektralfiltern für genaue Materialanteilsschätzungen und die eingeschränkte Möglichkeit, bestehende Verfahren dafür einzusetzen, geben Anlass zur Entwicklung neuer Methoden.

4.1 Analytische Formulierung des Spektralfilterentwurfs

Die Aufzeichnung eines Intensitätswerts $c_f \in \mathbb{R}$ bei Verwendung eines optischen Spektralfilters, das durch die Filterfunktion $f(\lambda)$ angegeben ist, am Pixel (x_1, x_2) einer Materialmischung mit der Reflektanzfunktion $y(x_1, x_2, \lambda)$ wird mathematisch beschrieben durch das Innenprodukt über die Wellenlänge λ :

$$c_f = \langle f, y \rangle_\lambda . \quad (4.1)$$

Das optische Spektralfilter nach (4.1) entspricht schematisch Abb. 4.1.

In dieser Arbeit erfolgt die Anwendung der optischen Spektralfilter stets simulativ, d. h. es wird anstelle von $y(x_1, x_2, \lambda)$ mit aufgezeichneten Mischspektren $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^A$ die optische Spektralfilterung rechnergestützt durchgeführt. Folglich wird statt $f(\lambda)$ ein diskretes Spektralfilter $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^A$

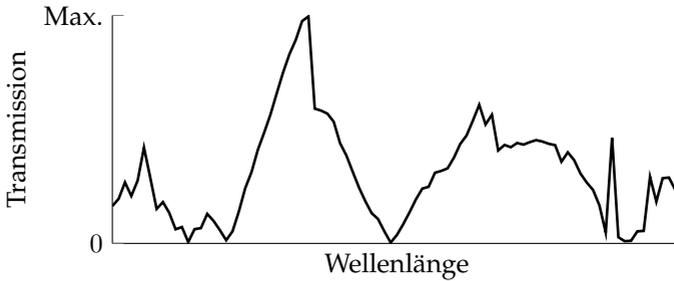


Abbildung 4.1 Beispiel für die Transmission eines optischen Spektralfilters ohne Diskretisierung des Spektrums.

verwendet. Dies impliziert eine Diskretisierung des Spektrums, was in (4.1) nicht auftritt. Die Wellenlänge λ geht über in einen spektralen Kanal mit dem gleich benannten Wellenlängenkanalindex. In Abb. 4.2 ist die Wirkung des simulativ angewendeten diskreten Spektralfilters in Relation zur herkömmlichen spektralen Abtastung nach Abb. 3.2 zu sehen. Es besteht dadurch ggf. ein weiterer Vorteil bei der Verwendung von optischen Spektralfiltern, indem keine Abtastung des spektralen Bereichs zum Informationsgewinn notwendig ist. Jedoch können aufgrund fehlender Hardware zur Umsetzung die Folgen davon in dieser Arbeit nicht berücksichtigt werden.

Für die simulative Anwendung des optischen Spektralfilters f soll die Beziehung

$$c_f = \mathbf{f}^T \mathbf{y} \tag{4.2}$$

gelten. Angewendet auf ein Hyperspektralbild \mathcal{Y} liefert (4.2) die Aufzeichnung eines Intensitätsbilds $C_f \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y}$. Dabei wird angenommen, dass es möglich ist, für jedes Pixel ein anderes optisches Spektralfilter innerhalb einer Aufzeichnung auszuwählen. Demnach resultiert C_f durch eine ortsabhängige optische Spektralfilterung. Für die Auswertung von C_f können sinnvoll gewählte Makropixel betrachtet werden, was der Farbaufnahme mit einem Bayer-Filter gleicht [11]. Einher geht diesem Umstand ein Verlust an örtlicher Auflösung. Verfahren wie bspw. die iterative Materialanteilsschätzung (siehe Abschnitt 4.6) können dadurch andererseits mit deutlich weniger Aufzeichnungen auskommen.

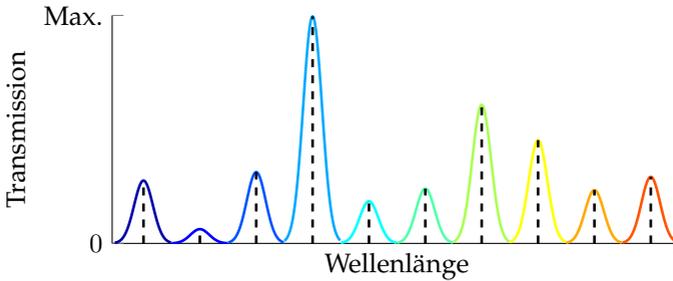


Abbildung 4.2 Mögliche Transmission eines optischen Spektralfilters nach Diskretisierung des Spektrums in 10 Werte. Die Höhe der zur Diskretisierung verwendeten Bandpässe wird nach der Transmission des optischen Spektralfilters im kontinuierlichen Fall an der jeweiligen Stelle gewichtet. Die Wellenlängen maximaler Transmission der Bandpässe sind gestrichelt gezeigt.

Im Vergleich zu Verfahren, die auf der Verarbeitung eines aufgezeichneten und abgespeicherten Hyperspektralbilds basieren, können merkliche Unterschiede zu Methoden, die einen Zusammenhang mit \mathcal{Y} gegeben durch (4.2) verwenden, hinsichtlich beanspruchter Speicherplatz- und Rechenressourcen beobachtet werden. Es wird ein Speicher mit der Größe der Anzahl an Intensitätsbildern C_f , die zeitgleich vorliegen müssen, benötigt. Somit ist der Speicherbedarf geringer gegenüber dem eines aufgezeichneten \mathcal{Y} , solange die Anzahl an C_f geringer als die Anzahl an Wellenlängenkanälen von \mathcal{Y} bleibt. Bei einer Umsetzung in einer geeigneten Hardware werden C_f aufgezeichnet und nicht berechnet, wie es in der simulativen Anwendung der Fall ist. Dadurch entfallen $N_x \cdot N_y \cdot \Lambda \cdot (\Lambda - 1)$ Rechenoperationen. An den Abhängigkeiten der benötigten Ressourcen wird ersichtlich, dass der Einsatz von optischen Spektralfiltern besonders bei sowohl räumlich als auch spektral hochaufgelösten \mathcal{Y} vorteilhaft ist. Es besteht gerade ein Trend zu Hyperspektralbildern mit zunehmender Größe [66], was die Methode der Materialanteilsschätzung mit optischen Spektralfiltern weiter bekräftigt. Auch ist dadurch die geminderte Ortsauflösung, aufgrund der oben genannten Anwendung von örtlich unterschiedlichen Spektralfiltern innerhalb einer Aufzeichnung, zunehmend vernachlässigbar.

Zwar ist eine Hardware für die Realisierung von optischen Spektral-

filtern zum Zeitpunkt der Anfertigung dieser Arbeit nicht existent, Realisierungen mit Ähnlichkeiten zu dem Einsatz von \mathbf{f} , wie er in dieser Arbeit angenommen wird, sind jedoch vereinzelt aufzufinden [58, 77, 107]. Dies kann die Entwicklung einer Hardware für die Umsetzung der hier simulativ entworfenen und angewendeten optischen Spektralfilter ermutigen. Mit dem Versuchsaufbau, der zur Gewinnung von hyperspektralen Daten über Mischproben verwendet wird, kann eine Realisierung der optischen Spektralfilterung lediglich in erster Näherung stattfinden (siehe Abschnitt 5.1).

Da sich der Entwurf von Methoden für die Bestimmung optischer Spektralfilter zur Materialanteilsschätzung auf den analytischen Zusammenhang (4.2) beschränkt, besteht die Aufgabe darin, geeignete \mathbf{f} zu bestimmen. Auf mögliche Einschränkungen bei der Umsetzung von \mathbf{f} in einer Hardware oder bspw. damit verbundene, weitere Unsicherheiten bei der Aufzeichnung von c_f , wird nicht eingegangen. Dies kann nur bei vorliegenden Kenntnissen über erste Hardwareaufbauten auf eine sinnvolle Weise erfolgen.

4.1.1 Optische Spektralfilterung zur Materialanteilsschätzung

Nachdem die Bedeutung der in dieser Arbeit verwendeten simulativen Anwendung von optischen Spektralfiltern aus analytischer Sicht bekannt ist, kann diese für die Materialanteilsschätzung untersucht werden. Für die Schätzung des Materialanteils a_i des i -ten Materials einer Mischprobe \mathbf{y} folgt aus Abschnitt 4.1, dass ein geeignet bestimmtes optisches Spektralfilter \mathbf{f} gesucht wird, das

$$a_i = c_f = \mathbf{f}^T \mathbf{y} = \mathbf{f}^T \phi(\mathbf{M}, \mathbf{a}, \varepsilon) \quad (4.3)$$

erfüllt. In (4.3) beschreibt $\phi(\cdot) : \mathbb{R}^{\Lambda \cdot P + P + \Lambda} \rightarrow \mathbb{R}^{\Lambda}$ den im Allgemeinen unbekanntenen funktionalen Zusammenhang zwischen \mathbf{M} , \mathbf{a} , ε und \mathbf{y} . Bei Annahme des LMM gilt

$$\phi := \mathbf{M} \mathbf{a} + \varepsilon. \quad (4.4)$$

Hierbei ist bspw. die Spektrenvariabilität bereits nicht mehr explizit berücksichtigt, da \mathbf{M} nach (3.8) berechnet wird. Es sind den Materialien

möglicherweise nicht die bestmöglichen Reinspektren, im Sinne von geringen Abweichungen ε zur Beschreibung von \mathbf{y} bei Verwendung von \mathbf{a} , zugeordnet.

Der Least-Squares-Schätzer (2.8) beschreibt einen naheliegenden Ansatz, um geeignete \mathbf{f} zu bestimmen, sodass (4.3) erfüllt wird (siehe Abschnitt 2.1.3). Aus (4.4) folgt mit der Pseudoinversen von \mathbf{M} , $\mathbf{M}^\dagger = [\mathbf{m}_1^\dagger, \dots, \mathbf{m}_P^\dagger]^\top \in \mathbb{R}^{P \times \Lambda}$,

$$\mathbf{f}^\top = \left(\mathbf{m}_i^\dagger \right)^\top \quad (4.5)$$

und somit

$$\hat{a}_{LSi} = \left(\mathbf{m}_i^\dagger \right)^\top \mathbf{y} \quad (4.6)$$

für die Schätzung von a_i mit den kleinsten quadratischen Abweichungen.

Die Genauigkeit der Schätzung \hat{a}_{LSi} ist von ε abhängig. Es wird eine erwartungstreue Materialanteilsschätzung mit (4.6) erreicht, falls es sich bei ε um die Realisierung von mittelwertfreiem weißen Rauschen handelt. Nach den Abschnitten 3.2.1–3.2.2 ist dies in vielen Fällen nicht gegeben. Gerade gegenüber vereinzelt betragsmäßig großen Werten in ε zeigt sich der Least-Squares-Schätzer nicht robust [119]. Weiter können neben einer ungenauen Schätzung sich auch als relative Materialanteile physikalisch nicht interpretierbare \hat{a}_{LSi} ergeben. Die (STO)-Bedingung (3.3) kann nicht erfüllt werden oder bei negativen Schätzungen wird die (NN)-Bedingung (3.4) verletzt.

Es werden folglich geeignetere Ansätze als der Least-Squares-Schätzer mit \mathbf{M}^\dagger für die Bestimmung der optischen Spektralfilter benötigt. Im Nachfolgenden werden Anforderungen und Schwierigkeiten aufgeführt, die bei der Suche von weiteren Verfahren berücksichtigt werden sollten. Ein schlecht konditioniertes \mathbf{M} wird als Ursache für ungenaue Materialanteilsschätzungen durch den Least-Squares-Schätzer ausgeschlossen.

4.1.2 Herausforderungen an den Entwurf optischer Spektralfilter

Das übergeordnete Ziel des optischen Spektralfilterentwurfs ist eine möglichst genaue Materialanteilsschätzung. Die dabei zu berücksichtigenden

Forderungen und gegebenen Einschränkungen leiten sich aus der Problemstellung und der hier betrachteten analytischen Bedeutung der optischen Spektralfilterung ab (siehe Abschnitte 1.2, 4.1). An dieser Stelle werden diese Ansprüche in Zusammenhang mit Abschnitt 4.1.1 gestellt, einschränkende Annahmen dieser Arbeit getroffen und nach Möglichkeit Bewertungsmaße zur Beurteilung der Erfüllung der jeweiligen Ziele eingeführt.

Um die Genauigkeit der Materialanteilsschätzungen zu bewerten, wird der Effektivwert des Fehlers verwendet:

$$E_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{1}{P} \sum_{i=1}^P (\hat{a}_i - a_i)^2}. \quad (4.7)$$

Dabei bezeichnet \hat{a}_i den Schätzwert des i -ten Materials, der sich durch den mit einem beliebigen Verfahren ermittelten, angewendeten optischen Spektralfilter ergibt.

Das eingeschränkte Wissen bezieht sich zum einem auf die nicht vorliegende hyperspektrale Aufnahme der Materialmischung und zum anderen auf das unbekannte Mischverhalten der einzelnen Materialien. Beides lässt eine genaue Beschreibung der Mischspektren durch ein passend gewähltes Mischmodell unmöglich erscheinen. Zudem gibt es unsichere Umgebungsbedingungen durch eine unbekannte Beleuchtung. Diese werden auf eine sich örtlich ändernde Helligkeit der Beleuchtung eingeschränkt. Für die betrachteten Reflektanzwerte (3.1) bedeutet dies bspw. bei einzelnen Mischspektren:

$$\tilde{\mathbf{y}} = c \mathbf{y}, \quad (4.8)$$

wobei $c \in \mathbb{R}$, $c > 0$ einen unbekanntem Vorfaktor beschreibt. Es sind die Reinspektren nach (3.8) und Reinspektrenbibliotheken (3.7) der einzelnen Materialien in Form von Reflektanzmessungen sowie die maximale Anzahl an Materialien, die in der Mischprobe auftreten kann, bekannt. Mit den STO- und NN-Bedingungen der Materialanteile liegt weiteres Wissen vor. Aufgrund dieser Vorgaben wird stets das LMM als mathematischer Zusammenhang zwischen Mischspektrum und den Materialanteilen angenommen. Folglich ist die Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern ein Parameterschätzproblem mit den Beobachtungen (4.1) [12].

Für die Bewertung des Einbezugs der Spektrenvariabilität sowie der STO- und NN-Bedingungen bei einem Verfahren zum Entwurf optischer Spektralfilter mit dem Ziel der Materialanteilsschätzung kann eine binäre Angabe erfolgen. Das Einhalten der STO- und NN-Bedingungen der sich ergebenden Materialanteilsschätzungen lässt sich weiter mithilfe von

$$\Delta_{\text{STO}} = \left| 1 - \sum_{i=1}^P \hat{a}_i \right| \quad (4.9)$$

und

$$\Delta_{\text{NN}} = \sum_{i=1}^P \hat{a}_i^* \quad \text{mit} \quad \hat{a}_i^* = \begin{cases} |\hat{a}_i| & \text{falls } \hat{a}_i < 0, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.10)$$

beurteilen.

Die geforderte Ressourceneffizienz erlaubt keine Anwendung statistischer Verfahren zur Behandlung der Problemstellung der Materialanteilsschätzung, da allgemein mit nur wenigen Aufzeichnungen ausgekommen werden soll. Dadurch wird weniger Speicherplatz als für ein Hyperspektralbild benötigt. Der Rechenaufwand bemisst sich nach der Anzahl an auszuwertenden mathematischen Operationen während der Materialanteilsschätzung, d. h. bereits im Vorhinein durchführbare Rechnungen werden nicht dazu gezählt. Da sämtliche Verfahren diesbezüglich nur wenig Rechenaufwand erfordern und auch der Speicherbedarf als unwesentlich angesehen werden darf, werden keine gesonderten Bewertungen aufgeführt. Anders muss die Anzahl an Spektralfilterungen innerhalb eines Auswerteschritts im jeweiligen Verfahren betrachtet werden. Entweder erhöht diese die Anzahl an Aufnahmen oder reduziert die maximal mögliche örtliche Auflösung des Schätzergebnisses. Um eine sinnvolle Beurteilung hierfür durchzuführen, soll diese möglichst unabhängig von einer späteren Hardwarerealisierung sein. Es wird die Anzahl an benötigten optischen Spektralfilterungen in Relation zu sämtlichen Verfahren, die untersucht werden, angegeben.

Das Ziel, die Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfilterungen für einen breiten Anwenderkreis zu ermöglichen, wird bei der Auswahl und Entwicklung von Verfahren berücksichtigt, indem ein Augenmerk auf auftretende, frei zu wählende Parameter gelegt wird. Es

sollen möglichst wenige Parameter enthalten sein. Zudem soll die Parameterwahl nur wenig Einfluss auf die Materialanteilsschätzung nehmen. Letzteres kann stark von den untersuchten Mischproben abhängig sein und kann nur nach Auswertung zahlreicher Anwendungsfälle fundiert bewertet werden. Deshalb wird der Einfluss der Parameterwahl nicht unter den Verfahren ausgewertet. Die Anzahl an zu wählenden Parametern kann dagegen ohne Weiteres beurteilt werden, wobei erneut eine relative Bewertung am sinnvollsten erscheint. Absolute Angaben sind hier nur schwer sinnvoll einzuordnen.

4.2 Zur optischen spektralen Filterung verwandte Verfahren

Mit dem vorherigen Abschnitt sind zum einen Anforderungen und zum anderen Bewertungsgrößen für die Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern vorgestellt worden. Zunächst ist unklar, ob bestehende Methoden bereits für den optischen Spektralfilterentwurf in Gegenwart dieser Zielsetzungen geeignet sind. Dazu muss vorrangig der Zusammenhang (4.2) gegeben sein. Weiter soll das eingeschränkte Wissen ausreichend sein, um die optischen Spektralfilter zu bestimmen. Es werden nachfolgend der Gauß-Markov-Schätzer (siehe Abschnitt 2.1.3) und der sog. *Mixture-Tuned Matched-Filter-Ansatz* [17] in Kürze untersucht, da bei diesen auf den ersten Blick eine Anwendung für die Problemstellung dieser Arbeit naheliegt.

4.2.1 Gauß-Markov-Schätzer

Nach (2.9) gewährt der Gauß-Markov-Schätzer den geforderten Zusammenhang (4.2), indem zeilenweise die Koeffizienten der optischen Spektralfilter der mit y im Produkt stehenden Matrix entnommen werden (siehe Abschnitt 2.1.3). Als Teil der Bayes'schen Statistik werden die zu schätzenden Materialanteile beim Gauß-Markov-Schätzer als stochastisch angesehen.

Für die Berechnung der optischen Spektralfilter mithilfe des Gauß-Markov-Schätzers wird, neben den Reinspektren M , auch die Inverse

der Autovarianzmatrix, $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}^{-1}$, benötigt. Die Bestimmung von $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$ ist mit dem bei der Materialanteilsschätzung vorhandenen Wissen nicht möglich. Ein Ausweg kann mit der Annahme von mittelwertfreien weißen Rauschen bei ε gefunden werden, wobei die Gültigkeit dieser ungewiss ist. Dadurch muss für die Bestimmung von $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$ anstelle von $\frac{\Lambda(\Lambda+1)}{2}$ Parametern lediglich ein weiterer Parameter $\sigma_\varepsilon^2 \in \mathbb{R}$ als Einträge der Diagonalen von $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$ gesucht werden. Die Materialanteilsschätzung mithilfe des Gauß-Markov-Schätzers ergibt sich zu

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{GMW}} = \left(\mathbf{M}^T \mathbf{M} + \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{R}_{aa}^{-1} \right)^{-1} \mathbf{M}^T \mathbf{y}. \quad (4.11)$$

Es bietet sich an, die Dirichlet-Verteilung (siehe Abschnitt 2.1.2) für \mathbf{a} anzunehmen. Dadurch können die STO- und NN-Bedingungen für die Materialeinteile bei der Schätzung berücksichtigt werden. Der Erwartungswert von \mathbf{a} , $\mathbb{E}\{\mathbf{a}\}$, ist ungleich null. Anstelle von (4.11) gilt [64]:

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{GMW}} = \left(\mathbf{M}^T \mathbf{M} + \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{C}_{aa}^{-1} \right)^{-1} \mathbf{M}^T (\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbb{E}\{\mathbf{a}\}) + \mathbb{E}\{\mathbf{a}\}. \quad (4.12)$$

Da die Materialanteile a_i sämtlich unbekannt sind, wird mit $\alpha = 1$ eine symmetrische Dirichlet-Verteilung angenommen (siehe Abschnitt 2.1.2). In (4.12) muss die Inverse der Autokovarianzmatrix, \mathbf{C}_{aa}^{-1} , berechnet werden. Die Autokovarianzmatrix einer durch eine symmetrische Dirichlet-Verteilung beschriebenen Zufallsgröße ist singulär. Somit existiert \mathbf{C}_{aa}^{-1} nicht.

Daraus resultiert, dass der Gauß-Markov-Schätzer (4.11) mit dem verfügbaren Wissen nicht nur aufgrund von unbekanntem $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$ bzw. $\sigma_\varepsilon^2 \in \mathbb{R}$ mit der Problemstellung unvereinbar ist. Auch die mangelnde Vorkenntnis über eine mögliche Materialanteilsverteilung macht seine Anwendung unmöglich.

4.2.2 Mixture-Tuned Matched-Filter-Ansatz

Beim *Mixture-Tuned Matched-Filter*-Ansatz wird nachfolgend leicht ersichtlich sein, dass dieser genauso wie der Gauß-Markov-Schätzer nicht im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt werden kann. Dennoch wird dieses Verfahren kurz erläutert. Zum einen können hier Einschränkungen der Anwendung von optischen Spektralfiltern verdeutlicht werden. Zum anderen ist ein

Ansatz aufzufinden, der in vielen der in den verbleibenden Abschnitten vorgestellten Verfahren enthalten ist.

Zunächst von Interesse ist der *Mixture-Tuned Matched-Filter*-Ansatz, da dieser von einem nicht weißen Rauschen mit ε ausgeht. Dazu werden durch sog. *Noise-Whitening*, oder weiterführend, eine *Minimum-Noise-Fraction*-Transformation die hyperspektralen Daten vor der Materialanteilsschätzung verarbeitet [50]. Diese Maßnahme kann beschrieben werden durch

$$\mathbf{y}_{\text{MNF}} = \mathbf{T}_{\text{MNF}}^{\text{T}} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_{\mu}). \quad (4.13)$$

Dabei bezeichnen $\mathbf{y}_{\mu} \in \mathbb{R}^A$ das Mittelwertsspektrum aller Mischspektren einer Mischprobe und $\mathbf{T}_{\text{MNF}} \in \mathbb{R}^{A \times A}$ die Transformationsmatrix für das *Noise-Whitening*. Als Folge beträgt das Mittelwertsspektrum aller \mathbf{y}_{MNF} null. Die transformierten Wellenlängenkanäle dieser Spektren sind unkorreliert. Die gleiche Maßnahme erfahren auch die Reinspektren, wodurch für \mathbf{m}_i folgt:

$$\mathbf{m}_{\text{MNF}i} = \mathbf{T}_{\text{MNF}}^{\text{T}} (\mathbf{m}_i - \mathbf{y}_{\mu}). \quad (4.14)$$

Die Materialanteilsschätzung des i -ten Materials erfolgt nach

$$\hat{a}_{\text{MNF}i} = \frac{\mathbf{m}_{\text{MNF}i}^{\text{T}} \mathbf{C}_{\text{MNF}}^{-1\text{T}}}{\underbrace{\mathbf{m}_{\text{MNF}i}^{\text{T}} \mathbf{C}_{\text{MNF}}^{-1} \mathbf{m}_{\text{MNF}i}}_{\mathbf{f}_{\text{MNF}i}}} \mathbf{y}_{\text{MNF}} \quad (4.15)$$

mit der Autokovarianzmatrix $\mathbf{C}_{\text{MNF}} \in \mathbb{R}^{A \times A}$ über alle Spektren der Mischprobe. Folglich ist $\mathbf{f}_{\text{MNF}i} \in \mathbb{R}^A$ das anzuwendende optische Spektralfilter. Die Schätzung (4.15) entspricht einem *Matched-Filter* [11].

Der *Mixture-Tuned Matched-Filter*-Ansatz erfordert mehr Information, als durch das eingeschränkte Wissen bereitgestellt wird. Für die Berechnung von \mathbf{y}_{μ} und auch für die weiteren Größen \mathbf{T}_{MNF} , \mathbf{C}_{MNF} , wird ein Hyperspektralbild der Mischprobe benötigt. Mithilfe von weiteren optischen Spektralfiltern lassen sich diese nicht bestimmen, da Berechnungen entlang der räumlichen Dimensionen notwendig sind. Darüber hinaus werden nur genaue Materialanteilsschätzungen mithilfe des *Mixture-Tuned Matched-Filter*-Ansatzes erreicht, falls die Mischspektren sich mit einer rein linearen Überlagerung der Reinspektren genau angeben lassen.

Das optische Spektralfilter $\mathbf{f}_{\text{MNF}_i}$ in (4.15) setzt sich aus mehreren Matrizen zusammen, die den einzelnen Transformations- bzw. Vorverarbeitungsschritten der Spektren innerhalb des *Mixture-Tuned Matched-Filter*-Ansatzes entsprechen. Die Verknüpfung einzelner solcher Schritte in ein einziges optisches Spektralfilter, und somit einer Aufzeichnung, wird in dieser Arbeit beim Entwurf neuer Methoden zur Berechnung von optischen Spektralfiltern beibehalten. Das Prinzip einer Vorverarbeitung der Mischspektren vor der Materialanteilsschätzung wird insbesondere in der Anwendung der diskreten Kosinustransformation im folgenden Abschnitt weiter verfolgt.

4.3 Vorverarbeitung mithilfe der diskreten Kosinustransformation

Durch die Berechnung der DCT über Matrizen (2.16) bzw. (2.17) ist es möglich, diese auch bei der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern einzusetzen. Angewendet auf ein Mischspektrum und bei Annahme des LMM folgt:

$$\underbrace{\mathbf{T}_{\text{DCT}} \mathbf{y}}_{\mathbf{y}_{\text{DCT}}} = \underbrace{\mathbf{T}_{\text{DCT}} \mathbf{M}}_{\mathbf{M}_{\text{DCT}}} \mathbf{a} + \underbrace{\mathbf{T}_{\text{DCT}} \boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{DCT}}} \quad (4.16)$$

mit $\mathbf{y}_{\text{DCT}} = [y_{\text{DCT}1}, \dots, y_{\text{DCT}\Lambda}]^T$, \mathbf{M}_{DCT} und $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{DCT}}$ den jeweils transformierten Größen. Zeilenweise enthalten diese die spektralen Frequenzkoeffizienten in aufsteigender Reihenfolge der diskreten Frequenz, wobei bspw. $y_{\text{DCT}1}$ nach (2.15) den mit $\sqrt{\Lambda}$ normierten spektralen Mittelwert von \mathbf{y} bezeichnet.

Wird (4.16) für die Materialanteilsschätzung über die Pseudoinverse (4.5)–(4.6) verwendet, bleibt das Ergebnis unverändert, da mit der DCT eine orthogonale Transformation vorliegt. Es können jedoch mit der Multiplikation weiterer Matrizen einzelne spektrale Frequenzkoeffizienten unterschiedlich gewichtet oder entfernt werden. Für das Entfernen des Anteils der spektralen Frequenz mit dem Index λ wird eine modifizierte Einheitsmatrix $\mathbf{I}_\lambda \in \mathbb{R}^{\Lambda \times \Lambda}$ verwendet, die identisch mit der Einheitsmatrix

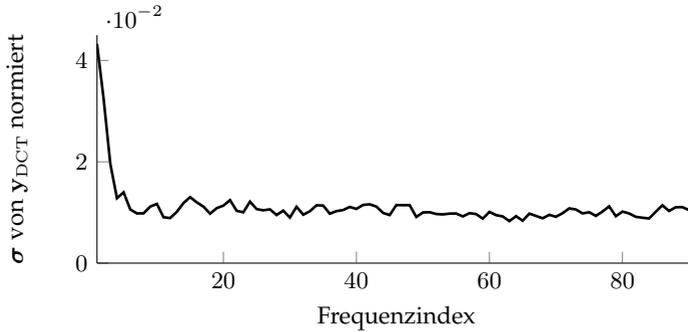


Abbildung 4.4 Normierte Standardabweichung σ der DCT-transformierten Spektren \mathbf{y}_{DCT} des Farbpulvers Chromoxid-Grün aufgezeichnet an 100 Pixeln.

spektralen Koeffizienten der Frequenz null, entfernt werden. Anstelle von \mathbf{y} wird

$$\underbrace{\mathbf{T}_{\text{DCT}}^{\text{T}} \mathbf{I}_1 \mathbf{T}_{\text{DCT}} \mathbf{y}}_{\tilde{\mathbf{y}}} = \underbrace{\mathbf{T}_{\text{DCT}}^{\text{T}} \mathbf{I}_1 \mathbf{T}_{\text{DCT}} \mathbf{M}}_{\mathbf{M}} \mathbf{a} + \underbrace{\mathbf{T}_{\text{DCT}}^{\text{T}} \mathbf{I}_1 \mathbf{T}_{\text{DCT}} \boldsymbol{\varepsilon}}_{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}} . \quad (4.18)$$

betrachtet. Es muss folglich $\mathbf{T}_{\text{DCT}}^{\text{T}} \mathbf{I}_1 \mathbf{T}_{\text{DCT}}$ bei dem Entwurf von optischen Spektralfiltern für eine Materialanteilsschätzung berücksichtigt werden. Um lediglich den spektralen Gleichanteil zu entfernen, muss nicht die DCT verwendet werden. Die Subtraktion mit $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^{\Lambda}$ an einen optischen Spektralfiltern würde zum gleichen Ergebnis führen. Der Ansatz über die DCT wird eingeführt, da hiermit zukünftig weitere spektrale Koeffizienten beliebiger Frequenz entfernt werden können.

Nach (4.18) führt das Entfernen des spektralen Gleichanteils zu einer Veränderung der Abweichungen des Mischspektrums zu einer rein linearen spektralen Überlagerung der Reinspektren. Auch der spektrale Gleichanteil von $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ beträgt null. Ob dies stets zu genaueren Materialanteilsschätzungen führt, darüber kann im Allgemeinen keine Aussage getroffen werden. Weitere Einflüsse wie nichtlineare Mischeffekte müssen mit berücksichtigt werden. Über diese kann nicht in gleicher Form eine Bemaßung stattfinden, wie es bei der Spektrenvariabilität möglich ist. Bei den Auswertungen der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern wird stets der spektrale Gleichanteil entfernt, da es unter dem

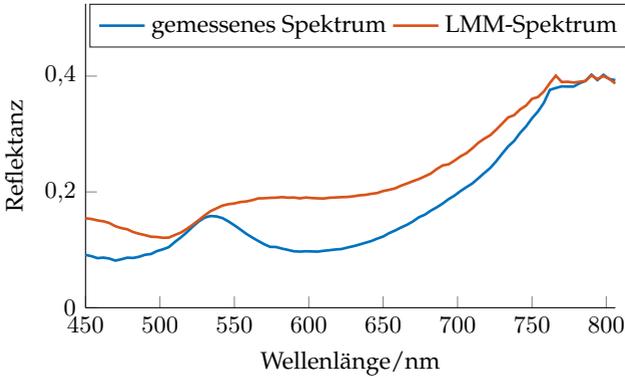


Abbildung 4.5 Aufgezeichnetes Spektrum eines Mischfachs der Farbpigmente gemittelt über alle Pixel und Spektrum unter Verwendung des LMM (3.2) mit $\varepsilon = 0$.

vorliegenden Kenntnisstand innerhalb dieser Arbeit eine begründete Maßnahme zur Verbesserung der Ergebnisse beschreibt (siehe Abschnitt 5.3). In der nachfolgenden Bandselektion wird ausschließlich (4.18), d. h. Größen ohne spektralen Gleichanteil, betrachtet. Es wird der Herausforderung von betragsmäßig großen Abweichungen ε bzw. $\bar{\varepsilon}$ begegnet. Mögliche negative Einträge in \bar{y} müssen dabei berücksichtigt werden, welche bei y aus physikalischen Gründen ausgeschlossen werden konnten (vgl. Abbildungen 4.5–4.6).

4.4 Bandselektion

Bei der Bandselektion wird der Grundsatz verfolgt, nicht die maximal zur Verfügung stehende spektrale Information zum Lösen einer Problemstellung in Betracht zu ziehen. Die Motive dahinter sind vielfältig. Mithilfe der Bandselektion werden effizientere Anwendungen von Hyperspektralbildern möglich, da sich die Aufzeichnungszeit ggf. verkürzen lässt und sich die Datenmenge reduziert. Auch kann dadurch eine kostengünstigere Hardware oftmals genutzt werden. In Abhängigkeit des Anwendungsgebiets dient die Bandselektion dazu, spektrale Bereiche mit keiner, nicht zielführender oder redundanter Information zu entfernen. In dieser Arbeit sind spektral stark unterschiedlich große Abweichungen zwischen

Mischspektren und der reinen linearen Überlagerung von Reinspektren der Grund für eine Bandselektion (siehe Abb. 4.6). Dabei muss beachtet werden, dass die Bandselektion mit dem gleichen eingeschränkten Wissen, wie es bei der Materialanteilsschätzung mit optischen Spektralfiltern zur Verfügung steht, auskommt. Darüber hinaus ggf. weiter benötigte Information muss sich aus der Anwendung optischer Spektralfilter gewinnen lassen können.

4.4.1 Stand der Technik

In bestehenden Methoden der Bandselektion werden überwiegend aufgezeichnete hyperspektrale Daten oder hyperspektrale Datenbanken eingesetzt. Diese werden benötigt, da die hierbei verwendeten Kriterien zur Untersuchung der einzelnen Wellenlängenkanäle häufig auch räumliche oder statistische Information einbinden.

In [81] werden Spektren als Merkmale betrachtet. Mit diesen sollen Klassifikationsprobleme gelöst werden. Vornehmlich dient die Auswahl einzelner Wellenlängenkanäle dabei der Reduktion der Datenmenge und einer resultierenden schnelleren Verarbeitung. Die zwangsläufig stattfindende Dimensionsreduktion soll dem Hughes-Phänomen [109] vorbeugen. Ein weiterer Grund für das Entfernen spektraler Information ist das unterschiedlich hohe Signal-Rausch-Verhältnis in den einzelnen Wellenlängenkanälen, welches sowohl durch die verwendete Hardware zur Aufnahme als auch physikalische Effekte, wie z. B. Wasserarbsorptionsbänder, bedingt ist. Es werden drei verschiedene Arten einer Bandselektion vorgestellt. In der ersten wird eine Auswahl einzelner Wellenlängenkanäle getroffen. In der zweiten wird dagegen der untersuchte spektrale Bereich neu aufgeteilt, d. h. vormals mehrere spektrale Wellenlängenkanäle können bspw. einen einzigen Wellenlängenkanal ergeben. Dabei wird zwischen einer Bandpartitionierung beim Beibehalten des gesamten spektralen Bereiches und einer Bandextraktion beim Ausschluss einzelner spektraler Bereiche unterschieden. Bei der dritten Art der Bandselektion wird eine neue hyperspektrale Aufzeichnung durchgeführt, wobei sich nun die Spektralfilter in der Form und Breite über den spektralen Bereich unterscheiden.

