

# 基于降维正则化多项式的光谱反射率重建方法

王可<sup>1,2</sup>, 王慧琴<sup>1,2</sup>, 龙艳群<sup>2</sup>, 王伟超<sup>2</sup>, 赵丽娟<sup>2</sup>, 杨蕾<sup>2</sup>

<sup>1</sup>西安建筑科技大学管理学院, 陕西 西安 710055;

<sup>2</sup>西安建筑科技大学信息与控制工程学院, 陕西 西安 710055

**摘要** 针对光谱反射率重建常用方法中主成分分析法重建后产生病态的问题, 提出一种基于降维正则化多项式的光谱反射率重建方法; 利用主成分分析法对训练样本的高维光谱数据进行降维, 在降维的基础上对样本的通道响应数进行多项式回归扩展来提高光谱反射率重建的精度, 同时加入 Tikhonov 限制条件来避免多项式扩展导致的数据不稳定性和随机噪声产生的病态问题。结果表明: 降维正则化多项式光谱反射率重建方法在精度评价中的效果优于主成分分析法和多项式回归扩展法, 同时实现了降低光谱数据计算量、优化通道响应、提高反射率重建精度的目的。

**关键词** 光谱学; 光谱反射率重建; 降维正则化; 多项式回归扩展; 主成分分析

中图分类号 O433.4

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP55.053004

## Spectral Reflectance Reconstruction Based on Dimension Reduction Regularization Polynomials

Wang Ke<sup>1,2</sup>, Wang Huiqin<sup>1,2</sup>, Long Yanqun<sup>2</sup>, Wang Weichao<sup>2</sup>, Zhao Lijuan<sup>2</sup>, Yang Lei<sup>2</sup>

<sup>1</sup> School of Management, Xi'an University of Architecture and Technology,

Xi'an, Shaanxi 710055, China;

<sup>2</sup> School of Information and Control Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology,

Xi'an, Shaanxi 710055, China

**Abstract** To solve problems in common algorithms for spectral reflectance reconstruction such as the principal component analysis method producing ill-posed situation after reconstruction, we propose a spectral reflectance reconstruction method based on dimension reduction regularization polynomials. The principal component analysis method is used to conduct dimension reduction for high-dimensional spectral data of training samples. Based on the dimension reduction, the polynomial regression expansion is carried out for channel response numbers of the samples to improve the accuracy of spectral reflectance reconstruction, and Tikhonov restrictions are added to avoid ill-posed situation produced by data instability and random noise due to polynomial expansion. The results show that the precision evaluation effect of the proposed spectral reflectance reconstruction method based on dimension reduction regularization polynomials is better than that of the principal component analysis method and the polynomial regression expansion method. The proposed method can reduce the amount of spectral data, optimize the channel response, and improve the accuracy of reflectance reconstruction.

**Key words** spectroscopy; spectral reflectance reconstruction; dimension reduction regularization; polynomial regression expansion; principal component analysis

**OCIS codes** 300.6550; 240.6645; 110.4234

收稿日期: 2017-10-20; 收到修改稿日期: 2017-11-16

**基金项目:** 国家自然科学基金青年基金(61701388)、住房和城乡建设部科学技术计划(2017-K2-014)、陕西省国际科技合作与交流计划(2017KW-036)、西安市软科学项目(2016043SF/RK06(3))、西安市碑林区科技计划(GX1606)、西安建筑科技大学青年科技基金(QN1628)

**作者简介:** 王可(1981—), 男, 博士, 讲师, 主要从事多光谱图像处理、机器学习方面的研究。E-mail: wangke@xauat.edu.cn

**导师简介:** 王慧琴(1970—), 女, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事数字图像处理、管理信息系统方面的研究。

E-mail: hqwang@xauat.edu.cn

## 1 引言

物体表面的色度信息通常使用一个三维的色度系统来显示。常规的彩色相机和扫描仪等颜色信息获取设备能够直接得到特定光照条件下的物体色度信息,但是同色异谱现象的影响导致相同三刺激值的色度值可对应多个光谱反射率。因此,不能通过物体在一种已知光照条件下的色度值来评估它在其他光照条件下的色度值<sup>[1-2]</sup>。为了能够精确得到不同光照条件下物体颜色的色度信息,可以通过获得物体表面光谱反射率的方法来判断物体的真实颜色<sup>[3-5]</sup>。

