

基于不同色块数量的光谱重构对比

丁国华^{1,2}, 朱元泓², 李 博³, 梁权峰¹

(1. 南京林业大学 江苏省制浆造纸科学与技术重点实验室, 南京 210037; 2. 深圳职业技术学院, 深圳 518000; 3. 曲阜师范大学, 日照 276800)

摘要: 分别对 24 色块、140 色块、1 269 色块 3 种不同颜色数量的哑光色卡光谱反射率进行主成分分析(PCA), 利用分析所提取的最大 6 个特征向量重构光谱, 并使用均方根误差值(RMSE)和 CIE1976 色差值对结果进行评价。实验结果表明: 同等条件重构后, 140 色卡在累计贡献率和色差方面均优于另外 2 种数量的色卡, 均方根误差也仅次于 1 269 色卡, 表明不同色块数量的训练样本会影响光谱重构精度; 重构后的光谱反射率均在对应黄色、绿色、蓝色等的中间波段, 再现效果最好, 蓝紫色相对较弱, 橙色-红色表现最差。

关键词: 多光谱成像; 主成分分析; 光谱重构

中图分类号: TS801.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3563(2012)03-0014-04

Comparison of Spectrum Reconstruction on Different Number of Color Block

DING Guo-hua^{1,2}, ZHU Yuan-hong², LI Bo³, LIANG Quan-feng¹

(1. Jiangsu Provincial Key Lab of Pulp and Paper Science and Technology, Nanjing Forestry University, Nanjing 210037, China; 2. Shenzhen Polytechnic, Shenzhen 518000, China; 3. Qufu Normal University, Qufu 276800, China)

Abstract: The spectral reflectance of the 24, 140, 1 269 matt Munsell color cards were analyzed respectively by principal component analysis, and then spectral reconstruction was carried out using 6 biggest eigenvectors extracted by the analysis. The results were evaluated by using RMSE and color difference value of CIE1976. The reconstruction results showed that 140 color cards surpass other two kinds of quantities in accumulative total contribution rate and color difference under the same reconstruction condition; RMSE of the 140 color cards is inferior to that of the 1 269 color cards, which suggests that the number of training sample has influence on reconstruction precision; reconstructed spectral reflectance is in the middle band of yellow, green, and blue, which represent the best reproduction; the reproduction performance of blue-purple is not as good and that of orange-red performance is the worst.

Key words: multispectral imaging; principal component analysis; spectrum reconstruction

物体的颜色是由物体对入射光选择性吸收后的反射光光谱成分所决定的, 因而用物体在可见光范围内的反射比来表示颜色最直观、最准确。自然界最常见的现象是: 虽然 2 个物体表面的光谱反射比不同, 但在特定的观察条件下看起来颜色完全一样, 即常说的同色异谱现象。如果用物体表面的光谱反射比来表示颜色, 就可以减少如同色异谱之类的问题, 同时可以大大提高颜色复制的精度。目前, 多光谱成像系

统已成为了获取光谱反射比信息的主要硬件技术, 与之相匹配的光谱估计算法则为实现光谱反射比重构的软件技术, 两者配合来最终实现真实彩色图像的复制^[1]。

笔者利用主成分分析法对 3 种不同数量色卡的光谱数据进行实验处理, 实现对海量数据的压缩和特征提取。根据所求得的基向量对原始光谱数据恢复, 并判断不同数量的色块对光谱反射率恢复的影响。

收稿日期: 2011-06-10

基金项目: 深圳市科技计划项目(JC200903180754A)