Weitere Ziele werden in [53] mit der Bandselektion verfolgt. Um benötigten Speicherplatz zu reduzieren, einen schnelleren Datentransfer

zu ermöglichen und eine effizientere spektrale Entmischung in Aussicht zu stellen, wird hier eine Dimensionsreduktion durch das Entfernen einzelner Wellenlängenkanäle angestrebt. Die Verfahren zur Bandselektion werden aufgeteilt in solche, die einzelne ursprüngliche Wellenkanäle beibehalten und somit physikalisch interpretierbar sind, und in solche, die Transformationen enthalten. Nach diesen ist der dreidimensionale Raum nicht mehr in örtliche und spektrale Richtungen einzuteilen. Das Motiv ist das Ausnutzen von häufig auftretender redundanter Information im hyperspektralen Datenwürfel. Bei beiden Varianten wird für die Bandselektion zwischen Informationsverlust, Unterscheidbarkeit der Spektren, dem Signal-Rausch-Verhältnis und der Präzision der Beschreibung der hyperspektralen Daten durch z. B. das LMM abgewogen. Lösungen werden mithilfe entsprechend formulierter Optimierungsprobleme oder der Anwendung von Cluster-Verfahren gefunden.

In dieser Arbeit dient die Bandselektion dem Ziel, Materialanteile präzise zu schätzen. Damit besteht grundsätzlich eine Übereinstimmung mit den Motiven von [53]. Eine Übertragung dieser Verfahren ist aufgrund des beschränkten Wissens und der Verwendung von optischen Spektralfiltern nicht möglich. Wie nachfolgend ersichtlich, entspricht die hier entwickelte Form der Bandselektion einer speziellen Ausprägung der Auswahl einzelner Wellenlängenkanäle nach [81]. In einer Hardwarerealisierung kann diese ggf. in einer Bandpartitionierung münden.

4.4.2 Bandselektion mit optischer Spektralfilter

Das LMM steht einerseits weitestgehend in Übereinstimmung mit den Herausforderungen an den optischen Spektralfilterentwurf in Abschnitt 4.1.2. Andererseits zeigt Abb. 4.6, dass Mischspektren beim LMM zum Teil betragsmäßig hohe $\bar{\epsilon}$ enthalten. Diese Abweichungen sind spektral unterschiedlich groß. Eine Bandselektion soll dazu führen, dass sich die Materialanteilsschätzung auf spektrale Bereiche mit betragsmäßig geringen Abweichungen zwischen LMM und Mischspektrum beschränkt. Die Herausforderung besteht darin, solche Bereiche ohne ein aufgezeichnetes Mischspektrum sowie die Kenntnis über die wahren Materialanteile zu erkennen. Nach der Bandselektion lassen sich ggf. mithilfe des Least-Squares-Schätzers (2.8) optische Spektralfilter bestimmen, die zu präzisen Materialanteilsschätzungen führen. Nach [119] ist der Least-Squares-Schätzer

(2.8) volatil gegenüber $\bar{\epsilon} \neq 0$ allgemein sowie Ausreißern, d. h. in den einzelnen Wellenlängenkanälen betragsmäßig stark unterschiedlich hohe Werte von $\bar{\epsilon}$. Es muss folglich bei großen $\bar{\epsilon}$ von Materialanteilsschätzungen ausgegangen werden, die sowohl die STO- als auch NN-Bedingungen verletzen.

Die Bandselektion tritt auch beim Lösen von Klassifikationsproblemen in dieser Arbeit in Erscheinung (siehe Abschnitt 4.5 sowie Abschnitt 4.7.1). Dabei ist die möglichst präzise Beschreibung von Mischspektren mit der reinen linearen Überlagerung von Reinspektren weiterhin vordergründig. Die Verwendung der Bandselektion für eine Auswahl von stark unterscheidbaren Wellenlängenkanälen, als stark diskriminative Merkmale (vgl. [81]), wird einer Auswahl von Wellenlängenkanälen mit geringen $\bar{\epsilon}$ untergeordnet, da der Einfluss von $\bar{\epsilon}$ auch bei der Klassifikation als höher eingestuft wird.

Grundsätzlich kann $\bar{\epsilon}$ in Abhängigkeit des Mischverhältnisses \mathbf{a} und somit in jedem Mischspektrum $\bar{\mathbf{y}}$ verschieden sein. Deshalb soll nachfolgend Information über $\bar{\mathbf{y}}$ mithilfe geeigneter optischer Spektralfilter bei der Bestimmung von Auswahlkriterien für eine Bandselektion berücksichtigt werden. Damit der Aufwand gemessen an der Anzahl an benötigten optischen Spektralfiltern und somit an aufgezeichneten, ggf. weiter zu verarbeitenden Intensitätswerten gering bleibt, werden spektrale Bereiche mit fester Breite anstelle von einzelnen Wellenlängenkanälen untersucht. Dadurch verkleinert sich ebenso die Menge an Auswahlmöglichkeiten. Die Bandselektion wird hier auch als Bandbereichsselektion bezeichnet.

Aufgrund der Betrachtung von Bereichen mit fester Anzahl an Wellenlängenkanälen bietet sich die Anwendung der SVD an. Es wurden insgesamt zwei Methoden entwickelt. Im ersten Verfahren wird versucht, die Genauigkeit der Beschreibung des Mischspektrums in den einzelnen Bandbereichen als reine lineare Superposition der gemittelten Reinspektren \mathbf{M} zu bewerten. Dagegen soll im zweiten Verfahren auch die Spektrenvariabilität in die Bewertung einfließen.

Für die Ansätze der Bandbereichsauswahl wird das LMM spektral unterteilt in L Bereiche der Länge $P + 1$ (siehe Abb. 4.6). Nach einer Bandbereichsauswahl kann sich die maximale Anzahl an Wellenlängenkanälen Λ_{MAX} reduzieren auf Λ mit $\Lambda \leq \Lambda_{\text{MAX}}$. Es wird $\Lambda_{\text{MAX}} = L \cdot (P + 1)$ angenommen. Somit folgt für die Beschreibung des Mischspektrums $\bar{\mathbf{y}}_l \in \mathbb{R}^{P+1}$

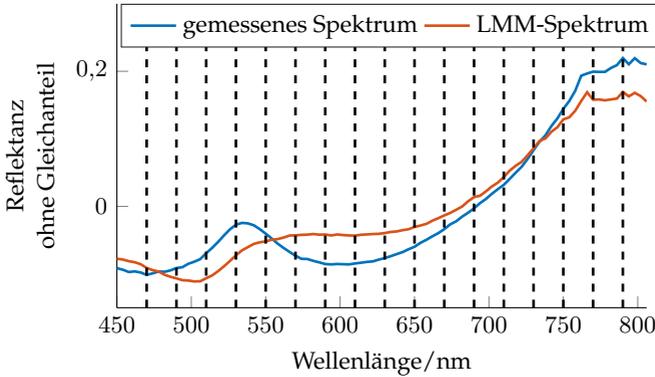


Abbildung 4.6 Aufgezeichnetes Spektrum eines Mischfachs der Farbpigmente gemittelt über alle Pixel und das Spektrum unter Verwendung des LMM (3.2) mit $\epsilon = \mathbf{0}$ nach Entfernung des spektralen Gleichanteils sowie die Grenzen von $L = 18$ Bandbereichen gestrichelt.

im l -ten Bereich, $l = 1, \dots, L$, das Mischmodell

$$\bar{\mathbf{y}}_l = \bar{\mathbf{M}}_l \mathbf{a} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_l \quad (4.19)$$

mit $\bar{\mathbf{M}}_l \in \mathbb{R}^{P+1 \times P}$ und $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_l \in \mathbb{R}^{P+1}$. Dabei geben $\bar{\mathbf{y}}_l$, $\bar{\mathbf{M}}_l$ und $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_l$ in den Wellenlängenkanälen $(l-1) \cdot (P+1) + 1, \dots, l \cdot (P+1)$ die Werte des Mischspektrums und der P Reinspektren sowie die Abweichungen zu einer rein linearen Überlagerung der Reinspektren an. Es handelt sich jeweils um die Größen nach der Vorverarbeitung mit der DCT (siehe Abschnitt 4.3). Die nachfolgenden Betrachtungen sollen zur Bewertung von $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_l$ hinführen.

Im ersten Verfahren wird davon ausgegangen, dass $\bar{\mathbf{M}}_l$ maximalen Rang P besitzt. Die SVD (siehe Abschnitt 2.1.4) von $\bar{\mathbf{M}}_l$ liefert

$$\bar{\mathbf{M}}_l = \bar{\mathbf{U}}_l \bar{\boldsymbol{\Sigma}}_l \bar{\mathbf{V}}_l^T, \quad (4.20)$$

wobei mit $\bar{\mathbf{U}}_l = [\bar{\mathbf{u}}_{l1}, \dots, \bar{\mathbf{u}}_{lP+1}] \in \mathbb{R}^{P+1 \times P+1}$ und $\bar{\mathbf{V}}_l^T \in \mathbb{R}^{P \times P}$ orthogona-

le Matrizen vorliegen. Es gilt

$$\bar{\Sigma}_l = \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{l1} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \bar{\sigma}_{lP} & \\ 0 & \dots & & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{P+1 \times P}. \quad (4.21)$$

Folglich ist durch $\{\bar{\mathbf{u}}_{l1}, \dots, \bar{\mathbf{u}}_{lP}\}$ eine Orthonormalbasis des Bildraums von $\bar{\mathbf{M}}_l$ gegeben. Zusammen mit (4.21) kann dies genutzt werden, um den l -ten Bandbereich hinsichtlich $\bar{\varepsilon}_l$ zu untersuchen. Im ersten Verfahren wird dazu die Bewertungsgröße

$$b_l^A = \frac{\bar{\mathbf{u}}_{lP+1}^T \bar{\mathbf{y}}_l}{\sum_{i=1}^P \frac{1}{\bar{\sigma}_{li}} \bar{\mathbf{u}}_{li}^T \bar{\mathbf{y}}_l} \quad (4.22)$$

vorgeschlagen, welche sich mithilfe von zwei optischen Spektralfiltern ermittelt lässt. Es müssen dazu die Aufnahmen, die sich bei Verwendung der optischen Spektralfilter $\bar{\mathbf{u}}_{lP+1}$ und $\sum_{i=1}^P \frac{1}{\bar{\sigma}_{li}} \bar{\mathbf{u}}_{li}$ ergeben, pixelweise dividiert werden. Grundsätzlich sind neben der Länge $P + 1$ für die einzelnen Bereiche auch größere Bereiche denkbar. Eine größere Wahl der Länge würde sich auf den Zähler in (4.22) bzw. das enthaltene optische Spektralfilter auswirken. Die Variation in der Länge der Bereiche wird in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt.

Aufgrund der Annahme von (4.19) lassen betragsmäßig kleine b_l^A geringe $\bar{\varepsilon}_l$ vermuten. Es gilt

$$\bar{\mathbf{u}}_{lP+1}^T \bar{\mathbf{y}}_l = 0, \quad (4.23)$$

falls $\bar{\mathbf{y}}_l$ im Bildraum von $\bar{\mathbf{M}}_l$ liegt. Auch bspw. $\bar{\mathbf{y}}_l = \mathbf{0}$ erfüllt (4.23). Um diesen Fall möglichst auszuschließen, soll mit der Aufzeichnung durch das optische Spektralfilter $\sum_{i=1}^P \frac{1}{\bar{\sigma}_{li}} \bar{\mathbf{u}}_{li}$ ein vorhandener Signalanteil im l -ten Bandbereich sichergestellt werden. Betragsmäßig große Werte sind hier nur für $\bar{\mathbf{y}}_l \neq \mathbf{0}$ möglich. Nach Abschnitt 2.1.4 ist die Höhe der Singulärwerte von der Norm von $\bar{\mathbf{M}}_l$ abhängig. Um mit b_l^A verschiedene Bandbereiche auch bei unterschiedlicher Norm von $\bar{\mathbf{M}}_l$ besser zu vergleichen und keine Richtung $\bar{\mathbf{u}}_{li}$ des Bildraums mit σ_{li} des Bildraums von $\bar{\mathbf{y}}_l$ in (4.22) zu bevorzugen, erfolgt die Normierung mit $\frac{1}{\sigma_{li}}$. Aus diesen Zusammenhängen folgt, dass bei der Auswahl von B Bandbereichen

die spektralen Bandbereiche gewählt werden, denen die B kleinsten b_l^A angehören.

Gänzlich unberücksichtigt bei der Bewertung eines spektralen Bandbereichs l nach (4.22) ist die Spektrenvariabilität. Diese soll im zweiten Verfahren zur Bandbereichsselektion auch einen Einfluss nehmen. Dazu werden anstelle von $\bar{\mathbf{M}}_l$ die Reinspektrenbibliotheken \mathcal{M}_i in den entsprechenden Wellenlängenkanälen und nach der Vorverarbeitung mit der DCT verwendet (siehe Abschnitt 3.2.2). Werden sämtliche sich auf diese Weise ergebenden Bibliotheken durch spaltenweise Aneinanderreihung vereinigt, ergeben sich L Matrizen $\bar{\mathbf{M}}_{\mathcal{M}l} \in \mathbb{R}^{P+1 \times P \cdot M}$. Die SVD dieser berechnet sich zu

$$\bar{\mathbf{M}}_{\mathcal{M}l} = \bar{\mathbf{U}}_{\mathcal{M}l} \bar{\mathbf{\Sigma}}_{\mathcal{M}l} \bar{\mathbf{V}}_{\mathcal{M}l}^T. \quad (4.24)$$

Die Dimensionen und Eigenschaften von $\bar{\mathbf{U}}_{\mathcal{M}l} = [\bar{\mathbf{u}}_{\mathcal{M}l1}, \dots, \bar{\mathbf{u}}_{\mathcal{M}lP+1}]$ in (4.24) bleiben gegenüber denen in (4.20) unverändert. Es gilt

$$\bar{\mathbf{\Sigma}}_{\mathcal{M}l} = \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{\mathcal{M}l1} & & 0 & \dots & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & \bar{\sigma}_{\mathcal{M}lP} & & \\ & & & \bar{\sigma}_{\mathcal{M}lP+1} & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{P+1 \times P \cdot M} \quad (4.25)$$

für die Matrix der Singulärwerte. Aufgrund von (3.8) kann weiter beobachtet werden, dass $\bar{\mathbf{U}}_{\mathcal{M}l}$ bis auf das Vorzeichen nahezu gleich zu $\bar{\mathbf{U}}_l$ ist. Tritt im spektralen Bandbereich l keine Spektrenvariabilität auf, gilt $\bar{\sigma}_{\mathcal{M}lP+1} = 0$ und $\bar{\mathbf{M}}_{\mathcal{M}l}$ besitzt nicht den vollen Rang $P + 1$. Ansonsten gilt $\bar{\sigma}_{\mathcal{M}lP+1} \neq 0$. Folglich kann mit $\bar{\sigma}_{\mathcal{M}lP+1}$ ein Rückschluss auf die Spektrenvariabilität erfolgen. Für die Bewertung des spektralen Bandbereichs l wird deshalb die Bewertungsgröße

$$b_l^B = \frac{\bar{\sigma}_{\mathcal{M}lP+1} \bar{\mathbf{u}}_{\mathcal{M}lP+1}^T \bar{\mathbf{y}}_l}{\sum_{i=1}^P \frac{1}{\bar{\sigma}_{\mathcal{M}li}} \bar{\mathbf{u}}_{\mathcal{M}li}^T \bar{\mathbf{y}}_l} \quad (4.26)$$

vorgeschlagen. Kleine $\bar{\sigma}_{\mathcal{M}lP+1}$ lassen eine geringe Spektrenvariabilität vermuten und führen zu einem kleinen b_l^B . In Übereinkunft mit b_l^A des ersten Verfahrens zur Bandselektion werden auch im zweiten Verfahren die spektralen Bandbereiche mit den kleinsten b_l^B ausgewählt.

Die Bewertungsgrößen beider Verfahren zur Bandselektion nutzen lediglich das vorhandene eingeschränkte Wissen und berücksichtigen weitestgehend die Herausforderungen an den Entwurf optischer Spektralfilter (siehe Abschnitt 4.1.2). Dabei handelt es sich jeweils um eine von vielen Möglichkeiten zur Bewertung eines spektralen Bandbereichs. Prinzipiell können auch längere spektrale Bereiche als $P + 1$ Wellenlängenkanäle oder sich überlappende spektrale Bandbereiche betrachtet werden. Dazu sind zusätzliche Parameter nötig, um die Breite oder den Grad der Überlappung festzulegen. Darüber hinaus steigt die Anzahl an notwendigen optischen Spektralfiltern an. Diese Folgen stehen im Widerspruch mit den Zielsetzungen innerhalb dieser Arbeit.

Es wird angemerkt, dass b_l^A und b_l^B keine hinreichenden Größen zur Bewertung eines spektralen Bandbereichs l nach der Höhe von $\bar{\varepsilon}_l$ darstellen. Beide Verfahren zur Bandselektion betrachten Abweichungen von einer rein linearen Überlagerung der Reinspektren, wobei NN- und STO-Bedingungen nicht enthalten sind. Daher können betragsmäßig große $\bar{\varepsilon}_l$ in kleinen b_l^A bzw. b_l^B resultieren, falls sich $\bar{\varepsilon}_l$ gerade im jeweiligen Bildraum, der durch die Orthonormalbasis $\{\bar{\mathbf{u}}_{l1}, \dots, \bar{\mathbf{u}}_{lP}\}$ bzw. $\{\bar{\mathbf{u}}_{\mathcal{M}l1}, \dots, \bar{\mathbf{u}}_{\mathcal{M}lP}\}$ gegeben ist, befindet. Ähnliches gilt für die Abschätzung des Signalanteils von $\bar{\mathbf{y}}_l$ in umgekehrter Richtung. Es ist $\sum_{i=1}^P \frac{1}{\bar{\sigma}_{ii}} \bar{\mathbf{u}}_{li}^T \bar{\mathbf{y}}_l \approx 0$ bzw. $\sum_{i=1}^P \frac{1}{\bar{\sigma}_{\mathcal{M}li}} \bar{\mathbf{u}}_{\mathcal{M}li}^T \bar{\mathbf{y}}_l \approx 0$ auch bei betragsmäßig großen $\bar{\mathbf{y}}_l$ möglich, was hohe b_l^A und b_l^B zur Folge haben kann, auch bei verhältnismäßig kleinen $\bar{\varepsilon}_l$. Nach der Vorverarbeitung mit der DCT ist $\bar{\mathbf{y}}_l$ nicht mehr zwangsläufig positiv, womit eine Bewertung des Signalanteils durch einfaches Aufsummieren mit bspw. dem optischen Spektralfilter 1 nicht möglich ist. Die gewichtete Projektion in den jeweiligen Bildraum erscheint zielführender.

Das Fehlen von Bewertungsmaßen zur Bandselektion mit hinreichenden Bestandteilen zur Abschätzung von $\bar{\varepsilon}_l$ ist als deutlicher Nachteil der vorgeschlagenen Verfahren anzusehen. Dafür erfüllen diese alle Voraussetzungen, die von der Problemstellung in dieser Arbeit gestellt sind. In Abschnitt 5 werden Vergleiche zwischen Materialanteilsschätzungen mithilfe von optischen Spektralfiltern nach und vor einer Bandselektion durchgeführt. Angesichts der Ergebnisse sollen die Auswirkungen der Bewertung der spektralen Bandbereiche beurteilt werden.

4.5 Klassifikation von Materialanteilen

Das Ergebnis der Klassifikation von Materialanteilen sind Schätzungen der Materialanteile einer Mischprobe. Das Entfernen des spektralen Gleichanteils mithilfe der DCT sowie die Auswahl spektraler Bandbereiche können Bestandteile dabei sein. Für den Übergang von dem Bestimmen von Materialanteilen als Schätzaufgabe in ein Klassifikationsproblem werden einschränkende Maßnahmen erforderlich (Abschnitt 4.5.2). Zudem muss das Lernen eines Klassifikators sowie die Klassifikation (siehe Abschnitt 2.2) mit dem eingeschränkten Wissen der Problemstellung dieser Arbeit möglich sein. Auch muss sich das Verfahren mit optischen Spektralfiltern realisieren lassen. Im besten Fall sollen dabei die Zielsetzungen in Abschnitt 4.1.2 vollständig erreicht werden.

4.5.1 Stand der Technik

Mehrere Verfahren der Literatur betrachten bereits die Materialanteilsbestimmung als Klassifikationsproblem. Genaueres Hinsehen zeigt, dass sich diese nicht auf die hier formulierte Problemstellung mit optischen Spektralfiltern übertragen lassen. Anlass zur Anwendung von Klassifikationsverfahren in [111, 112] ist das häufige Verletzen der NN- und STO-Bedingungen durch die geschätzten Materialanteile mithilfe von Methoden ohne Klassifikation. Alleinige Ursache dafür soll die Spektrenvariabilität sein. Nichtlineare Mischeffekte und dennoch die Verwendung des LMM werden nicht als Gründe für physikalisch kaum interpretierbare Materialanteilsschätzungen angesehen. Um Materialanteile durch ein Klassifikationsverfahren zu gewinnen, wird in [111, 112] ein Ansatz mit einer harten Klassifikation unter Verwendung von SVMs nach [21, 22] erweitert für eine weiche Klassifikation. Die harte Klassifikation bezeichnet hier das Zuweisen eines Mischspektrums zu genau einem Material bzw. Reinspektrum. Dagegen wird bei der weichen Klassifikation ein Mischspektrum mehreren Materialien zugeordnet. Dies gelingt, indem die enthaltenen Zugehörigkeitsfunktionen für die einzelnen Materialien nicht einem Maximum-Operator unterworfen werden, wie es bei der harten Klassifikation meist der Fall ist, sondern auf weiteren Wegen ausgewertet werden. Es können durch Normierung der Zugehörigkeitsfunktionen Werte als geschätzte Materialanteile ermittelt werden, die sowohl die NN- als

auch die STO-Bedingung erfüllen. Als Zugehörigkeitsfunktionen treten meist Distanzmaße zu den Klassengrenzen oder -zentren auf. Deren Wahl kann Einfluss auf die geschätzten Materialanteile nehmen.

Gemeinsam setzen diese Ansätze voraus, dass aufgezeichnete hyperspektrale Daten mit bekannten und gekennzeichneten wahren Materialanteilen vorliegen, damit ein überwachtes Training der Klassifikatoren stattfinden kann. Insbesondere sollen mehrere hyperspektrale Daten mit gleichen bekannten Materialanteilen vorhanden sein. Die Unterschiede zwischen diesen wird auf die Spektrenvariabilität zurückgeführt. Indem solche Datensätze im Training der Klassifikatoren eingesetzt werden, wird die Spektrenvariabilität berücksichtigt. Es werden auch nichtlineare Transformationen durch Kernel-Funktionen beim Training und bei der späteren Klassifikation in den betrachteten Anwendungsbeispielen eingesetzt, um bei Verwendung der SVM präzise Schätzergebnisse zu erzielen (siehe Abschnitt 2.2.3). Diese Vorgehensweisen können weder mit dem vorhanden Wissen in dieser Arbeit zur Materialanteilsschätzung noch mithilfe von optischen Spektralfiltern realisiert werden.

Im Folgenden wird ein neuer Ansatz vorgestellt, der den Einsatz von Klassifikatoren bei Verwendung von optischen Spektralfiltern erlaubt und auch ohne hyperspektrale Aufzeichnungen von Mischspektren mit bekannten Materialanteilen einsetzbar bleibt.

4.5.2 Klassifikation quantisierter Materialanteile

Der Ablauf der Klassifikation quantisierter Materialanteile erfolgt nach dem Schema in Abb. 4.7 und weist mit der Datenaufzeichnung und der Bewertung aufgezeichneter Intensitätsbilder zwei Elemente auf, die auch in der iterativen Materialanteilsschätzung auftreten werden (siehe Abschnitt 4.6). Es sollen die Anzahl F_K und Koeffizienten der optischen Spektralfilter f_{f_K} , $f_K = 1, \dots, F_K$, aus einem trainierten Klassifikator abgelesen werden. Die Anwendung dieser optischen Spektralfilter liefert aufgezeichnete Intensitätswerte, die nach einer geringfügigen weiteren Auswertung zu einer Materialanteilsschätzung als Klassifikationsergebnis führen. Die optischen Spektralfilter bestimmen sich durch die Gewichte der Eingangsschicht des gleichbedeutenden neuronalen Netzes (siehe Abschnitt 2.2.1). Folglich sind die Anzahl an optischen Spektralfiltern, deren Koeffizienten und die Auswertung abhängig vom gewählten Klassifikati-

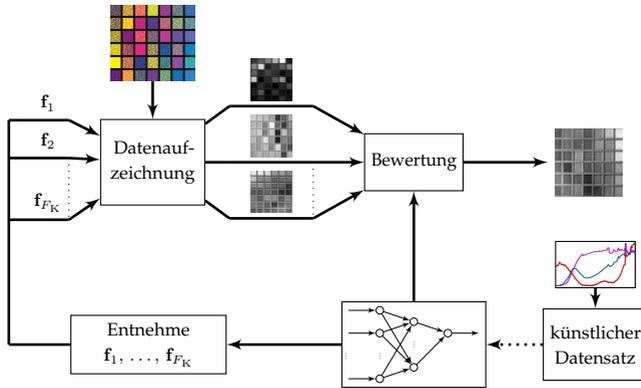


Abbildung 4.7 Schema der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen für ein Material. Aus einem neuronalen Netz, das mithilfe eines künstlichen Datensatzes einmalig trainiert wurde, mit F_K Neuronen in der verdeckten Schicht, werden die optischen Spektralfilter zur Aufzeichnung von Intensitätsbildern entnommen. Die Bewertung entspricht der Auswertung der Ausgangsschicht des neuronalen Netzes.

onsverfahren sowie der Anzahl an Klassen. Das Trainieren von neuronalen Netzen geht im Allgemeinen mit einem nicht unwesentlichen Rechenaufwand einher. Da dieses jedoch auch vor einer Materialanteilsschätzung einmalig erfolgen kann, bleibt der Rechenaufwand für die Bestimmung der Materialanteile mithilfe von optischen Spektralfiltern weiterhin gering.

Der Umstand des Mangels an hyperspektralen Aufzeichnungen über Mischproben für das Training von Klassifikatoren soll durch das Berechnen von Mischspektren aufgehoben werden. Das verfügbare Wissen soll dabei vollständig ausgeschöpft werden, indem die Reinspektren und Bibliotheken sowie die NN- und STO-Bedingungen benutzt werden. Dadurch ist die Spektrenvariabilität auf eine ähnliche Weise wie in den Verfahren der Literatur im vorherigen Abschnitt berücksichtigt. Zusätzlich werden beim Erzeugen dieser künstlichen hyperspektralen Datensätze Abweichungen zu einer rein linearen Überlagerung der Reinspektren angenommen. Spektrale Bänder mit stark unterschiedlich hohen Abweichungen werden jedoch nicht betrachtet und treten somit nicht im Training auf. Die Anzahl an Parametern für das Festlegen des Modells zur Berechnung von Mischspektren kann dadurch deutlich kleiner gehalten werden. Um dennoch

mit den berechneten Mischspektren repräsentative Daten bei verschiedensten Mischproben vorzuweisen, soll dieses Verhalten durch vorherige Anwendung der Bandselektion gelöst werden (siehe Abschnitt 4.7). Der Einfluss der Spektrenvariabilität und die Höhe der Abweichungen zu einer rein linearen Überlagerung der Reinspektren werden jeweils mit interpretierbaren Parametern gesteuert. Dadurch soll ein möglichst vielfältiger Datensatz vorliegen. Eine detaillierte Beschreibung zur Erzeugung von künstlichen Datensätzen erfolgt in Abschnitt 5.2.3, da auch in der Auswertung der weiteren Verfahren zur Materialanteilsschätzung ohne Klassifikation diese berechneten Datensätze auftreten werden.

Ein weiterer wesentlicher Bestandteil bei der Berechnung der künstlichen Datensätze ist die Vorgabe der Verteilungen der Materialanteile. Dazu könnten mögliche Materialanteile mithilfe von Realisierungen parametrierter Dirichlet-Verteilungen in Betracht gezogen werden (siehe Abschnitt 2.1.2). Bei der Klassifikation von Materialanteilen treten die Materialanteile als Klassen auf. Da deren Anzahl auch die Anzahl an optischen Spektralfiltern mitbestimmt, wird die Klassenanzahl begrenzt, indem sich die Materialanteilsschätzung auf quantisierte Materialanteile beschränkt. Es wird eine äquidistante Quantisierung der Materialanteile angesetzt. Somit sind mit der Anzahl an Materialanteilstufen Q die Anzahl an Klassen und folglich die möglichen Schätzergebnisse mithilfe eines Klassifikationsverfahrens gegeben. Für $Q = 6$ ergeben sich bspw. die quantisierten Materialanteilstufen $a_Q \in \{0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1\}$. In dieser Arbeit soll sich die Wahl von Q nicht auf die Genauigkeit der Schätzung auswirken, da z. B. keine der sich ergebenden Materialanteilstufen in der vorliegenden Mischprobe auftreten. Es ist stets Q so gewählt, dass a_Q auch den auftretenden wahren Materialanteilen entspricht. Dadurch bestimmt lediglich die Klassifikationsgenauigkeit den $RMSE$ und Δ_{STO} der Materialanteilsschätzung. Weiter wird für jedes Material ein eigenständiger Klassifikator gewählt. Auf diese Weise lässt sich die Anzahl an Neuronen der Eingangsschicht und somit der optischen Spektralfilter zusätzlich reduzieren. Falls ein Klassifikator Q Eingangsneuronen besitzt und für jedes Material das gleiche Klassifikationsverfahren verwendet wird, ergibt sich $F_K = Q \cdot P$, was eine erhebliche Reduktion gegenüber den möglichen Materialanteilstufenkombinationen bedeutet. Für $Q = 6$ und $P = 4$ liegen bspw. 56 mögliche Kombinationen an Anteilstufen vor,

während $F_K = 24$ beträgt.

Die Klassifikation quantisierter Materialanteile bietet einen unmittelbaren Vorteil gegenüber der Verwendung von z. B. \hat{a}_{LSi} nach (4.6). Da lediglich a_Q als Materialanteilsschätzungen auftreten können, ist Δ_{NN} stets null. Dies gilt nicht für Δ_{STO} . Dafür kann die Forderung nach einer robusten Materialanteilsschätzung bei örtlich variierender Beleuchtung (4.8) bei manchen Klassifikationsverfahren erreicht werden. Dazu wird zunächst der Zusammenhang zwischen der euklidischen Distanz als Abstandsmaß zur Klassifikation z. B. bei der SOM (siehe Abschnitt 2.2) und der optischen spektralen Filterung nach (4.2) gezeigt. Das Quadrat der euklidischen Distanz kann umgeformt werden zu

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{w}_{iq}\|_2^2 = \|\mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{w}_{iq}\|_2^2 - 2\mathbf{w}_{iq}^T\mathbf{y} \quad (4.27)$$

mit den trainierten Gewichten $\mathbf{w}_{iq} \in \mathbb{R}^A$ für die Materialanteilstufe $q = 1, \dots, Q$ des Materials i . Da \mathbf{w}_{iq} normiert ist, ist $\|\mathbf{w}_{iq}\|_2$ konstant unabhängig von q . Es folgt

$$\arg \min_q \|\mathbf{y} - \mathbf{w}_{iq}\|_2^2 = \arg \max_q \mathbf{w}_{iq}^T\mathbf{y} \quad (4.28)$$

[36]. Somit kann ohne Auswirkung im Training die euklidische Distanz verwendet werden und die Klassifikation des quantisierten Materialanteils einer unbekanntem Mischprobe mithilfe von optischen Spektralfiltern erfolgen.

In Abhängigkeit des gewählten Klassifikationsverfahrens kann durch Betrachtung der Ausgangsschicht über die Robustheit gegenüber einer örtlich variierenden Beleuchtung geurteilt werden. Aus (4.8) und (4.28) folgt:

$$\arg \max_q \frac{\mathbf{w}_{iq}^T\tilde{\mathbf{y}}}{\|\mathbf{w}_{iq}\|_2\|\tilde{\mathbf{y}}\|_2} = \arg \max_q \frac{c\mathbf{w}_{iq}^T\mathbf{y}}{\|\mathbf{w}_{iq}\|_2\|\tilde{\mathbf{y}}\|_2} = \arg \max_q \frac{\mathbf{w}_{iq}^T\mathbf{y}}{\|\mathbf{w}_{iq}\|_2}. \quad (4.29)$$

Damit ist (4.29) unabhängig von der Norm des Mischspektrums. Nach Abschnitt 2.2 erfüllen Materialanteilsschätzungen, die über die SOM und das MWV bestimmt wurden, diese Eigenschaft. Für die SVM und FLDA ist dies aufgrund der zusätzlichen Schwellenwerte nicht der Fall.

Darüber hinaus gibt es weitere Unterschiede zwischen den Klassifikationsverfahren für die Bestimmung von quantisierten Materialanteilen bei der Umsetzung mithilfe von optischen Spektralfiltern. Die Anzahl an Neuronen ist bspw. bei der LVQ-SOM aufgrund der Kartentopologie nicht unmittelbar mit Q gegeben. In Tabelle 4.1 werden diese tabellarisch zusammen mit weiteren Verfahren zur Materialanteilsschätzung gegenübergestellt.

4.6 Iterative Materialanteilsschätzung

Die Klassifikation von Materialanteilen, wie sie im vorherigen Abschnitt vorgeschlagen wird, bietet die Vorteile von ausschließlich positiven Materialanteilen und die Robustheit gegenüber einer örtlich variierenden Beleuchtung bei bestimmten Klassifikationsverfahren. Die STO-Bedingung wird nicht zwangsläufig erfüllt. Weiter nachteilig sind die auftretenden Parameter, die bei der Festlegung der Materialanteilstufen, im jeweiligen Klassifikationsverfahren selbst als auch beim Erstellen von hyperspektralen Mischspektren, für das Training enthalten sind. Die Wahl der Parameter ist ggf. nicht ohne Erfahrungswissen sinnvoll möglich und kann die Genauigkeit der Materialanteilsschätzung beeinträchtigen. Davon abgesehen sind neben dem präsentierten Verfahren unzählige weitere Varianten mit zusätzlichen Freiheitsgraden denkbar. Dazu zählt z. B. die Verwendung von *Ensembles*, die hier wegen ihrer Vielfalt an Entwurfsmöglichkeiten mit zahlreichen weiteren Parametern nicht näher diskutiert werden.

Mit der iterativen Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD in Abschnitt 4.6.2 wird eine Vorgehensweise vorgeschlagen, die die oben genannten Nachteile beseitigt oder abmildern kann. Dafür muss auf eine Robustheit gegenüber einer örtlich variierenden Beleuchtung verzichtet werden. Es werden sowohl die NN- als auch die STO-Bedingung bei der Materialanteilsschätzung berücksichtigt. Zudem werden nur wenige Parameter benötigt, deren Einfluss leicht einzusehen ist. Im Vergleich zur Klassifikation oder allgemeinen nicht-iterativen Verfahren werden in jedem Iterationsschritt deutlich mehr Intensitätswerte benötigt, aufgezeichnet mit unterschiedlichen optischen Spektralfiltern. Da keine Reihe an Aufzeichnungen über mehrere Iterationsschritte notwendig ist, bleiben der Rechenaufwand und insbesondere der Speicherbedarf dennoch

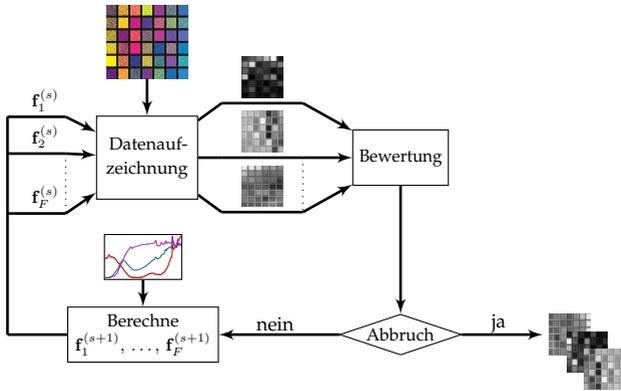


Abbildung 4.8 Allgemeines Schema der iterativen Materialanteilsschätzung bei Verwendung von bis zu F optischen Spektralfiltern in jeder Iteration s .

vernachlässigbar.

