

# **Adaptive Kanalreduktion eines hyperspektralen Bilddatensatzes kombiniert mit k-mean Clustering**

***Tom Stalinski<sup>1</sup>, Oliver Scharf<sup>2</sup>, Vladimir Arkadiev<sup>3</sup>,  
Martin Radtke<sup>4</sup>, Frank Püschel<sup>1</sup>, Reiner Wedell<sup>3</sup>***

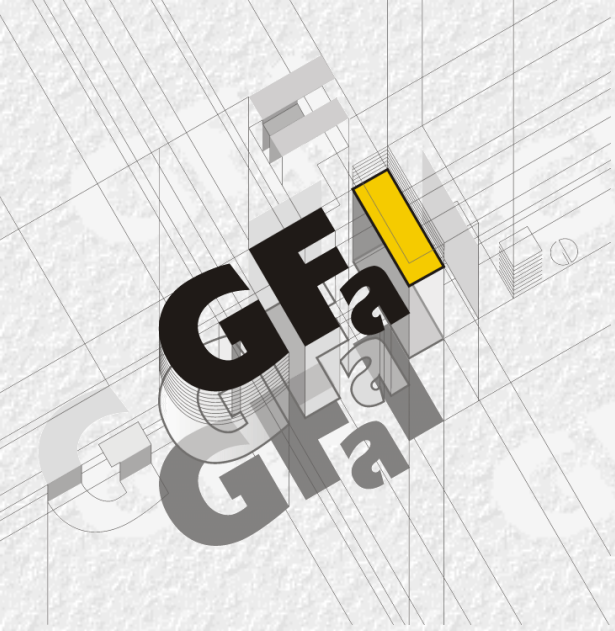
***<sup>1</sup>GFaI-Gesellschaft zur Förderung angewandter Informatik e.V.,  
Volmerstraße 3, 12489 Berlin***

***<sup>2</sup>IfG-Institute for Scientific Instruments GmbH,  
Rudower Chaussee 29/31, 12489 Berlin***

***<sup>3</sup>IAP-Institut für angewandte Photonik e.V.,  
Rudower Chaussee 29/31, 12489 Berlin***

***<sup>4</sup>BAM-Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung,  
Richard-Willstätter-Straße 11, 12489 Berlin***

***25. September 2014***



# Adaptive Kanalreduktion eines hyperspektralen Bilddatensatzes kombiniert mit k-mean Clustering

- I. Experimenteller Aufbau und Röntgenfluoreszenz
- II. Vollfeldauswertung und Clustering
- III. Güte des Clustering
- IV. Zusammenfassung und Ausblick

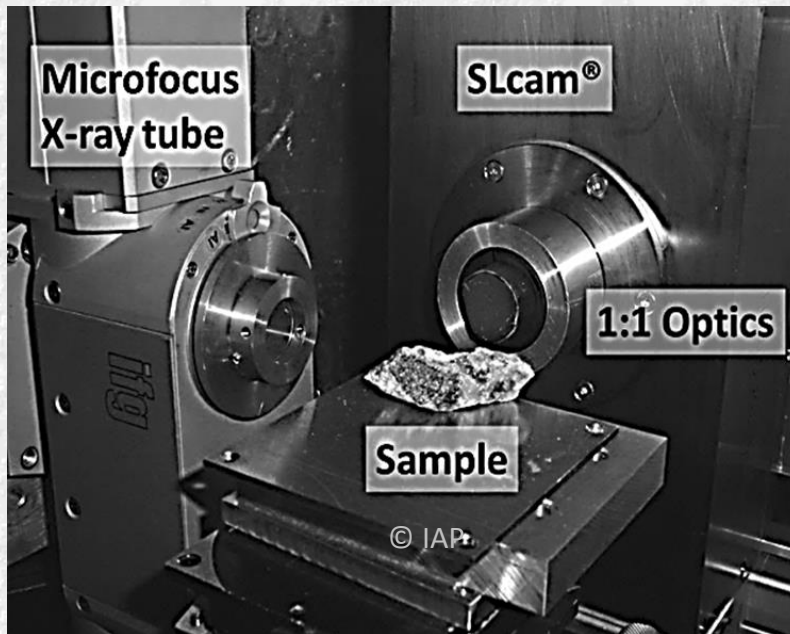




# Experimenteller Aufbau und Röntgenfluoreszenz



## Experimenteller Aufbau

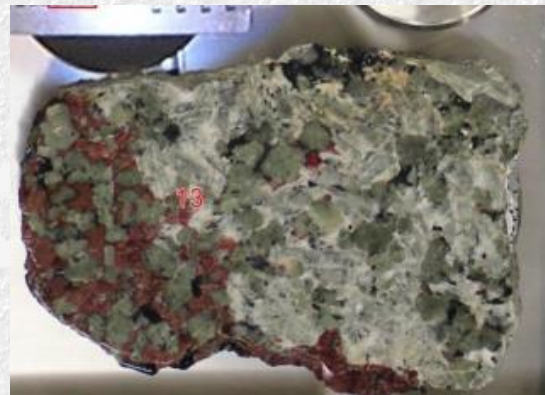


**Laboraufbau bei der IFG mit einer 30-Watt-Microfocusröhre für RFA**

- Ortsaufgelöstes Röntgenfluoreszenzspektrum
- Hyperspektraler Datensatz (264 Pixel x 264 Pixel x 1024 Kanäle)
- Kanalnummer repräsentiert Photonenenergie  $E$
- $E = c \cdot \text{gain} + \text{offset} \Rightarrow E \in [\text{offset eV}, 20000\text{eV}]$