作者简介: 丁国华(1986—), 女, 江苏人, 南京林业大学硕士生, 主攻光谱学方面的研究。

通讯作者: 梁权峰(1973—), 男, 黑龙江人, 南京林业大学副教授, 主要从事纸张油墨材料等方面的教学与研究。

1 光谱重构算法

1.1 基于主成分分析的光谱重构

一个光谱数据集可以表示成几个主要光谱成分的线性组合,提取光谱数据集最常用方法是主成分分析法(PCA),其关键是要求出各变换轴(即主成分)^[2]。假设一个光谱反射率数据集 $\mathbf{R}$ 是一个 $n \times m$ 维的向量矩阵(即 m 个样本数, n 个波段下的光谱反射率),则可以表示为 $\mathbf{R} = (R_{11}, R_{12} \cdots R_{mn})^T$ 。因为 $\mathbf{R}$ 的自由度小于 n , $\mathbf{R}$ 的近似值 $\hat{\mathbf{R}}$ 是 p 个彼此正交的 n 维单位基向量 $\mathbf{e}_i (1 \leq i \leq p)$ 的线性组合,即光谱反射率可近似表示为:

$$\hat{\mathbf{R}} = \sum_{i=1}^p \mathbf{e}_i \mathbf{a}_i = \mathbf{F} \mathbf{a} \quad (1)$$

式中:基向量 $\mathbf{e}_i$ 是所提取的特征向量,用向量组 $\mathbf{F} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \cdots, \mathbf{e}_p)$ 表示; $\mathbf{a}$ 是对应的转换系数,可表示为 $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3, \cdots, a_p)^T$ ^[3]。计算基向量的常用方法是 PCA。

在对数据做 PCA 处理之前,为了简化计算过程以及具有更好的条件约束性,需要预先对数据进行中间化处理;中间化就是零平均,即可去除平均值大小的影响。若光谱反射率 R 的平均值为 $\bar{R}$,则 R 去平均的中心矩阵 $\mathbf{X}$ 可以定义为:

$$\mathbf{X} = [R_1 - \bar{R}, R_2 - \bar{R}, \cdots, R_m - \bar{R}] \quad (2)$$

其中 $\mathbf{X}$ 是一个 $n \times m$ 的矩阵。其协方差矩阵 $\mathbf{G}$ 可表示为:

$$\mathbf{G} = \frac{1}{m} \mathbf{X} \mathbf{X}^T \quad (3)$$

$\mathbf{G}$ 是协方差矩阵,当只需要计算矩阵的特征向量时,比例因子 $1/m$ 是不需要的。即可对 $\mathbf{X}$ 做如下奇异值分解:

$$\mathbf{X} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T \quad (4)$$

式中: $\mathbf{U}$ 是 $\mathbf{X} \mathbf{X}^T$ 的特征向量,即为 $\mathbf{G}$ 的特征向量,也就是在重构光谱时所使用的基向量 $\mathbf{U} = [u_1, u_2, \cdots, u_n]$; $\mathbf{V}$ 是 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 的特征向量; $\mathbf{S}$ 是对角阵,它和矩阵 $\mathbf{X}$ 有着相同的维数,对角线上的值是 $\mathbf{X} \mathbf{X}^T$ 和 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 特征值的平方根^[4]。

当矩阵 $\mathbf{U}$ 的前 p 个特征向量的贡献率足够大时,光谱反射率就可认为是前 p 个特征向量的线性组合。累计贡献率的计算公式表示为:

$$V_p = \sum_{i=1}^p W_i / \sum_{i=1}^n W_i \quad (5)$$

在确定完所需的特征根的个数后,即可进行主成分的分析以及光谱的恢复,即利用式(1)将前 p 个特征基向量代入求出新的光谱反射率 $\hat{\mathbf{R}}$ 。在此基础上还要加入之前去除的平均反射率 $\bar{R}$,则可得到重新恢复的光谱值 $\mathbf{R}'$ ^[5]:

$$\mathbf{R}' = \mathbf{X}_i + \bar{\mathbf{R}} \quad (6)$$

因此,PCA 是一种基于二阶统计的最小均方根误差意义上的最优维数压缩技术,所提取特征的各分量之间是统计不相关的。

1.2 光谱相似度评价标准

采用均方根误差(RMSE)和 CIE1976 色差公式 ΔE_{ab}^* 来评价光谱反射率重建效果^[5]。设每一点像素的原始光谱反射率数据集为 $\mathbf{R}$,重构反射比为 $\mathbf{R}'$ 。

定义均方根误差 RMSE 为:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum (\mathbf{R} - \mathbf{R}')^2}{N}} \quad (7)$$