Das Prinzip der iterativen Materialanteilsschätzung ist in Abb. 4.8 zu sehen. In jeder Iteration s , $s = 1, \dots, S$, werden F optische Spektralfilter $f_1^{(s+1)}, \dots, f_F^{(s+1)}$ für den nächsten Durchlauf berechnet. Die Anzahl F an optischen Spektralfiltern ist vom Verfahren abhängig und kann zudem mit s variieren. Dabei erfolgt die Berechnung der optischen Spektralfilter unter der Verwendung der Spektren der Reinstoffe bzw. der Reinspektrenbibliotheken, der Bewertung der aufgezeichneten Intensitätsbilder in den vorangegangenen Iterationen sowie in Abhängigkeit von Abbruchkriterien. Die Dauer der iterativen Materialanteilsschätzung ist durch die maximale Anzahl an Iterationen S und weitere Abbruchkriterien beschränkt. Es muss nicht zwangsläufig durch das optische Spektralfilter $f_f^{(s)}$, $f = 1, \dots, F$, ein Intensitätsbild folgen, das die Schätzung der Anteile eines Materials enthält. Die Information, die mit jeder Aufzeichnung gewonnen wird, ist vom angewendeten iterativen Verfahren abhängig.

In den nachfolgenden Abschnitten werden Ansätze vorgestellt, die auf ein Schema nach Abb. 4.8 übertragbar sind. Auch die mehrstufige iterative Materialanteilsschätzung sowie die darin enthaltenen Verfahren, die zum Teil bereits vorgestellt wurden, können als eine iterative Vorgehensweise betrachtet werden (siehe Abschnitt 4.7.2).

4.6.1 Stand der Technik

Auf dem Gebiet der spektralen Entmischung sind unzählige iterative Verfahren bekannt. Nur wenige davon weisen Übereinstimmungen mit den Herausforderungen an die Materialanteilsschätzung mithilfe optischer Spektralfilter auf. Insbesondere muss bei der Auswahl von iterativen Verfahren zur Materialanteilsschätzung der Literatur die Beziehung zum Spektrum einer Mischprobe mit (4.2) gegeben sein, sodass eine Realisierung mit optischen Spektralfiltern möglich ist und diese Spektren nicht aufgezeichnet werden müssen. Es muss zudem das verfügbare Wissen zur Bestimmung der optischen Spektralfilter ausreichen. Die Zielsetzungen in Abschnitt 4.1.2 sollen möglichst vollständig erfüllt werden. Mit dem *Fully Constrained Least-Squares* (FCLS)- und *Modified Constrained Least-Squares* (MCLS)-Verfahren liegen zwei Algorithmen vor, die mit den Voraussetzungen und Zielen der optischen Materialanteilsschätzung größtenteils in Übereinkunft stehen. Die Prinzipien dieser Verfahren werden im Folgenden, beschränkt auf die wesentlichen Bestandteile, beschrieben.

Das FCLS-Verfahren [56] liefert eine iterative Lösung für die Materialanteilsschätzung. Dazu wird in jeder Iteration eine Materialanteilsschätzung zuerst ohne Betrachtung der NN- und STO-Bedingungen berechnet. Über Korrekturterme werden diese als weitere Elemente der Iteration einbezogen. Es wird das LMM-Modell für die Mischprobe, wie auch in sämtlichen neu entwickelten Ansätzen dieser Arbeit, angenommen. Um die STO-Bedingung hinzuzunehmen, wird eine Kostenfunktion formuliert, die zum einen aus der gewichteten Gütefunktion des Least-Squares-Schätzers (2.7) besteht und zum anderen den nicht betragsmäßigen Δ_{STO} , gewichtet mit einem Parameter $t \in \mathbb{R}$, enthält:

$$J_{\text{FCLS}} = \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{M} \mathbf{a})^T (\mathbf{y} - \mathbf{M} \mathbf{a}) - t_{\text{FCLS}} \left(\sum_{i=1}^P a_i - 1 \right). \quad (4.30)$$

Für die Materialanteilsschätzung wird die Ableitung von (4.30) nach \mathbf{a} zu null gesetzt. Dadurch ergeben sich

$$\mathbf{0} = \hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}} - t_{\text{FCLS}} \left(\mathbf{M}^T \mathbf{M} \right)^{-1} \mathbf{1} \quad (4.31)$$

mit $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^P$ sowie

$$t_{\text{FCLS}} = \left(1 - \mathbf{1}^T \hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}\right) / \left(\mathbf{1}^T \left(\mathbf{M}^T \mathbf{M}\right)^{-1} \mathbf{1}\right). \quad (4.32)$$

In (4.31) tritt der Least-Squares-Schätzer für \mathbf{a} auf (siehe Abschnitt 2.1.3). Es können (4.31) und (4.32) iterativ gelöst werden. Der gesamte Ablauf für die Bestimmung einer Materialanteilsschätzung nach dem FCLS-Verfahren $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}} \in \mathbb{R}^P$ ist in Algorithmus 1 gezeigt. Dabei wurde hier und im späteren MCLS-Verfahren jeweils auf eine Darstellung, ohne Kennzeichnung der Iteration s sowie Bezeichnungen mit einer Gültigkeit nur innerhalb von Algorithmus 1, zurückgegriffen, um die Lesbarkeit nicht unnötig zu erschweren. Großen Einfluss besitzt der Gewichtungsvektor $\mathbf{g}_{\text{FCLS}} \in \mathbb{R}^P$ (siehe Zeile 4). Innerhalb einer Iteration werden negativ geschätzte Materialanteile mit diesem gewichtet und die kleinste Materialanteilsschätzung zu null gesetzt (siehe Zeilen 8 und 9). Für die nächste Iteration wird dieses Material nicht mehr weiter betrachtet (siehe Zeile 11). Dadurch wird in jeder Iteration genau der Materialanteil nicht mehr weiter behandelt, der zuvor die größte Korrektur für eine nicht-negative Schätzung benötigt hatte. Das Mischspektrum der Materialprobe tritt einmalig in Form von Zeile 3 auf. Demnach ist eine Realisierung mit optischen Spektralfiltern möglich.

Offensichtlich kann nach Ablauf des FCLS-Verfahrens $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}}$ stets die NN-Bedingung erfüllen. Die STO-Bedingung wird zwar im Verfahren aufgenommen, jedoch nach Beendigung von $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}}$ ggf. dennoch verletzt. Es ist möglich, dass das Bewertungsmaß Δ_{STO} für $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}}$ größer ist als für eine nicht-iterative Schätzung wie \mathbf{a}_{LS} . Reinspektrenbibliotheken und somit die Spektrenvariabilität werden im FCLS-Algorithmus nicht behandelt. Dagegen ist hervorzuheben, dass keine Parameter frei festzulegen sind. Die maximale Anzahl an Iterationen ist beispielsweise durch Zeile 11 mit $S = P - 1$ bestimmt. Folglich profitiert das Verfahren, falls in der untersuchten Mischprobe nicht auftretende Materialien bereits vor Beginn des iterativen Algorithmus ausgeschlossen werden (siehe Abschnitt 4.7.1). Im Vergleich zu ähnlichen Ansätzen [96] zeigt sich das FCLS-Verfahren als effizienter, bewertet nach Anzahl an durchzuführenden Iterationen und Rechenoperationen in jeder Iteration.

Der MCLS-Algorithmus weist Ähnlichkeiten zum FCLS-Algorithmus auf. Zum einen wird auch ein LMM angenommen. Zum anderen erfolgen

Algorithmus 1 FCLS-Algorithmus.

Eingabe: \mathbf{y} , \mathbf{M} **Ausgabe:** $\hat{\mathbf{a}}_{\text{FCLS}}$

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

erneut Least-Squares-Schätzungen, um die Materialanteile iterativ zu bestimmen. Es werden mehrere Ausprägungen des MCLS-Algorithmus in [29] vorgestellt. Die folgende Beschreibung beschränkt sich auf die parametrische Form des MCLS-Algorithmus, da diese wesentliche Einblicke mit nur wenigen Angaben ermöglicht.

Das LMM wird beim MCLS-Verfahren erweitert, sodass die NN- und STO-Bedingungen jeweils gewichtet enthalten sind:

$$\mathbf{y}_{\text{MCLS}} = \mathbf{M}_{\text{MCLS}} \mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{MCLS}}. \quad (4.33)$$

Dabei gilt $\mathbf{y}_{\text{MCLS}} = [\mathbf{y}^T, t_{\text{MCLS1}}, t_{\text{MCLS2}}]^T$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{MCLS}} = [\boldsymbol{\varepsilon}^T, 0, 0]^T$.

Während \mathbf{M}_{MCLS} mit $\mathbf{M}_{\text{MCLS}} = [\mathbf{M}^T, t_{\text{MCLS1}} \mathbf{1}, t_{\text{MCLS2}} \text{sgn}(\mathbf{a})]^T$ gegeben ist, wobei $\text{sgn}(\mathbf{a})^T$ elementweise mit

$$\text{sgn}(a_i) = \begin{cases} 1 & \text{für } a_i > 0, \\ -1 & \text{für } a_i < 0, \\ 0 & \text{für } a_i = 0 \end{cases} \quad (4.34)$$

definiert wird. Die Parameter $t_{\text{MCLS1}}, t_{\text{MCLS2}} \in \mathbb{R}$ steuern, wie stark die NN- und STO-Bedingungen im Verhältnis zu der Beschreibung des Mischspektrums der Materialprobe als gewichtete Überlagerung der Reinspektren berücksichtigt werden. Daraus resultierend lässt sich mit $t_{\text{MCLS1}}, t_{\text{MCLS2}}$ auch der Einfluss dieser Bedingungen auf eine Materialanteilsschätzung $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}} \in \mathbb{R}^P$ im MCLS-Verfahren angeben. Nach Algorithmus 2 ist eine einmalige Initialisierung von $t_{\text{MCLS1}}, t_{\text{MCLS2}}$ notwendig (siehe Zeile 1). Es folgt die iterative Bestimmung von $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}}$. Dabei werden nur die Reinspektren \mathbf{M} weiter benötigt, um mit \mathbf{M}_{MCLS} den Least-Squares-Schätzer nach (2.8) bei Betrachtung von (4.33) für die Materialanteile anzugeben. In jeder Iteration wird in Abhängigkeit der Stärke der Verletzung der NN- und STO-Bedingungen der aktuellen Materialanteilsschätzung jeweils ein ausgewähltes Reinspektrum t_{MCLS1} sowie t_{MCLS2} angepasst (siehe Zeilen 6, 7, 11, 12 und 16, 17). Dazu werden mit ϵ_{MCLS1} und ϵ_{MCLS2} zur Festlegung der Anpassungen weitere Schwellenwerte benutzt. Der Zahlenwert 10000 für die Anpassung in Zeile 7 ist nach [29] gewählt. Wie in Zeile 5 zu sehen ist, erlaubt auch das MCLS-Verfahren eine Umsetzung mithilfe von optischen Spektralfiltern. Dazu müssen die ersten A

Spalten in $\left(\mathbf{M}_{\text{MCLS}}^T \mathbf{M}_{\text{MCLS}}\right)^{-1} \mathbf{M}_{\text{MCLS}}^T \in \mathbb{R}^{P \times \Lambda+2}$ als Filterkoeffizienten gewählt werden. Die letzten beiden Spalten stehen im Produkt mit $[t_{\text{MCLS1}}, t_{\text{MCLS2}}]^T$, sodass sich ein P -wertiger Vektor unabhängig von \mathbf{y} ergibt. Folglich kann die Anteilsschätzung in jeder Iteration aus der Summe der mit den optischen Spektralfiltern aufgezeichneten P Intensitätswerten und diesem P -wertigen Vektor bestimmt werden, ohne das Mischspektrum aufzuzeichnen. In jedem Durchlauf wird $\mathbf{M}_{\text{MCLS1}}$ angepasst. Somit ändern sich auch die optischen Spektralfilter mit jeder Iteration bis zur endgültigen Materialanteilsschätzung $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}}$ (siehe Zeile 22).

Im MCLS-Algorithmus kann mit $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}}$ nicht zwingend eine Materialanteilsschätzung erreicht werden, die geringere Δ_{NN} und Δ_{STO} besitzt als z. B. $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$. Zudem gilt es beim MCLS-Algorithmus, zahlreiche Parameter festzulegen. Neben den oben genannten Parametern muss auch die Stärke der Erhöhungen von t_{MCLS1} , t_{MCLS2} bestimmt werden (siehe Zeilen 12 und 17). Es fehlt in Algorithmus 2 eine maximale Anzahl an Iterationen, um eine Beendigung des Algorithmus zu sichern. Es kommt hierbei erschwerend hinzu, dass diese Wahlen nur anhand von Erfahrungen sinnvoll erfolgen können.

Sowohl der FCLS- als auch der MCLS-Algorithmus stützen sich auf ein LMM-Modell, das die Reinspektren der Materialien mit \mathbf{M} enthält. Weitere Information, die in den Reinspektrenbibliotheken \mathcal{M}_i enthalten ist, wird nicht verwendet. Das folgende Verfahren soll auch diese in die iterative Materialanteilsschätzung einbeziehen, um das zur Verfügung stehende Wissen möglichst vollständig auszuschöpfen. Zusätzlich sollen hier in Erscheinung getretene Nachteile abgeschwächt oder gar beseitigt werden.

4.6.2 Iterative Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD

Ziel der iterativen Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD (IMS) ist es, Materialanteilsschätzungen zu bestimmen, die sukzessive mit jeder weiteren Iteration einen geringeren oder mindestens gleichen Δ_{NN} und Δ_{STO} besitzen. Zudem sollen diese Bewertungsgrößen des Schätzergebnisses nach diesem Verfahren stets nicht höhere Werte als von $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ annehmen. Neben dem Ziel von physikalisch interpretierbaren Materialanteilsschätzungen soll auch die Spektrenvariabilität in die nachfolgende iterative

Algorithmus 2 MCLS-Algorithmus.

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

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

- 1: **Initialisierungen:** $t_{\text{MCLS1}} \leftarrow 10000, t_{\text{MCLS2}} \leftarrow 10000, \hat{\mathbf{a}} \leftarrow \mathbf{1} \in \mathbb{R}^P,$
 $\text{Bed1} \leftarrow \text{false}, \text{Bed2} \leftarrow \text{false}, \text{Bed3} \leftarrow \text{false}$
 - 2: **while** $\text{Bed1} = \text{false}$ **or** $\text{Bed2} = \text{false}$ **or** $\text{Bed3} = \text{false}$ **do**
 - 3: $\mathbf{y}_{\text{MCLS}} \leftarrow \left[\mathbf{y}^T, t_{\text{MCLS1}}, t_{\text{MCLS2}} \right]^T$
 - 4: $\mathbf{M}_{\text{MCLS}} \leftarrow \left[\mathbf{M}^T, t_{\text{MCLS1}} \mathbf{1}, t_{\text{MCLS2}} \text{sgn}(\hat{\mathbf{a}}) \right]^T$
 - 5: $\hat{\mathbf{a}} \leftarrow \left(\mathbf{M}_{\text{MCLS}}^T \mathbf{M}_{\text{MCLS}} \right)^{-1} \mathbf{M}_{\text{MCLS}}^T \mathbf{y}_{\text{MCLS}}$
 - 6: **if** $\min_{i \in \mathcal{P}} \hat{a}_i < 0$ **mit** $\mathcal{P} = \{1, \dots, P\}$ **then**
 - 7: $\mathbf{m}_i \leftarrow 10000 \cdot \mathbf{m}_i$
 - 8: **else**
 - 9: $\text{Bed1} \leftarrow \text{true}$
 - 10: **end if**
 - 11: **if** $\left| \mathbf{1}^T \hat{\mathbf{a}} - 1 \right| > \epsilon_{\text{MCLS1}}$ **then**
 - 12: t_{MCLS1} erhöhen
 - 13: **else**
 - 14: $\text{Bed2} \leftarrow \text{true}$
 - 15: **end if**
 - 16: **if** $\left| \text{sgn}(\hat{\mathbf{a}})^T \hat{\mathbf{a}} - 1 \right| > \epsilon_{\text{MCLS2}}$ **then**
 - 17: t_{MCLS2} erhöhen
 - 18: **else**
 - 19: $\text{Bed3} \leftarrow \text{true}$
 - 20: **end if**
 - 21: **end while**
 - 22: $\hat{\mathbf{a}}_{\text{MCLS}} \leftarrow \hat{\mathbf{a}}$
-

Vorgehensweise einfließen.

Wesentlich in diesem neuen Ansatz ist das Ausnutzen von Eigenschaften der SVD (siehe Abschnitt 2.1.4), um die Spektrenvariabilität in Form der Reinspektrenbibliotheken mit dem LMM und somit mit der Materialanteilsschätzung in Verbindung zu setzen. Es werden dazu jeweils zunächst die in der Reinspektrenbibliothek \mathcal{M}_i enthaltenen Spektren \mathbf{m}_{im} in einer Matrix angeordnet:

$$\mathbf{M}_i = [\mathbf{m}_{i1}, \dots, \mathbf{m}_{iM}] \in \mathbb{R}^{A \times M}. \quad (4.35)$$

Für die SVD von (4.35) folgt

$$\mathbf{M}_i = [\mathbf{u}_{i1}, \dots, \mathbf{u}_{iA}] \begin{bmatrix} \sigma_{i1} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_{iA} & \\ & & & \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathbf{V}_i^T = \mathbf{U}_i \mathbf{\Sigma}_i \mathbf{V}_i^T. \quad (4.36)$$

Die Reinspektrenmatrix \mathbf{M} im LMM enthält Information aus \mathcal{M}_i mit \mathbf{m}_i über (3.8). Es lässt sich für den Bildraum der linearen Abbildung \mathbf{M}_i andererseits der Zusammenhang

$$\mathbf{u}_{i\lambda}^T \mathbf{m}_i \begin{cases} \neq 0 & \text{für } \lambda = 1, \\ \approx 0 & \text{für } \lambda = 2, \dots, A \end{cases} \quad (4.37)$$

beobachten. Folglich ist bei Verwendung des LMM mit \mathbf{M} ein Verlust an Information von \mathcal{M}_i vorhanden. Dieser soll nun durch schrittweise Manipulation von \mathbf{M} mit jeder Iteration im LMM und letztendlich bei der Materialanteilsschätzung berücksichtigt werden.

Im Einzelnen werden bei der Materialanteilsschätzung in der Iteration $s + 1$ für jedes Material zwei weitere Spektren berechnet, die als Reinspektren dienen sollen. Es wird dazu die Richtung

$$\tilde{\mathbf{u}}_i = \sum_{\lambda=2}^A \sigma_{i\lambda} \mathbf{u}_{i\lambda} \quad (4.38)$$

gewählt und zu $\frac{\sigma_{i1}}{\|\tilde{\mathbf{u}}_i\|} \tilde{\mathbf{u}}_i$ normiert. Aus (4.37) und (4.38) folgt

$$\frac{\sigma_{i1}}{\|\tilde{\mathbf{u}}_i\|} \tilde{\mathbf{u}}_i^T \mathbf{m}_i \approx 0. \quad (4.39)$$

Somit werden mit

$$\tilde{\mathbf{m}}_{iu}^{(s)} = \begin{cases} \mathbf{m}_i^{(s)} + C \frac{\sigma_{i1}}{\|\tilde{\mathbf{u}}_i\|} \tilde{\mathbf{u}}_i & \text{für } u = 1, \\ \mathbf{m}_i^{(s)} - C \frac{\sigma_{i1}}{\|\tilde{\mathbf{u}}_i\|} \tilde{\mathbf{u}}_i & \text{für } u = 2, \\ \mathbf{m}_i^{(s)} & \text{für } u = 3 \end{cases} \quad (4.40)$$

in den Fällen $u \in \{1, 2\}$ jeweils Richtungen auf das Reinspektrum $\mathbf{m}_i^{(s)}$ der Iteration s aufgeprägt, die nicht im Bild gegeben durch die lineare Abbildung von \mathbf{M} enthalten sind. Die Gewichtung mit σ_{i1} dient dazu, die Anpassung in Abhängigkeit der Norm von \mathbf{m}_i vorzunehmen. Der Parameter $C \in \mathbb{R}$ erlaubt eine weitere Steuerung der Stärke der Manipulation, gleichbleibend für alle Materialien. Aus (4.40) lassen sich nun weitere Reinspektrenmatrizen erzeugen:

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\tilde{s}}^{(s)} = \left[\tilde{\mathbf{m}}_{1u}^{(s)}, \dots, \tilde{\mathbf{m}}_{Pu}^{(s)} \right]. \quad (4.41)$$

Dabei nummeriert \tilde{s} in (4.41) mit $\tilde{s} = 1, \dots, 3^P$ die möglichen Reinspektrenmatrizen. Es können somit $3^P \cdot P$ Materialanteile

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}\tilde{s}}^{(s+1)} = \tilde{\mathbf{M}}_{\tilde{s}}^{(s)\dagger} \mathbf{y} \quad (4.42)$$

mit (4.41) und (2.8) über optische Spektralfilter geschätzt werden. Jede dieser Schätzungen soll bezüglich der NN- und STO-Bedingungen beurteilt werden, indem die Bewertungsmaße $\Delta_{\text{NN}\tilde{s}}^{(s+1)}$ und $\Delta_{\text{STO}\tilde{s}}^{(s+1)}$ berechnet werden. Es werden die Reinspektrenmatrix und Materialanteilsschätzung beibehalten, bei denen die kleinsten Werte von $\Delta_{\text{NN}\tilde{s}}^{(s+1)}$ und $\Delta_{\text{STO}\tilde{s}}^{(s+1)}$ erreicht werden. Zudem muss die Reihenfolge der $\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}\tilde{s}}^{(s+1)}$, sortiert nach der Größe, gegenüber der Materialanteilsschätzung der vorherigen Iteration, $\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}}^{(s)}$, unverändert bleiben. Falls auch $\Delta_{\text{NN}\tilde{s}}^{(s+1)} \leq \Delta_{\text{NN}}^{(s)}$ und $\Delta_{\text{STO}\tilde{s}}^{(s+1)} \leq \Delta_{\text{STO}}^{(s)}$, wobei $\Delta_{\text{NN}}^{(s)}, \Delta_{\text{STO}}^{(s)}$ die Bewertungsmaße von $\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}}^{(s)}$ notieren, werden die zugehörigen Reinspektren und Materialanteilsschätzung für die nächste Iteration übernommen:

$$\mathbf{M}^{(s+1)} = \tilde{\mathbf{M}}_{\tilde{s}}^{(s)} \quad (4.43)$$

und

$$\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}}^{(s+1)} = \hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}\tilde{s}}^{(s+1)}. \quad (4.44)$$

Das Verfahren der Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD endet, sobald in einer Iteration keine der Materialanteilsschätzungen $\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}\bar{s}}^{(s+1)}$ alle der obigen Bedingungen erfüllen kann oder die maximale Anzahl an Iterationen S erreicht wird (siehe Abb. 4.9).

Aus der entworfenen Vorgehensweise zur iterativen Materialanteilsschätzung resultieren zwangsläufig Materialanteilsschätzungen, die die NN- und STO-Bedingungen gegenüber $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ weniger stark oder zumindest mit gleichbleibend hohen Bewertungsgrößen verletzen. Die zusätzliche Bedingung der gleichbleibenden Reihenfolge der geschätzten Materialanteile innerhalb einer Iteration nach ihrer Größe wird hinzugenommen, da sich gezeigt hat, dass sich die Genauigkeit der geschätzten Materialanteile dadurch weiter erhöht. Es werden die Eingriffe in \mathbf{M} stärker eingegrenzt. In der Praxis bedeutet diese Bedingung, dass $\hat{\mathbf{a}}_{\text{LS}}$ zumindest ausreichend präzise hinsichtlich der Reihenfolge nach der Größe ist, was sinnvoll erscheint. Es ist bemerkenswert, dass durch die iterative Neuberechnung einer Reinspektrenmatrix Spektren erzeugt werden, die im Allgemeinen keinem der Reinspektren in \mathcal{M}_i entsprechen. Dadurch sollen nachteilige Effekte für präzise Materialanteilsschätzungen zum einen aufgrund der Spektrenvariabilität behoben werden. Zum anderen soll ein breiteres Spektrum an Materialmischungen, die nur unzureichend als lineare Überlagerung von Reinspektren beschrieben werden können, abgedeckt werden. Da für die Materialanteile weiterhin ein linearer Zusammenhang der neu erzeugten Reinspektren angenommen wird, können mit (4.42) ohne weiteres Schätzungen über optische Spektralfilter erfolgen.

Im Gegensatz zum MCLS-Algorithmus lassen sich in diesem Ansatz die einzigen auftretenden Parameter C und S ohne nennenswertes Erfahrungswissen bestimmen. Mit S kann die maximale Dauer als Anzahl an Iterationen kontrolliert werden. Wird C sehr klein gewählt, ändern sich die Materialanteilsschätzungen im Verlauf der einzelnen Iterationen kaum. Dagegen wird stets S erreicht, ohne aufgrund der Verletzung von einer der Bedingungen an $\hat{\mathbf{a}}_{\text{IMS}\bar{s}}^{(s+1)}$ vorzeitig abzubrechen. Umgekehrt können zu große C zu einem Abbruch nach bereits sehr wenigen Iterationen führen, ohne S auch nur annähernd auszuschöpfen. Somit kann gezielt mit C und S bei der Materialanteilsschätzung eingegriffen werden.

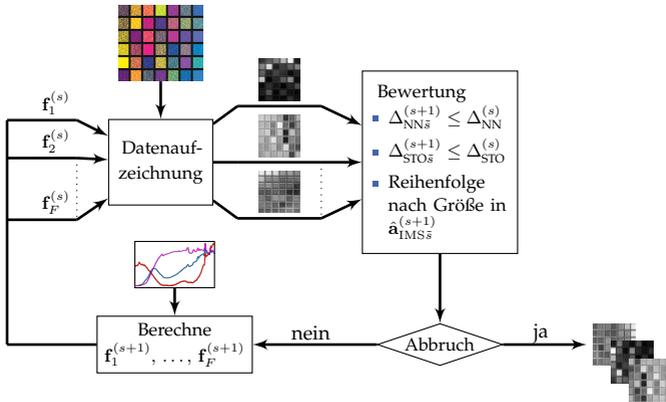


Abbildung 4.9 Schema der iterativen Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD bei Verwendung von bis zu F optischen Spektralfiltern in jeder Iteration s . Innerhalb der Iteration s erfolgen $3^P \cdot P$ Schätzungen, die mit \tilde{s} gekennzeichnet sind. Die Bestandteile der Schätzung mit der besten Bewertung werden für die Iteration $s + 1$ übernommen, falls die maximale Anzahl an Iterationen S nicht erreicht ist und eine Verbesserung erzielt wird.

4.7 Mehrstufige iterative Materialanteilsschätzung

In den vorherigen Abschnitten wurden unterschiedliche Methoden gezeigt, die sich mit optischen Spektralfiltern realisieren lassen. Dabei ist eine Gruppierung nach Aufgabe der jeweiligen Methode möglich. Das Entfernen des spektralen Gleichanteils unter Verwendung der DCT sowie die Bandselektion, als eine Auswahl von spektralen Bandbereichen, geben zwei vorbereitende Maßnahmen für die Materialanteilsschätzung an. Sie dienen dem Zweck, Mischspektren durch lineares Überlagern von Reinspektren mit geringeren Abweichungen zu beschreiben. Dadurch sollen mit einem gewählten Verfahren zur Materialanteilsschätzung präzisere Ergebnisse resultieren. Als Verfahren stehen in dieser Arbeit die Anwendung der Pseudoinversen der Reinspektrenmatrix M , die Klassifikation von quantisierten Materialanteilen und die Materialanteilsschätzung mit einem der drei vorgestellten iterativen Verfahren zur Auswahl.

Es liegt nahe, die genannten Vorgehensweisen in einem mehrstufigen Schema zu platzieren, das diesen zwei Aufgabentypen nachkommt. Da-

durch sollen verschiedene Kombinationen der Verfahren auf eine einfache Art und Weise unter Berücksichtigung von geforderten Eigenschaften der sich ergebenden Methode zur Materialanteilsschätzung möglich sein (siehe Abschnitt 4.7.2). Zuvor soll mit der Erkennung von Materialien eine weitere vorbereitende Maßnahme eingeführt werden. Es kann in sämtlichen Verfahren zur Materialanteilsschätzung ein Zusammenhang zwischen Anzahl an Materialien einer Mischprobe und der Anzahl an optischen Spektralfiltern beobachtet werden. Wird vor der Materialanteilsschätzung bereits ein Material als nicht vorhanden, d. h. mit Materialanteil gleich null, erkannt, wird bei Anwendung der Pseudoinversen der Reinspektrenmatrix eine Aufzeichnung weniger notwendig. Bei der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen und insbesondere dem neuen Verfahren zur iterativen Materialanteilsschätzung mithilfe der SVD, bei dem in jeder Iteration $3^P \cdot P$ optische Spektralfilter angewendet werden müssen, ist die sich dadurch ergebende Einsparung an Aufzeichnungen noch größer. Möglicherweise kann mit einer vorhergehenden Erkennung von Materialien zudem von einer präziseren Materialanteilsschätzung profitiert werden.

4.7.1 Erkennung von Materialien

Bei der Erkennung von Materialien wird das Ziel verfolgt, einzelne Materialien in der zu untersuchenden Mischprobe auszuschließen, falls deren Materialanteil null beträgt. Die Anteile dieser Materialien sollen darauf nicht mehr geschätzt werden. Daher ist eine hohe *Precision* (siehe Abschnitt 2.2.6) beim Lösen der Klassifikationsaufgabe von besonderer Bedeutung. Falls ein Material falsch beibehalten wurde, besteht in der Materialanteilsschätzung weiterhin die Möglichkeit, einen niedrigen Materialanteil und somit insgesamt präzise Materialanteilsschätzungen zu erhalten. Umgekehrt ist dies unabhängig vom gewählten Verfahren zur Materialanteilsschätzung nicht möglich. Aus diesem Grund werden nachfolgend die Aussagen zweier Klassifikationsverfahren basierend auf unterschiedlichen Ansätzen miteinander verknüpft. Da es sich nur bei einem dieser um ein Verfahren nach Abschnitt 2.2, d. h. dem Trainieren von Entscheidungsregeln durch einen Datensatz, handelt und sich die jeweiligen Klassenmengen voneinander unterscheiden, entspricht der Verbund der

beiden Verfahren zur Erkennung von Materialien nicht einem *Ensemble* [82].

Grundsätzlich muss die Klassifikation mithilfe von optischen Spektralfiltern und ohne die Aufzeichnung von \mathbf{y} möglich sein. Deshalb wird für das erste Klassifikationsverfahren eines der Verfahren des maschinellen Lernens gewählt, die auch bei der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen eingesetzt werden (siehe Abschnitt 2.2 sowie Abschnitt 4.5.2). Die Erkennung eines Materials erfolgt auf eine ähnliche Weise wie die Klassifikation von quantisierten Materialanteilen. Es werden dazu erneut Datensätze berechnet, in denen auch z. B. die Spektrenvariabilität durch Einbezug von \mathcal{M}_i berücksichtigt ist (siehe Abschnitt 5.2.3). Statt der Wahl von quantisierten Materialanteilen als Klassen in den Trainingsdaten erfolgt nun eine Zuordnung in die binären Klassen 0 für die Kennzeichnung Material vorhanden und 1 für die Kennzeichnung Material nicht vorhanden. Somit unterscheiden sich die Klassenbezeichnungen von den quantisierten Materialanteilen, die zur Berechnung des Datensatzes verwendet werden. Die Klassenbezeichnungen werden in $\mathbf{a}_K = [a_{K1}, \dots, a_{KP}]^T \in \{0; 1\}^P$ notiert. Das Ergebnis des ersten der beiden Klassifikationsverfahren zur Erkennung von Materialien ergibt sich nach Auswertung der Aufzeichnungen, die durch die Umsetzung mit optischen Spektralfiltern der trainierten Gewichte in der Eingangsschicht des ausgewählten Klassifikationsverfahrens gewonnen werden. Dieses wird mit $\mathbf{a}_K^{KV} = [a_{K1}^{KV}, \dots, a_{KP}^{KV}]^T \in \{0; 1\}^P$ gekennzeichnet.

Das zweite Verfahren zur Erkennung von Materialien verwendet, wie die Bandselektion (siehe Abschnitt 4.4.2), die SVD, um mit Bestandteilen aus dieser optische Spektralfilter anzugeben. Die Anwendung der optischen Spektralfilter liefert Aufzeichnungen, die, mit wenig Aufwand ausgewertet, Größen für eine einfache Entscheidung ergeben. Dabei wird ein enger Zusammenhang des Spektrums der Mischprobe zu einer rein linearen Überlagerung der Reinspektren unterstellt. Indem vor der Erkennung von Materialien bereits eine Bandselektion durchgeführt wird, kann diese Annahme von geringen Abweichungen erfüllt sein. Zunächst werden für sämtliche \mathbf{a}_K , die mindestens ein Material mit $a_{Ki} = 1$ besitzen, jeweils Mengen an Reinspektren $\mathcal{M}_{\mathbf{a}_K}$ als eine Auswahl aus \mathcal{M} erstellt. Es gilt $\mathbf{m}_i \in \mathcal{M}_{\mathbf{a}_K}$, falls $a_{Ki} = 1$, sowie $\mathbf{m}_i \notin \mathcal{M}_{\mathbf{a}_K}$ sonst. Die Reinspektren dieser Mengen werden spaltenweise in Matrizen $\mathbf{M}_{\mathbf{a}_K}$ sortiert und jeweils

eine SVD berechnet:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{a}_K} = [\mathbf{u}_{\mathbf{a}_K 1}, \dots, \mathbf{u}_{\mathbf{a}_K \Lambda}] \begin{bmatrix} \sigma_{\mathbf{a}_K 1} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_{\mathbf{a}_K P_K} & \\ & & & \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathbf{V}_{\mathbf{a}_K}^T = \mathbf{U}_{\mathbf{a}_K} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{a}_K} \mathbf{V}_{\mathbf{a}_K}^T \quad (4.45)$$

mit $\mathbf{M}_{\mathbf{a}_K} \in \mathbb{R}^{\Lambda \times P_K}$ und $P_K = |\mathcal{M}_{\mathbf{a}_K}|$. Es wird (4.45) genutzt, um die Größe

$$d_{\mathbf{a}_K} = \frac{\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{a}_K z}^T \mathbf{y}}{\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{a}_K n}^T \mathbf{y}} \quad (4.46)$$

für eine Entscheidung über die Präsenz der Materialien zu berechnen, die in \mathbf{a}_K mit $a_{K i} = 0$ vorliegen. In (4.46) bestimmen sich die als optische Spektralfilter zu realisierenden Größen mit $\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{a}_K z} = \frac{\mathbf{u}_{\mathbf{a}_K z}}{\|\mathbf{u}_{\mathbf{a}_K z}\|}$ sowie $\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{a}_K n} = \frac{\mathbf{u}_{\mathbf{a}_K n}}{\|\mathbf{u}_{\mathbf{a}_K n}\|}$, wobei

$$\mathbf{u}_{\mathbf{a}_K z} = \sum_{u=1}^{P_K} \sigma_{\mathbf{a}_K u} \mathbf{u}_{\mathbf{a}_K u} \quad (4.47)$$

und

$$\mathbf{u}_{\mathbf{a}_K n} = \sum_{u=P_K+1}^{\Lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{a}_K u} \quad (4.48)$$

Mit (4.46) kann das Ergebnis der Materialerkennung des zweiten Klassifikationsverfahrens ermittelt werden:

$$\mathbf{a}_K^{\text{SVD}} = \underset{\mathbf{a}_K}{\operatorname{argmin}} |d_{\mathbf{a}_K}| \quad (4.49)$$

mit $\mathbf{a}_K^{\text{SVD}} = [a_{K1}^{\text{SVD}}, \dots, a_{KP}^{\text{SVD}}]^T \in \{0; 1\}^P$.