获取物体光谱反射率的传统方法是利用分光光度计进行点对点的测量,工作量非常大。生活中大多数物体表面的光谱反射率是平滑的,为了高效地得到物体表面的光谱反射率,可以利用多光谱成像系统采集物体在多个通道时的多光谱颜色信息,然后使用重建算法高效地重现物体表面的连续光谱。这种方法称为基于多光谱成像技术的光谱反射率重建方法<sup>[6-8]</sup>,该方法可以同时从光谱维度和空间维度获取目标物体的信息。然而,传统的色度空间维度仅为光谱空间维度的1/10,当采用光谱反射率表示颜色时,需要处理大量的光谱数据,导致处理效率低,存储空间增加。因此,在满足重建精度的条件下,可以对大量光谱数据进行压缩,以达到光谱数据降维的效果。目前,常用的光谱数据降维方法有主成分分析(PCA)法<sup>[9]</sup>、独立主成分分析法<sup>[10]</sup>以及其他改进的相关算法<sup>[11-12]</sup>。使用PCA法可以将大量的具有一定相关性的光谱数据重新线性组合成一组新的互相无关的光谱数据指标,以该指标代替原来的光谱数据,该方法的本质是间接求解光谱反射率重建方程。在一般情况下,求解重建方程的精确性依赖于通道响应数,可以通过增加滤光片个数的方法来获得更多维的信息,以提高求解光谱反射率重建方程的精度,但在实际应用中,使用的滤光片个数通常是有限的,从而导致该方法的应用受到一定限制。

为了提高光谱反射率的重建精度,本文在不增加滤光片个数的前提下引入多项式回归扩展(PRE)法对通道响应进行扩展,以增加更多的通道响应信息。但是扩展后的多项式存在噪声和不稳定性数据,这会导致光谱重建结果不稳定,这是一种明显的病态问题。对这类病态问题求解的关键是得到一个物理无限趋近于准确且对噪声不敏感的近似解,可以利用一些先验信息对多项式扩展加入适当的限制

条件,以避免产生新的病态问题。针对以上所述,本文提出采用PCA法与PRE法相结合的降维正则化多项式(DRRP)法重建光谱反射率,使用多光谱成像系统采集训练样本的光谱数据,利用PCA法对训练样本的光谱数据进行降维,以减少训练样本的数据量,再利用PRE法来提高样本通道响应的线性度,并针对扩展后训练样本通道响应中的不稳定情况,加入Tikhonov条件来限制其病态问题,以达到提高重建光谱反射率精度的目的。

## 2 光谱反射率的重建原理

一般的多光谱成像系统由CCD数码相机和相关的多个滤光镜片构成。基于多光谱成像技术使用光谱反射率重建算法重建物体的光谱反射率时,首先要得到与多光谱相机配套的*i*个通道滤光片的数字响应 $g_i$ 。输出的数字响应模型为

$$g_i = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} l(\lambda)r(\lambda)f_i(\lambda)o(\lambda)s(\lambda)d\lambda + b_i + n_i, \quad (1)$$

式中: $\lambda$ 为波长; $\lambda_{\min}$ 为最小波长; $\lambda_{\max}$ 为最大波长; $r(\lambda)$ 为物体反射率; $l(\lambda)$ 、 $f_i(\lambda)$ 、 $o(\lambda)$ 、 $s(\lambda)$ 均为未知量,它们分别为照明光源的光谱功率分布函数、多光谱成像系统第*i*个通道滤光片的透射率、镜头的光谱传递函数、多光谱相机的光谱敏感函数,这4个未知量可合并为单一光谱函数 $q_i(\lambda) = l(\lambda)f_i(\lambda) \cdot o(\lambda)s(\lambda)$ ;  $b_i$ 和 $n_i$ 分别为第*i*个通道滤光片的暗电流响应和系统产生的噪声<sup>[13]</sup>。对可见光范围内380~780 nm的光谱反射率进行*N*点间隔采样后,得到一个*N*维列向量 $\mathbf{R}$ ,用 $\mathbf{g}$ 表示*C*维相机通道响应列向量。使用向量、矩阵形式将(1)式改写为

$$\mathbf{g} = \mathbf{QR} + \mathbf{b} + \mathbf{n}, \quad (2)$$

式中 $\mathbf{Q}$ 为*C*×*N*光谱响应矩阵, $\mathbf{b}$ 为暗电流响应, $\mathbf{n}$ 为高斯白噪声。令 $\mathbf{G} = \mathbf{g} - \mathbf{b}$ ,则(2)式可改写为 $\mathbf{G} = \mathbf{QR} + \mathbf{n}$ 。通过标准白板校正去除暗电流<sup>[14]</sup>,去除暗电流后的校正公式为

$$\mathbf{G} = \frac{\mathbf{G}_{\text{data}} - \mathbf{G}_{\text{dark}}}{\mathbf{G}_{\text{white}} - \mathbf{G}_{\text{dark}}}, \quad (3)$$