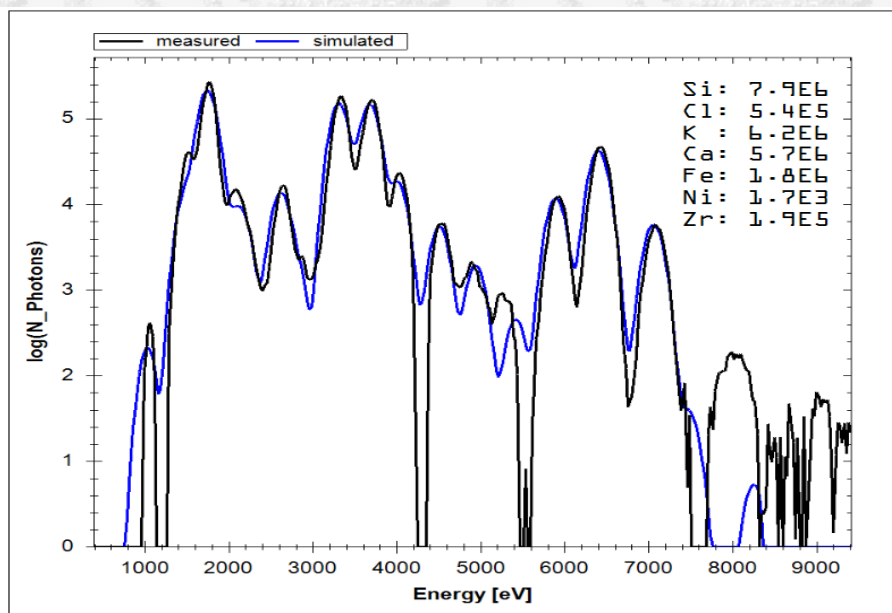


# Beispiel Eudialyt-Gestein

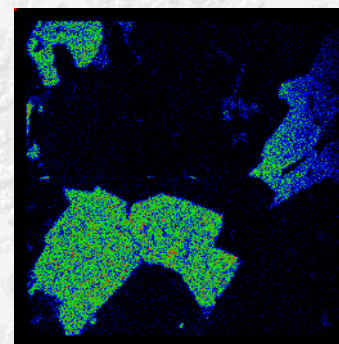


Helmholtz-Zentrum Dresden  
 Beamtime report,  
 7.-8.Oct. 2013  
 High-Speed PIXE

**Materialprobe Eudalyt**

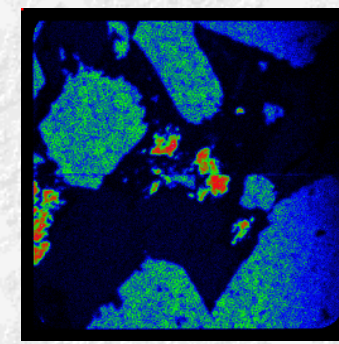


**Summenspektrum  
 (gemessen und simuliert)**



**K Kα1**

Kanal: 119...136  
 Energie: 3,1...3,5keV



**Mn Kα1**

Kanal: 220...239  
 Energie: 5,6...6,1keV



# Vollfeldauswertung und Clustering

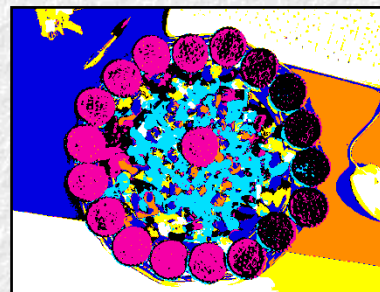


# k-mean Clustering, Beispiel RGB-Farbbild

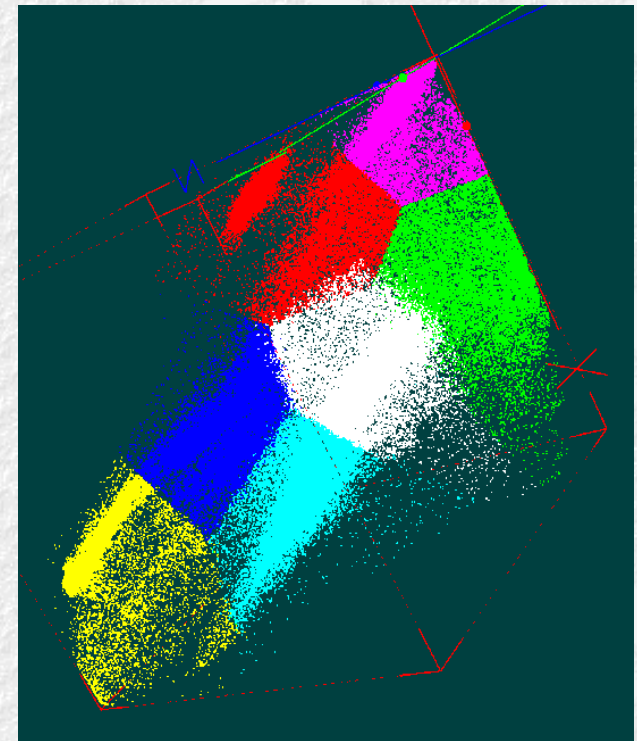
- $m \times n$  Punkte im RGB-Bild, jeder Punkt stellt Vektor aus  $\mathbb{R}^3$  dar (Vektor ist RGB-Farb-information)
- Ergibt Punktwolke im  $\mathbb{R}^3$  mit  $m \times n$  Punkten
- Hier Annahme:  
7 Klassen  
⇒ 7 Schwerpunkte