Mittels $|d_{\mathbf{a}_K}|$ soll abgeschätzt werden, ob sich das Spektrum der Mischprobe \mathbf{y} im Bildraum der linearen Abbildung, gegeben durch die Reinspektren $\mathcal{M}_{\mathbf{a}_K}$, befindet. Dazu wird das Verhältnis der Projektionen in den

Bildraum mit (4.47) bzw. Kernraum mit (4.48) ausgewertet. Aus (4.49) folgt $\mathbf{a}_K^{\text{SVD}}$ als die Kombination \mathbf{a}_K von Materialien, die mit den zugehörigen Reinspektren dem betragsmäßig kleinsten Verhältnis zugehören. Folglich werden mit $a_{Ki}^{\text{SVD}} = 1$ die Materialien angegeben, mit deren Reinspektren eine lineare Abbildung durch $\mathbf{M}_{\mathbf{a}_K}^{\text{SVD}}$ erhalten wird, in deren Bildraum \mathbf{y} am wenigsten liegt und in deren Kernraum am meisten. Dabei wird $\mathbf{M}_{\mathbf{a}_K}^{\text{SVD}}$ auf die gleiche Weise wie $\mathbf{M}_{\mathbf{a}_K}$ mit $\mathbf{a}_K^{\text{SVD}}$ anstelle von \mathbf{a}_K gebildet. Die Materialien mit $a_{Ki}^{\text{SVD}} = 1$ werden als nicht vorhanden gemutmaßt. Umgekehrt ist ein Rückschluss auf die mit $a_{Ki}^{\text{SVD}} = 0$ vorhandenen Materialien möglich. Der Vergleich zwischen den $|d_{\mathbf{a}_K}|$ ist aussagekräftig, da $\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{a}_K, z}^T \mathbf{y}$ und $\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{a}_K, n}^T \mathbf{y}$ normiert wurden. Der Einbezug der Spektrenvariabilität, wie in (4.26), ist auch an dieser Stelle möglich, führte jedoch in der praktischen Anwendung zu keinen Verbesserungen. Dies kann dadurch begründet werden, dass nicht die absoluten Werte von $|d_{\mathbf{a}_K}|$ das Ergebnis herbeiführen, sondern die Relationen zwischen sämtlichen $|d_{\mathbf{a}_K}|$.

Das Verfahren zur Erkennung von Materialien über die SVD benötigt keinen Trainingsdatensatz. Somit ist das Ergebnis nicht von diesem abhängig. Unbrauchbar wird die zweite Vorgehensweise zur Klassifikation jedoch bei Mischproben, die P Materialien enthalten. Das Prinzip mit der Verwendung der SVD ist in solchen Fällen nicht anwendbar. Dafür kann sich diese Vorgehensweisen als zweite Stufe in einem mehrstufigen Klassifikationsverfahren als vorteilhaft erweisen, um die *Precision* des so aufgebauten Klassifikators zu erhöhen. Es wird \mathbf{a}_K^{KV} bestimmt, nachdem ein Klassifikationsverfahren des maschinellen Lernens aus Abschnitt 2.2 einmalig gewählt und trainiert wurde. Nur falls mindestens ein Material mit $a_{Ki}^{\text{KV}} = 1$ vorliegt, wird $\mathbf{a}_K^{\text{SVD}}$ ermittelt. Das Ergebnis dieses zweistufigen Verfahrens ergibt sich durch den Vergleich von \mathbf{a}_K^{KV} mit $\mathbf{a}_K^{\text{SVD}}$:

$$\mathbf{a}_K^{\text{E}} = \mathbf{a}_K^{\text{KV}} \odot \mathbf{a}_K^{\text{SVD}}. \quad (4.50)$$

Diese kurze Schreibweise ist möglich, da eine zunächst als unüblich erscheinende gewählte Zuordnung der Klassen mit $a_{Ki} = 0$ für vorhanden und $a_{Ki} = 1$ für nicht vorhanden gewählt wurde. Das erste Klassifikationsverfahren verantwortet, ob einzelne Materialien Kandidaten für einen Ausschluss sind. Eine falsche Klassifikation, d. h. alle P Materialien werden fälschlicherweise als vorhanden erkannt, ist für die *Precision* irrelevant. Mit dem zweiten Verfahren können dagegen die Kandidaten für einen Aus-

schluss überprüft werden. Nach (4.50) werden nur die Materialien bei der darauf folgenden Materialanteilsschätzung nicht weiter beachtet, die einstimmig als nicht vorhanden erkannt wurden. Besonders hervorzuheben ist, dass im Gegensatz zu bspw. [77] in diesem Schema zur Klassifikation keine Schwellenwerte notwendig sind.

4.7.2 Mehrstufiger Ansatz

Der mehrstufige Ansatz vereinigt alle vorgestellten Ansätze, die in ihrer Gesamtheit das Ziel der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern verfolgen. In den Abschnitten 4.6.1–4.6.2 wurden zwei iterative Verfahren gezeigt, die Materialanteilsschätzungen als Ergebnisse liefern. Grundsätzlich beschreibt der nachfolgende mehrstufige Ansatz stets eine iterative Vorgehensweise, auch wenn zur eigentlichen Materialanteilsbestimmung z. B. die Klassifikation quantisierter Materialanteile oder die Pseudoinverse mit dem Ergebnis \hat{a}_{LS} (PSE) eingesetzt wird. Die Ergebnisse und somit Aufzeichnungen einer Stufe beeinflussen das Verfahren der nächsten Stufe.

Ein Ziel des mehrstufigen Ansatzes (siehe Abb. 4.10) ist es, eine übersichtliche Darstellung über die behandelten Methoden zu geben, indem eine Einordnung in einzelne Stufen erfolgt. Das Entfernen des spektralen Gleichanteils (ESG) mithilfe der DCT, die Bandselektion (BS) und die Materialerkennung (ME) sind optionale Stufen, die für eine Materialanteilsschätzung nicht zwingend erforderlich sind. Es können mit diesen jedoch ggf. präzisere Schätzergebnisse bei Verwendung von einer geringeren Anzahl an optischen Spektralfiltern erzielt werden. Die gegebene Reihenfolge in Abb. 4.10 zeigt, welche Verfahren von dem Ergebnis der jeweils vorherigen Stufe profitieren können.

Insbesondere das gewählte Verfahren in der Stufe der Materialanteilsschätzung entscheidet über die Eigenschaften des Schätzergebnisses, die im Zusammenhang mit den Zielsetzungen nach Abschnitt 4.1.2 stehen. In Tabelle 4.1 werden die Eigenschaften aller Methoden im Einzelnen aufgeführt. Dadurch wird das weitere Ziel des mehrstufigen Ansatzes deutlich. Es wird ein modularer Aufbau bereitgestellt, der es in Abhängigkeit der geforderten Eigenschaften an die Materialanteilsschätzung erlaubt, eine geeignete Auswahl an Verfahren in den einzelnen Stufen zu treffen. Auf eine Unterscheidung zwischen quantisierten Schätzergebnissen bei

der Klassifikation quantisierter Materialanteile (KQM) und kontinuierlichen Schätzergebnissen bei der PSE sowie den iterativen Verfahren (FCLS, MCLS, IMS) wird dabei verzichtet. Dagegen werden die Eigenschaften der zur Verfügung stehenden Klassifikationsverfahren explizit aufgeführt. Offenbar erfolgt bspw. eine Materialanteilsschätzung, die robust gegenüber örtlich variierender Beleuchtung ist, nur dann, falls jede Stufe diese Eigenschaft besitzt. In Tabelle 4.1 werden für die Eigenschaften der Robustheit gegenüber örtlich variierender Beleuchtung (kurz Beleuchtung), das Berücksichtigen sowohl des Wissens über die Reinspektrenbibliotheken (Spektrenvarianz) als auch der NN- und STO-Bedingungen binäre Kennzeichnungen gewählt. Für die Anzahl an festzulegenden Parametern, insofern welche im Verfahren auftreten, und einzusetzenden optischen Spektralfiltern erfolgt eine relative Angabe mit der Materialanteilsschätzung über die PSE als Referenz.

Mit dem mehrstufigen Ansatz ist eine Vielzahl an Kombinationen der Verfahren zur Materialanteilsschätzung, über die Wahl an Parametern in den einzelnen Methoden hinaus, möglich. Im Folgenden wird die Auswirkung auf die Materialanteilsschätzung an einzelnen Beispielen von Materialmischungen untersucht. Im Mittelpunkt steht dabei, neben den gegebenen Eigenschaften der jeweils gewählten Methode zur Materialanteilsschätzung, das Aufzeigen der Potentiale zur Verbesserung der geschätzten Materialanteile in den Bewertungsgrößen bezüglich des RMSE und dem Einhalten der NN- und STO-Bedingungen. Fundierte Aussagen über z. B. die Wahl einzelner Parameter können nur erfolgen, falls umfangreiche Untersuchungen mit vielseitigen Problemstellungen durchgeführt werden. Im besten Fall finden diese bei Verwendung eines existierenden Hardwareaufbaus statt, der den Zielsetzungen der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern genügt. Während der Zeit, in der die Ergebnisse dieser Arbeit entstanden sind, waren solche Auswertungen nicht möglich. Deshalb wurde bei der Auswertung der entwickelten Verfahren auf eine ausgiebige Parametersuche verzichtet.

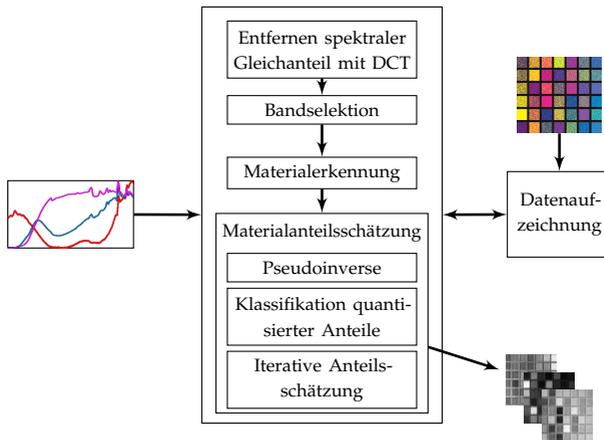


Abbildung 4.10 Schema der mehrstufigen iterativen Materialanteilsschätzung: Vor der eigentlichen Materialanteilsschätzung können eine Entfernung des spektralen Gleichanteils mithilfe der DCT, eine Bandbereichsauswahl und eine Erkennung von vorhandenen Materialien erfolgen.

Tabelle 4.1 Übersicht der Eigenschaften der vorgestellten Verfahren. Das Erfüllen bzw. Nichterfüllen einer Eigenschaft und das Berücksichtigen bzw. Nichtberücksichtigen einer Bedingung werden jeweils mit ✓ bzw. × markiert. Höhere Anzahlen an Parametern oder optischen Spektralfiltern werden in Relation zur PSE durch die Anzahl an + angegeben. Das Symbol ◦ kennzeichnet keine Einflussnahme auf die Anzahlen an Parametern oder optischen Spektralfiltern bzw. eine nicht zutreffende Eigenschaft.

		Beleuch- tung	Para- meter	Filter- zahl	Spektr- varianz	STO- Bed.	NN- Bed.
ESG		✓	◦	◦	✓	◦	◦
BS	b_l^A	✓	+	×	×	◦	◦
	b_l^B	✓	+	+	✓	◦	◦
ME/KQM	FLDA	×	+	+	✓	◦/×	◦/✓
	SVM	×	+	+	✓	◦/×	◦/✓
	MWV	✓	+	+	✓	◦/×	◦/✓
	LVQ- SOM	✓	++	++	✓	◦/×	◦/✓
PSE		×	◦	◦	×	×	×
FCLS		×	+	+++	×	✓	✓
MCLS		×	++	+++	×	✓	✓
IMS		×	+	+++	✓	✓	✓

5 Auswertung

Aufgrund der bestehenden Gegebenheiten für die Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern ist die PSE mit dem Schätzergebnis \hat{a}_{LS} eine naheliegende Methode für die Festlegung der optischen Spektralfilter. Die PSE geht im Vergleich zu den neu entworfenen Ansätzen zur Materialanteilsschätzung mit dem geringsten Aufwand, gemessen bspw. an der Anzahl an zusätzlichen optischen Spektralfiltern oder der Auswertung von aufgezeichneten Intensitätsbildern, einher. Deshalb liegt im Fokus der Auswertung dieser Arbeit u. a. stets ein Vergleich zwischen \hat{a}_{LS} und den Materialanteilsschätzungen, die mithilfe einer neuen Vorgehensweise erzielt werden. Wegen der fehlenden Hardware zur Realisierung entworfener optischer Spektralfilter erfolgt deren Umsetzung simulativ, indem die Auswertung über (4.2) mit aufgezeichneten Hyperspektralbildern bzw. Spektren betrachtet wird. Mögliche Vorzüge einzelner Verfahren oder auch Einschränkungen, die sich durch die zu verwendende Hardware ergeben können, müssen somit ungeachtet bleiben. Unabhängig davon ermöglicht Tabelle 4.1 bereits die Auswahl eines Schätzverfahrens nach gewünschten Eigenschaften.

In den nachfolgenden Auswertungen handelt es sich um einen Ausschnitt von Ergebnissen, die unter einer Vielzahl an erprobten Parametern in den einzelnen Verfahren entstanden sind. Die Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern wird insgesamt für drei Typen hyperspektraler Datensätze über Materialmischungen angewendet (siehe Abschnitt 5.2). Für die Untersuchung sämtlicher Datensätze sind zuvor hyperspektrale Datenaufzeichnungen erforderlich. Die hierzu verwendete Hardware besitzt wesentlichen Einfluss auf die Datensätze. Im Folgenden werden die Elemente und der Aufbau der eingesetzten Hardware erläutert.

5.1 Versuchsaufbau zur Datengewinnung

Für die Aufzeichnung von Hyperspektralbildern wird der in Abb. 5.1 schematisch dargestellte Versuchsaufbau verwendet. Dieser besteht aus einem *Acousto-Optical Tunable Filter* (AOTF, Gooch&Housego HSi-300), einer EMCCD-Kamera (Andor iXon₃897 EMCCD) und einer 300 W Xenon-Lampe als Lichtquelle. Daneben sind ein Rechner zur Ansteuerung der Hardware und zur Abspeicherung der Aufzeichnungen sowie ein Spiegel zur Ausrichtung der Beleuchtung auf die Mischprobe vorhanden [121].

Die hyperspektralen Daten werden im Wellenlängenbereich von 450 bis 806 nm bei einer Unterteilung in $\Lambda_{\text{MAX}} = 90$ Wellenlängenkanäle mit einer mittleren Breite von ca. 4 nm aufgezeichnet. Bei Mischproben, die aus bis zu $P = 3$ verschiedenen Materialien bestehen, werden die ersten $\Lambda_{\text{MAX}} = 88$ Wellenlängenkanäle beibehalten. Dadurch ist mit $L = 18$ bzw. $L = 22$ in den Verfahren zur Bandselektion $\Lambda_{\text{MAX}} = L \cdot (P + 1)$ stets erfüllt. Für die Aufnahme wird mit dem AOTF der Reihe nach ein Bandpass für den jeweiligen Wellenlängenkanal eingestellt. Die Kamera zeichnet Intensitätsbilder bei einer festgelegten Belichtungszeit für jeden dieser Wellenlängenkanäle auf. Nach Durchfahren sämtlicher Wellenlängenkanäle liegen Intensitätsbilder vor, die bei konstant gewählten Belichtungszeiten für jede Aufnahme das Hyperspektralbild der Mischprobe ergeben. In dieser Arbeit wurde eine Belichtungszeit von 400 ms gewählt.

Indem die Belichtungszeiten der einzelnen Wellenlängenkanäle nach den Koeffizienten der berechneten Spektralfilter als Vielfache einer Referenzzeit angepasst werden, kann eine partielle Realisierung der optischen Spektralfilter mit dem verwendeten Versuchsaufbau erfolgen. Dazu wird das optische Spektralfilter \mathbf{f} unterteilt nach

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_+ - \mathbf{f}_-, \quad (5.1)$$

mit $\mathbf{f}_+ = [f_{+1}, \dots, f_{+\lambda}, \dots, f_{+A}]^T$ und $\mathbf{f}_- = [f_{-1}, \dots, f_{-\lambda}, \dots, f_{-A}]^T$, wobei

$$f_{+\lambda} = \begin{cases} f_\lambda & \text{für } f_\lambda > 0, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.2)$$

sowie

$$f_{-\lambda} = \begin{cases} -f_{\lambda} & \text{für } f_{\lambda} < 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.3)$$

Es folgen Λ Aufzeichnungen mit Belichtungszeiten gewählt nach f_+ und f_- . Die Summe bzw. Subtraktion der resultierenden Intensitätsbilder ergeben das Intensitätsbild C_f (siehe Abschnitt 4.1). Falls jeweils eine Aufzeichnung erst nach Durchlaufen sämtlicher Wellenlängenkanäle bei geöffnetem Shutter der Kamera erfolgt, wird zwischenzeitlich nur ein Intensitätsbild für f_+ bzw. f_- aufgezeichnet. Diese ergeben nach Subtraktion C_f .

Im Allgemeinen entspricht der Hardwareaufbau nicht den Anforderungen, die sich aus den Zielsetzungen mit den angestrebten Anwendungsgebieten der optischen Spektralfilter ergeben (siehe Abschnitt 1.1). Es sind bspw. kein mobiler Einsatz oder die Realisierung verschiedener optischer Spektralfilter orts aufgelöst möglich. Deshalb soll diese Art der Umsetzung von optischen Spektralfiltern lediglich als ein Ausblick auf die Perspektiven der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern dienen. Bei der Auswertung der Methoden zur Materialanteilsschätzung wird diese Umsetzung nicht weiter verfolgt.

5.2 Datensätze

An Datensätzen stehen mit den Farbpulvermischungen und den Quarzsandmischungen zwei Typen an händisch angefertigten Materialmischproben zur Verfügung (siehe Abschnitte 5.2.1–5.2.2). Mit diesen Materialien ist es möglich, eigenständig Mischungen zu beliebigen Materialanteilen herzustellen. Dabei erfolgt die Anteilsbemessung nach Volumenanteilen. Es wird dadurch versucht, dem zugrundeliegenden Prinzip beim LMM zur Beschreibung von Mischspektren, welches die Materialanteile als anteilige Flächen eines Pixels betrachtet, zu entsprechen (siehe Abschnitt 3.2.1.1). Die Materialmischungen werden in Setzkästen gefüllt, wie sie in Ausschnitten in den Abbildungen 5.2 und 5.6 zu sehen sind. Mit der Vorgehensweise zur Anfertigung von Materialmischungen können zum einen die Materialanteile innerhalb von Messungenauigkeiten als bekannt angenommen werden. Zum anderen liegen Mischproben aus

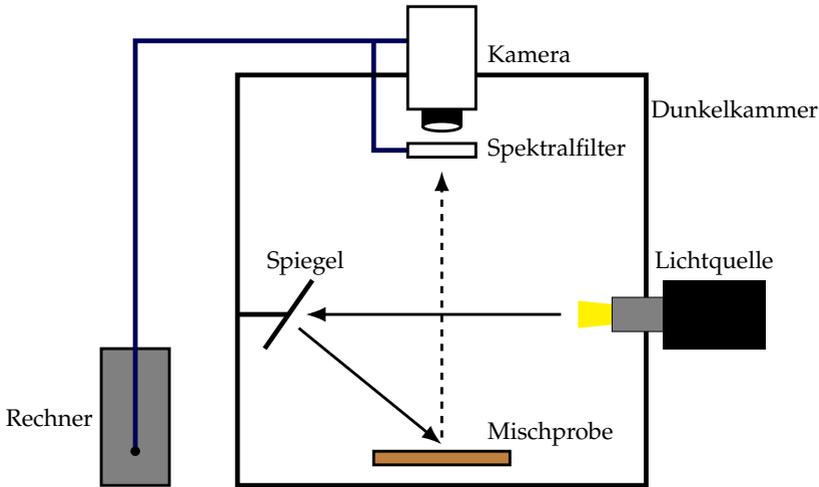


Abbildung 5.1 Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus.

Materialien vor, die auch über größere Zeitabstände zu unveränderten Reflektanzwerten führen. Zur Gewinnung eines Datensatzes erfolgt die Aufzeichnung eines Hyperspektralbilds über den gesamten Setzkasten. Nach einem Weißbildabgleich bei Verwendung eines Reflexionsstandards des Herstellers Spectralon können die Reflektanzwerte ermittelt werden. Anschließend werden die Bereiche mit Materialmischungen von anderen Bereichen, wie bspw. den Rändern der Setzkästen, getrennt. Es werden somit nur hyperspektrale Aufzeichnungen der Materialmischungen ausgewertet. Die Größe der Bereiche mit Materialmischungen wird fest zu $M = 20 \times 20$ Pixel gewählt. Die Aufzeichnungen der Bereiche eines einzigen Materials ergeben die Reinspektrenbibliotheken \mathcal{M}_i . Die Berechnung von künstlichen Datensätzen in Abschnitt 5.2.3 greift auf diese Aufzeichnungen zurück.

5.2.1 Farbpulvermischungen

Bei den Farbpulvermischungen werden vier verschiedene Farbpigmente des Herstellers Kremer Pigmente GmbH & Co. KG mit den Bezeichnungen Chromoxid-Grün, Eisenglimmer-Violett, Eisenoxid-Gelb und Ultramarin-

Blau zu Anteilstufen $\{0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1\}$ miteinander vermischt [121]. Es ergeben sich insgesamt 56 mögliche Kombinationen als Materialmischungen. In Abb. 5.3 sind die gemittelten Spektren der reinen Farbpigmente bzw. -pulver zu sehen. Es können zwei Besonderheiten bei den Farbpulvern beobachtet werden. Erstens neigen die Farbpulver zum Anhaften untereinander. Dadurch bilden sich zum Teil sichtbare Klümpchen bei den vermischten Farbpigmenten aus, die auch an der Oberfläche in den einzelnen Fächern des Setzkastens zum Vorschein treten (siehe Abb. 5.2). Dies kann als Ursache für eine verhältnismäßig ausgeprägte Spektrenvariabilität angesehen werden (siehe bspw. Abb. 3.5). Zweitens besitzen die meisten Farbpigmente Abmessungen von nur wenigen Nanometern bis hinzu 600 nm. Dieser Bereich überschneidet sich mit dem Wellenlängenbereich, der mit dem Versuchsaufbau für die hyperspektralen Aufzeichnungen zur Verfügung steht. Als Folge sind Mehrfachstreuungen der Photonen des einfallenden Lichts, wie bspw. die sog. Mie-Streuung [18], innerhalb der Mischproben möglich. Somit interagieren in Richtung der Kamera reflektierte Photonen mit mehreren Reinstoffen, was als Grund für nichtlineare Mischeffekte gilt (siehe Abschnitt 3.2.1). Es ergeben sich im Betrag teils hohe Abweichungen zwischen der Beschreibung der Mischspektren als rein lineare Überlagerung der Reinspektren und den gemessenen Mischspektren (siehe Abb. 4.6). Daraus folgt, dass eine genaue Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern für den Datensatz der Farbpulvermischungen, angesichts der gestellten Einschränkungen sowie Zielen nach Abschnitt 4.1.2, eine schwierig zu lösende Aufgabe darstellt.

5.2.2 Quarzsandmischungen

Für den Erhalt von Mischungen aus eingefärbten Quarzsanden werden zum einen vier verschiedene Quarzsande mit den Bezeichnungen Blau 5/104, Gelb 1/59, Grün 6/18 und Rot 3/4 des Herstellers Qsand miteinander vermischt. Die Materialanteilstufen werden gleich zu denen der Farbpulvermischungen gewählt. Zum anderen werden drei verschiedene Quarzsande mit den Bezeichnungen Blau 5/31, Gelb 1/17 sowie Rot 3/26 vermischt, wobei mit $\{0; 0,125; 0,25; 0,375; 0,5; 0,625; 0,75; 0,875; 1\}$ eine feinere Wahl der Anteilstufen erfolgt [135]. Es ergeben sich dadurch zwei Datensätze mit 56 möglichen Mischungen der vier Quarzsande und mit 45 möglichen Mischungen der drei Quarzsande. Es werden zwei



Abbildung 5.2 Ausschnitt eines Setzkastens befüllt mit händisch angefertigten Mischproben bestehend aus verschiedenen Farbpulvern.

gesonderte Setzkästen verwendet, die aufgezeichnet die Datensätze ergeben. Auch werden die Datensätze getrennt voneinander untersucht. Die gemittelten Reinspektren zu den einzelnen Quarzsanden sind in den Abbildungen 5.4–5.5 dargestellt.

Im Vergleich zu den Farbpulvermischungen besitzen die Quarzsande Abmessungen in einem kleineren Bereich von 100 bis 300 nm. Folglich muss erneut von Mehrfachstreuungen ausgegangen werden, die sich in den gemessenen Mischspektren widerspiegeln können. Wie Abb. 5.6 zeigt, sind die Mischungen der Quarzsande deutlich homogener als die der Farbpulvermischungen. Einzelne Klümpchenbildungen sind nicht zu sehen und die Oberfläche der befüllten Mischfächer erscheint glatter. Weiterhin ist eine Spektrenvariabilität beobachtbar, die nach Abb. 5.7 im betrachteten Wellenlängenbereich unterschiedlich stark auftritt. Die gemessenen Mischspektren weisen betragsmäßig deutlich kleinere Abweichungen zu den rein linear überlagerten Reinspektren im Vergleich zu der Farbpulvermischung auf (siehe bspw. Abb. 5.8). Somit sollte die Materialanteilschätzung bei den Datensätzen der Quarzsandmischungen der Erwartung gemäß genauer als bei den Farbpulvermischungen möglich sein.

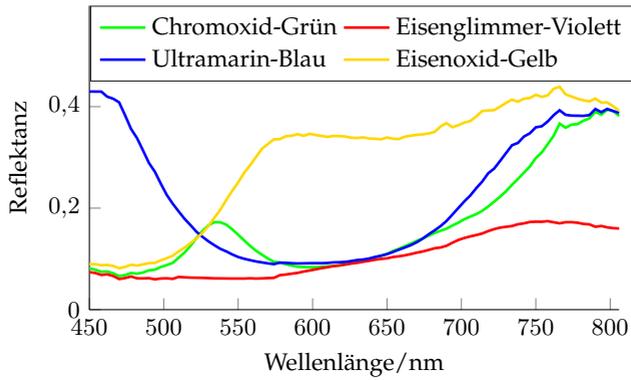


Abbildung 5.3 Reflektanz der Reinstoffe der Mischprobe aus vier verschiedenen Farbpigmenten im betrachteten Wellenlängenbereich.

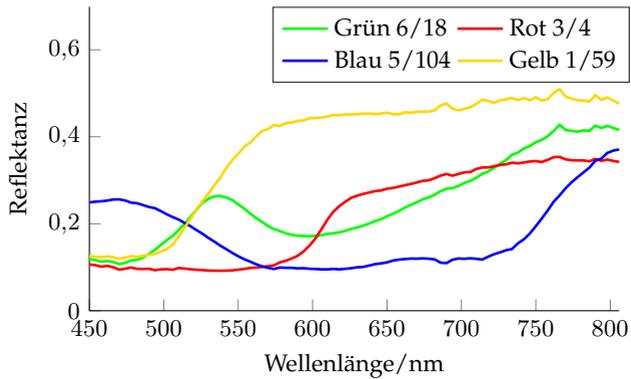


Abbildung 5.4 Reflektanz der Reinstoffe der Mischprobe aus vier verschiedenen Quarzsanden im betrachteten Wellenlängenbereich.

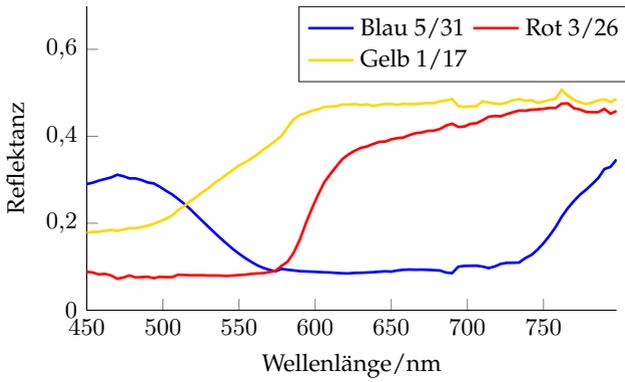


Abbildung 5.5 Reflektanz der Reinstoffe der Mischprobe aus drei verschiedenen Quarzsanden im betrachteten Wellenlängenbereich.



Abbildung 5.6 Ausschnitt eines Setzkastens befüllt mit händisch angefertigten Mischproben aus verschieden eingefärbten Quarzsanden.

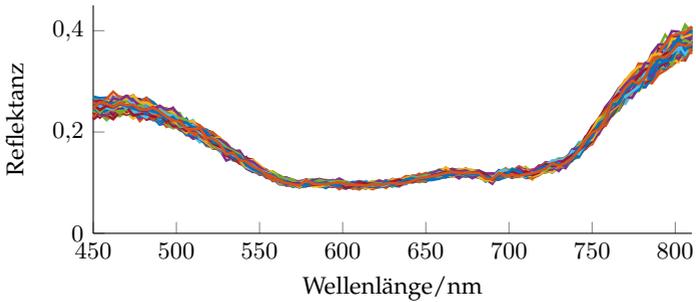


Abbildung 5.7 Spektren des Quarzsands Blau 5/104 aufgezeichnet an 100 Pixeln als Beispiel für die Spektrenvariabilität. Durch die Wahl unterschiedlicher Farben für die einzelnen Spektren werden die unterschiedlichen spektralen Verläufe deutlich.

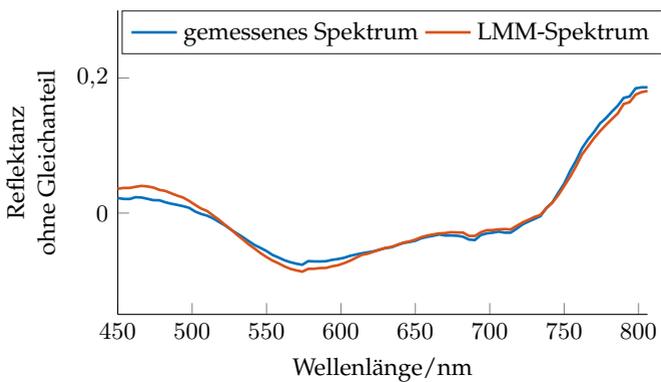


Abbildung 5.8 Nach Entfernen des spektralen Gleichanteils: Aufgezeichnetes Spektrum eines Mischfachs der Mischungen aus bis zu vier Quarzsanden gemittelt über alle Pixel und das Spektrum unter Verwendung des LMM (3.2) mit $\varepsilon = \mathbf{0}$.

5.2.3 Künstlicher Datensatz

Sämtliche Verfahren zur Berechnung von optischen Spektralfiltern berufen sich weitestgehend auf das LMM. Aus diesem Grund sollen auch das LMM den nachfolgenden künstlichen Datensätze zugrunde liegen, wobei die Möglichkeit bestehen soll, gezielt verschiedene Formen von Abweichungen zu der rein linearen Überlagerung der Reinspektren hinzuzufügen. Es liegt ein Augenmerk darauf, dass sowohl allgemeine Abweichungen als auch Abweichungen durch die Spektrenvariabilität, die als anteilsabhängige Abweichungen angesehen werden, unabhängig voneinander und in unterschiedlichen Stärken eingestellt werden können. Dadurch ist es möglich, die Methoden zur Materialanteilsschätzung auf Mischspektren anzuwenden, die festgelegte Abweichungen enthalten. Es sind nicht nur die wahren Materialanteile bekannt, sondern auch die Stärke und Art der Abweichungen. Als Folge können auch Auswertungen der Verfahren in Abhängigkeit von gewählten Abweichungen erfolgen.

Im Allgemeinen bieten sich neben dem LMM auch weitere Mischmodelle der Literatur an, um Datensätze zur Auswertung zu berechnen (siehe Abschnitt 3.2.1). Die Aussagefähigkeit der Auswertung solcher Datensätze ist jedoch nur bedingt allgemeingültig. Oftmals werden Parameter zum Erstellen der Datensätze festgelegt, die nicht unmittelbar im Zusammenhang zu einem bekannten Einfluss stehen, wie dieser bspw. durch die Spektrenvariabilität vorliegt. Somit eignet sich die Verwendung von solchen Mischmodellen vielmehr, falls eine Problemstellung gegeben ist, die möglichst genau modelliert werden soll. Es kann notwendig sein, um umfangreichere Auswertungen durchzuführen als diese, die mit den verfügbaren aufgezeichneten hyperspektralen Daten möglich sind.