式中: $\mathbf{G}_{\text{white}}$ 为标准白板的响应; $\mathbf{G}_{\text{data}}$ 为系统的实际响应; $\mathbf{G}_{\text{dark}}$ 为使用镜头盖遮挡相机镜头后的系统响应。如果去除系统暗电流后不考虑噪声 $\mathbf{n}$ 的影响,则(2)式的基本转换形式为

$$\mathbf{g} = \mathbf{QR}. \quad (4)$$

### 2.1 PCA法

在实际计算过程中,可以用*k* ( $k \in \mathbf{Z}_+$ )个两两

正交的单位基向量  $\mathbf{B}_i (i=1,2,\dots,k)$  的线性组合将包含训练样本和测试样本的光谱反射率数据集  $\mathbf{R}^{[13]}$  近似地表示为

$$\mathbf{R} = \mathbf{B}\mathbf{a} = \sum_{i=1}^k \mathbf{B}_i \mathbf{a}_i, \quad (5)$$

式中:  $\mathbf{B} = [\mathbf{B}_1 \ \mathbf{B}_2 \ \dots \ \mathbf{B}_k]$  为特征向量矩阵;  $\mathbf{a} = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \dots \ \mathbf{a}_k]^T$  为转换矩阵。基向量可以使用 PCA 法计算得到, 假定  $N \times M$  矩阵  $\mathbf{R} = [\mathbf{R}_1 \ \mathbf{R}_2 \ \dots \ \mathbf{R}_M]^T$  由  $M$  个不相等的光谱反射率组成, 对矩阵  $\mathbf{R}$  进行奇异值分解(SVD), 可得:

$$\mathbf{R} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T, \quad (6)$$

式中:  $\mathbf{U}$  为由  $\mathbf{R}\mathbf{R}^T$  的特征向量组成的  $N \times N$  单位正交矩阵;  $\mathbf{V}$  为由  $\mathbf{R}^T\mathbf{R}$  的特征向量组成的  $M \times M$  单位矩阵;  $\mathbf{S}$  为由  $r = \text{rank}(\mathbf{R})$  个从大到小排列的奇异值组成的对角矩阵, 即

$$\mathbf{S} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r). \quad (7)$$

式中  $\sigma$  为  $\mathbf{R}$  的奇异值。

原光谱反射率数据的线性组合可以由前  $k$  个主成分来表示。主成分的个数由主成分贡献率决定, 前  $k$  个特征向量的主成分累积贡献率为

$$\rho_k = \sum_{i=1}^k \sigma_i / \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (8)$$

在实际计算中, 当主成分个数满足光谱反射率的前  $k$  个累积贡献率  $\rho_k > 99.95\%$  时, 将(5)式代入(4)式中得到:

$$\mathbf{g}_0 = \mathbf{Q}\mathbf{B}_0 \mathbf{a}_0, \quad (9)$$

式中:  $\mathbf{g}_0$  为训练样本的通道响应;  $\mathbf{B}_0$  和  $\mathbf{a}_0$  为训练样本的光谱反射率集  $\mathbf{R}_0$  的特征向量矩阵和转换矩阵;  $\mathbf{Q}\mathbf{B}_0$  为前  $k$  个特征向量主成分的响应刺激值。具体的主成分个数  $k$  可由实验数据计算得到。通过(9)式得到的转换矩阵为

$$\mathbf{a}_0 = [(\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)^T (\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)]^{-1} (\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)^T \mathbf{g}_0. \quad (10)$$

实验中可以根据训练样本求出  $\mathbf{Q}\mathbf{B}_0$  的值, 即

$$[(\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)^T (\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)]^{-1} (\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)^T = \mathbf{a}_0 \mathbf{g}_0^T (\mathbf{g}_0 \mathbf{g}_0^T)^{-1}. \quad (11)$$

$\mathbf{Q}\mathbf{B}_0$  的值随着系统响应值的改变而改变。如果使用新的测试样本, 则转换矩阵为

$$\mathbf{a} = [(\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)^T (\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)]^{-1} (\mathbf{Q}\mathbf{B}_0)^T \mathbf{g}_1 = \mathbf{a}_0 \mathbf{g}_0^T (\mathbf{g}_0 \mathbf{g}_0^T)^{-1} \mathbf{g}_1. \quad (12)$$