**RGB Farbbild**

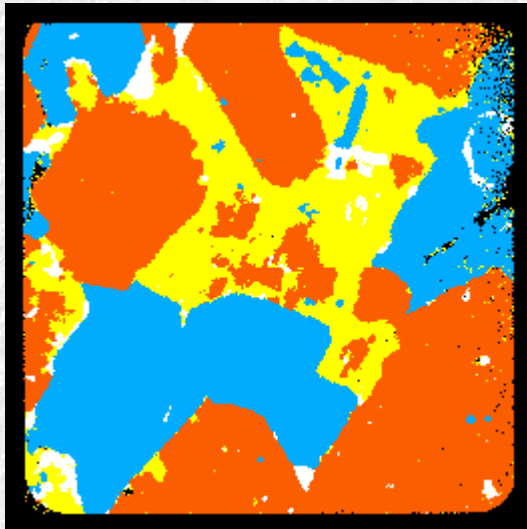


**Klassifikation**



**Geclusterte Punktwolke im RGB-Farbraum, alle Punkte des RGB-Farbbilds sind einbezogen**

# k-mean Clustering, hyperspektrales Bild Eudialyt



**Klassifikation  
1024-dimensionaler Raum**

- Direkte Variante:
  - 1024 Kanäle im hyperspektralen Datensatz
  - Rechnen mit  $\mathbb{R}^{1024}$
- Nachteil: lange Rechenzeit
- Vorteil: keine Näherung, kein Datenverlust



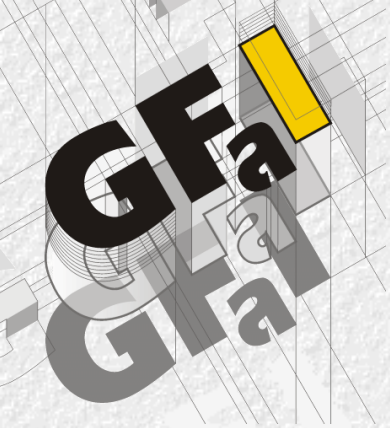


## Methode DimX

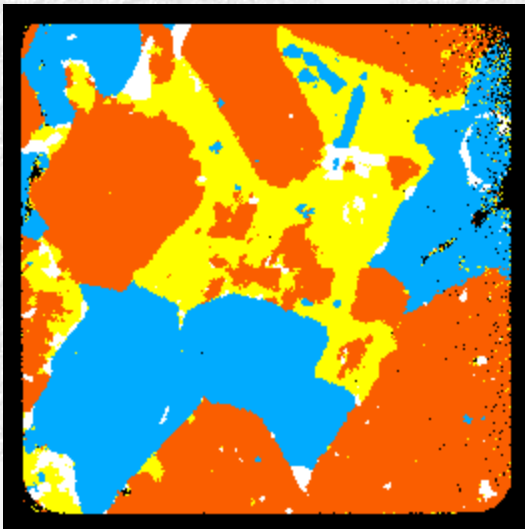
Hyperspektral → 512, ..., 1 Kanal

### Subsampling des hyperspektralen Datensatzes

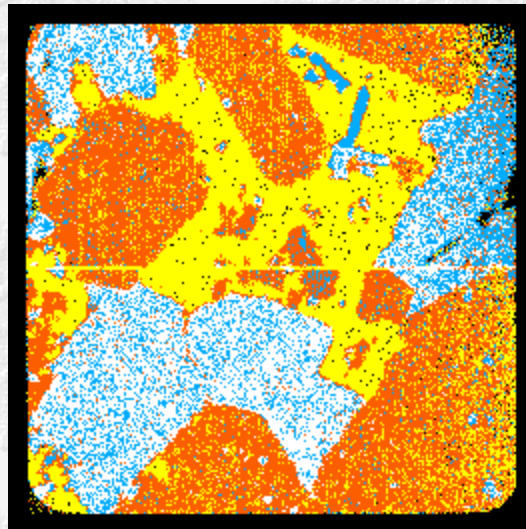
- Methode „DimX“
  - Dim512: Zusammenfassung und Mittelung jeweils zweier benachbarter Kanalwerte
  - Dim256, Dim128, ..., Dim1: analoge Fortsetzung
- Stellt kein adaptives Verfahren dar



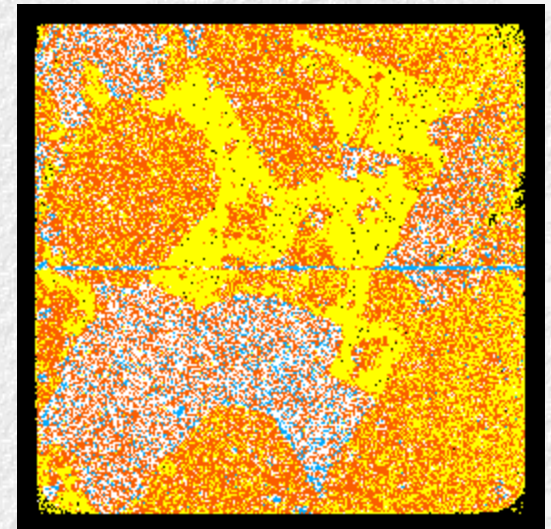
# Verfolgte Strategie: Subsampling der Energiekanäle (Methoden Dim1024, Dim512 , ..., Dim1)