Eine auf eine einzelne Problemstellung zugeschnittene Auswertung der Verfahren zur Materialanteilsschätzung wird in dieser Arbeit nicht angestrebt. Stattdessen sollen nur wenige Parameter zur Datenerzeugung notwendig sein, welche mit möglichst leicht einzusehenden Auswirkungen festgelegt werden können. Es wird deshalb das Mischmodell

$$\begin{aligned}
 \mathbf{y}_{\text{KD}} &= \underbrace{(\mathbf{M} + \Delta\mathbf{M})}_{:=\mathbf{M}_{\text{KD}}} \mathbf{a}_{\text{KD}} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{KD}} \\
 &= \mathbf{M} \mathbf{a}_{\text{KD}} + \Delta\mathbf{M} \mathbf{a}_{\text{KD}} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{KD}}
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

zur Berechnung von künstlichen Datensätzen vorgeschlagen. Das Mischspektrum $\mathbf{y}_{\text{KD}} \in \mathbb{R}^A$ ergibt sich somit aus der rein linearen Überlagerung der gemittelten Reinspektren in \mathbf{M} und den Abweichungen aufgrund von $\Delta\mathbf{M} = [\Delta\mathbf{m}_1, \dots, \Delta\mathbf{m}_P]^T \in \mathbb{R}^{A \times P}$, die mit den wählbaren Materialanteilen $\mathbf{a}_{\text{KD}} \in \mathbb{R}^P$ gewichtet werden, sowie allgemeinen Abweichungen $\varepsilon_{\text{KD}} \in \mathbb{R}^A$. Um künstliche Datensätze zu erzeugen, müssen $\Delta\mathbf{M}$, ε_{KD} und \mathbf{a}_{KD} vorgegeben werden. Dazu erfolgen für $\Delta\mathbf{M}$ und ε_{KD} jeweils Beschreibungen über multivariate Normalverteilungen $\mathcal{N}_{\Delta\mathbf{m}_i} \sim (\boldsymbol{\mu}_{\Delta\mathbf{m}_i}, \boldsymbol{\Sigma}_{\Delta\mathbf{m}_i})$ und $\mathcal{N}_{\varepsilon_{\text{KD}}} \sim (\boldsymbol{\mu}_{\varepsilon_{\text{KD}}}, \boldsymbol{\sigma}_{\varepsilon_{\text{KD}}}^2 \mathbf{I}_A)$. Mit dieser Wahl beschränkt sich das Mischmodell (5.4), abgesehen von \mathbf{a}_{KD} und der Größe des Datensatzes, auf $P \cdot (A^2 + A)$ Parameter für $\Delta\mathbf{M}$ sowie $2 \cdot A$ Parameter für ε_{KD} . Indem $\boldsymbol{\Sigma}_{\Delta\mathbf{m}_i}$ durch Berechnung der Kovarianzmatrix zu \mathcal{M}_i festgelegt wird, reduziert sich die Anzahl an freien Parameter auf $P \cdot A$ für $\Delta\mathbf{M}$. Um bspw. die Wurzeln der Diagonalelemente dieser Kovarianzmatrizen $\boldsymbol{\sigma}_{\Delta\mathbf{m}_i} = [\sigma_{\Delta m_{i1}}, \dots, \sigma_{\Delta m_{iA}}]^T$ leichter zu interpretieren und eine sinnvolle Bestimmung von $\boldsymbol{\sigma}_{\varepsilon_{\text{KD}}} = [\sigma_{\varepsilon_{\text{KD}1}}, \dots, \sigma_{\varepsilon_{\text{KD}A}}]^T$ zu ermöglichen, werden die Signal-Rauschverhältnisse

$$\text{SNR}_{\Delta m_{i\lambda}} = \frac{m_{i\lambda}}{\sigma_{\Delta m_{i\lambda}}} = 10 \cdot \lg \frac{m_{i\lambda}}{\sigma_{\Delta m_{i\lambda}}} \text{dB} \quad (5.5)$$

und

$$\text{SNR}_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}} = \frac{y_{\text{LMM}\lambda}}{\sigma_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}}} = 10 \cdot \lg \frac{y_{\text{LMM}\lambda}}{\sigma_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}}} \text{dB} \quad (5.6)$$

mit

$$\mathbf{y}_{\text{LMM}} = [y_{\text{LMM}1}, \dots, y_{\text{LMM}A}]^T = \mathbf{M} \mathbf{a}_{\text{KD}} \quad (5.7)$$

in Anlehnung an die üblichen Angaben in der Spektroskopie eingeführt [24]. Es ergeben sich greifbare Darstellungen für die im künstlichen Datensatz enthaltenen Parameter. Die systematischen Abweichungen $\boldsymbol{\mu}_{\Delta\mathbf{m}_i} = [\mu_{\Delta m_{i1}}, \dots, \mu_{\Delta m_{iA}}]^T$ und $\boldsymbol{\mu}_{\varepsilon_{\text{KD}}} = [\mu_{\varepsilon_{\text{KD}1}}, \dots, \mu_{\varepsilon_{\text{KD}A}}]^T$ können als vorzeichenbehaftete Verhältnisse $\mu_{\Delta m_{i\lambda}} = \frac{\Delta m_{i\lambda}}{m_{i\lambda}}$ und $\mu_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}} = \frac{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}}{y_{\text{LMM}\lambda}}$ angesehen werden. Da

$$\frac{m_{i\lambda} + \Delta m_{i\lambda}}{m_{i\lambda}} = 1 + \frac{\Delta m_{i\lambda}}{m_{i\lambda}} = 1 + \mu_{\Delta m_{i\lambda}} \quad (5.8)$$

sowie

$$\frac{y_{\text{LMM}\lambda} + \varepsilon_{\text{KD}\lambda}}{y_{\text{LMM}\lambda}} = 1 + \frac{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}}{y_{\text{LMM}\lambda}} = 1 + \mu_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}}, \quad (5.9)$$

sind auch die Festlegungen dieser Größen mit unmittelbar einsehbaren Auswirkungen in der Berechnung des künstlichen Datensatzes verbunden.

Die Materialanteile \mathbf{a}_{KD} werden durch die Anzahl an Stufen Q_{KD} bestimmt, da eine äquidistante Aufteilung des physikalisch sinnvollen Bereichs $[0, 1]$ vorgenommen wird. Es ergeben sich bspw. für $Q_{\text{KD}} = 11$ die möglichen Materialanteile $\{0; 0,1; 0,2; \dots; 0,9; 1\}$, womit sämtliche Mischkombinationen der P Materialien erzeugt werden. Das Mischspektrum \mathbf{y}_{KD} unterliegt einem Zufallsprozess. Es bestimmen die Anzahl an Realisierungen $N_{\mathbf{a}_{\text{KD}}}$ für ein festes \mathbf{a}_{KD} sowie Q_{KD} und P die Größe des künstlichen Datensatzes. Nach dem gewählten Ansatz zur Berechnung von Mischspektren besitzt jedes Mischspektrum eine andere Reinspektrenmatrix \mathbf{M}_{KD} und allgemeine Abweichung ε_{KD} .

Die Verwendung von künstlichen Datensätzen bietet die Möglichkeit, zahlreichere Auswertungen durchzuführen, als diese bei händisch angefertigten Mischproben in einem angemessenen Zeitrahmen möglich wären. Zudem sind gezielte Eingriffe in einen Datensatz nur dadurch möglich. Im Rahmen dieser Arbeit werden die künstlichen Datensätze insbesondere auch zur Verwendung der Klassifikationsverfahren benötigt. Es müssen hier Zugriffe auf bekannte Mischspektren für das Training innerhalb dieser Methoden unter den gesetzten Einschränkungen der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern bereitgestellt werden. Durch die Verwendung der aufgezeichneten Reinspektren der Farbpulver bzw. der eingefärbten Quarzsande beim Erstellen der Trainingsdatensätze bestehen Zusammenhänge zur unbekanntem Mischprobe.

Das vorgeschlagene Mischmodell (5.4) kann beliebig erweitert werden. Indem z. B. auch keine Diagonalmatrix als Kovarianzmatrix für die Beschreibung der allgemeinen Abweichungen verwendet wird, kann berücksichtigt werden, dass benachbarte Wellenlängenkanäle häufig korreliert sind [116]. Durch solche Maßnahmen erhöht sich die Anzahl an festzulegenden Parametern jedoch schnell erheblich, was bei der Erzeugung künstlicher Datensätze in dieser Arbeit gerade vermieden werden soll.

5.3 Bewertung

Für die Bewertung von geschätzten Materialanteilen, die über eines der Verfahren zum Entwurf dafür geeigneter optischer Spektralfilter ermittelt wurden, werden der Effektivwert des Fehlers E_{RMS} und die Bewertungsgrößen für das Einhalten der NN- und STO-Bedingungen mit Δ_{NN} bzw. Δ_{STO} nach Abschnitt 4.1.2 verwendet. Es stehen bei den Farbpulver- und Quarzsandmischungen aufgrund der Ausmaße der Setzkästen und des Versuchsaufbaus 400 Mischspektren je Mischfach zur Verfügung. Bei den künstlichen Datensätzen wird mit $N_{\text{aKD}} = 400$ die gleiche Anzahl gewählt. Die Materialanteilsschätzung erfolgt mit dem über allen 400 Pixeln gemittelten Mischspektrum eines Mischfachs. Somit kann für jedes Mischfach o , $o = 1, \dots, O$ und O der Anzahl an Mischfächern, eine Materialanteilsschätzung erfolgen. Es lässt sich jeweils ein Wert der Bewertungsgrößen $E_{\text{RMS}o}$, $\Delta_{\text{NN}o}$ und $\Delta_{\text{STO}o}$ bestimmen. Um einen Datensatz insgesamt zu bewerten, werden $E_{\text{RMS}o}$, $\Delta_{\text{NN}o}$ und $\Delta_{\text{STO}o}$ über alle Mischfächer gemittelt:

$$\bar{E}_{\text{RMS}} = \frac{1}{O} \sum_{o=1}^O E_{\text{RMS}o}, \quad (5.10)$$

$$\bar{\Delta}_{\text{NN}} = \frac{1}{O} \sum_{o=1}^O \Delta_{\text{NN}o}, \quad (5.11)$$

$$\bar{\Delta}_{\text{STO}} = \frac{1}{O} \sum_{o=1}^O \Delta_{\text{STO}o}. \quad (5.12)$$

Es können dadurch die Bewertungsgrößen zwischen den Datensätzen verglichen werden sowie für jede Materialanteilszusammensetzung in einem Datensatz beobachtet werden. In den Tabellen A.1–A.2 in Abschnitt A.1 werden dazu für die verwendeten Datensätze die wahren Materialanteile über den indizierten Mischfächern o aufgeführt. Fächer mit reinen Materialien fließen nicht in die Bewertung ein, da deren Spektren mit \mathcal{M}_i bzw. \mathbf{M} aufgezeichnet in den Verfahren zur Bestimmung der optischen Spektralfilter enthalten sind. Diese entsprechen während der Materialanteilsschätzungen aufgezeichneten Mischspektren, die nach Abschnitt 4.1.2 nicht verfügbar sind.

Die Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern erfolgt über ein Verfahren, das sich aus der Zusammensetzung von ausgewählten Methoden in den einzelnen Stufen nach Abb. 4.10 ergibt. Aufgrund der teils zahlreichen Auswahlmöglichkeiten (siehe Tabelle 4.1) ist eine hohe Anzahl an Kombinationen und somit an Verfahren zur Materialanteilsschätzung möglich. Abbildung 5.9 zeigt dazu die einzelnen Stufen aus Abb. 4.10 zusammen mit den Auswahlmöglichkeiten in Tabelle 4.1 zu einem Ablaufschema angeordnet. In den nachfolgenden Abschnitten werden bei mehreren Auswahlmöglichkeiten von Methoden in den Stufen Bandselektion und Materialerkennung die Ergebnisse jeweils nur einer Auswahl gezeigt. In der Stufe Materialanteilsschätzung werden dagegen die Ergebnisse sämtlicher Methoden sowohl innerhalb der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen als auch innerhalb der Bestimmung von kontinuierlichen Materialanteilen jeweils miteinander verglichen. Bei der Klassifikation quantisierter Materialanteile und der iterativen Materialanteilsschätzung werden die Ergebnisse mit den Ergebnissen durch Verwendung der PSE und bei gleicher Wahl in den Stufen Bandselektion und Materialerkennung sowie bei der Wahl von keinen der in diesen Stufen möglichen Methoden verglichen.

Die künstlichen Datensätze werden als Trainingsdatensätze sowohl für die Materialerkennung als auch für die Klassifikation von quantisierten Materialanteilen verwendet. Es erfolgt jedoch keine Schätzung von Materialanteilen der künstlichen Datensätze innerhalb der Auswertung. Bei einem Verfahren, das ein Klassifikationsverfahren aufgrund der Wahl für eine Materialerkennung oder für eine Bestimmung von quantisierten Materialanteilen enthält, widerspricht die Untersuchung des künstlichen Datensatzes den formulierten Herausforderungen in Abschnitt 4.1.2. Die Methode zur Materialanteilsschätzung würde Mischspektren, deren Materialanteile zu bestimmen sind, auch für den Entwurf optischer Spektralfilter verwenden. Insbesondere ist in einer realen Anwendung von einer solch hohen Ähnlichkeit zwischen Trainingsdatensatz und der zu untersuchenden Mischprobe nicht auszugehen.

5.3.1 Parameterwahl

Die Auswertung behandelt zu den Datensätzen der Farbpulvermischung und der beiden Mischungen der eingefärbten Quarzsande drei künstliche

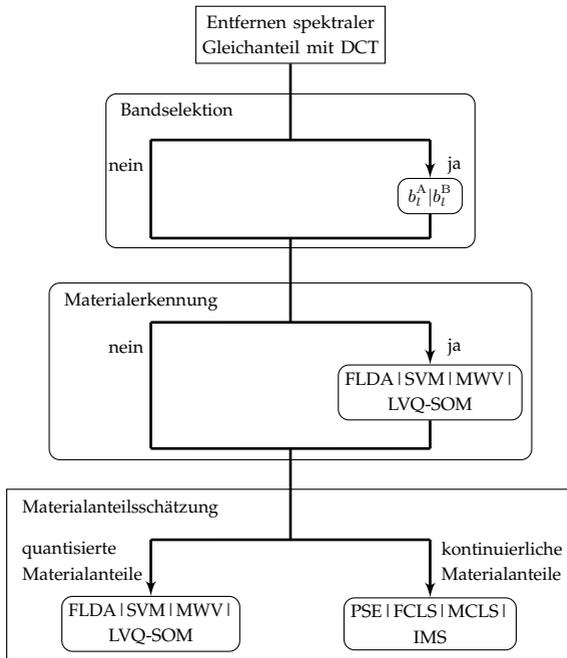


Abbildung 5.9 Schema der einzelnen Auswahlmöglichkeiten zum Entwurf von optischen Spektralfiltern für eine Materialanteilsschätzung: Stets angewendete Stufen sind eckig umrandet. Abgerundete Rahmen kennzeichnen wählbare Stufen und Verfahren.

Datensätze, die jeweils die aufgezeichneten Reinspektren der händisch angefertigten Materialmischungen enthalten. Dabei werden die Anzahl an Stufen mit $Q_{\text{KD}} = 6$ bei 4 Materialien bzw. $Q_{\text{KD}} = 9$ bei 3 Materialien so festgelegt, dass sich die gleichen Materialanteilstufen wie in den händisch angefertigten Materialmischungen ergeben. Die verbleibenden Parameter sind zu $\mu_{\Delta m_{i\lambda}} = -0,05$, $\mu_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}} = 0$ und $\text{SNR}_{\varepsilon_{\text{KD}\lambda}} = 15 \text{ dB } \forall \lambda$ in sämtlichen Datensätzen frei gewählt. Durch das Entfernen des spektralen Gleichanteils mit der DCT wirkt sich $\mu_{\Delta m_{i\lambda}}$ besitzt bei gleicher Wahl von $\mu_{\Delta m_{i\lambda}}$ über alle Wellenkanäle keine Auswirkung. Mit dem negativen Vorzeichen bei $\mu_{\Delta m_{i\lambda}}$ wird berücksichtigt, dass gemessene Reflektanzwerte meist niedriger liegen als Reflektanzwerte nach einer rein linear gewichteten Überlagerung der gemittelten Reinspektren (vgl. Abb. 4.5).

Für die Bestimmung quantisierter Materialanteile werden Klassifikationsverfahren eingesetzt, die zum Training einen künstlichen Datensatz nach Abschnitt 5.2.3 verwenden. Die Parameter zur Berechnung dieser Datensätze sind für die Anwendung sowohl der Farbpulver- als auch der Quarzsandmischungen stets gleich gewählt. Unterschiede zwischen berechneten Datensätzen für einen Typ von Materialmischung können sich dennoch ergeben, da Realisierungen von Zufallsgrößen enthalten sind. Somit können sich mit jedem neu berechneten Datensatz auch die Ergebnisse der Klassifikation quantisierter Materialanteile unterscheiden, da die Klassifikationsverfahren nach dem Training verschieden sind. Für die Bewertung der quantisierten Materialanteile werden bei allen Klassifikationsverfahren stets die gleichen künstlichen Datensätze zum Training verwendet. Selbiges gilt für die Erkennung von Materialien (siehe Abschnitt 4.7.1), die u. a. in Abschnitt 5.3.2.2 sowie Abschnitt 5.3.3.2 enthalten ist.

Bei den Methoden zur Klassifikation FLDA, SVM und MWV sind über die in Abschnitt 2.2 genannten Festlegungen hinaus keine weiteren Parameter zu bestimmen. Für die LVQ-SOM müssen eine Kartengröße über die Anzahl an Neuronen und eine Struktur gewählt werden. In sämtlichen Auswertungen erfolgt die Wahl nach den als bekannt vorausgesetzten Anteilstufen. Für 6 Anteilstufen bei $P = 4$ Materialien wird die Struktur nach Abb. 5.10(a) bestehend aus 12 Neuronen gewählt. Liegen neun Anteilstufen bei $P = 4$ Materialien vor, werden 21 Neuronen benutzt mit der Anordnung in Abb. 5.10(b). Die Entscheidungen begründen sich

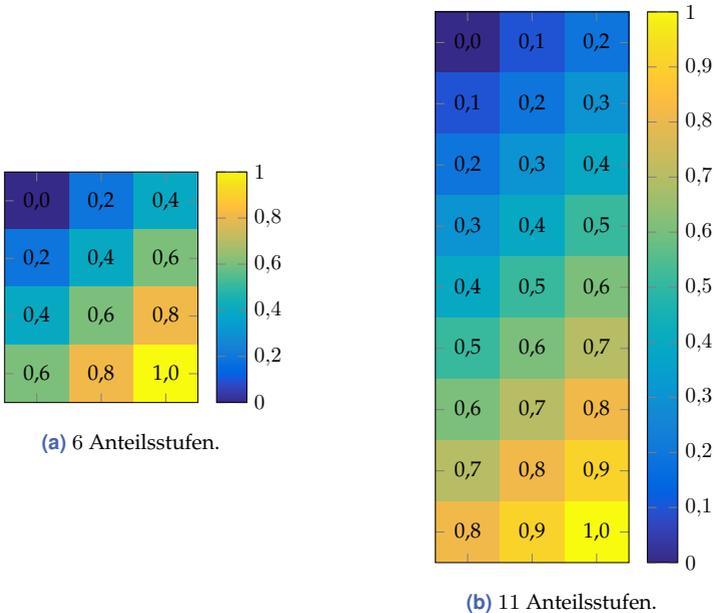


Abbildung 5.10 Anteilswerte der Neuronen unter Verwendung der LVQ-SOM bei unterschiedlicher Anzahl von Anteilsstufen.

dadurch, dass für Anteilsstufen eines Materials in etwa mittig zwischen 0 und 1 möglicherweise eine stärkere Varianz im Datensatz vorliegt als dies bspw. für $a_Q = 1$ der Fall ist. Somit erscheint eine höhere Anzahl an Neuronen für diese Klassen sinnvoll. Die Anzahl an Trainingsschritten wird mit $T = 15 \cdot |\mathcal{D}|$ als ein Vielfaches der Größe des Datensatzes gewählt. Die Lernrate zu Beginn wird auf $l[0] = 0,8$ gesetzt. Als Nachbarschaftsfunktion im Training wird die Gauß-Funktion verwendet, wodurch die genutzte Implementierung zur LVQ-SOM in der *somtoolbox* für *Matlab* parametrisiert ist.

Bei den iterativen Verfahren zur Materialanteilsschätzung wird die maximale Anzahl an Iterationen auf $S = 400$ gesetzt. Die iterative Materialanteilsschätzung mit dem FCLS-Algorithmus enthält keine weiteren festzulegende Parameter (siehe Abschnitt 4.6.1). Beim MCLS-Algorithmus müssen die Schwellenwerte ϵ_{MCLS1} , ϵ_{MCLS2} gewählt und die Gewichte t_{MCLS1} ,

t_{MCLS2} initialisiert werden. Dabei erfolgt die Wahl im Rahmen der Auswertungen mit $\epsilon_{\text{MCLS1}} = \epsilon_{\text{MCLS2}} = 0,01$ sowie $t_{\text{MCLS1}} = t_{\text{MCLS2}} = 10000$ nach Empfehlungen in [29]. Im neu entwickelten IMS-Verfahren wird die Stärke der Veränderungen der Reinspektrenmatrizen auf $C = 0,05$ gesetzt. Mit dieser Wahl wird S in keiner der durchgeführten Auswertungen erreicht und stellt somit kein Abbruchkriterium dar.

Nachfolgend werden die Ergebnisse entsprechend der beschriebenen Vorgehensweise aufgeführt. Nach der Entscheidung für oder gegen eine Bandselektion erfolgt eine Unterteilung in die Klassifikation quantisierter Materialanteile und die Schätzung kontinuierlicher Materialanteile mit den übrigen Verfahren, die im Allgemeinen der iterativen Materialanteilsschätzung zugeordnet werden. Die Entfernung des spektralen Gleichanteils mithilfe der diskreten Kosinustransformation ist bei allen Auswertungen enthalten, da sich mit dieser Stufe stets Verbesserungen der Bewertungsgrößen zu den ermittelten Materialanteilsschätzungen ergeben.

5.3.2 Ergebnisse mit Bandselektion

Die Auswertung von geschätzten Materialanteilen bei Verwendung einer Bandselektion erfolgt im Folgenden unter Einsatz von (4.26) mit b_i^B zur Bewertung einzelner Bandbereiche. Die Ergebnisse, die sich aus der Bewertung mit b_i^A ergeben, d. h. es erfolgt kein expliziter Einbezug der Spektrenvariabilität innerhalb der Bandbereiche (siehe Abschnitt 4.4.2), sind in Abschnitt A.2 aufgeführt. Bei sämtlichen Datensätzen werden zehn Bandbereiche ausgewählt, was bei Materialmischungen bestehend aus $P = 4$ Materialien $\Lambda = 50$ aus $\Lambda_{\text{max}} = 90$ gewählte Wellenlängenkanäle bedeutet. Bei Materialmischungen mit $P = 3$ Materialien werden dagegen $\Lambda = 40$ aus $\Lambda_{\text{max}} = 88$ Wellenlängenkanälen beibehalten. In sämtlichen Verfahren zur Bandselektion setzt sich ein Bandbereich aus $P + 1$ Wellenlängenkanälen zusammen. Im Allgemeinen unterscheiden sich die Ergebnisse bei einer leicht veränderten Anzahl an gewählten Bandbereichen nur wenig. Eine Umsetzung der optischen Spektralfilter zur Materialanteilsschätzung in einer Hardware liefert womöglich zusätzliche Vorgaben, die in der Auswahl der Bandbereiche mit zu berücksichtigen wären.

5.3.2.1 Klassifikation quantisierter Materialanteile

Die Ergebnisse der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer können Tabelle 5.1 entnommen werden. Bei der Anwendung der PSE, deren Materialanteilsschätzungen als Referenz dienen, zeigt sich, dass die Farbpulvermischung höhere \bar{E}_{RMS} im Vergleich zu beiden betrachteten Quarzsandmischungen aufweisen. Dagegen befinden sich $\bar{\Delta}_{\text{STO}}$ und $\bar{\Delta}_{\text{NN}}$ in einem ähnlichen Bereich. Die quantisierten Materialanteilsschätzungen sämtlicher Klassifikationsverfahren führen aufgrund der zugrundeliegenden Vorgehensweise stets zu $\bar{\Delta}_{\text{NN}} = 0$. Im Bezug auf \bar{E}_{RMS} gibt es bei sämtlichen Datensätzen mindestens ein Verfahren, das zu einer Verbesserung führt. Insbesondere bei den Farbpulvermischungen weisen alle Klassifikationsergebnisse geringere Werte auf. Demgegenüber sind Verschlechterungen bezüglich $\bar{\Delta}_{\text{STO}}$ bei sämtlichen Klassifikationsverfahren im Vergleich zur PSE zu beobachten.

Zwischen den Methoden FLDA und SVM sowie LVQ-SOM und MWV liegen Ähnlichkeiten in den Ergebnissen der quantisierten Materialanteile gemittelt über alle Mischfächer nach \bar{E}_{RMS} vor. Mit den vergleichbaren Trainingsvorgängen der FLDA und der SVM sowie dem ähnlichen Prinzip der Ermittlung der Klassenzugehörigkeit bei der LVQ-SOM und dem MWV kann eine mögliche Erklärung für diese Beobachtung gefunden werden. Es ist bemerkenswert, dass der zur LVQ-SOM verhältnismäßig einfache Ansatz im MWV für die Bestimmung der optischen Spektralfilter zu ähnlichen oder genaueren Ergebnissen, gemessen an den Bewertungsgrößen, führt. Für das MWV müssen weniger Parameter festgelegt werden. Gegenüber der FLDA und der SVM sind die Werte des \bar{E}_{RMS} bei der LVQ-SOM und dem MWV zwar deutlich höher, jedoch sind einzig diese Verfahren zur Materialanteilsschätzung invariant gegenüber der Beleuchtung. Besonders hoch fällt die Verschlechterung in den Mischungen der Quarzsande aus. Bei der Farbpulvermischung besitzt dagegen das MWV den geringsten \bar{E}_{RMS} sämtlicher Verfahren, was für $\bar{\Delta}_{\text{STO}}$ nicht gilt.

Die Auswertungen der Bewertungsgrößen in den einzelnen Mischfächern zeigen deutliche Unterschiede zwischen den Verfahren, auch wenn gemittelt ähnliche Ergebnisse vorliegen (siehe Abbildungen 5.11–5.16). Dabei ist zu sehen, dass höhere $\bar{\Delta}_{\text{STO}}$ der Klassifikationsverfahren gegenüber der PSE durch vereinzelt sehr hohe Δ_{STO} verursacht werden. In den meisten Mischfächern gibt es mindestens ein Klassifikationsverfahren,

Tabelle 5.1 Vergleich der klassifizierten und geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer: Zu sehen sind die Ergebnisse bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$
PSE	0,3299	0,1364	0,0486	0,1307	0,1642	0,0740	0,1061	0,0992	0,0470
FLDA	0,2779	0,1692	0,0000	0,1046	0,1548	0,0000	0,1006	0,1923	0,0000
SVM	0,2639	0,2154	0,0000	0,1119	0,1458	0,0000	0,0937	0,1808	0,0000
LVQ-SOM	0,3105	0,5808	0,0000	0,2078	0,1875	0,0000	0,3140	0,7115	0,0000
MWV	0,2402	0,3885	0,0000	0,2286	0,2946	0,0000	0,2515	0,5077	0,0000

welches geringere E_{RMS} und Δ_{STO} aufweist.

5.3.2.2 Iterative Materialanteilsschätzung

Mit den Methoden der iterativen Schätzverfahren zur Materialanteilsbestimmung sollen sowohl geringe Δ_{NN} als auch geringe Δ_{STO} erzielt werden. Kennzeichnend ist bei diesen Verfahren die Verwendung von aufgezeichneten Intensitätsbildern, wie bspw. die Materialanteilsschätzung, der vorherigen Iterationen. In der Tabelle 5.2 sind die über alle Mischfächer gemittelten Bewertungsgrößen der Schätzungen nach Anwendung der iterativen Verfahren auf die einzelnen Datensätze zu sehen.

Im Datensatz der vermischten Farbpulver erreichen sämtliche iterative Verfahren einen geringeren \bar{E}_{RMS} gegenüber der PSE. Bei beiden Quarzsandmischungen können nur mit dem MCLS und der IMS ähnliche Werte im Vergleich zur PSE erzielt werden, wohingegen der FCLS-Algorithmus zu einer Verschlechterung führt. Die Bewertungsgrößen $\bar{\Delta}_{NN}$ und $\bar{\Delta}_{STO}$ können mithilfe des MCLS-Algorithmus und dem IMS-Verfahren in allen Datensätzen verbessert werden. Die Methoden FCLS und MCLS führen bedingt durch den jeweils dahinter stehenden Algorithmus zwangsläufig zu $\bar{\Delta}_{STO} = 0$. Das Ergebnis $\bar{\Delta}_{NN} = 0$ in sämtlichen Datensätzen nach Verwendung von MCLS muss im Allgemeinen nicht stets vorliegen. Ebenso bedingt durch die Vorgehensweise verschlechtern sich beim IMS-Verfahren in keinem Fall $\bar{\Delta}_{NN}$ und $\bar{\Delta}_{STO}$ gegenüber der PSE.

Insgesamt sind die Streuungen der Bewertungsgrößen im Allgemeinen

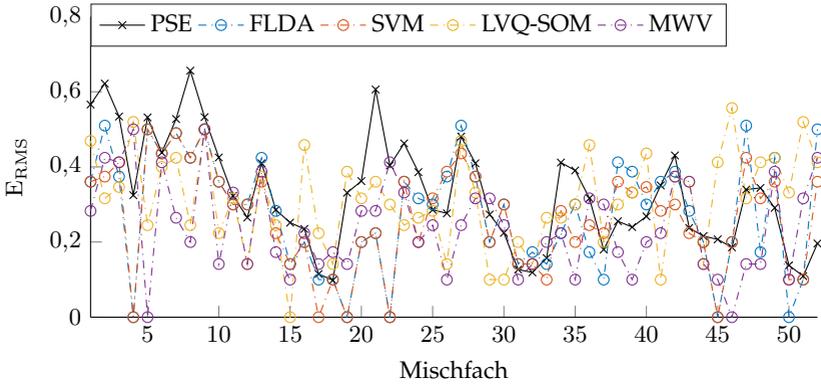


Abbildung 5.11 Farbpulvermischung: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

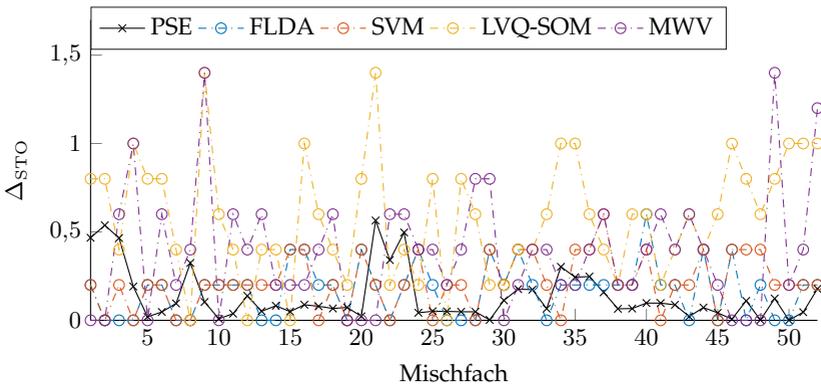


Abbildung 5.12 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

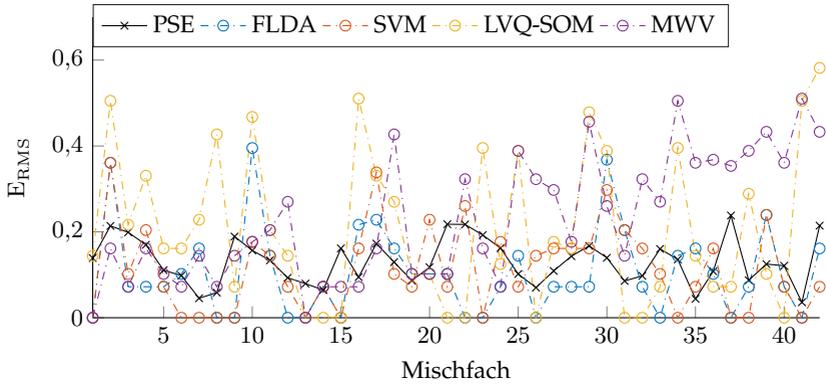


Abbildung 5.13 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

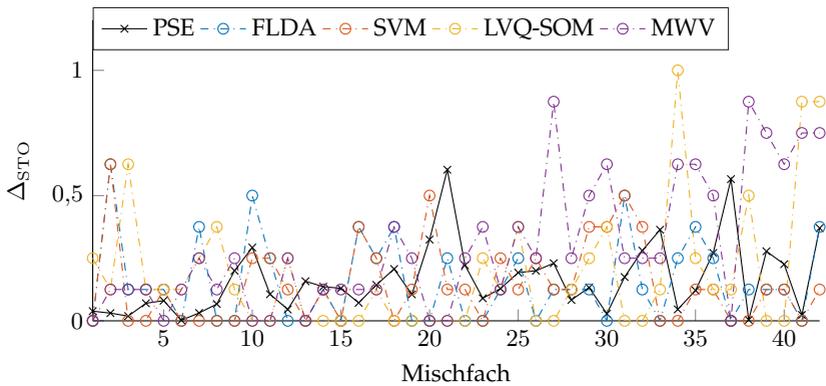


Abbildung 5.14 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

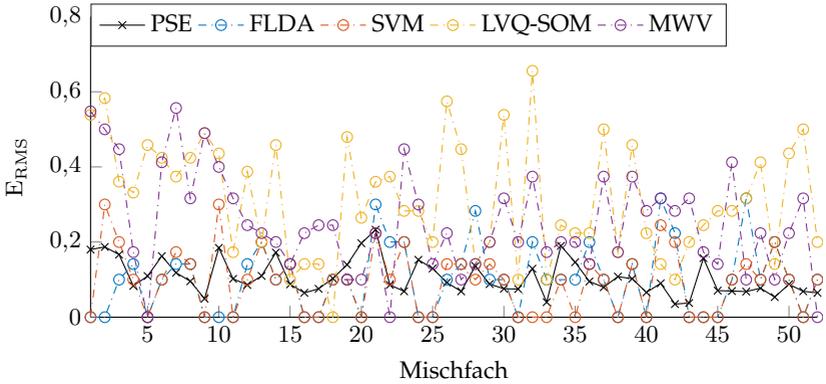


Abbildung 5.15 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

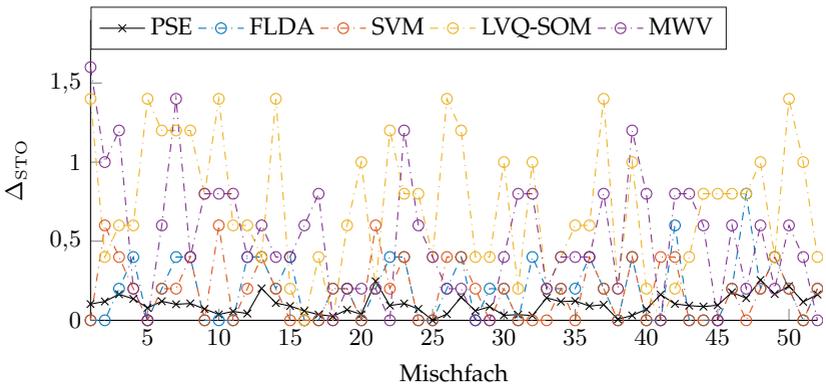


Abbildung 5.16 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

und insbesondere von \bar{E}_{RMS} zwischen den iterativen Verfahren geringer als bei der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen. In den einzelnen Mischfächern der Datensätze sind dagegen auch Unterschiede der iterativen Verfahren abzulesen (siehe Abbildungen 5.17–5.25). Allerdings liegen keine vereinzelte erhebliche Verschlechterungen gegenüber der PSE vor. Die Verfahren MCLS und IMS zeigen gegenüber der PSE die größten Ähnlichkeit, wohingegen mit dem FCLS-Algorithmus größere Unterschiede und im Einzelnen auch schlechtere Ergebnisse auftreten.

In Tabelle 5.3 sind die Ergebnisse der über alle Mischfächer gemittelten Bewertungsgrößen aufgeführt, die aus der Anwendung der PSE oder eines iterativen Verfahrens nach einer vorherigen Materialerkennung resultieren. Es zeigen sich dabei nur geringfügige Veränderungen gegenüber den Ergebnissen ohne Materialerkennung. In den Abbildungen 5.26–5.28 ist beispielhaft der Vergleich des E_{RMS} mit und ohne Materialerkennung beim IMS-Verfahren in den Datensätzen aufgetragen über den einzelnen Mischfächern zu sehen.