式中:  $\mathbf{g}_1$  为测试样本响应。

综上, 使用 PCA 法重建的光谱反射率为

$$\hat{\mathbf{R}} = \mathbf{B}_0 \mathbf{a}_0 \mathbf{g}_0^T (\mathbf{g}_0 \mathbf{g}_0^T)^{-1} \mathbf{g}_1. \quad (13)$$

## 2.2 PRE 法

每个颜色样本对应的通道响应包含了  $C$  个元

素, 即  $\mathbf{g}_i = [\mathbf{g}_1 \ \mathbf{g}_2 \ \dots \ \mathbf{g}_C]^T$ 。通常, 通道越多, 成像系统的线性度越好, 但多光谱成像系统的滤片不可能无限地增加。在不增加滤光片个数的前提下, 为了提高系统的线性度, 可以利用 PRE 法<sup>[14]</sup>对原有的通道响应进行高阶多项式相乘扩展, 即  $\mathbf{g}_i$  可以扩展为

$$\tilde{\mathbf{g}}_i = [1 \ \mathbf{g}_1 \ \dots \ \mathbf{g}_C \ \mathbf{g}_1^2 \ \mathbf{g}_1 \mathbf{g}_2 \ \dots]^T. \quad (14)$$

令  $\tilde{\mathbf{g}}$  为  $m \times K$  ( $m$  为  $\tilde{\mathbf{g}}_i$  中元素的个数) 矩阵, 则得到新的转换矩阵  $\mathbf{Q}^+$  为

$$\mathbf{Q}^+ = \mathbf{R} \tilde{\mathbf{g}}^T (\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T)^{-1}. \quad (15)$$

使用 PRE 法进行扩展的目的是使重建的光谱反射率与实际值之间的差别最小, 即

$$E \|\mathbf{R} - \mathbf{Q}^+ \mathbf{g}\|^2 \rightarrow \text{Minimum}, \quad (16)$$

式中:  $E$  为方差;  $\|\cdot\|$  为  $L_2$  范数。

在实际应用中, 重建的光谱反射率精度会随着多项式项数的增加而提高。当多项式项数相同时, 引入不同的扩展项, 重建精度会有所不同, 因此具体扩展的项数需要根据实验确定。

## 2.3 DRRP 法

当使用 PRE 法扩充通道数较大时, 成像系统中的随机噪声会影响样本的通道响应, 产生过拟合的现象, 从而影响数据的稳定性和重构精度, 这是一种典型的病态问题。在该病态问题中, 需要适当地添加限制条件来加入先验信息, 得到一个无限趋近于准确并且对噪声不敏感的近似解来减小噪声的影响, 从而能够在响应数据存在噪声的情况下得到尽可能精确的光谱反射率重建值。

为了解决该病态不适定问题, 可以使用 Tikhonov 正则化方法<sup>[15-16]</sup>在(16)式中的目标函数  $\|\mathbf{R} - \mathbf{Q}^+ \mathbf{g}\|^2$  中加入限制项, 从优化理论的角度使加入限制项后目标函数的极小化问题适定。添加限制条件后目标函数转变为

$$E (\|\mathbf{R} - \mathbf{Q}^+ \tilde{\mathbf{g}}\|^2 + \lambda_1 \|\mathbf{Q}^+\|^2) \rightarrow \text{Minimum}, \quad (17)$$

式中:  $\|\mathbf{R} - \mathbf{Q}^+ \tilde{\mathbf{g}}\|^2$  项用来保证光谱数据的真实性;  $\|\mathbf{Q}^+\|^2$  项用来控制解的平滑性;  $\lambda_1$  为正则化参数, 用来调节数据真实性与解的平滑性之间的权重关系。

由(4)式可知, 光谱反射率重建的精度取决于转换矩阵  $\mathbf{Q}^+$ ,  $\mathbf{Q}^+$  是由训练样本的反射率矩阵  $\mathbf{R}$  和响应矩阵  $\mathbf{g}$  得到的。因此, 从光谱数据和通道响应两方面考虑, 采用降维和正则化的方法同时求解病态方程。首先利用 PCA 法提取光谱数据的光谱特征向量  $\mathbf{B}$  作为训练样本的输入变量, 然后利用正则化