**Klassifikation  
64-dimensionaler Raum**



**Klassifikation  
8-dimensionaler Raum**



**Klassifikation  
1-dimensionaler Raum**



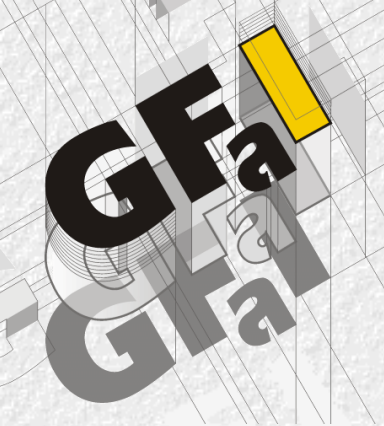


## Methode RGBeq

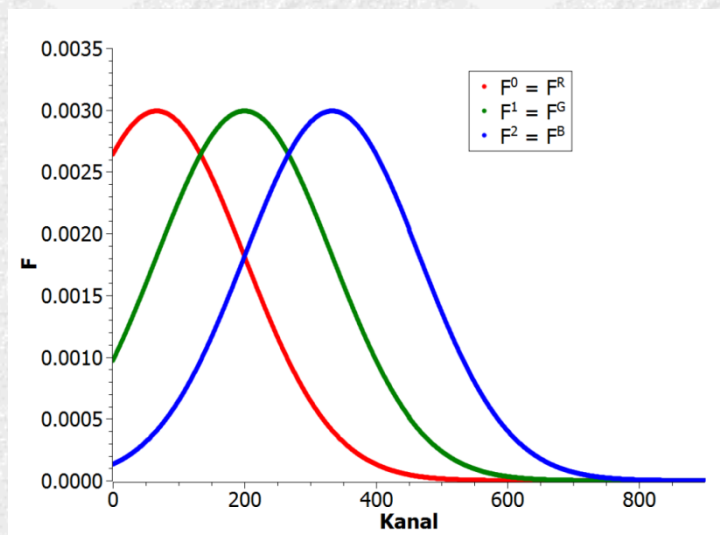
Hyperspektral  $\rightarrow$  RGB (1024  $\rightarrow$  3 Kanäle)

### Adaptive Berechnung von Faltungsfiterkurven

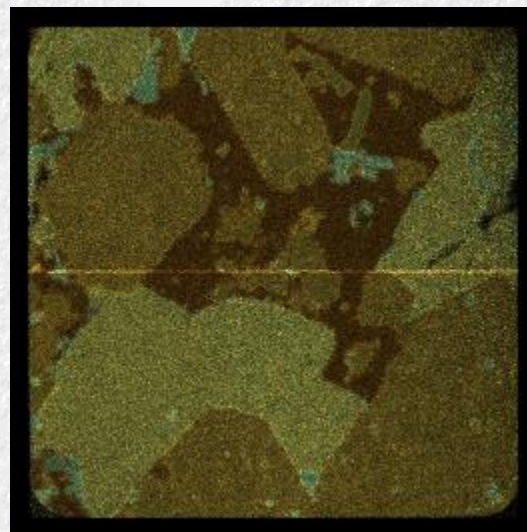
- Methode „RGBeq“
  - Globale Berechnung des mittleren Kanals und Schwankung
  - Darauf basierend Festlegung einer unteren und oberen Grenze
  - Äquidistante Dreiteilung und Konstruktion von drei Gaußkurven



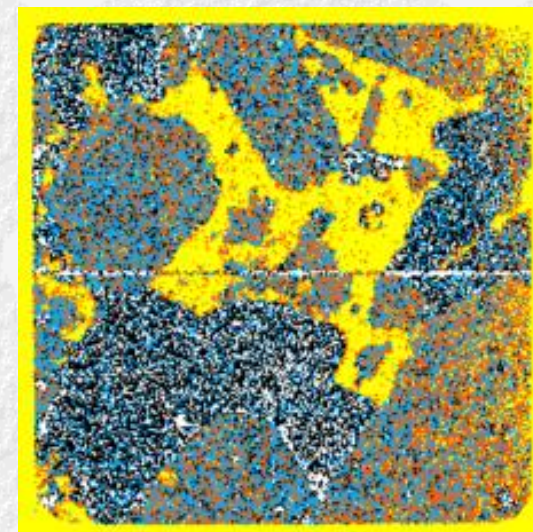
## Methode RGBeq



**Faltungskurven zur  
RGB-Farbbilderzeugung**



**RGB Farbbild**



**Klassifikation**





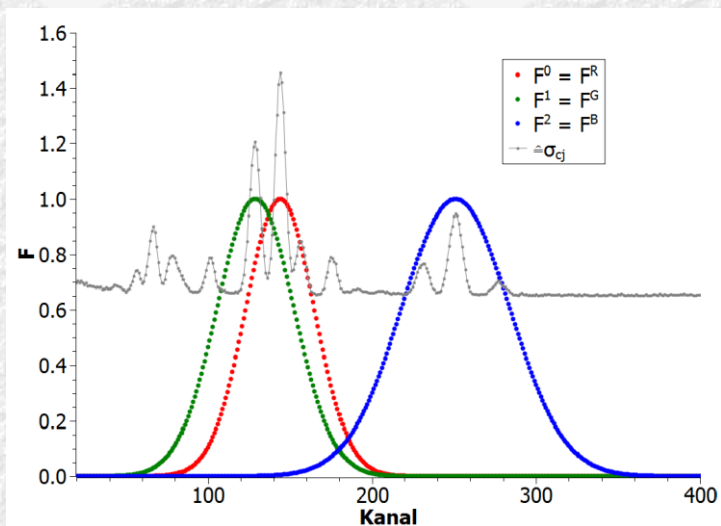
## Methode RGBvar

Hyperspektral  $\rightarrow$  RGB (1024  $\rightarrow$  3 Kanäle)