Tabelle 5.2 Vergleich der geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE und der iterativen Verfahren anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer: Zu sehen sind die Ergebnisse bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^B und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$
PSE	0,3299	0,1364	0,0486	0,1307	0,1642	0,0074	0,1061	0,0992	0,0470
FCLS	0,2881	0,2351	0,0000	0,2032	0,3718	0,0000	0,1289	0,2072	0,0000
MCLS	0,2921	0,0000	0,0000	0,1193	0,0000	0,0000	0,0996	0,0000	0,0000
IMS	0,2950	0,0815	0,0131	0,1327	0,1623	0,0024	0,1066	0,0800	0,0132

5.3.2.3 Fazit

Die Materialanteilsschätzung mithilfe der PSE und einer Bandselektion führt bei sämtlichen Datensätzen zu Abweichungen der NN- und STO-Bedingungen. Besonders hoch sind diese Abweichungen in der Farbpulvermischung, wobei hier auch hohe \bar{E}_{RMS} zu beobachten sind. Die Klassifikationsverfahren können Abweichungen von der NN-Bedingung vermeiden. Eine Verbesserung in den übrigen Bewertungsgrößen wird nicht

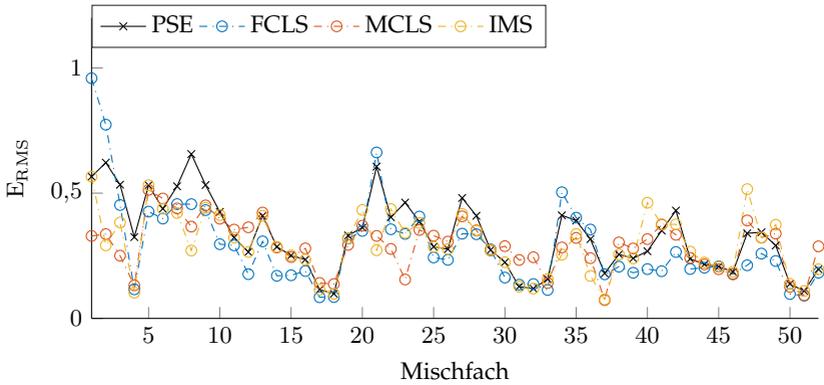


Abbildung 5.17 Farbpulvermischung: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^{B} .

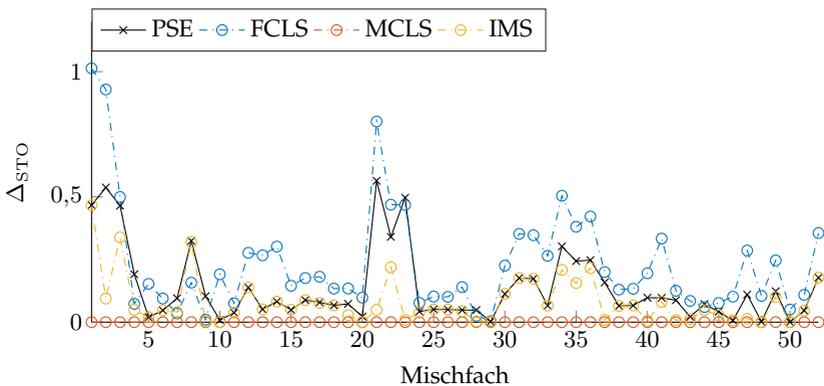


Abbildung 5.18 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^{B} .

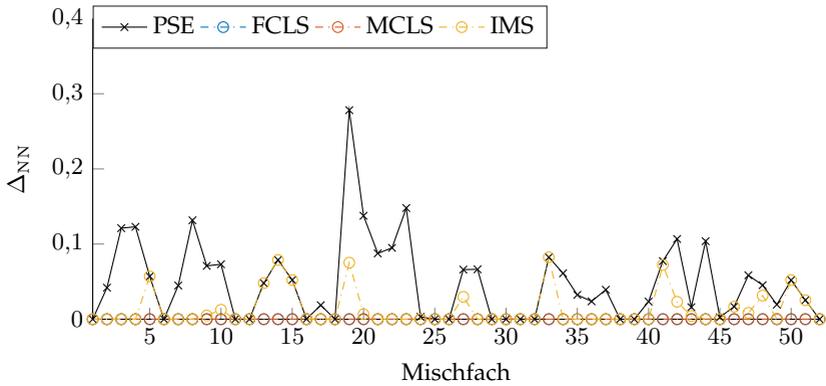


Abbildung 5.19 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

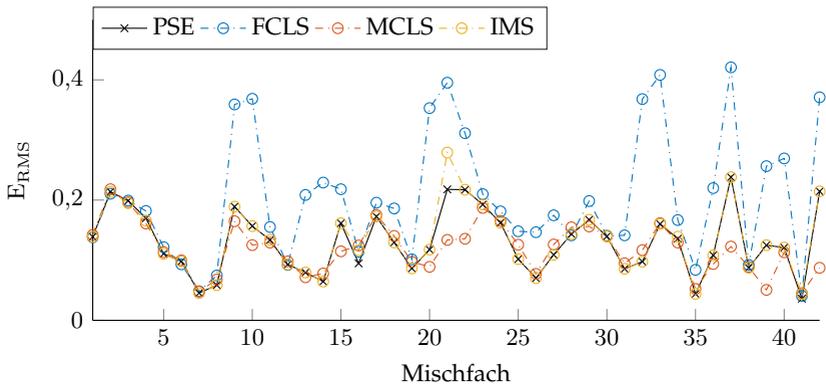


Abbildung 5.20 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

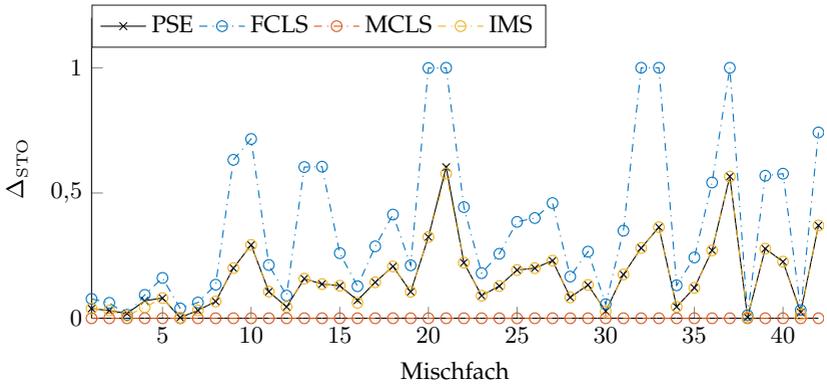


Abbildung 5.21 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

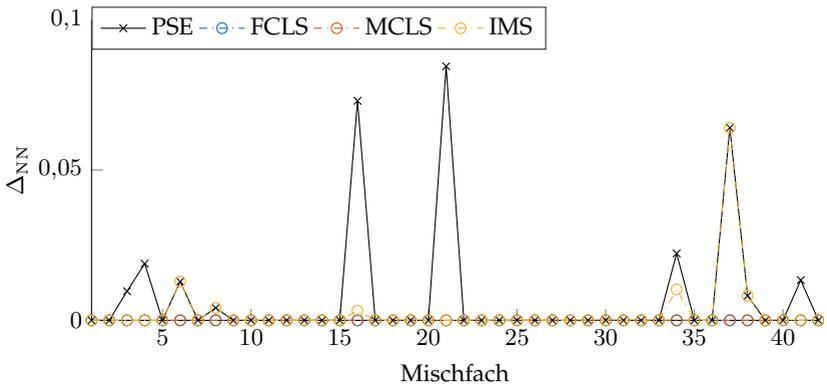


Abbildung 5.22 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

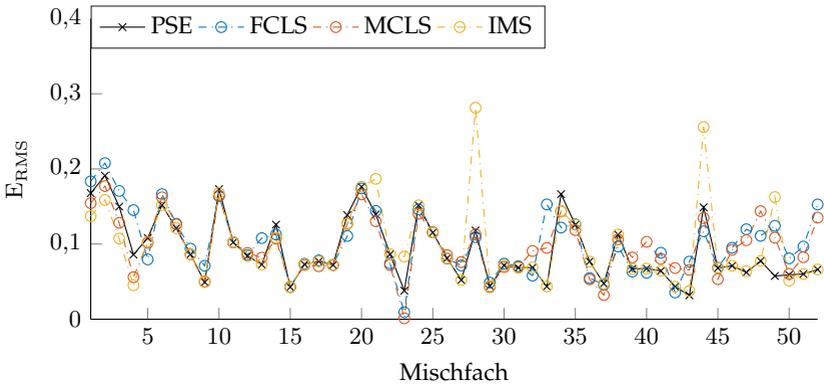


Abbildung 5.23 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

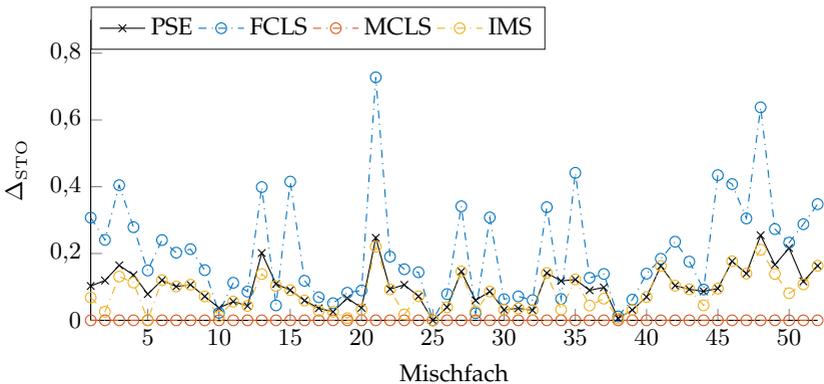


Abbildung 5.24 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

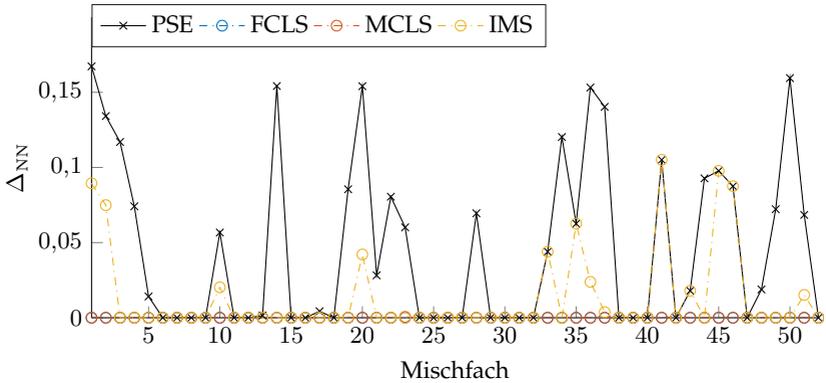


Abbildung 5.25 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B .

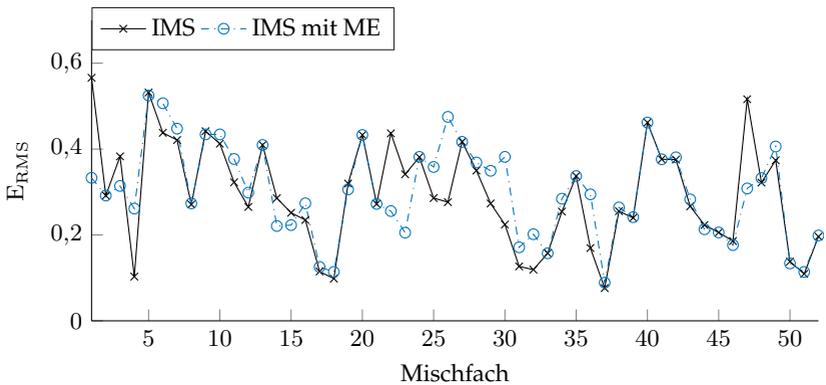


Abbildung 5.26 Farbpulvermischung: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B sowie mit und ohne Materialerkennung (ME) für das IMS-Verfahren.

5 Auswertung

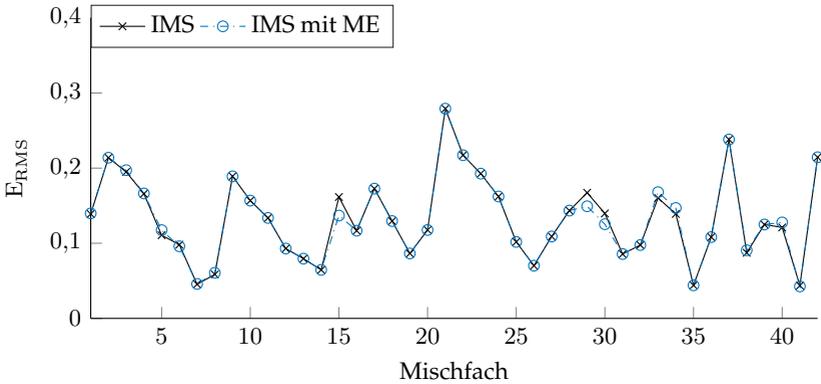


Abbildung 5.27 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B sowie mit und ohne Materialerkennung (ME) für das IMS-Verfahren.

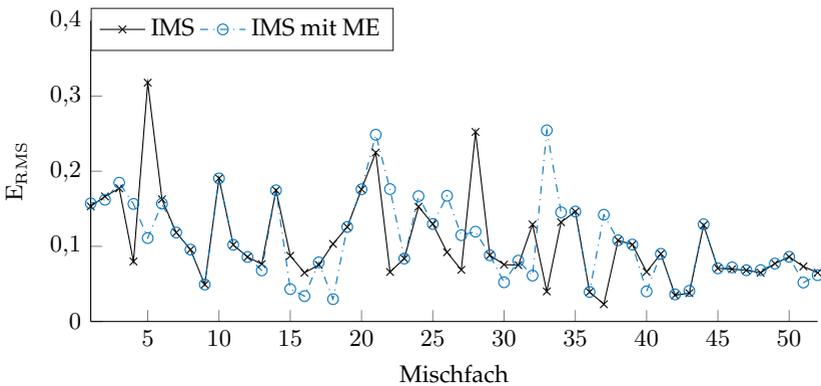


Abbildung 5.28 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B sowie mit und ohne Materialerkennung (ME) für das IMS-Verfahren.

Tabelle 5.3 Vergleich der geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE und der iterativen Verfahren anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer: Zu sehen sind die Ergebnisse bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^B und der Auswahl von 10 Bandbereichen sowie einer Materialerkennung mit der SVM als Bestandteil zur Erkennung.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$
PSE	0,3208	0,0927	0,0272	0,1302	0,1652	0,0053	0,1039	0,1008	0,0263
FCLS	0,2889	0,1734	0,0000	0,2025	0,3689	0,0000	0,1264	0,2028	0,0000
MCLS	0,3022	0,0000	0,0000	0,1131	0,0000	0,0000	0,0932	0,0000	0,0000
IMS	0,3019	0,0620	0,0087	0,1322	0,1644	0,0016	0,1080	0,0903	0,0068

stets erreicht. Es treten auch teilweise erheblich ungenauere Schätzungen auf. In Abhängigkeit der Anwendung können diese gerechtfertigt werden, da mit der LVQ-SOM und dem MWV die einzigen Verfahren vorliegen, die auch gegenüber der Beleuchtung invariant sind.

Anhand der Ergebnisse in den betrachtenden Datensätzen besteht bei den iterativen Verfahren eine geringere Gefahr von starken Verschlechterungen in der Genauigkeit der geschätzten Materialanteile gegenüber der PSE. Dafür sind auch keine wesentlichen Verbesserungen zu beobachten, falls die PSE zu ungenauen Ergebnissen führt. Die Materialerkennung kann meist keine Verbesserung der Bewertungsgrößen erzielen. Der Einsatz der Materialerkennung erhöht zunächst die Anzahl an notwendigen optischen Spektralfiltern. Dafür kann die Gesamtanzahl an optischen Spektralfiltern nach Anwendung eines der iterativen Verfahren bei sehr vielen Iterationsschritten mit der Materialerkennung geringer sein. In Abhängigkeit der Hardwarerealisierung kann dies ggf. ein wesentlicher Vorteil sein, indem sich bspw. die örtliche Auflösung erhöht. Dadurch ist der Materialerkennung dennoch eine nützliche Rolle zuzuschreiben, deren Bedeutung neben der Hardwarerealisierung auch anhand von wesentlich umfangreicheren Anwendungen erst bewertet werden kann.

5.3.3 Ergebnisse ohne Bandselektion

In den nachfolgenden Abschnitten erfolgen die Klassifikation quantisierter Materialanteile und die Anwendung iterativer Verfahren zur Material-

anteilsschätzung ohne Bandselektion. Demnach werden bei den Materialmischungen bestehend aus bis zu vier Materialien sämtliche 22 bzw. bei Mischungen bestehend aus bis zu drei Materialien sämtliche 18 zur Verfügung stehende Bandbereiche betrachtet. Die jeweils insgesamt zur Verfügung stehenden Bandbereiche L ergeben sich aus der maximalen Anzahl an Wellenlängenkanälen λ_{\max} und der Anzahl an Materialien P (siehe Abschnitt 4.4.2). Somit ist lediglich die Entfernung des spektralen Gleichanteils als Maßnahme zur Reduktion der Abweichungen zwischen einem Mischspektrum und der gewichteten rein linearen Überlagerung der gemittelten Reinspektren beim Entwurf optischer Spektralfilter für eine Materialanteilsbestimmung inbegriffen.

5.3.3.1 Klassifikation quantisierter Materialanteile

Die Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer der einzelnen Datensätze bei Anwendung eines der Klassifikationsverfahren für die Bestimmung quantisierter Materialanteile sind in Tabelle 5.4 zu sehen. Zudem sind die Ergebnisse nach Verwendung der PSE zur Materialanteilsschätzung ohne Bandselektion enthalten. Im Vergleich zur Anwendung der Bandselektion zeigen sich die Bewertungsgrößen der Materialanteilsschätzung mithilfe der PSE kaum verändert. Dagegen sind die klassifizierten Materialanteile hinsichtlich \bar{E}_{RMS} bei sämtlichen Klassifikationsverfahren und in allen Datensätzen deutlich ungenauer. Eine Ausnahme stellt das MWV bei den Quarzsandmischungen dar. Auch $\bar{\Delta}_{\text{STO}}$ bleibt meist hoch, wobei kein einheitlicher Trend der Veränderungen zu den Ergebnissen nach einer Bandselektion beobachtet werden kann. Auffallend stark sind die Verschlechterungen bei der Anwendung von LVQ-SOM zu beobachten. Eine Ursache hierfür kann das Prinzip der Dimensionsreduktion sein, das von sämtlichen SOM-Verfahren verfolgt wird. Die Dimensionsreduktion ist umso stärker, je größer die Differenz zwischen der gewählten Anzahl an Neuronen der SOM und der Anzahl an Wellenlängen λ ist. Im Gegensatz dazu sind die durchgängigen Verschlechterungen der Bewertungsgrößen bei den übrigen Klassifikationsverfahren auf größere Unterschiede zwischen dem Trainingsdatensatz, welcher dem LMM zugrunde liegt, und den aufgezeichneten Mischspektren zurückzuführen. Die Bandselektion verfolgt gerade das Ziel, spektrale Bereiche mit großen Unterschieden zwischen LMM und aufgezeichnetem Mischspektrum zu erkennen und

bei der Materialanteilsschätzung nicht weiter zu berücksichtigen.

Ein Blick auf die Ergebnisse in den einzelnen Mischfächern zeigt, dass die Bewertungsgrößen meist beständig hoch ausfallen (siehe Abbildungen 5.29–5.34). In nur wenigen Fällen ist E_{RMS} bei der Verwendung eines Klassifikationsverfahrens geringer als bei der Anwendung der PSE. Dabei führen bei den Klassifikationsverfahren oftmals erneut geringere Δ_{STO} auch zu geringeren E_{RMS} als bei Anwendung der PSE in dem jeweiligen Mischfach.

Aufgrund der erheblichen Verschlechterungen der Ergebnisse der Klassifikationsverfahren ohne Bandselektion entfallen im nachfolgenden Abschnitt Auswertungen der iterativen Verfahren in Kombination mit einer Materialerkennung.

Tabelle 5.4 Vergleich der klassifizierten und geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$
PSE	0,3246	0,1118	0,0344	0,1356	0,0549	0,0008	0,0923	0,0657	0,0411
FLDA	0,2814	0,2538	0,0000	0,1507	0,2917	0,0000	0,1558	0,3423	0,0000
SVM	0,3013	0,1731	0,0000	0,1920	0,3095	0,0000	0,1501	0,1615	0,0000
LVQ-SOM	0,4269	0,8808	0,0000	0,3163	0,4048	0,0000	0,3915	0,9038	0,0000
MWV	0,2797	0,4154	0,0000	0,1471	0,1220	0,0000	0,2131	0,3192	0,0000

5.3.3.2 Iterative Materialanteilsschätzung

Die Bewertungsgrößen der Materialanteilsschätzung nach Anwendung eines iterativen Verfahrens und keiner Bandselektion weisen ähnlich zur PSE gemittelt über alle Mischfächer in den einzelnen Datensätzen geringe Veränderungen im Vergleich zur Hinzunahme der Bandselektion auf (siehe Tabelle 5.5). Einzig der FCLS-Algorithmus führt bei den Datensätzen der Quarzsandmischungen zu merklichen Verschlechterungen. Im Vergleich zur PSE werden mithilfe des IMS-Verfahrens nahezu gleiche \bar{E}_{RMS} erzielt und $\bar{\Delta}_{\text{STO}}$ sowie $\bar{\Delta}_{\text{NN}}$ verbessern sich nur geringfügig. Einzig bei der Anwendung des MCLS-Algorithmus können auch ohne Bandselektion durchgängig genauere Ergebnisse erzielt werden. Das IMS-Verfahren

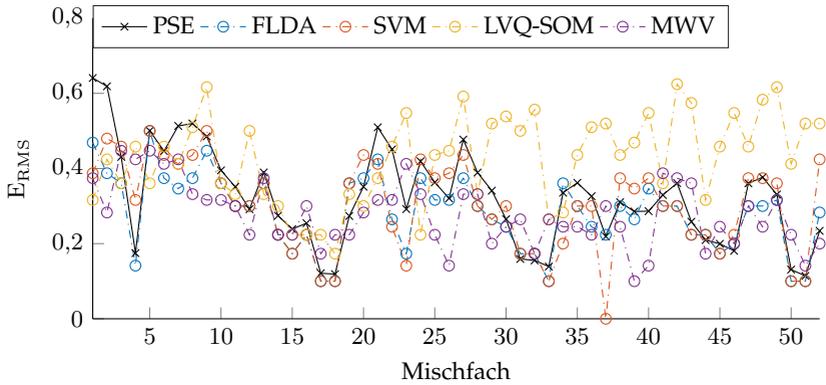


Abbildung 5.29 Farbpulvermischung: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile.

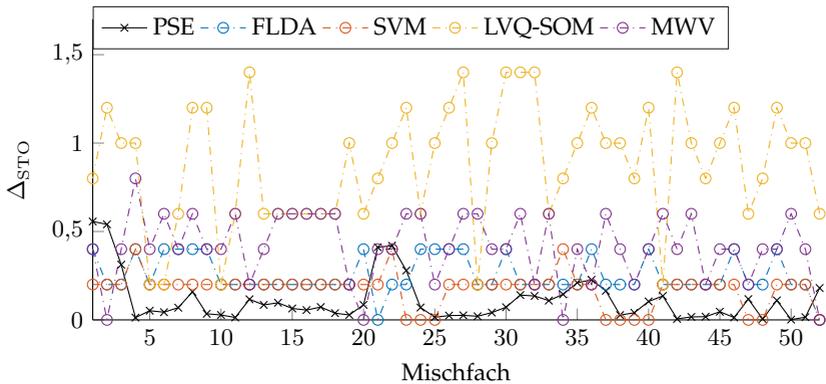


Abbildung 5.30 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} .

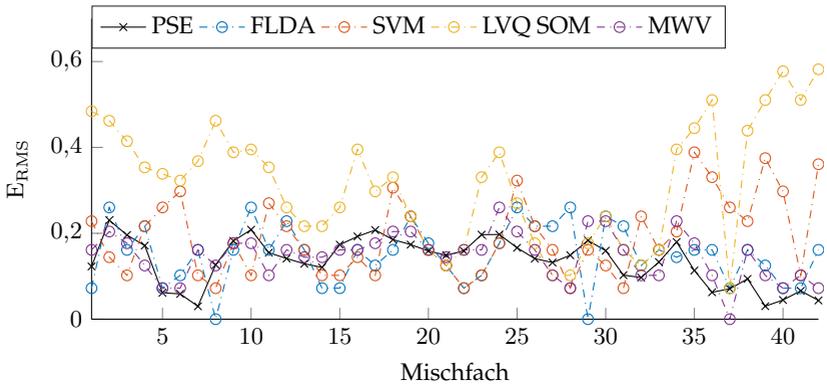


Abbildung 5.31 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile.

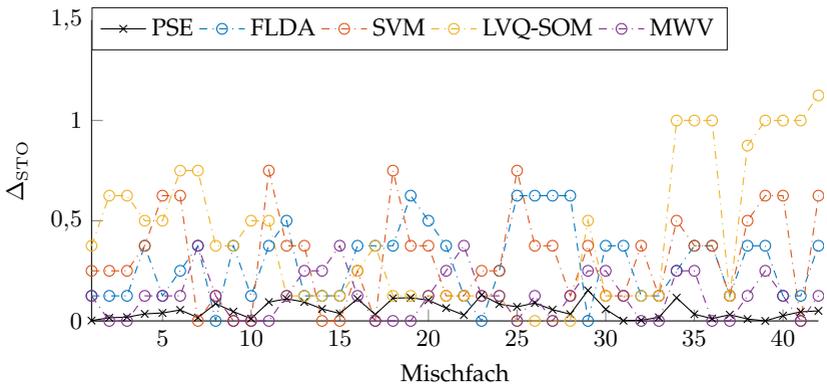


Abbildung 5.32 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} .

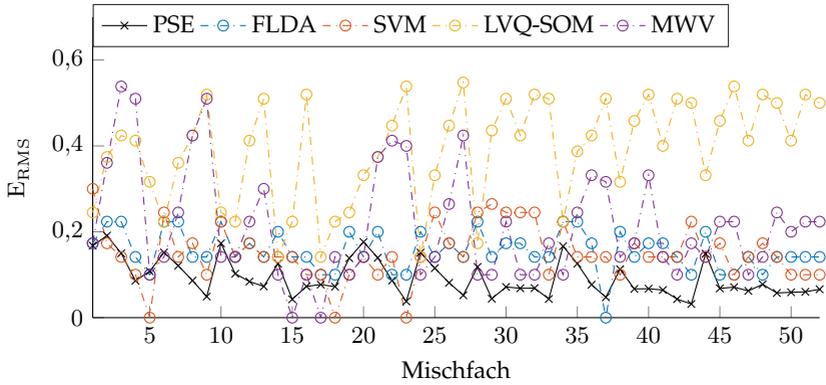


Abbildung 5.33 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile.

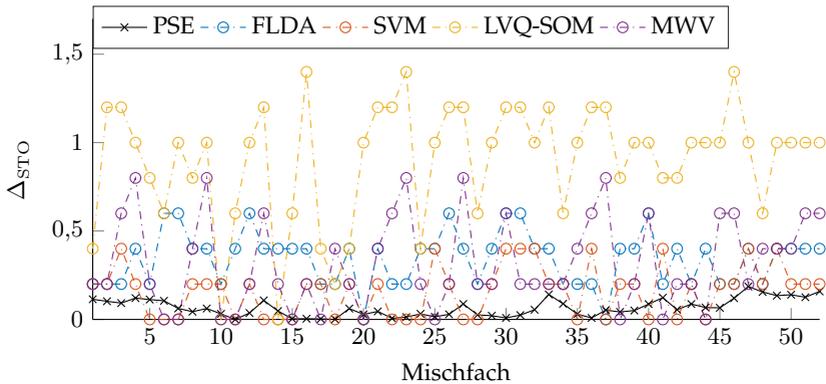


Abbildung 5.34 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} .

unterscheidet sich stärker von dem MCLS-Algorithmus bezüglich \bar{E}_{RMS} , als es bei der Auswertung mit einer Bandselektion zu beobachten ist.

Die Auswertungen in den einzelnen Mischfächern bestätigen dieses Verhalten (siehe Abbildungen 5.35–5.43). Der FCLS-Algorithmus führt bei den verschiedenen Materialmischungen oftmals zu größeren negativen Veränderungen in den Bewertungsgrößen. Dagegen ähnelt E_{RMS} nach Anwendung des IMS-Verfahrens in vielen Mischfächern den Ergebnissen, die sich aus der Anwendung der PSE ergeben. Ohne Bandselektion werden mehr Wellenlängenkanäle λ betrachtet und die Differenz zwischen λ und der Anzahl an Materialien P wächst. Somit nimmt die Dimension des Kerns der Reinspektrenmatrix M zu. Das IMS-Verfahren modifiziert M durch ein Element, das im Kern von M liegt (siehe Abschnitt 4.6.2). Anhand der Auswertungen über die Datensätze ist zu vermuten, dass mit zunehmender Dimension des Kerns seltener ein Element zur Modifikation von M bestimmt werden kann, welches zu genaueren Materialanteilschätzungen führt.

Tabelle 5.5 Vergleich der geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE und der iterativen Verfahren anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{\text{STO}}$	$\bar{\Delta}_{\text{NN}}$
PSE	0,3246	0,1118	0,0344	0,1356	0,0549	0,0008	0,0923	0,0657	0,0411
FCLS	0,2985	0,2215	0,0000	0,1511	0,1105	0,0000	0,1012	0,1272	0,0000
MCLS	0,2934	0,0000	0,0000	0,1252	0,0000	0,0000	0,0962	0,0000	0,0000
IMS	0,3205	0,0576	0,0108	0,1355	0,0542	0,0004	0,0973	0,0548	0,0177

5.3.3.3 Fazit

Die Auswertungen ohne Bandselektion zeigen, dass ein Einsatz sowohl der Klassifikationsverfahren als auch der iterativen Verfahren nur noch in wenigen Fällen Verbesserungen der Bewertungsgrößen im Vergleich zur PSE ergeben. Dabei führt der Verzicht auf die Bandselektion bei den Klassifikationsverfahren zu teils hohen Verschlechterungen, die insbesondere zu einem Verzicht auf die in der Vorgehensweise im engen Zusammenhang stehende Materialerkennung geführt haben. Der Auswahl von spektralen

5 Auswertung

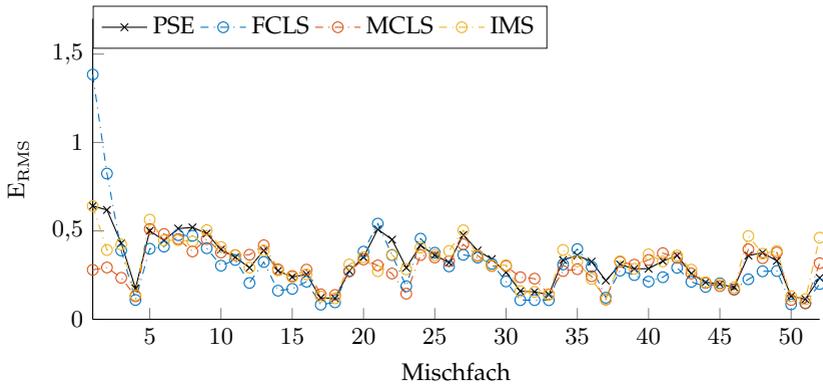


Abbildung 5.35 Farbpulvermischung: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile.

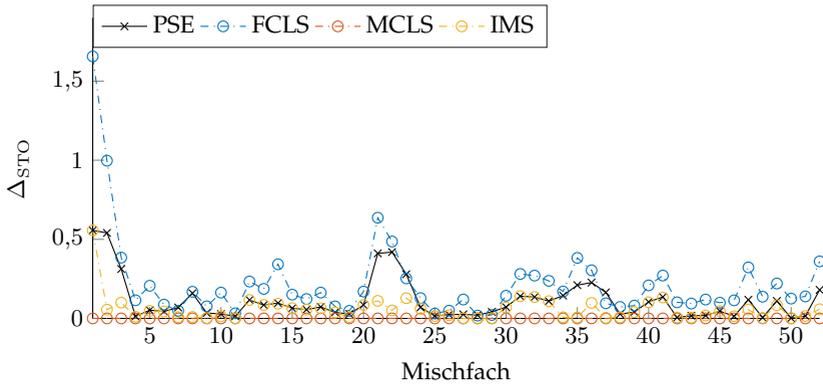


Abbildung 5.36 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} .

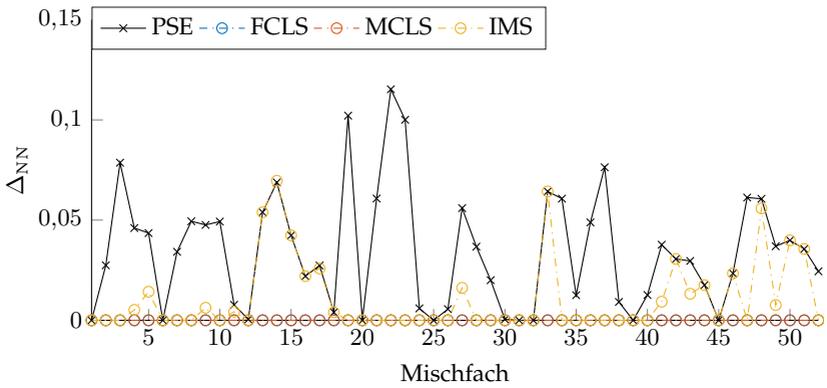


Abbildung 5.37 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} .

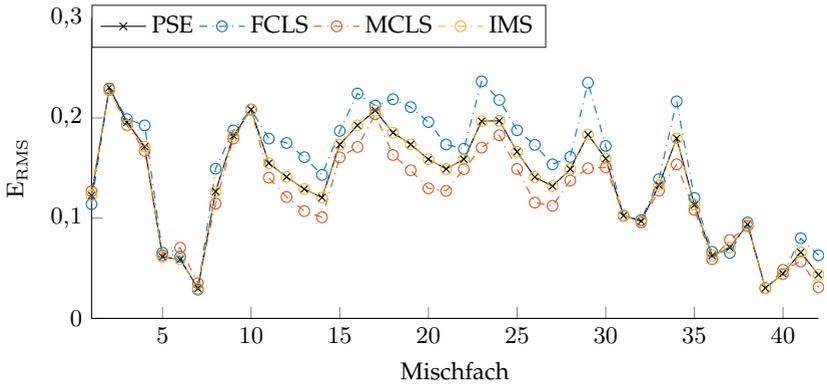


Abbildung 5.38 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile.

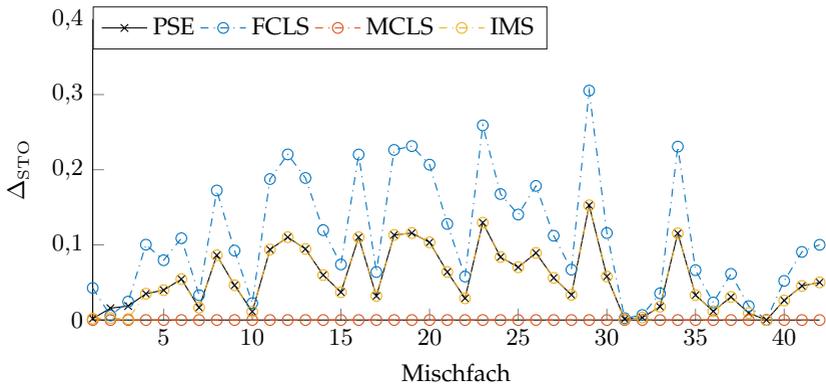


Abbildung 5.39 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} .

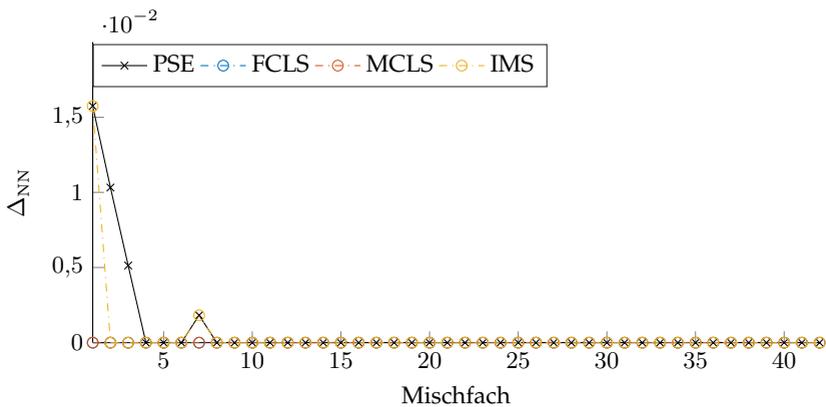


Abbildung 5.40 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} .