定义 CIE1976 色差 ΔE_{ab}^* 为:

$$\Delta E_{ab}^* = [(\Delta L)^2 + (\Delta a)^2 + (\Delta b)^2]^{1/2} \quad (8)$$

2 光谱估算结果分析

2.1 实验条件

分别采用 24, 140, 1 269 个色块的 3 种哑光色卡作为测试样本。色卡样本的光谱反射率是由 Spectrolino 在 2° 视场、D65 光源下测出,所测光谱的波长范围为 400~700 nm,年间隔 10 nm 进行采样,这样每个物体表面的光谱反射比由 $N = 31$ 维向量组成。利用 Matlab 中的 SVD 函数分别对 3 组样本主成分分析,根据所提取的前 6 个最大特征根基向量对光谱反射率进行重构对比^[6]。

2.2 特征向量选取结果对比

3 种色卡的前 6 组特征值和累计贡献率见表 1,提取了前 6 个最大特征值,贡献率均已达到 99.7% 以上。结果表明,累计贡献率并没有随着色块数量的增加而持续增加;贡献率最高的是 140 色卡,达到 99.850%;24 色卡最低,总体而言 3 者相差不大。为进一步排除它们在颜色分布上对特征根选取的影响,对比了 24 色卡和 140 色卡的 a, b 值坐标轴分布(a, b 为心理计量色度,简称色度指数, a 坐标轴表示红绿色轴的变化,正值为红色,负值为绿色; b 坐标轴表示黄蓝色轴的变化,正值为黄,负值为蓝),结果显示两者的色块数量虽然不一样,但总体的分布趋势是相同的。

表 1 3 种色卡的前 6 组特征值和累计贡献率

Tab.1 First six groups of characteristic values and accumulation contribution rate of three kinds of color card

数量	24 色卡		140 色卡		1 269 色卡	
	特征值	累计贡献率/%	特征值	累计贡献率/%	特征值	累计贡献率/%
1	25.074 41	65.970	298.308 9	82.292	1 162.528	76.846
2	9.071 467	89.836	46.383 63	95.087	239.244 4	92.660
3	3.170 79	98.177	13.888 07	98.918	89.781 43	98.595
4	0.336 263	99.061	1.941 007	99.454	11.323 78	99.343
5	0.175 556	99.523	1.131 096	99.766	5.464 257	99.705
6	0.871 89	99.753	0.306 389	99.850	1.734 247	99.819

3 种色卡的前 6 组最大特征根的光谱曲线见图 1。结果显示,3 种色卡的 6 组基函数的能量走势大

1 269 色卡更准确。第 2 组和第 3 组基函数则各自捕获了橙色-青色以及黄色-绿色的变化;第 4 组和第 5 组基函数则各自捕获了蓝色-紫色以及黄色-绿色变化;第 6 组基函数的光谱能量曲线的变化幅度相对大些,颜色覆盖在整个波长范围。总体来说 3 种色卡的 6 组基函数的走势都基本相同,这与累积贡献率上的表现相一致。

另外在一定程度上表达了某些波段颜色再现的优劣情况,除去表示黑白颜色的曲线,另外 5 组曲线在波段 500~620 nm 之间出现强烈的光谱能量,而在 400~500 nm 之间相对较弱,相对应的 640 nm 以后的波段光谱能量最小。可以初步判断,重构后的光谱反射率在中间波段对应的黄色、绿色、蓝色等再现效果最好,蓝紫色相对较弱,橙色-红色则是表现最差的。

2.3 均方根误差和色差对比

在选定 6 组特征根基函数的基础上,即可重构光谱反射率,并比较重构后的色块在光谱值以及色差值方面的差异。

基于前 6 组基函数的均方根误差值对比见表 2,从表 2 可以看出,随着基函数个数的增加均方根误差值逐渐变小,在使用 6 组基函数时 3 者的 rmse 均值都在 1.0 左右,重构光谱与原始光谱相似程度已经很高。并且 3 种色卡的均方根误差值随着色块的数量增加而减少,1 269 个色块的平均误差值最小,达到 0.722 607,140 个色块的和 24 个色块的平均均方根误差则分别为 0.948 752,1.035 134。