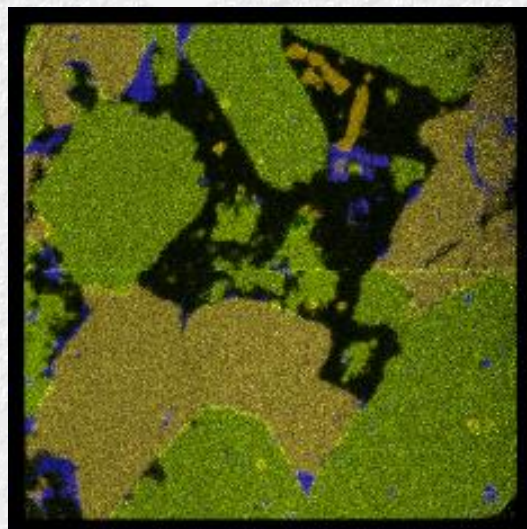
### Adaptive Berechnung von Faltungsfiterkurven

- Methode RGBvar
  - Berechnung des globalen Summenspektrums  
(= Spektrummittelung)
  - Berechnung der globalen Standardabweichung  
(=Spektrumschwankung)
  - Normierung auf die gemessenen Photonen je Kanal
  - Bestimmung der drei höchsten Peaks in dieser Kurve
    - Beantwortet die Frage: Welcher Kanal ist interessant?  
Wo passiert viel?
    - Grundlage zur Berechnung von drei Gaussfilterkurven