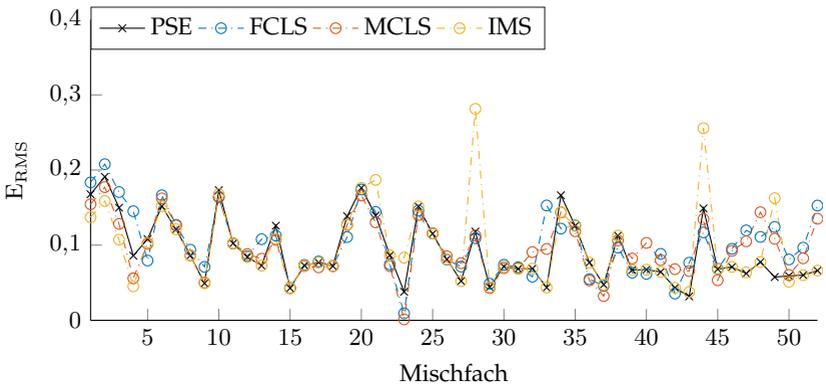


Abbildung 5.41 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile.

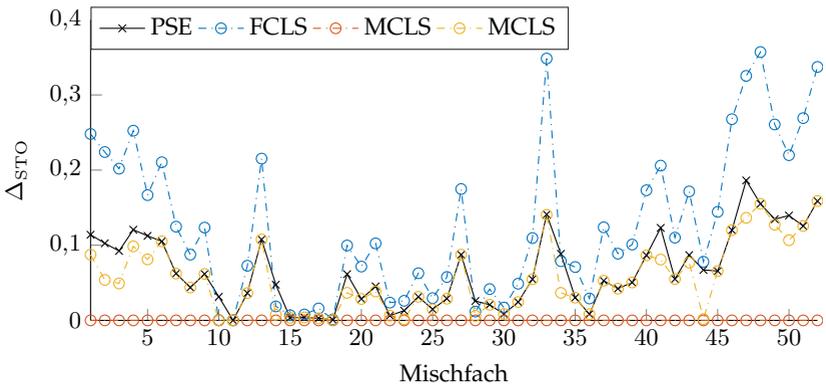


Abbildung 5.42 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} .

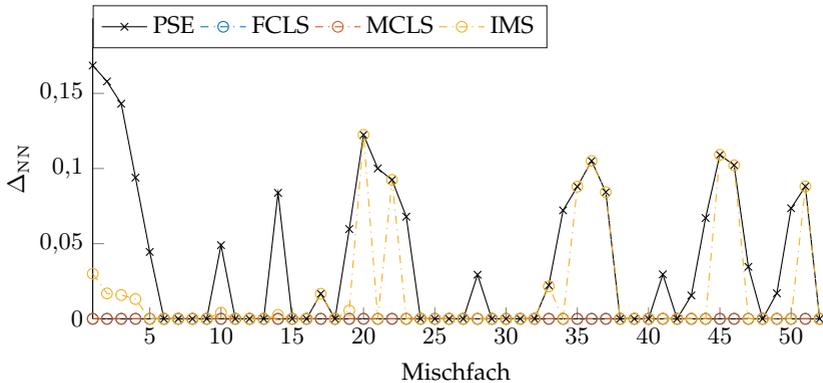


Abbildung 5.43 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} .

Bandbereichen steht der Nachteil zusätzlicher Spektralfilter gegenüber. Die Materialanteilsschätzung profitiert in den meisten Auswertungen von einer höheren Genauigkeit. Zudem beschränkt sich diese auf einen in der Gesamtlänge kürzeren spektralen Bereich als ohne Bandselektion. Dieser Effekt kann ggf. auch bei einer Hardwarerealisierung von Vorteil sein und muss sich nicht auf die Auswirkungen der Methoden zum Entwurf optischer Spektralfilter für die Materialanteilsschätzung beschränken.

5.4 Fazit

Hinter den ausgewerteten Ergebnissen der Materialanteilsschätzungen steht der mehrstufige Ansatz für die Bestimmung der dazugehörigen optischen Spektralfilter (siehe Abschnitt 4.7.2). Dabei wurde eine Auswahl aus sämtlichen möglichen Kombinationen der einzelnen Verfahren in den verschiedenen Stufen getroffen (siehe Abb. 5.9). Anhand der ausgewerteten Datensätze wird gefolgert, dass die vorgestellte Vorgehensweise zur Bandselektion erfolgreich für genauere Materialanteilsschätzungen eingesetzt werden kann. Es ergeben sich in keiner Auswertung erhebliche Verschlechterungen in den Bewertungsgrößen. Die Klassifikation quantifizierter Materialanteile erweist sich bei Verwendung eines künstlichen Da-

tensatzes zum Training als eine nennenswerte Alternative zur Schätzung von kontinuierlichen Materialanteilen. In einzelnen Materialmischungen sind jedoch auch teils erhebliche Verschlechterungen im Vergleich zur PSE zu beobachten. Diese treten mit einer Bandselektion weniger häufig auf. Der Vergleich zwischen den Δ_{STO} der geschätzten Materialanteile nach Anwendung eines Klassifikationsverfahrens und dem Einsatz der PSE zeigt Folgendes: Werden die Materialanteilsschätzungen beibehalten, die nach Anwendung eines Klassifikationsverfahrens mit geringeren Δ_{STO} als bei Anwendung der PSE einhergehen, und ansonsten die Ergebnisse der PSE berücksichtigen, können sich kleinere E_{RMS} ergeben. Durch diese Maßnahme kann die Gefahr von hohen Verschlechterungen in einzelnen Mischfächern verringert werden. Ausgeschlossen ist ein solcher Vergleich, falls eine Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern erfolgen soll, die invariant gegenüber der Beleuchtung ist. Diese Eigenschaft kann nur bei ausschließlicher Anwendung der Klassifikationsverfahren MWV oder LVQ-SOM erreicht werden.

Bei den iterativen Verfahren ist anhand der Auswertungen davon auszugehen, dass gegenüber der PSE eine geringe Gefahr zu ungenaueren Materialanteilsschätzungen besteht. Die Anwendung des IMS-Verfahrens führt nach einer Bandselektion ebenso zu präziseren Schätzungen. Darüber hinaus wird die Materialerkennung als eine hilfreiche Vorstufe der iterativen Verfahren dadurch erst sinnvoll. Mit dem MCLS-Algorithmus und dem IMS-Verfahren werden oftmals vergleichbare Ergebnisse erzielt. Da für das IMS-Verfahren weniger und zudem leichter festzulegende Parameter notwendig sind, ist das IMS-Verfahren dem MCLS-Algorithmus im Hinblick auf die Anforderungen an die Verfahren für den Entwurf optischer Spektralfilter vorzuziehen (siehe Abschnitt 4.1.2). Das IMS-Verfahren stellt als einziges iteratives Verfahren zwangsläufig geringere Δ_{STO} und Δ_{NN} im Vergleich zur PSE unabhängig von der Anwendung sicher.

Sämtliche Verfahren zur Bestimmung der Materialanteile mithilfe von optischen Spektralfiltern wurden auf alle Datensätze bei einer festen Parametrisierung angewendet. Weitere Auswertungen, die beim Entstehen dieser Arbeit durchgeführt wurden und weder in diesem Abschnitt noch in Abschnitt A.2 enthalten sind, zeigen, dass sich auch bei veränderter Parameterwahl vergleichbare Ergebnisse sowohl mit einem Klassifikationsverfahren als auch dem IMS-Verfahren ergeben. Das Ziel der breiten

Anwendungsmöglichkeiten nach Abschnitt [4.1.2](#) kann somit mithilfe der Methoden zum Entwurf optischer Spektralfilter erreicht werden.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wird ein neuer Ansatz für das Nutzen von hyperspektraler Information im Alltag auf Grundlage analytischer Betrachtungen vorgestellt. Das Ziel ist es, mithilfe des gegenüber Farbbildern Mehrs an Information der hyperspektralen Bildgebung auch in diesem Anwendungsbereich Lösungen für materialverstehende Problemstellungen anzubieten. Die Aufnahme hyperspektraler Daten wird als eine wesentliche nachteilige Eigenschaft identifiziert, die einen Transfer bestehender Verfahren basierend auf hyperspektraler Information von der industriellen Anwendung in das tägliche Leben bisher verhindert hat. Die Aufnahme von Hyperspektralbildern benötigt oftmals eine unhandliche Hardware und führt zu großen Datenmengen. Das gesuchte Ergebnis wird durch eine darauffolgende Auswertung erzielt, die als rechenintensiv eingestuft wird.

Um diese Hindernisse zu bewältigen, wird ein Einsatz von geeignet ausgelegten optischen Spektralfiltern vorgeschlagen. Mithilfe von optischen Spektralfiltern werden Intensitätsbilder aufgezeichnet, die in Abhängigkeit des Entwurfs der optischen Spektralfilter eine gesuchte Information anhand von Intensitätswerten bereits enthalten.

Daraus ergeben sich die Aufgaben der Bereitstellung von Methoden für den Entwurf geeigneter optischer Spektralfilter und die Realisierung dieser optischen Spektralfilter in einer Hardware. In dieser Arbeit wird die Entwicklung von Methoden für die Bestimmung von optischen Spektralfiltern untersucht, wobei sich die Anwendung optischer Spektralfilter auf eine analytische Betrachtung beschränkt. Während eine Hardwarerealisierung kein Bestandteil ist, werden Kriterien, wie bspw. ein begrenztes Wissen über die Anwendung oder eine Invarianz gegenüber der Beleuchtung, festgelegt. Diese werden aus dem Einsatz im alltäglichen Leben abgeleitet

und ergeben Ziele dieser Arbeit. Die Berücksichtigung der Kriterien erfolgt nach bester Möglichkeit bei der Entwicklung von Vorgehensweisen zum Entwurf optischer Spektralfilter.

Als Anwendungsfall wird die Materialanteilsschätzung aus Mischungen betrachtet. Die Untersuchung bestehender Verfahren in der hyperspektralen Bildverarbeitung ergibt, dass die Ziele mit diesen nicht oder nur bedingt erreicht werden. Ein wesentliches Problem bei der Materialanteilsschätzung stellt die Annahme eines Mischmodells dar. Um eine höhere Genauigkeit der Beschreibung von Mischspektren durch das LMM zu ermöglichen, werden mit der DCT und zwei Methoden im Bereich der Bandselektion in dieser Arbeit neue Ansätze entwickelt, die sich insbesondere mithilfe von optischen Spektralfiltern umsetzen lassen. Ein weiteres Ziel ist eine möglichst genaue Anteilsschätzung, bewertet durch die Abweichungen von den NN- und STO-Bedingungen. Dadurch sollen physikalisch interpretierbare Schätzungen folgen. Dazu werden mit der Klassifikation von quantisierten Materialanteilen und dem IMS-Verfahren, das zu einer iterativen Materialanteilsschätzung führt, weitere neuartige Vorgehensweisen entwickelt. Mit dem Einbinden der einzelnen Methoden in einen mehrstufigen Ansatz, der eine hierarchische Struktur besitzt, ist eine Anpassung ohne nennenswertes Erfahrungswissen möglich. Bekräftigt wird diese Eigenschaft weiter, indem jeweils verhältnismäßig wenige festzulegende Parameter enthalten sind und sich zudem unterschiedliche Parameterwahlen nur gering auf die Schätzergebnisse in den betrachteten Datensätzen über Materialmischungen auswirken.

Um die Ergebnisse dieser Arbeit besser zu beurteilen, sind Untersuchungen von zahlreicheren Anwendungsfällen, als sie im Rahmen dieser Arbeit möglich waren, notwendig. Dazu werden die vielversprechenden Ansätze als Anreiz für die Entwicklung einer geeigneten Hardware betrachtet, welche eine Realisierung der Materialanteilsschätzung mithilfe von optischen Spektralfiltern ermöglicht. Es ergeben sich möglicherweise zusätzliche Einschränkungen an den Entwurf optischer Spektralfilter, die bei den hier vorgeschlagenen Vorgehensweisen zukünftig zusätzlich berücksichtigt werden müssen. Diese können über die akzeptable Anzahl an optischen Spektralfiltern oder die maximale Anzahl an insgesamt aufgezeichneten Intensitätsbildern hinausgehen.

Mit einer existierenden Hardware kann zudem schnell umfangreiches

Wissen über praktische Anwendungsfälle gewonnen werden, das womöglich zu einer Erweiterung der formulierten Kriterien an die Methoden für den Entwurf optischer Spektralfilter führt. Die gewonnenen Erfahrungen könnten auch andere Lösungswege ermöglichen. Es ist denkbar, dass eine Bestimmung optischer Spektralfilter über Methoden erfolgt, die Zugriffe auf online abgelegte Datenbanken nutzen. Dadurch können in einer alltäglichen Anwendung z. B. zunächst die Homogenität der Materialmischung oder die Beleuchtungssituation mithilfe der Auswertung von nur wenigen Intensitätsbildern bestimmt werden. Die Materialanteilsschätzung selbst wird in einem darauffolgenden Schritt durchgeführt. Es müssen weitere Ansätze entwickelt werden, die jedoch dem Prinzip der in dieser Arbeit vorgestellten mehrstufigen Vorgehensweise ähneln.

Anhang

A Ergänzungen zur Auswertung

A.1 Mischverhältnisse der Datensätze

Tabelle A.1 Wahre Materialanteile der einzelnen Mischfächer in den Farbpulvermischungen sowie den Quarzsandmischungen bestehend aus vier Materialien.

Fach	Chromoxid- Grün	Eisenglimmer- Violett	Ultramarin- Blau	Eisenoxid- Gelb
	Grün 6/18	Rot 3/4	Blau 5/104	Gelb 1/59
1	0	0	0,2	0,8
2	0	0	0,4	0,6
3	0	0	0,6	0,4
4	0	0	0,8	0,2
5	0	0,2	0	0,8
6	0	0,2	0,2	0,6
7	0	0,2	0,4	0,4
8	0	0,2	0,6	0,2
9	0	0,2	0,8	0
10	0	0,4	0	0,6
11	0	0,4	0,2	0,4
12	0	0,4	0,4	0,2
13	0	0,4	0,6	0
14	0	0,6	0	0,4
15	0	0,6	0,2	0,2
16	0	0,6	0,4	0
17	0	0,8	0	0,2
18	0	0,8	0,2	0
19	0,2	0	0	0,8
20	0,2	0	0,2	0,6
21	0,2	0	0,4	0,4
22	0,2	0	0,6	0,2

A Anhang

23	0,2	0	0,8	0
24	0,2	0,2	0	0,6
25	0,2	0,2	0,2	0,4
26	0,2	0,2	0,4	0,2
27	0,2	0,2	0,6	0
28	0,2	0,4	0	0,4
29	0,2	0,4	0,2	0,2
30	0,2	0,4	0,4	0
31	0,2	0,6	0	0,2
32	0,2	0,6	0,2	0
33	0,2	0,8	0	0
34	0,4	0	0	0,6
35	0,4	0	0,2	0,4
36	0,4	0	0,4	0,2
37	0,4	0	0,6	0
38	0,4	0,2	0	0,4
39	0,4	0,2	0,2	0,2
40	0,4	0,2	0,4	0
41	0,4	0,4	0	0,2
42	0,4	0,4	0,2	0
43	0,4	0,6	0	0
44	0,6	0	0	0,4
45	0,6	0	0,2	0,2
46	0,6	0	0,4	0
47	0,6	0,2	0	0,2
48	0,6	0,2	0,2	0
49	0,6	0,4	0	0
50	0,8	0	0	0,2
51	0,8	0	0,2	0
52	0,8	0,2	0	0

Tabelle A.2 Wahre Materialanteile der einzelnen Mischfächer in den Quarzsandmischungen bestehend aus drei Materialien.

Fach	Blau 5/31	Rot 3/26	Gelb 1/17
1	0	0,125	0,875
2	0	0,25	0,75
3	0	0,375	0,625

4	0	0,5	0,5
5	0	0,625	0,375
6	0	0,75	0,25
7	0	0,875	0,125
8	0,125	0	0,875
9	0,125	0,125	0,75
10	0,125	0,25	0,625
11	0,125	0,375	0,5
12	0,125	0,5	0,375
13	0,125	0,625	0,25
14	0,125	0,75	0,125
15	0,125	0,875	0
16	0,25	0	0,75
17	0,25	0,125	0,625
18	0,25	0,25	0,5
19	0,25	0,375	0,375
20	0,25	0,5	0,25
21	0,25	0,625	0,125
22	0,25	0,75	0
23	0,375	0	0,625
24	0,375	0,125	0,5
25	0,375	0,25	0,375
26	0,375	0,375	0,25
27	0,375	0,5	0,125
28	0,375	0,625	0
29	0,5	0	0,5
30	0,5	0,125	0,375
31	0,5	0,25	0,25
32	0,5	0,375	0,125
33	0,5	0,5	0
34	0,625	0	0,375
35	0,625	0,125	0,25
36	0,625	0,25	0,125
37	0,625	0,375	0
38	0,75	0	0,25
39	0,75	0,125	0,125
40	0,75	0,25	0
41	0,875	0	0,125
42	0,875	0,125	0

A.2 Weitere Ergebnisse mit Bandselektion

A.2.1 Klassifikation quantisierter Materialanteile

Tabelle A.3 Vergleich der klassifizierten und geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer: Zu sehen sind die Ergebnisse bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$
PSE	0,3142	0,1065	0,0321	0,1171	0,1010	0,0057	0,0963	0,0787	0,0387
FLDA	0,2191	0,2731	0,0000	0,0650	0,1042	0,0000	0,1151	0,1654	0,0000
SVM	0,2069	0,2962	0,0000	0,0789	0,1131	0,0000	0,1173	0,1615	0,0000
LVQ-SOM	0,3285	0,7000	0,0000	0,1915	0,2649	0,0000	0,2701	0,5115	0,0000
MWV	0,2549	0,2962	0,0000	0,1915	0,2649	0,0000	0,2591	0,4846	0,0000

A.2.2 Iterative Materialanteilsschätzung

Tabelle A.4 Vergleich der geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE und der iterativen Verfahren anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer: Zu sehen sind die Ergebnisse bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$
PSE	0,3142	0,1065	0,0321	0,1171	0,1010	0,0057	0,0963	0,0787	0,0387
FCLS	0,2799	0,1948	0,0000	0,1426	0,2045	0,0000	0,1055	0,1513	0,0000
MCLS	0,2920	0,0000	0,0000	0,1200	0,0000	0,0000	0,1009	0,0000	0,0000
IMS	0,3090	0,0660	0,0126	0,1187	0,0987	0,0025	0,1088	0,0642	0,0073

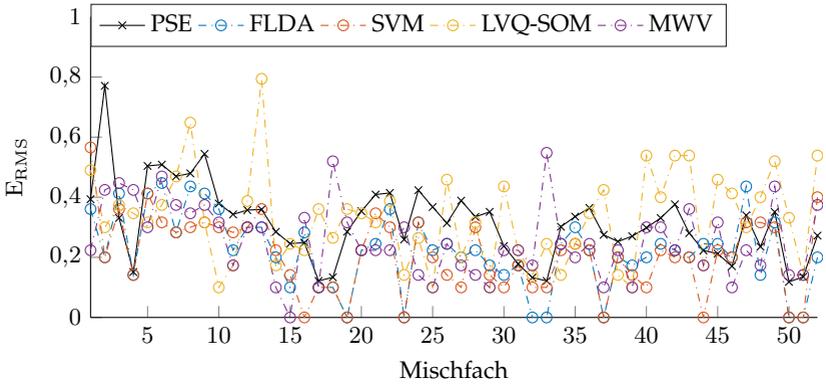


Abbildung A.1 Farbpulvermischung: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

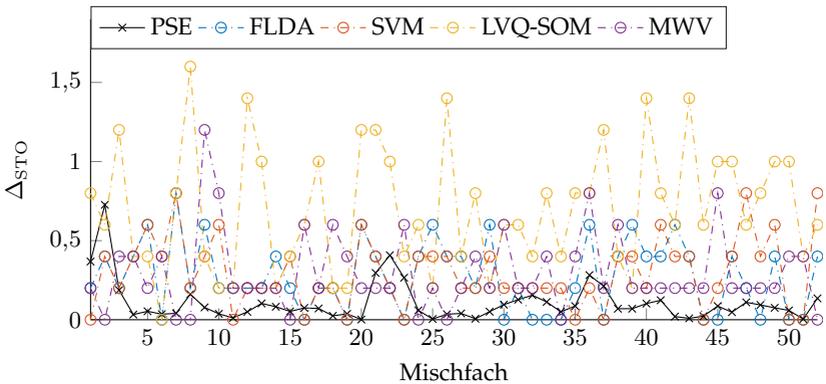


Abbildung A.2 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

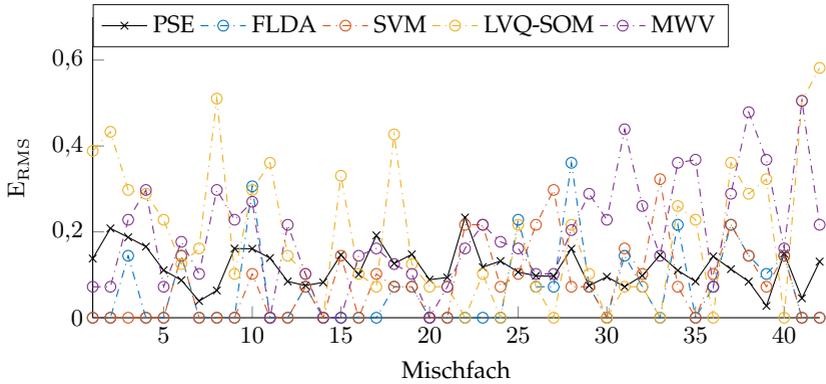


Abbildung A.3 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

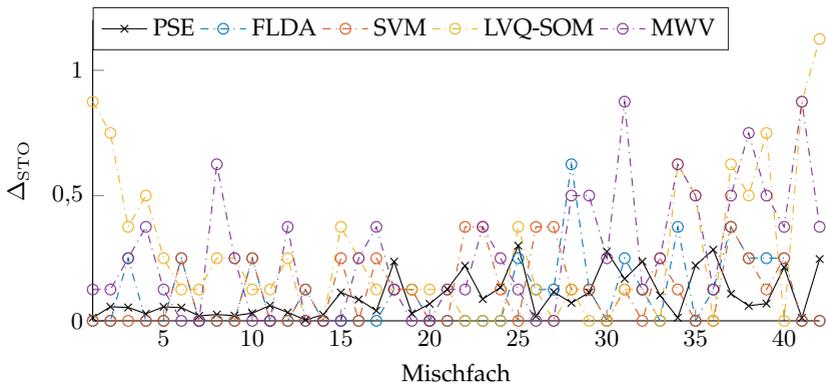


Abbildung A.4 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A .

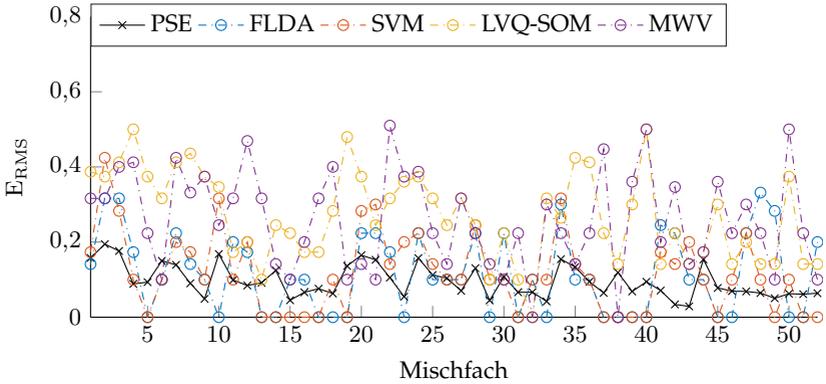


Abbildung A.5 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der klassifizierten und geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

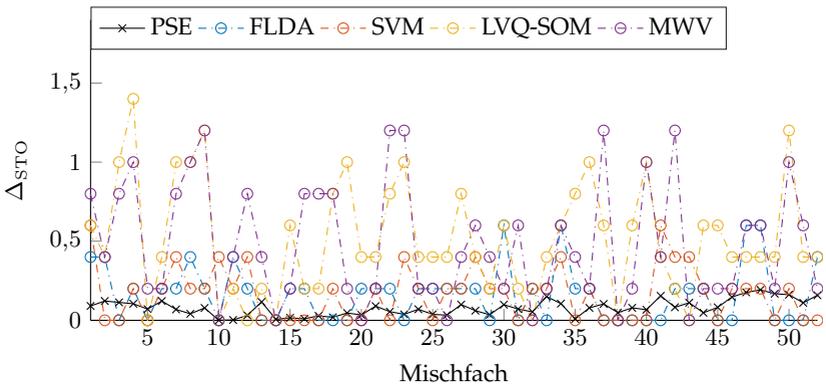


Abbildung A.6 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der klassifizierten und geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A .

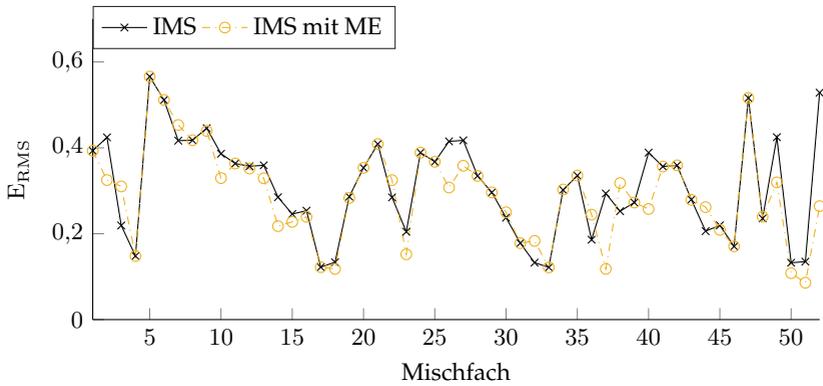


Abbildung A.7 Farbpulvermischung: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A sowie mit und ohne Materialerkennung (ME) für das IMS-Verfahren.

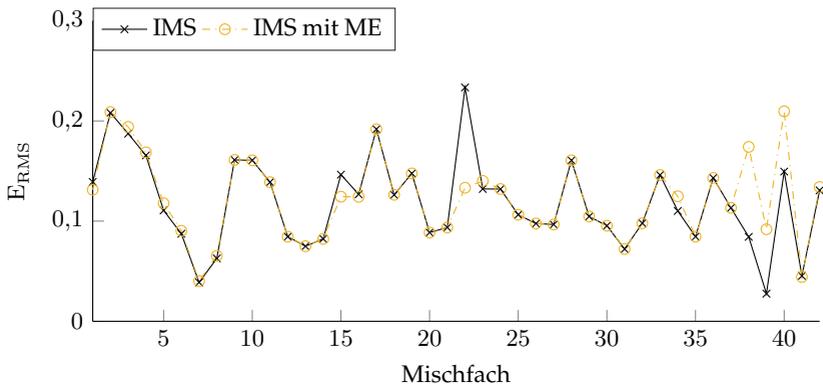


Abbildung A.8 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A sowie mit und ohne Materialerkennung (ME) für das IMS-Verfahren.

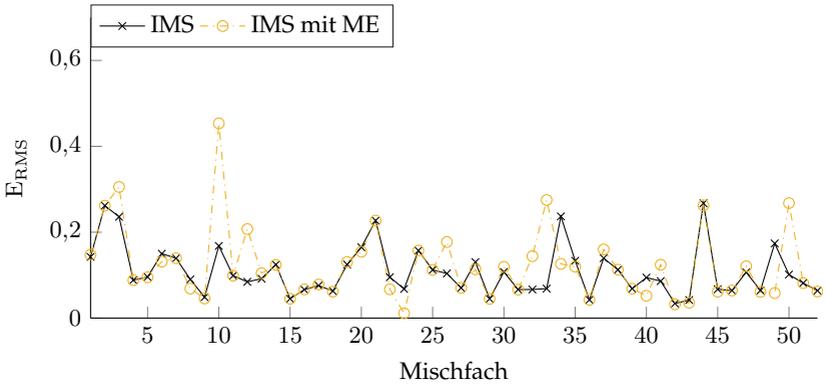


Abbildung A.9 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A sowie mit und ohne Materialerkennung (ME) für das IMS-Verfahren.

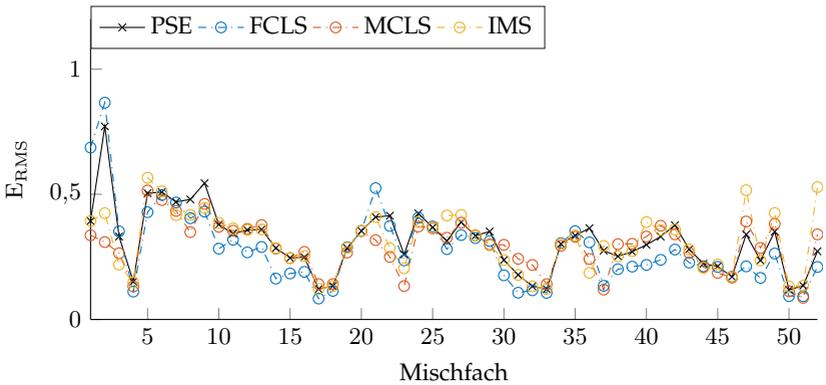


Abbildung A.10 Farbpulvermischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

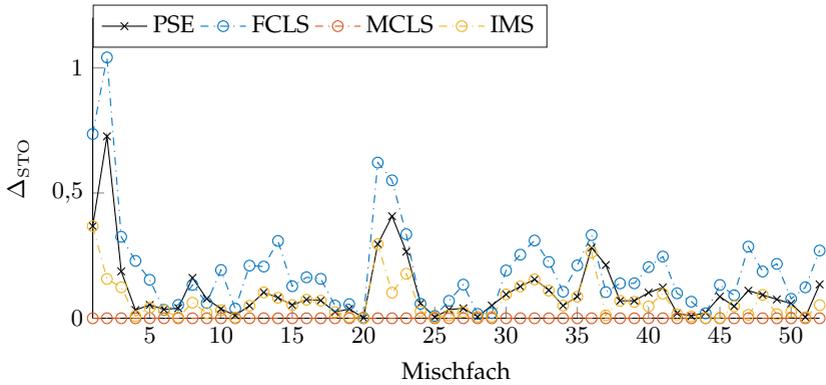


Abbildung A.11 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

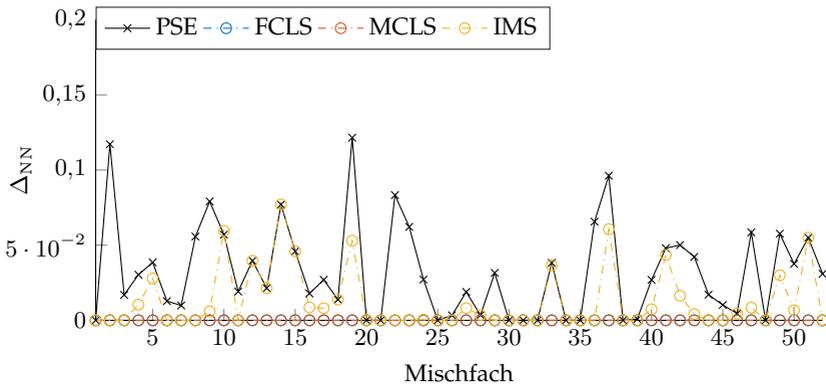


Abbildung A.12 Farbpulvermischung: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

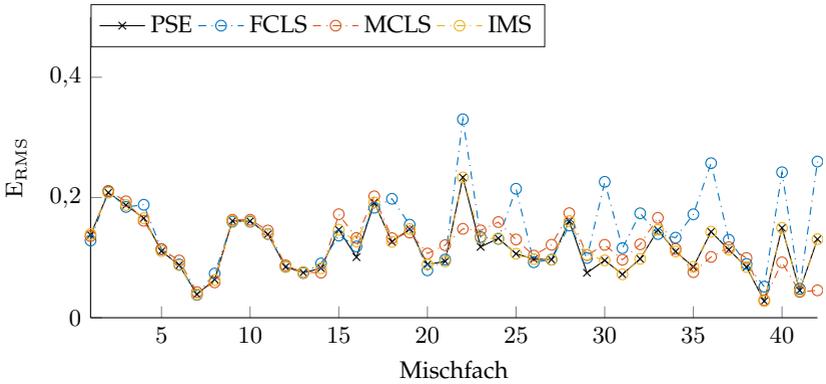


Abbildung A.13 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

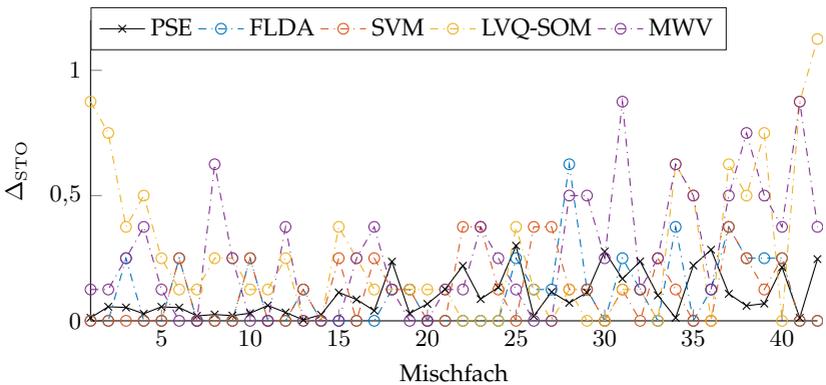


Abbildung A.14 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A .

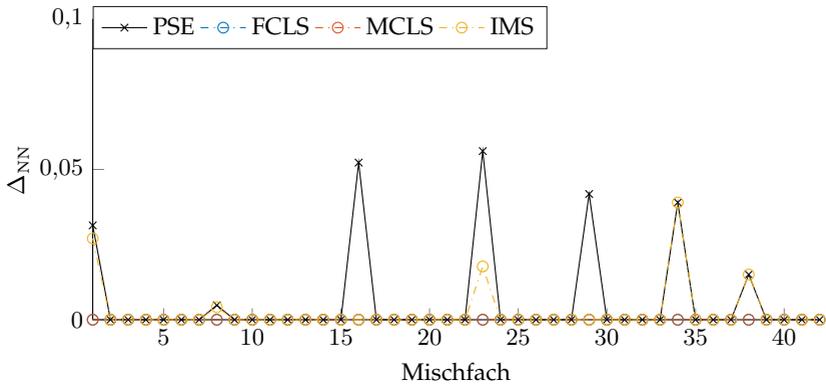


Abbildung A.15 Quarzsandmischung bestehend aus drei Materialien: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

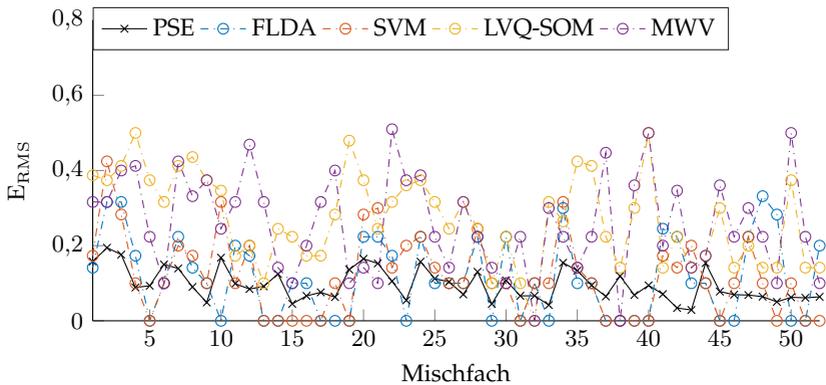


Abbildung A.16 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich des Effektivwerts des Fehlers E_{RMS} der geschätzten Materialanteile, jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_l^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen.