基于前 6 组基函数的色差值对比见表 3,当基函数的个数增加时,色差值逐渐降低,这与 RMSE 值表现相一致,但唯一例外的是 3 者重构误差都会在基础函数的数量从 1 增加到 2 时有所增加。在使用 6 组基函数进行重构后的色差值 3 者均达到 1.0 左右,140 色卡的色差值最小为 0.598 2,其次是 1 269 色卡

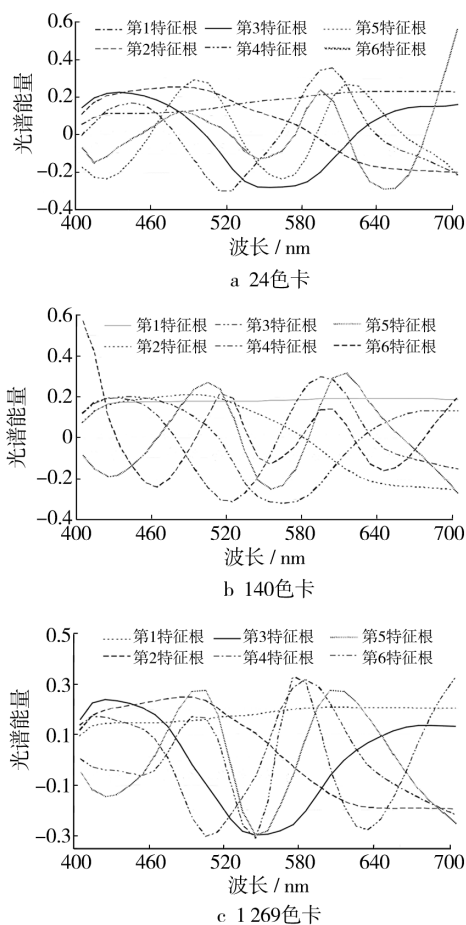


图 1 3 种色卡的前 6 组特征向量

Fig.1 First six group of eigenvector for the three kinds of color card

致相同,第一组光谱能量曲线在整个波长范围都较平滑,光谱反射率波动幅度较小,代表着反射率光谱的黑-白色的变化;140 色卡的第一组能量光谱值变化相对平稳,即 140 色卡的黑白色再现会比 24 色卡和

表 2 基于前 6 组基函数的均方根误差值对比
Tab.2 Contrast of RMSE based on first six groups of primary function

基函数	24 色卡			140 色卡			1 269 色卡		
	平均值	中位数	最大值	平均值	中位数	最大值	平均值	中位数	最大值
1	11.856	11.359	20.294	9.711	6.118	31.561	7.673	6.442	25.679
2	6.120	4.886	16.517	4.613	2.600	18.639	4.144	3.028	16.312
3	2.842	3.081	4.734	2.491	1.630	8.659	1.894	1.548	10.507
4	1.974	1.634	4.059	1.723	1.301	8.573	1.264	0.976	7.403
5	1.431	1.265	2.615	1.217	0.963	3.990	0.901	0.769	5.435
6	1.035	0.956	2.312	0.949	0.733	2.793	0.723	0.639	2.925

表 3 基于前 6 组基函数的色差值对比
Tab.3 Contrast of chromatic aberration value based on first six groups of primary function

基函数	24 色卡			140 色卡			1 269 色卡		
	平均值	中位数	最大值	平均值	中位数	最大值	平均值	中位数	最大值
1	35.876	4.910	67.294	240.853	28.255	728.123	23.028 4	1.171	71.495
2	851.85	71.028	3 243.92	1 042.13	4.385	3 339.01	297.988	6.322	981.541
3	7.542 9	0.619	19.841	1 049.79	2.417	3 336.54	3.149	0.095	29.672
4	1.870	0.379	5.596	326.561	1.359	1 221.96	1.861	0.042	19.364
5	1.192	0.328	4.447	326.129	1.496	1 222.34	0.879	0.023	5.422
6	1.180	0.140	5.525	0.598	0.021	4.612	0.872	0.010	5.389