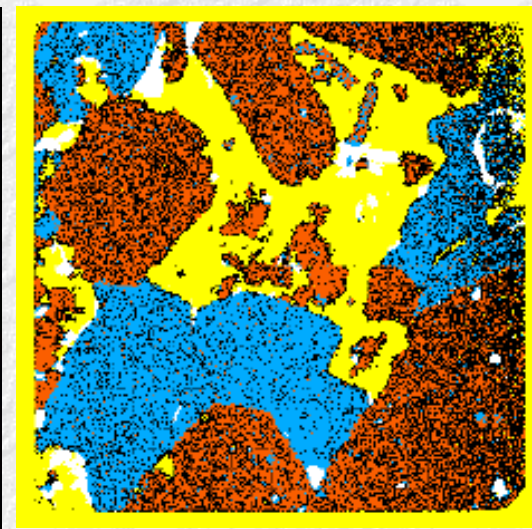
# Methode RGBvar



Faltungskurven zur  
RGB-Farbbilderzeugung



RGB Farbbild



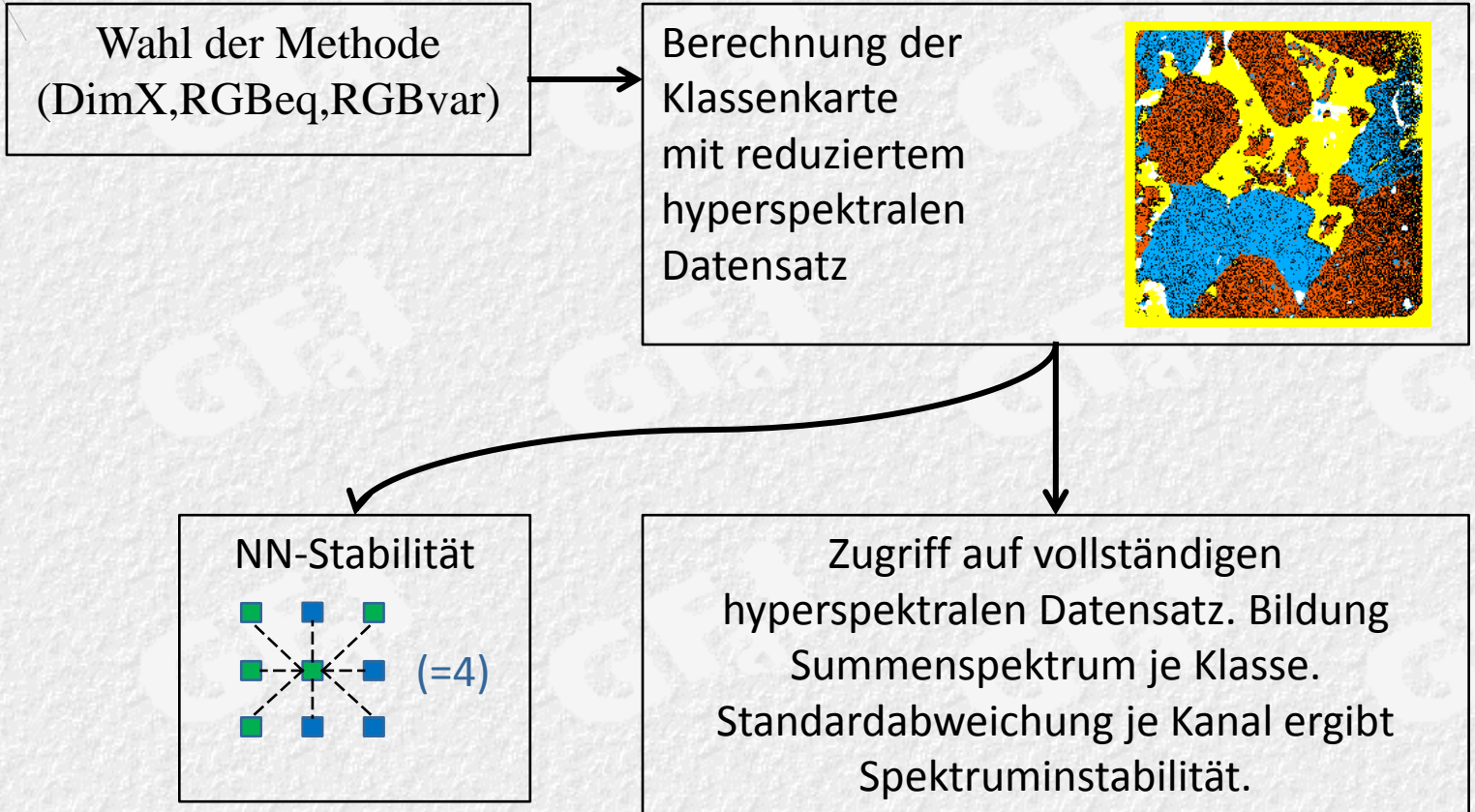
Klassifikation





# Güte des Clusterings

# Güte des Clusterings





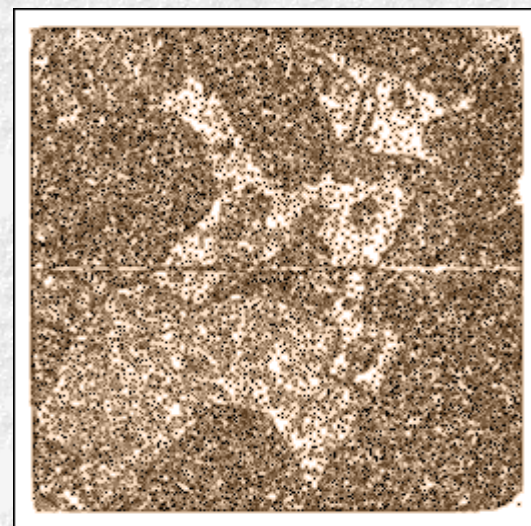
## Güte des Clusterings: NN-Stabilität

- Anzahl der Nachbarpunkte an einem Punkt, wo die Klasse ihren Wert nicht ändert.
- NN-Stabilität: Mittelwert über das gesamte Bild



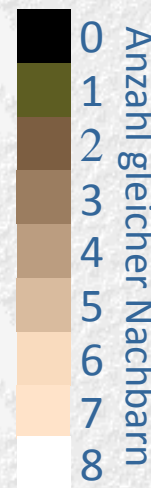
**Dim1024**

**NN-Stabilität = 7,27,  $\sigma = 1,67$**



**Dim4**

**NN-Stabilität = 3,98,  $\sigma = 2,42$**





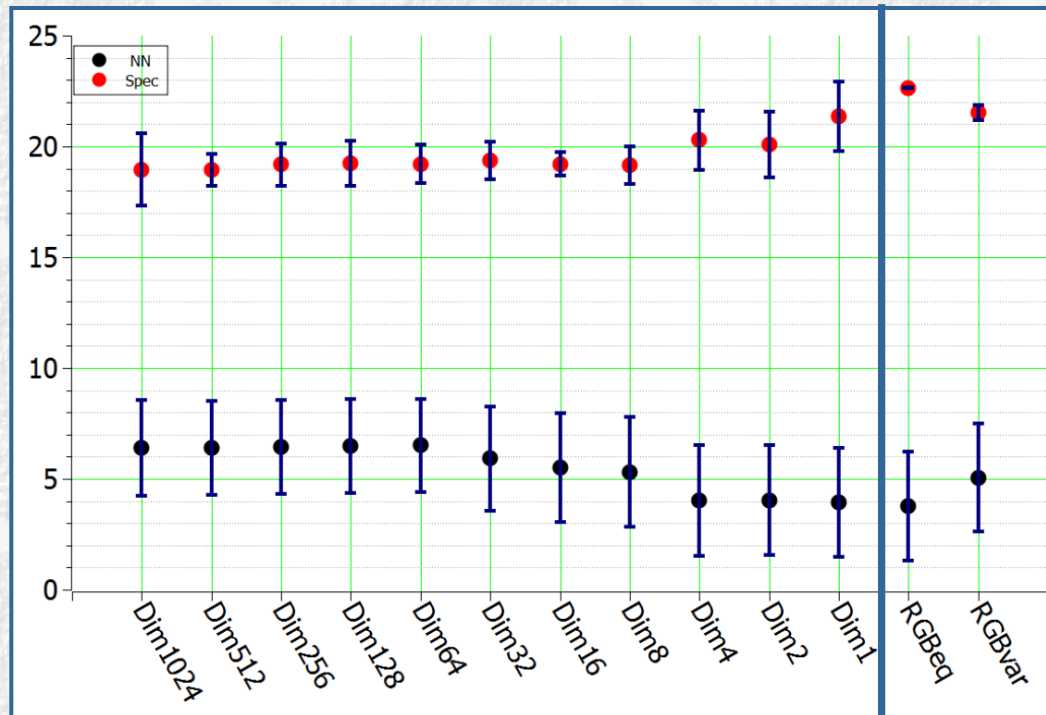
## Güte des Clusterings: Spektruminstabilität