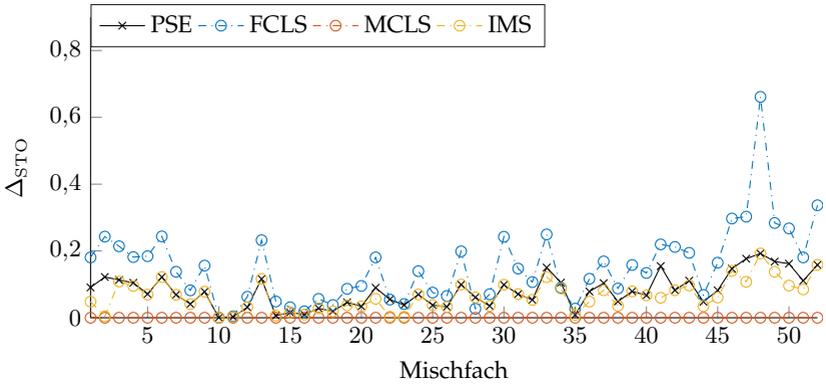


Abbildung A.17 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der STO-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{STO} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A .

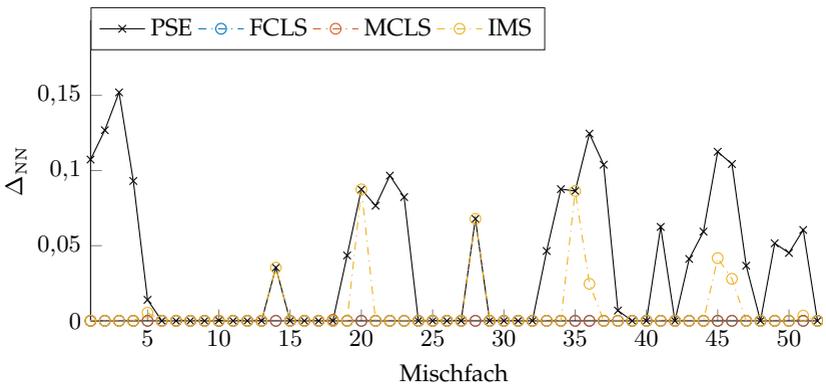


Abbildung A.18 Quarzsandmischung bestehend aus vier Materialien: Vergleich der Abweichung von der NN-Bedingung der geschätzten Materialanteile bewertet mit Δ_{NN} , jeweils bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A .

Tabelle A.5 Vergleich der geschätzten Materialanteile nach Anwendung der PSE und der iterativen Verfahren anhand der Bewertungsgrößen gemittelt über alle Mischfächer: Zu sehen sind die Ergebnisse bei Verwendung der Bandselektion mithilfe von b_i^A und der Auswahl von 10 Bandbereichen und einer Materialerkennung mit der SVM als ein Bestandteil zur Erkennung.

	Farbpulver			Quarzsande $P = 3$			Quarzsande $P = 4$		
	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$	\bar{E}_{RMS}	$\bar{\Delta}_{STO}$	$\bar{\Delta}_{NN}$
PSE	0,2894	0,0802	0,0143	0,1212	0,1081	0,0010	0,1106	0,0862	0,0289
FCLS	0,2719	0,1614	0,0000	0,1534	0,2222	0,0000	0,1254	0,1720	0,0000
MCLS	0,2932	0,0000	0,0000	0,1242	0,0000	0,0000	0,1052	0,0000	0,0000
IMS	0,2921	0,0713	0,0056	0,1219	0,1073	0,0000	0,1213	0,0753	0,0046

Literaturverzeichnis

- [1] **Adams, John und Gillespie, Alan.** *Remote Sensing of Landscapes with Spectral Images: A Physical Modeling Approach.* Topics in remote sensing. Cambridge University Press, 2006.
- [2] **Ahmed, N., Natarajan, T. und Rao, K. R.** *Discrete Cosine Transform.* In: *IEEE Transactions on Computers* C-23.1 (1974), S. 90–93.
- [3] **Altmann, Y., Dobigeon, N. und Tourneret, J.** *Bilinear models for nonlinear unmixing of hyperspectral images.* In: *2011 3rd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)* (2011), S. 1–4.
- [4] **Altmann, Y., Halimi, A., Dobigeon, N. und Tourneret, J.** *Supervised Nonlinear Spectral Unmixing Using a Postnonlinear Mixing Model for Hyperspectral Imagery.* In: *IEEE Transactions on Image Processing* 21.6 (2012), S. 3017–3025.
- [5] **Altmann, Y., Dobigeon, N., McLaughlin, S. und Tourneret, J.** *Residual Component Analysis of Hyperspectral Images—Application to Joint Nonlinear Unmixing and Nonlinearity Detection.* In: *IEEE Transactions on Image Processing* 23.5 (2014), S. 2148–2158.
- [6] **Asner, G. P. und Lobell, D. B.** *A Biogeophysical Approach for Automated SWIR Unmixing of Soils and Vegetation.* In: *Remote Sensing of Environment* 74 (2000), S. 99–112.
- [7] **Asner, Gregory P., Wessman, Carol A., Bateson, C. Ann und Privette, Jeffrey L.** *Impact of Tissue, Canopy, and Landscape Factors on the Hyperspectral Reflectance Variability of Arid Ecosystems.* In: *Remote Sensing of Environment* 74 (2000), S. 69–84.
- [8] **Baeza-Yates, Ricardo A. und Ribeiro-Neto, Berthier.** *Modern Information Retrieval.* Boston, MA, USA: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1999.
- [9] **Bateson, C. A., Asner, G. P. und Wessman, C. A.** *Endmember bundles: a new approach to incorporating endmember variability into spectral mixture analysis.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 38.2 (2000), S. 1083–1094.

- [10] **Bauer, S., Stefan, J., Michelsburg, M., Längle, T. und Puente León, F.** *Robustness Improvement of Hyperspectral Image Unmixing by Spatial Second-Order Regularization*. In: *IEEE Transactions on Image Processing* 23.12 (2014), S. 5209–5221.
- [11] **Beyerer, J., Puente León, F. und Frese, C.** *Automatische Sichtprüfung: Grundlagen, Methoden und Praxis der Bildgewinnung und Bildauswertung*. Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [12] **Beyerer, Jürgen.** *Verfahren zur quantitativen statistischen Bewertung von Zusatzwissen in der Messtechnik*. Habilitation. 1999.
- [13] **Bialkowski, Stephen E.** *Species discrimination and quantitative estimation using incoherent linear optical signal processing of emission signals*. In: *Analytical Chemistry* 58.12 (1986), S. 2561–2563.
- [14] **Bioucas-Dias, J. M., Plaza, A., Dobigeon, N., Parente, M., Du, Q., Gader, P. und Chanussot, J.** *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.
- [15] **Bioucas-Dias, J. M., Plaza, A., Camps-Valls, G., Scheunders, P., Nasrabadi, N. und Chanussot, J.** *Hyperspectral Remote Sensing Data Analysis and Future Challenges*. In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 1.2 (2013), S. 6–36.
- [16] **Bishop, Christopher M.** *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.
- [17] **Boardman, J. W. und Kruse, F. A.** *Analysis of imaging spectrometer data using N-dimensional geometry and a mixture-tuned matched filtering approach*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 49.11 (2011), S. 4138–4152.
- [18] **Bohren, C.F. und Huffman, D.R.** *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley Science Series. Wiley, 2008.
- [19] **Brandt, Mathias.** *Immer mehr Fotos dank Smartphones*. Statista Infografiken, Statista GmbH, 2017.
- [20] **Britanak, V., Yip, P.C. und Rao, K.R.** *Discrete Cosine and Sine Transforms: General Properties, Fast Algorithms and Integer Approximations*. Elsevier Science, 2010.
- [21] **Brown, M., Lewis, H. G. und Gunn, S. R.** *Support vector machines for spectral unmixing*. In: *IEEE 1999 International Geoscience and Remote Sensing Symposium. IGARSS'99 (Cat. No.99CH36293)*. Bd. 2. 1999, 1363–1365 vol.2.

-
- [22] **Brown, M., Lewis, H. G. und Gunn, S. R.** *Linear spectral mixture models and support vector machines for remote sensing.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 38.5 (2000), S. 2346–2360.
- [23] **Büchter, A. und Henn, H.W.** *Elementare Stochastik: Eine Einführung in die Mathematik der Daten und des Zufalls.* Mathematik für das Lehramt. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [24] **Bushberg, J.T., Seibert, J.A., Leidholdt, E.M. und Boone, J.M.** *The Essential Physics of Medical Imaging.* Wolters Kluwer Health, 2011.
- [25] **Canham, K., Schlamm, A., Ziemann, A., Basener, B. und Messinger, D.** *Spatially Adaptive Hyperspectral Unmixing.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 49.11 (2011), S. 4248–4262.
- [26] **Cawse, K., Robin, A. und Sears, M.** *The effect of noise whitening on methods for determining the intrinsic dimension of a hyperspectral image.* In: *2011 3rd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS).* 2011, S. 1–4.
- [27] **Chai, Tianfeng und Draxler, R.R.** *Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)?– Arguments against avoiding RMSE in the literature.* In: *Geoscientific Model Development* 7 (2014), S. 1247–1250.
- [28] **Chang, Chein-I und Ji, Baohong.** *Weighted abundance-constrained linear spectral mixture analysis.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 44.2 (2006), S. 378–388.
- [29] **Chang, Chein-I, Ren, Hsuan, D’Amico, Francis M. und Jensen, James O.** *Subpixel target size estimation for remotely sensed imagery.* In: Hrsg. von **Shen, Sylvia S. und Lewis, Paul E.** *SPIE Proceedings.* SPIE, 2003, S. 398.
- [30] **Cichocki, A., Zdunek, R., Phan, A.H. und Amari, S.** *Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations: Applications to Exploratory Multi-way Data Analysis and Blind Source Separation.* Wiley, 2009.
- [31] **Cortes, Corinna und Vapnik, Vladimir.** *Support-Vector Networks.* In: *Machine Learning* 20.3 (1995), S. 273–297.
- [32] **Craig, M. D.** *Minimum-volume transforms for remotely sensed data.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 32.3 (1994), S. 542–552.
- [33] **Dahmen, Wolfgang und Reusken, Arnold.** *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler.* Springer-Lehrbuch. Berlin: Springer, 2006.
- [34] **Davenport, Mark A., Duarte, Marco F., Eldar, Yonina C. und Kutyniok, Gitta.** *Introduction to compressed sensing.* In: *Compressed Sensing: Theory and Applications.* Hrsg. von **Eldar, Yonina C. und Kutyniok, Gitta.** Cambridge University Press, 2012, S. 1–64.

- [35] **Debba, P., Carranza, E. J. M., Meer, F. D. van der und Stein, A.** *Abundance Estimation of Spectrally Similar Minerals by Using Derivative Spectra in Simulated Annealing*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 44.12 (2006), S. 3649–3658.
- [36] **Demartines, Pierre und Blayo, François.** *Kohonen Self-Organizing Maps: Is the Normalization Necessary?* In: *Complex Systems* 6 (1992).
- [37] **Deuffhard, Peter und Hohmann, Andreas.** *Numerische Mathematik I*. Berlin: De Gruyter, 2008.
- [38] **Dobigeon, N., Tourneret, J. und Chang, C.** *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, Nicolas, Tourneret, Jean-Yves, Richard, Cédric, Bermudez, José Carlos M, McLaughlin, Stephen und Hero, Alfred O.** *Nonlinear unmixing of hyperspectral images: Models and algorithms*. In: *IEEE Signal Processing Magazine* 31.1 (2014), S. 82–94.
- [40] **Dobigeon, Nicolas, Altmann, Yoann, Brun, N. und Moussaoui, S.** *Linear and Nonlinear Unmixing in Hyperspectral Imaging*. In: *Resolving Spectral Mixtures With Applications from Ultrafast Time-Resolved Spectroscopy to Super-Resolution Imaging, 2016*. Hrsg. von **Ruckebusch, Cyril**. Bd. 30. *Data Handling in Science and Technology*. Netherlands: Elsevier, 2016, S. 185–224.
- [41] **Elmore, Andrew James, Mustard, John F., Manning, Sara J. und Lobell, David B.** *Quantifying Vegetation Change in Semiarid Environments: Precision and Accuracy of Spectral Mixture Analysis and the Normalized Difference Vegetation Index*. In: *Remote Sensing of Environment* 73.1 (2000), S. 87–102.
- [42] **Fan, Wenyi, Hu, Baoxin, Miller, John und Li, Mingze.** *Comparative Study Between a New Nonlinear Model and Common Linear Model for Analysing Laboratory Simulated-forest Hyperspectral Data*. In: *Int. J. Remote Sens.* 30.11 (2009), S. 2951–2962.
- [43] **Gallinari, P., Thiria, S., Badran, F. und Fogelman-Soulie, F.** *On the relations between discriminant analysis and multilayer perceptrons*. In: *Neural Networks* 4.3 (1991), S. 349–360.
- [44] **Gillis, David, Bowlesa, Jeffrey, Ientiluccib, Emmett J. und Messingerb, David W.** *A generalized linear mixing model for hyperspectral imagery*. In: 2008.
- [45] **Gillis, N. und Vavasis, S. A.** *Fast and Robust Recursive Algorithms for Separable Nonnegative Matrix Factorization*. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 36.4 (2014), S. 698–714.

-
- [46] **Golub, Gene H. und Van Loan, Charles F.** *Matrix Computations (3rd Ed.)*. Baltimore, MD, USA: Johns Hopkins University Press, 1996.
- [47] **Gong, P. und Zhang, A.** *Noise Effect on Linear Spectral Unmixing*. In: *Geographic Information Sciences* 5.1 (1999), S. 52–57.
- [48] **Graff, David L. und Love, Steven P.** *Toward real-time spectral imaging for chemical detection with a digital micromirror device-based programmable spectral filter*. In: *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* 13.1 (2013).
- [49] **Grahn, H. und Geladi, P.** *Techniques and Applications of Hyperspectral Image Analysis*. Wiley, 2007.
- [50] **Green, A. A., Berman, M., Switzer, P. und Craig, M. D.** *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.
- [51] **Gross, W., Schilling, H. und Middelman, W.** *An approach to fully unsupervised hyperspectral unmixing*. In: *2012 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. 2012, S. 4714–4717.
- [52] **Guolan Lu, Baowei Fei.** *Medical hyperspectral imaging: a review*. In: *Journal of Biomedical Optics* 19.1 (2014), S. 1–24.
- [53] **Habermann, Mateus, Fremont, Vincent und Shiguemori, Elcio.** *Unsupervised hyperspectral band selection using clustering and single-layer neural network*. In: *Revue Francaise de Photogrammetrie et de Teledetection* 2018 (2018).
- [54] **Halimi, A., Altmann, Y., Dobigeon, N. und Tourneret, J.** *Unmixing hyperspectral images using the generalized bilinear model*. In: *2011 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. 2011, S. 1886–1889.
- [55] **Hapke, Bruce.** *Bidirectional reflectance spectroscopy: 1. Theory*. In: *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 86.B4 (1981), S. 3039–3054.
- [56] **Heinz, D., Chang, C.-I. und Althouse, M.L.G.** *Fully constrained least-squares based linear unmixing [hyperspectral image classification]*. In: *IEEE 1999 International Geoscience and Remote Sensing Symposium. IGARSS'99 (Cat. No.99CH36293)*. IEEE, 1999, S. 1401–1403.
- [57] **Heylen, R., Parente, M. und Gader, P.** *A Review of Nonlinear Hyperspectral Unmixing Methods*. In: *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 7.6 (2014), S. 1844–1868.

- [58] **Hosono, Satsuki, Kawashima, Natsumi, Wollherr, Dirk und Ishimaru, Ichiro.** *Built-in hyperspectral camera for smartphone in visible, near-infrared and middle-infrared lights region (third report): spectroscopic imaging for broad-area and real-time componential analysis system against local unexpected terrorism and disasters.* 2016.
- [59] **Hsu, Chih-Wei und Lin, Chih-Jen.** *A comparison of methods for multiclass support vector machines.* In: *IEEE Transactions on Neural Networks* 13.2 (2002), S. 415–425.
- [60] **Hulst, H.C. und Hulst, H.C. van de.** *Light Scattering by Small Particles.* Dover Books on Physics. Dover Publications, 1981.
- [61] **Jähne, Bernd.** *Der Standard EMVA 1288: Objektive Charakterisierung von Bildsensoren und digitalen Kameras.* 2011.
- [62] **Jia, S. und Qian, Y.** *Spectral and Spatial Complexity-Based Hyperspectral Unmixing.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 45.12 (2007), S. 3867–3879.
- [63] **Kaur, Harpreet, Künnemeyer, Rainer und McGlone, Andrew.** *Comparison of hand-held near infrared spectrophotometers for fruit dry matter assessment.* In: *J. Near Infrared Spectrosc.* 25.4 (2017), S. 267–277.
- [64] **Kay, Steven M.** *Fundamentals of Statistical Processing, Volume I: Estimation Theory.* Prentice-Hall PTR, 1998.
- [65] **Keshava, N. und Mustard, J. F.** *Spectral unmixing.* In: *IEEE Signal Processing Magazine* 19.1 (2002), S. 44–57.
- [66] **Khan, M. J., Khan, H. S., Yousaf, A., Khurshid, K. und Abbas, A.** *Modern Trends in Hyperspectral Image Analysis: A Review.* In: *IEEE Access* 6 (2018), S. 14118–14129.
- [67] **Kiencke, U., Schwarz, M. und Weickert, T.** *Signalverarbeitung: Zeit-Frequenz-Analyse und Schätzverfahren.* Oldenbourg, 2008.
- [68] **Kohonen, Teuvo.** *Self-organized formation of topologically correct feature maps.* In: *Biological cybernetics* 43.1 (1982), S. 59–69.
- [69] **Kohonen, Teuvo.** *Self-organizing maps: with 22 tables.* 3. ed. Springer series in information sciences ; 30. Berlin: Springer, 2001.
- [70] **Kruse, Rudolf, Borgelt, Christian, Braune, Christian, Klawonn, Frank, Möwes, Christian und Steinbrecher, Matthias.** *Computational Intelligence: Eine methodische Einführung in Künstliche Neuronale Netze, Evolutionäre Algorithmen, Fuzzy-Systeme und Bayes-Netze.* Springer Vieweg, 2015.

-
- [71] **Lafontaine, M., Bockaj, Z., Freund, M., Vieth, K.-U. und Negara, C.** *Non-Destructive Determination of Grape Berry Sugar Concentration Using Visible/Near Infrared Imaging and Possible Impact on Wine Quality*. In: *tm-Technisches Messen* 82.12 (2015), S. 633–642.
- [72] **Lamonaca, F., Polimeni, G., Barbé, K. und Grimaldi, D.** *Health parameters monitoring by smartphone for quality of life improvement*. In: *Measurement* 73 (2015), S. 82–94.
- [73] **Lee, Daniel und Seung, Hyunjune.** *Algorithms for Non-negative Matrix Factorization*. In: *Adv. Neural Inform. Process. Syst.* 13 (2001).
- [74] **Li, Mo, Qian, Zhiqing, Shi, Bingwen, Medlicott, Jane und East, Andrew.** *Evaluating the performance of a consumer scale SCiO molecular sensor to predict quality of horticultural products*. In: *Postharvest Biology and Technology* 145 (2018), S. 183–192.
- [75] **Li, Tao, Zhu, Shenghuo und Ogihara, Mitsunori.** *Using discriminant analysis for multi-class classification: an experimental investigation*. In: *Knowledge and Information Systems* 10.4 (2006), S. 453–472.
- [76] **Lin, Xing, Rivenson, Yair, Yardimci, Nezh T., Veli, Muhammed, Luo, Yi, Jarrahi, Mona und Ozcan, Aydogan.** *All-optical machine learning using diffractive deep neural networks*. In: *Science* (2018).
- [77] **Luo, Ding, Bauer, Sebastian, Taphanel, Miro, Längle, Thomas, Puente León, Fernando und Beyerer, Jürgen.** *Optical unmixing using programmable spectral source based on DMD*. In: *Next-Generation Spectroscopic Technologies IX; Baltimore; United States; 18 April 2016 through 19 April 2016*. Bd. 9855. Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering. SPIE, Bellingham (WA), 2016, Art. Nr.: 98550P.
- [78] **Makhoul, John, Kubala, Francis, Schwartz, Richard und Weischedel, Ralph.** *Performance Measures For Information Extraction*. In: *In Proceedings of DARPA Broadcast News Workshop*. 1999, S. 249–252.
- [79] **McCullagh, P. und Nelder, J.A.** *Generalized Linear Models, Second Edition*. Chapman & Hall/CRC Monographs on Statistics & Applied Probability. Taylor & Francis, 1989.
- [80] **Meganem, I., Déliot, P., Briottet, X., Deville, Y. und Hosseini, S.** *Linear–Quadratic Mixing Model for Reflectances in Urban Environments*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 52.1 (2014), S. 544–558.
- [81] **Michelsburg, Matthias.** *Materialklassifikation in optischen Inspektionssystemen mithilfe hyperspektraler Daten*. Diss. 2014.

- [82] **Murphy, K.P.** *Machine Learning: A Probabilistic Perspective*. Adaptive Computation and Machine Learning series. MIT Press, 2012.
- [83] **Nascimento, J. M. P. und Bioucas-Dias, J. M.** *Nonlinear mixture model for hyperspectral unmixing*. 2009.
- [84] **Nelson, Matthew P., Aust, Jeffrey F., Dobrowolski, J. A., Verly, P. G. und Myrick, M. L.** *Multivariate Optical Computation for Predictive Spectroscopy*. In: *Analytical Chemistry* 70.1 (1998). PMID: 21644602, S. 73–82.
- [85] **Plaza, A., Martinez, P., Perez, R. und Plaza, J.** *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.
- [86] **Polder, Gerrit und Heijden, Gerie van der.** *Estimation of compound distribution in spectral images of tomatoes using independent component analysis*. In: (2003).
- [87] **Prakash, Anna M.C., Stellman, Christopher M. und Booksh, Karl S.** *Optical regression: a method for improving quantitative precision of multivariate prediction with single channel spectrometers*. In: *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 46.2 (1999), S. 265–274.
- [88] **Puente León, Fernando.** *Messtechnik*. Springer Berlin Heidelberg, 2015.
- [89] **Rao, K.R. und Yip, P.C.** *The Transform and Data Compression Handbook*. Electrical Engineering & Applied Signal Processing Series. CRC Press, 2018.
- [90] **Roberts, D. A., Gardner, M., Church, R., Ustin, S., Scheer, G. und Green, R. O.** *Mapping chaparral in the Santa Monica Mountains using multiple endmember spectral mixture models*. English. In: *Remote Sensing of Environment* 65.3 (1998), S. 267–279.
- [91] **Rogge, D.M., Rivard, B., Zhang, J., Sanchez, A., Harris, J. und Feng, J.** *Integration of spatial–spectral information for the improved extraction of endmembers*. In: *Remote Sensing of Environment* 110.3 (2007), S. 287–303.
- [92] **Schölkopf, Bernhard und Smola, Alexander J.** *Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond*. Cambridge, MA, USA: MIT Press, 2001.
- [93] **Schomaker, M., Rao, C.R., Toutenburg, H. und Heumann, C.** *Linear Models and Generalizations: Least Squares and Alternatives*. Springer Series in Statistics. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [94] **Seoho, L., Tae, G. N., Jun, H. C., Jeongsu, H., Joo, Y. H., Ji, Y. L. und Yongjong, P.** *NIR spectroscopic sensing for point-of-need freshness assessment of meat, fish, vegetables and fruits*. 2017.

-
- [95] **Shannon, C.E. und Weaver, W.** *The Mathematical Theory of Communication*. The Mathematical Theory of Communication Bd. 1. University of Illinois Press, 1949.
- [96] **Shimabukuro, Y. E. und Smith, J. A.** *The least-squares mixing models to generate fraction images derived from remote sensing multispectral data*. In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 29.1 (1991), S. 16–20.
- [97] **Sigurdsson, J., Ulfarsson, M. O. und Sveinsson, J. R.** *Semi-supervised hyperspectral unmixing*. In: *2014 IEEE Geoscience and Remote Sensing Symposium*. 2014, S. 3458–3461.
- [98] **Singer, R. B. und McCord, T. B.** *Mars - Large scale mixing of bright and dark surface materials and implications for analysis of spectral reflectance*. In: *Lunar and Planetary Science Conference Proceedings*. Hrsg. von **Hinners, N. W.** Bd. 10. Lunar and Planetary Science Conference Proceedings. 1979, S. 1835–1848.
- [99] **Smith, Milton O., Adams, John B. und Sabol, Don E.** *Spectral Mixture Analysis - New Strategies for the Analysis of Multispectral Data*. In: *Imaging Spectrometry — a Tool for Environmental Observations*. Hrsg. von **Hill, Joachim und Mégier, Jacques**. Dordrecht: Springer Netherlands, 1994, S. 125–143.
- [100] **Smith, Zachary J., Strombom, Sven und Wachsmann-Hogiu, Sebastian.** *Multivariate optical computing using a digital micromirror device for fluorescence and Raman spectroscopy*. In: *Opt. Express* 19.18 (2011), S. 16950–16962.
- [101] **Somers, B., Delalieux, S., Stuckens, J., Verstraeten, W. W. und Coppin, P.** *A weighted linear spectral mixture analysis approach to address endmember variability in agricultural production systems*. In: *International Journal of Remote Sensing* 30 (2009), S. 139–147.
- [102] **Somers, B., Delalieux, S., Verstraeten, W. W., Aardt, J. A. N. van, Albrigo, G. L. und Coppin, P.** *An automated waveband selection technique for optimized hyperspectral mixture analysis*. In: *International Journal of Remote Sensing* 31.20 (2010), S. 5549–5568.
- [103] **Somers, B., Asner, G. P., Tits, L. und Coppin, P.** *Endmember variability in Spectral Mixture Analysis: A review*. In: *Remote Sensing of Environment* 115.7 (2011), S. 1603–1616.
- [104] **Somers, B., Zortea, M., Plaza, A. und Asner, G. P.** *Automated Extraction of Image-Based Endmember Bundles for Improved Spectral Unmixing*. In: *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 5.2 (2012), S. 396–408.

- [105] **Somers, Ben, Cools, Kenneth, Delalieux, Stephanie, Stuckens, Jan, Van der Zande, Dimitry, Verstraeten, Willem und Coppin, Pol.** *Nonlinear Hyperspectral Mixture Analysis for tree cover estimates in orchards.* In: *Remote Sensing of Environment* 113 (2009), S. 1183–1193.
- [106] **Strutz, T.** *Bilddatenkompression: Grundlagen, Codierung, Wavelets, JPEG, MPEG.* Informations- und Kommunikationstechnik Bd. 264. Vieweg+Teubner Verlag, 2009.
- [107] **Taphanel, Miro, Gruna, Robin und Beyerer, Jürgen.** *Materialidentifikation mittels optisch realisierter Kreuzkorrelation der Reflektanzspektren.* In: *tm-Technisches Messen* 79.4 (2012), S. 202–209.
- [108] **Tatzer, Petra, Wolf, Markus und Panner, Thomas.** *Industrial application for inline material sorting using hyperspectral imaging in the NIR range.* In: *Real-Time Imaging* 11.2 (2005). Spectral Imaging II, S. 99–107.
- [109] **Trunk, G. V.** *A Problem of Dimensionality: A Simple Example.* In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 1.03 (1979), S. 306–307.
- [110] **Voigt, C. und Adamy, J.** *Formelsammlung der Matrizenrechnung.* De Gruyter, 2012.
- [111] **Wang, L. und Jia, X.** *Integration of Soft and Hard Classifications Using Extended Support Vector Machines.* In: *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 6.3 (2009), S. 543–547.
- [112] **Wang, L., Liu, D. und Zhao, L.** *Exploring support vector machine in spectral unmixing.* In: *2012 4th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*. 2012, S. 1–4.
- [113] **Wu, Changshan.** *Normalized spectral mixture analysis for monitoring urban composition using ETM+ imagery.* In: *Remote Sensing of Environment* 93 (2004), S. 480–492.
- [114] **Wyszecki, G. und Stiles, W.S.** *Color Science: Concepts and Methods, Quantitative Data and Formulae.* Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley, 2000.
- [115] **Zare, A.** *Spatial-spectral unmixing using fuzzy local information.* In: *2011 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. 2011, S. 1139–1142.
- [116] **Zhai, H., Zhang, H., Zhang, L. und Li, P.** *Laplacian-Regularized Low-Rank Subspace Clustering for Hyperspectral Image Band Selection.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* (2018), S. 1–18.
- [117] **Zhang, J., Rivard, B. und Sanchez-Azofeifa, A.** *Derivative spectral unmixing of hyperspectral data applied to mixtures of lichen and rock.* In: *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 42.9 (2004), S. 1934–1940.

- [118] **Zhang, J., Rivard, B., Sánchez-Azofeifa, A. und Castro-Esau, K.** *Intra- and inter-class spectral variability of tropical tree species at La Selva, Costa Rica: Implications for species identification using HYDICE imagery.* In: *Remote Sensing of Environment* 105 (2006), S. 129–141.
- [119] **Zoubir, A. M., Koivunen, V., Chakhchoukh, Y. und Muma, M.** *Robust Estimation in Signal Processing: A Tutorial-Style Treatment of Fundamental Concepts.* In: *IEEE Signal Processing Magazine* 29.4 (2012), S. 61–80.

Eigene Veröffentlichungen

- [120] **Anastasiadis, Johannes, Krippner, Wolfgang und Puente León, Fernando.** *Spatially resolved ingredient detection in spice mixes using 3D convolutional neural networks.* In: *OCM 2019 – Optical Characterization of Materials.* Hrsg. von **Beyerer, Jürgen, Puente León, Fernando und Längle, Thomas.** Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2019, S. 35–44.
- [121] **Bauer, Sebastian, Krippner, Wolfgang, Luo, Ding, Taphanel, Miro, Abdo, Mohammad, Badilita, Vlad, Längle, Thomas, Beyerer, Jürgen, Korvink, Jan und Puente León, Fernando.** *Ortsaufgelöste optische Bestimmung von Materialanteilen in Mischungen.* In: *XXX. Messtechnisches Symposium 2016.* Hrsg. von **Zimmermann, Stefan.** Berlin: De Gruyter, 2016, S. 69–76.
- [122] **Gering, Stefan, Krippner, Wolfgang und Adamy, Jürgen.** *Robust stabilization of recurrent fuzzy systems via switching control.* In: *2014 IEEE International Conference on Fuzzy Systems.* Beijing, 2014, S. 1867–1874.
- [123] **Krippner, Wolfgang, Anastasiadis, Johannes und Puente León, Fernando.** *Robust iterative estimation of material abundances based on spectral filters exploiting the SVD.* In: *Optical determination of material abundances by using neural networks for the derivation of spectral filters.* Hrsg. von **Velez-Reyes, Miguel und Messinger, David W.** Bd. 10986. Proceedings of SPIE. Bellingham, WA: SPIE, 2019.
- [124] **Krippner, Wolfgang, Bauer, Sebastian und Puente León, Fernando.** *Optical measurement of material abundances in mixtures incorporating preprocessing to mitigate spectral variability.* In: *OCM 2017.* Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2017, S. 87–96.
- [125] **Krippner, Wolfgang, Bauer, Sebastian und Puente León, Fernando.** *Ortsaufgelöste optische Bestimmung von Materialanteilen in Mischungen.* In: *tm – Technisches Messen* 84.3 (2017), S. 207–215.

- [126] **Krippner, Wolfgang, Bauer, Sebastian und Puente León, Fernando.** *Considering spectral variability for optical material abundance estimation.* In: *tm – Technisches Messen* 85.3 (2018), S. 149–158.
- [127] **Krippner, Wolfgang, Benzing, Philipp und Puente León, Fernando.** *Iterativer Spektralfilterentwurf für eine genaue optische Bestimmung von Materialanteilen.* In: *tm – Technisches Messen* 85.S1 (2018), S. 110–116.
- [128] **Krippner, Wolfgang und Puente León, Fernando.** *Optische Bandselektion für die verbesserte Schätzung von Materialanteilen.* In: *tm – Technisches Messen* 84.S1 (2017), S. 124–130.
- [129] **Krippner, Wolfgang und Puente León, Fernando.** *Bandbereichswahl und Materialanteilsschätzung mithilfe von Spektralfiltern.* In: *tm – Technisches Messen* 85.6 (2018), S. 454–467.
- [130] **Krippner, Wolfgang, Wagner, Felix, Bauer, Sebastian und Puente León, Fernando.** *Optical determination of material abundances by using neural networks for the derivation of spectral filters.* In: *Automated Visual Inspection and Machine Vision II.* Hrsg. von **Beyerer, Jürgen und Puente León, Fernando.** Bd. 10334. Proceedings of SPIE. Bellingham, WA: SPIE, 2017.
- [131] **Krippner, Wolfgang, Kisner, Viktor, Listmann, Kim D. und Konigorski, Ulrich.** *Recheneffiziente Bewertung von Messsignalen am Beispiel einer Regelkreisüberwachung für mechatronische Antriebssysteme.* In: *at – Automatisierungstechnik* 66.8 (2018), S. 604–616.
- [132] **Schmitt, E. J., Noack, B., Krippner, W. und Hanebeck, U. D.** *Gaussianity-Preserving Event-Based State Estimation With an FIR-Based Stochastic Trigger.* In: *IEEE Control Systems Letters* 3.3 (2019), S. 769–774.

Betreute studentische Arbeiten

- [133] **Benzing, Philipp.** *Optische Bestimmung von Materialanteilen: Iterativer Spektralfilterentwurf für genauere Anteilsschätzungen.* Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2018.
- [134] **Dietrich, Paul.** *Entmischung hyperspektraler Bilder mittels Nicht-Negativer-Matrix-Faktorisierung unter Einbezug räumlicher Information durch Graphen.* Masterarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2017.
- [135] **Kunz, Andreas.** *Untersuchung verschiedener Mischmodelle für Hyperspektralbilder und deren Einfluss auf die Entmischung von Spektren.* Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2017.

- [136] **Niederberger, Linus.** *Inverse Problems in the Field of Image Processing.* Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2018.
- [137] **Pan, Xinghan.** *Bandbereichsauswahl und Materialklassifikation mithilfe von geeigneten Spektralfiltern.* Masterarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2019.
- [138] **Schmitt, Eva.** *Ereignisbasierte Zustandsschätzung in Sensornetzwerken mit nicht-idealen Kanälen.* Masterarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2018.
- [139] **Simon, Bernd.** *Messgerät-invariante Merkmalsextraktion für die Analyse hyperspektraler Daten.* Masterarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2018.
- [140] **Tanaka, Toshiaki.** *Untersuchung und Anwendung verschiedener Verfahren der Entmischung von Spektren unter Einbezug variabler Reinspektren.* Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2017.
- [141] **Wagner, Felix.** *Optische Materialanteilsbestimmung unter Verwendung von variablen Spektralfiltern.* Masterarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2017.
- [142] **Yao, Yi.** *Classification of Material Abundances and Ensembles through Neural Networks by Spectral Filtering.* Masterarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2019.
- [143] **Zenkri, Oussama.** *Optisch gestützte Materialanteilsbestimmung mithilfe von künstlichen neuronalen Netzen und nichtlinearen Mischmodellen.* Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2017.