的色差值为 0.872,24 色卡的色差值最大为 1.18,其恢复后在色度上表现最不好。

根据表 2 和 3 均方根误差值以及色差值的变化趋势,从整体上分析了恢复后的光谱反射率与原始光谱反射率的相似程度,下面将通过对比具体色块的误差值和色差值,分析哪些颜色恢复较好与较差。

不同色块所对应的不同颜色的光谱恢复是有差异的,见图 2 和 3。在 RMSE 表现上,24 色卡在其编号 3,6,11,17,22 等 5 个色块上数值较大;140 色卡则在其编号 15,23,43,47,53,63,79,115,117,125 等 10 个色块上的数值较大。通过观察这些色块的 a 、 b 值分布,发现 RMSE 较高的几个色块几乎都分布在一、四象限,表明光谱重构误差在红色、紫色波最大,这与前面光谱能量曲线的走势相一致。

由图 3 可以看出:24 色卡其编号在 3,5,6,11,15,226 个色块处数值最大,140 色卡则分别在其编号 12,22,43,53,64,74,116,124,128 等 9 个色块处数值最大,均达到 1.5 以上,即重构后这些色块在色度上表现最不理想。对于 24 色卡其 RMSE 与色差值较差的点是相对一致的,即光谱反射率恢复较差的色块其在色度表现上也相对较差,在 140 色卡和 1 269 色卡上的表现就不相一致。如 140 色卡,其 RMSE 值在 1.5 以上的较多,但色差值就相对较均匀。1 269