- Berechne Summenspektren über alle Klassen  
(= Mittelwert in jedem Kanal)
- Berechne innerhalb jeder Klasse die mittlere  
Kanalstandardabweichung  
(große Standardabweichung bedeutet, dass Spektrum „instabil“,  
d.h. geringe Homogenität)



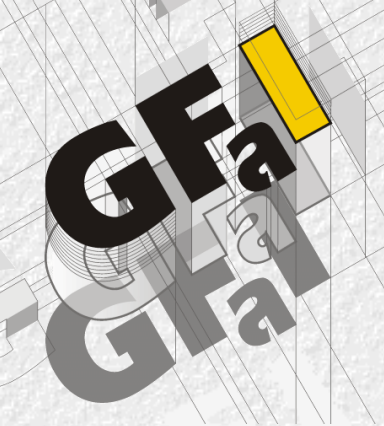


# Mittlere NN-Stabilität und Spektreninstabilität über 20 Testreihen

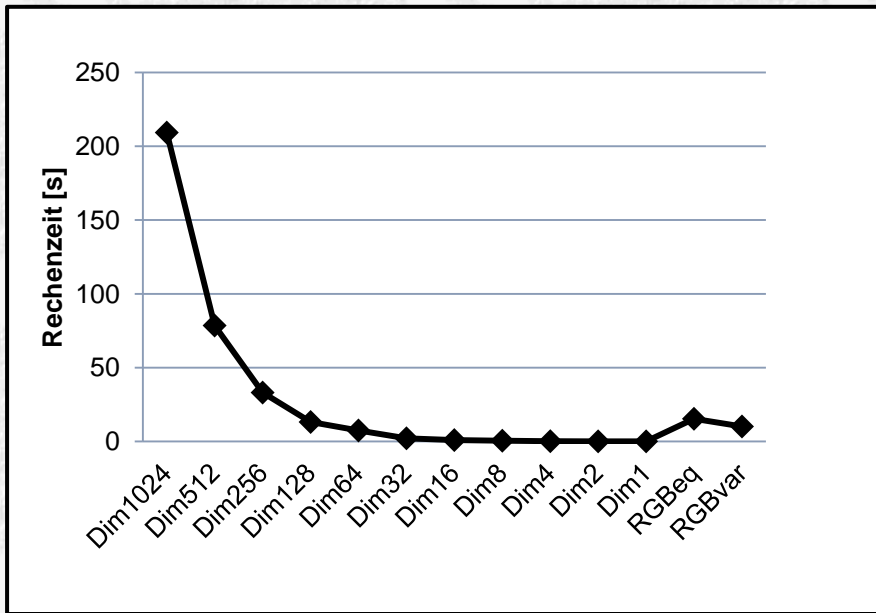


Mittlere NN-Stabilität und Spektruminstabilität

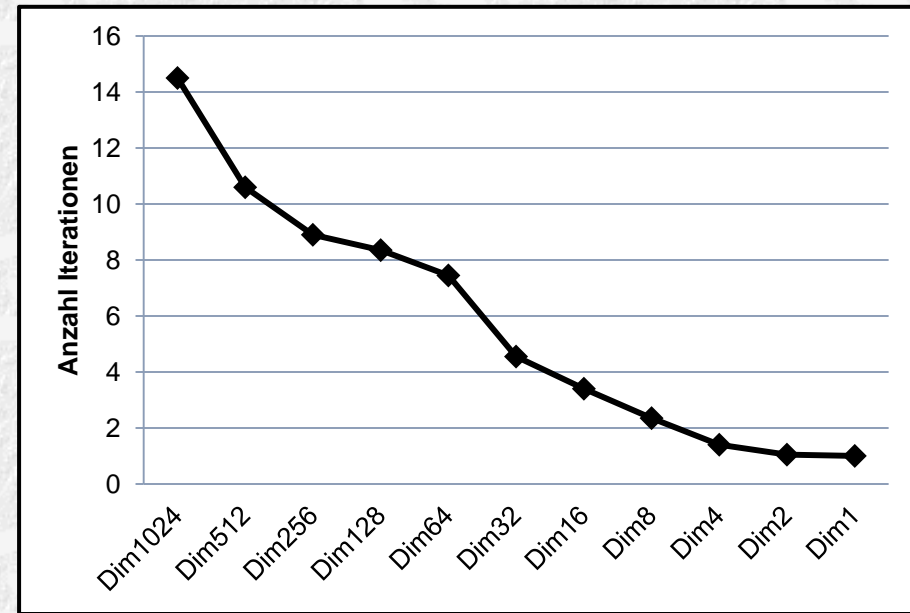




# Anzahl Iterationen und Rechenzeit



Gesamtrechenzeit k-mean Clustering



Durchschnittliche Anzahl Iterationen über alle Testreihen (bei RGBeq und RGBvar stets 50).







# Zusammenfassung und Ausblick



## Zusammenfassung

- K-mean Clustering hervorragend geeignet für das Zusammenfassen ähnlicher Gebiete bei orts aufgelösten Röntgenfluoreszenzspektren
- Statt 70000 Spektren müssen nur wenige Spektren (3-20) mittels Fundamentalparameteranalyse ausgewertet werden
- Subsampling von 1024 auf 64 Kanäle ohne relevanten Qualitätsverlust möglich
- Adaptive Verfahren, insbesondere das Variationsverfahren stellen eine brauchbare Alternative dar.
- Innovatives Darstellungsverfahren als RGB-Bild des hyperspektralen Datensatzes steht zur Verfügung





## Ausblick

- Liefert die Fundamentalparameteranalyse bei den erhaltenen Clusterspektren zuverlässige Ergebnisse?
- Testen Stabilität der Algorithmen unter Echtzeitbedingungen (Livemessungen)
  - Welche Subsamplingstufe ist in welchem Messzeitstadium zu verwenden?
  - In welchen Zeitabständen müssen Filterkurven neu berechnet werden?

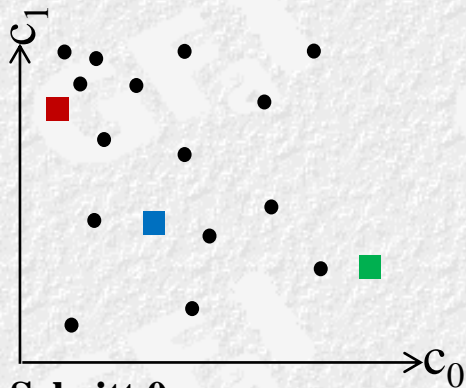


**Vielen Dank für die  
Aufmerksamkeit!**

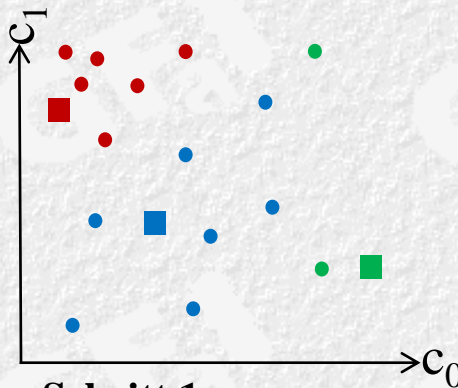


# K-Means Clustering

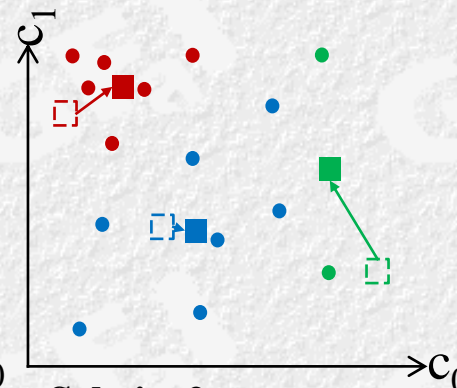
- Hier Beispiel im  $\mathbb{R}^2$
- Annahme: Drei Klassen, Codefarben **rot**, **grün**, **blau**
- Trainingspunkte •
- Schwerpunkte ■ ■ ■
- klassifizierte Punkte ● ● ●



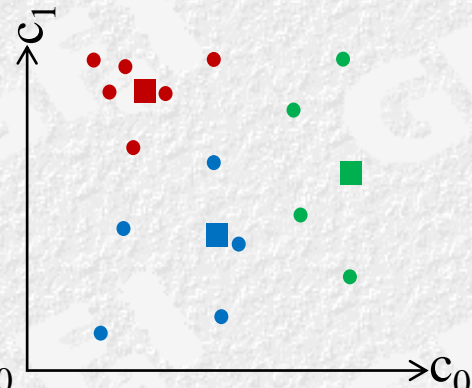
**Schritt 0:**  
Unklassifizierte Trainings-  
Punkte. Drei zufällige  
Initialschwerpunkte



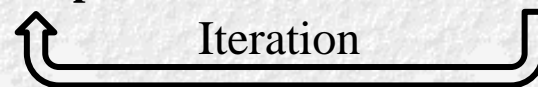
**Schritt 1:**  
Zugehörigkeit nach  
minimalem Abstand



**Schritt 2:**  
Neuberechnung der  
Schwerpunkte



**Schritt 1 (wiederholt):**  
Zugehörigkeit nach  
minimalem Abstand

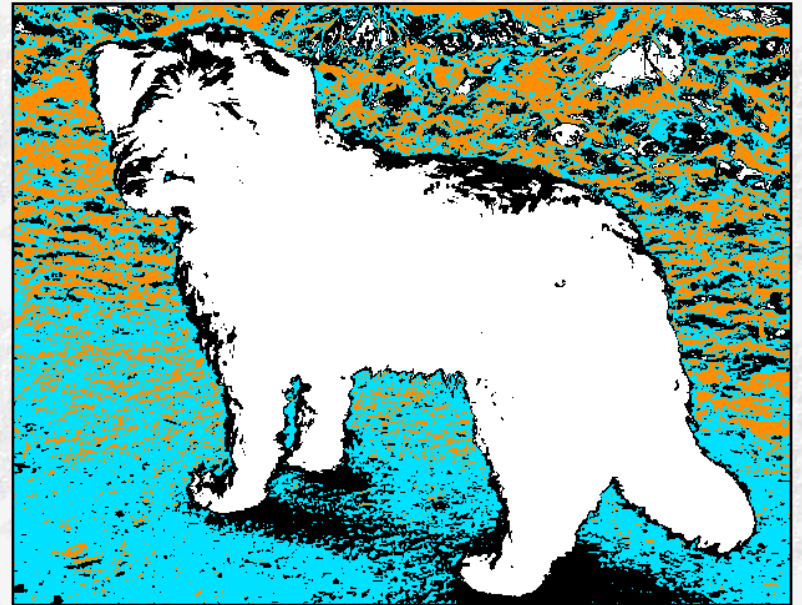


# K-Means Clustering

## Beispiel RGB-Farbbild



**RGB Farbbild**



**Klassifikation**