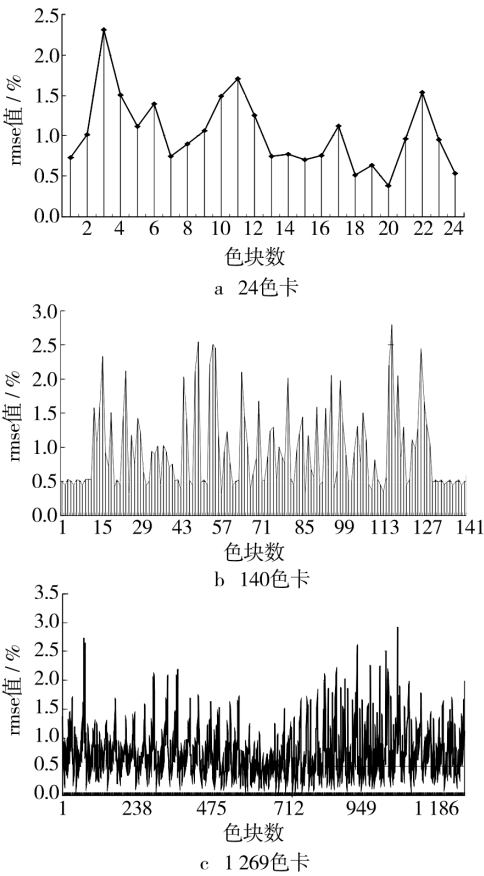


图 2 3 种色卡的 RMSE 曲线
Fig.2 RMSE curves of the three kinds of color card

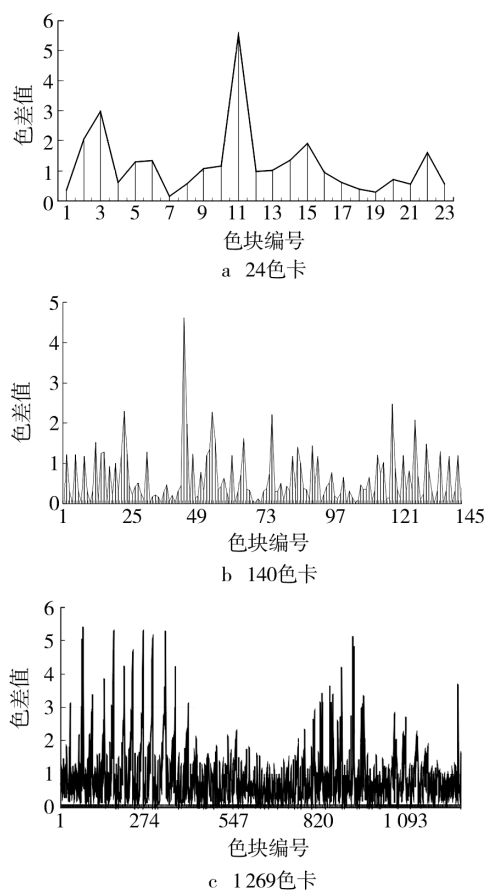


图3 3种色卡的色差曲线

Fig. 3 Chromatic aberration curves of the three kinds of color card

的色卡在两者的表现上也有区别,在 RMSE 方面主要表现在中间及后半部分的色块的误差值更大,色差值上则在前半部分与后半部分的色差值大些。对比色差较大的几个色块的 a, b 值象限分布,发现色差较大的色块其 a, b 值均分布在一、四象限,尤其是在第一象限色块分布较多,表明光谱重构后的色差在红色波段表现误差较大,这也进一步证实,光谱重构后在红色波段再现效果最不理想,这与前面计算均方根误差值时所表现的结果相一致。

3 结果讨论

对3种不同色块数量色卡的光谱反射率作了主成分分析,提取了特征光谱向量,对比累计贡献率;在共同获取前6个特征根的情况下,140色卡的累积贡献率最大达到99.850%,其次是1269色卡,24色卡的相对较低。利用提取的前6组特征向量进行仿真光谱重构,分别计算均方根误差值以及色差值来比较

3者的光谱重构效果,结果显示3种色卡的均方根误差值和色差值都随着基函数个数的增加而减小,随着色块数量的增加均方根误差逐渐减少,1269色卡的RMSE均值最小,其次是140色卡;色差方面则是140色卡的色差均值最小达到0.598,24色卡色差均值最大为1.180,这与累计贡献率的走势一致。

分别将24色卡和140色卡其均方根误差值与色差值中误差最大的几个色块提取出来,分别研究其在 a, b 值坐标轴的分布情况。结果表明光谱反射率在波段500~620 nm之间再现效果最佳;在400~500 nm相对较弱;而相对应的640 nm以后的波段表现最差。表明重构后的光谱反射率在中间波段对应的黄色、绿色、蓝色等再现效果最好,蓝紫色相对较弱,橙色-红色则是表现最差的,这一结果与前面所分析的3者特征光谱能量曲线结果相符。说明基于6组特征根的主成分重构光谱在某些颜色再现上是有缺陷的,这有利于在后续实验中有针对性的用增加滤色片予以弥补。

参考文献:

- [1] 杨卫平,徐楠,段剑金,等.多光谱成像技术在颜色复制方面的应用及发展[J].云南民族大学学报(自然科学版),2009,18(3):191-197.
YANG Wei-ping, XU Nan, DUAN Jian-jin, et al. Application and Development of Multispectral Imaging Technology in Color Reproduction[J]. Journal of Yunnan University Nationalities (Natural Sciences Edition), 2009, 18(3): 191-197.
- [2] 王璐,包革军,王雪峰.主成分分析中的信息损失及其效率估计[J].统计与信息论坛,2003(3):55-57.
WANG Lu, BAO Ge-jun, WANG Xue-feng. Information loss and Efficiency Estimation by Principal Component Analysis[J]. Statistics & Information Tribune, 2003(3): 55-57.
- [3] 任鹏远,廖宁放,柴冰华,等.基于多光谱成像的光谱反射比重建[J].光学技术,2005,31(3):427-433.
REN Peng-yuan, LIAO Ning-fang, CHAI Bing-hua, et al. Spectral Reflectance Recovery Based on Multispectral Imaging[J]. Optical Technique, 2005, 31(3): 427-433.
- [4] TZENG D Y, BERNIS R S. Spectral-based Ink Selection for Multiple-ink Printing II. Optimal Ink Selection[C]. Proceedings of the 7th IS&T/SID Color Imaging Conference, Scottsdale, 1999: 182-187.
- [5] CHEN Qiao, CHEUNG T L V, WESTLAND S. Physical Modelling of Spectral Reflectance[C]. Proceedings of the 10th Congress of the International Color Association, Granada, Spain, 2005: 1151-1154.