方法控制目标函数来调节扩展后的通道响应 $\tilde{\mathbf{g}}$ 作为训练样本的输出变量。添加 Tikhonov 限制条件和 PCA 降维的转换矩阵为

$$\mathbf{Q}^+ = \mathbf{B}\mathbf{a}_0 \tilde{\mathbf{g}}^T (\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T + \lambda_1 \mathbf{I})^{-1}, \quad (18)$$

式中 $\mathbf{I}$ 为单位矩阵。将(18)式进行奇异值分解,即

$$\mathbf{Q}^+ (\lambda_1) = \mathbf{B}\mathbf{a}_0 \sum_{i=1}^k \frac{\mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^T}{\sigma_i} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda_1}, \quad (19)$$

式中: $\mathbf{v}_i$ 为右奇异向量; $\mathbf{u}_i$ 为左奇异向量。

一般可以通过矩阵的条件数<sup>[17]</sup>来衡量系统的稳定性,即

$$\text{cond}(\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T) =$$

$$\|(\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T)\| \|(\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T)^{-1}\| = \left| \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}} \right|, \quad (20)$$

式中: $\sigma_{\max}$ 和 $\sigma_{\min}$ 为矩阵 $\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T$ 的最大奇异值和最小奇异值。使用 Tikhonov 方法加入限制条件后,矩阵 $\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T$ 的条件数也相应变化。由于矩阵 $\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T$ 是一个半正定对称矩阵,因此将矩阵 $\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T$ 改为 $\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T + \lambda_1 \mathbf{I}$ ,使得矩阵 $\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T + \lambda_1 \mathbf{I}$ 的特征值可以落在 $[\lambda_1, \lambda_1 + \|\tilde{\mathbf{g}}\|^2]$ 内,以此来限制条件系数,确保条件数能够获得最小值,即其条件数满足

$$k(\tilde{\mathbf{g}} \tilde{\mathbf{g}}^T + \lambda_1 \mathbf{I}) \leq \frac{\lambda_1 + \|\tilde{\mathbf{g}}\|^2}{\lambda_1}. \quad (21)$$

(21)式表明,条件数可以通过正则化参数 $\lambda_1$ 予以控制,对于条件数较大的病态矩阵,就可以通过L曲线方法<sup>[18]</sup>选取最佳 $\lambda_1$ 来减少其病态问题。由于 $\|\mathbf{B}\mathbf{a}_0 - \mathbf{Q}^+ \tilde{\mathbf{g}}\|$ 与 $\|\mathbf{Q}^+\|$ 均为正则化参数 $\lambda_1$ 的函数,因此以 $\lg \|\mathbf{B}\mathbf{a}_0 - \mathbf{Q}^+ \tilde{\mathbf{g}}\|$ 和 $\lg \|\mathbf{Q}^+\|$ 分别为L曲线的横坐标和纵坐标,当 $\lambda_1$ 使得 $\lg \|\mathbf{B}\mathbf{a}_0 - \mathbf{Q}^+ \tilde{\mathbf{g}}\|$ 和 $\lg \|\mathbf{Q}^+\|$ 同时足够小时,对应L曲线角点,且角点为L曲线曲率的最大点,通常由该最大点确定最佳的 $\lambda_1$ 。若设 $\rho(\lambda_1) = \|\mathbf{B}\mathbf{a}_0 - \mathbf{Q}^+ \tilde{\mathbf{g}}\|$ , $\eta(\lambda_1) = \|\mathbf{Q}^+\|$ ,则L曲线的曲率为

$$K(\lambda_1) = \frac{|\rho' \eta'' - \rho'' \eta'|}{[(\rho')^2 + (\eta')^2]^{3/2}}. \quad (22)$$

当 $d[K(\lambda_1)]/d\lambda_1 = 0$ 时,曲率 $K(\lambda_1)$ 取得最大值,而此值为最佳的正规化参数 $\lambda_1$ 。

### 3 实验及结果分析

#### 3.1 数据准备

采用多光谱成像系统和德国劳尔(RAL)色卡进行性能考察。多光谱成像技术有干涉型、色散型和滤光片型<sup>[19]</sup>。本研究使用的多光谱成像系统包括美国海洋薄膜公司的 SpectroCam VIS 型 CCD 相机、11个连续波峰中心值的窄带滤光片、国际照明

委员会(CIE)标准 D65 照明光源。多光谱相机如图1所示,滤光片的带宽为20 nm,透射率曲线如图2所示。RAL色卡包括213种颜色。通过多光谱成像系统采集RAL色卡样本集在11个波段通道时的多光谱图像数据,同时采用美国海洋薄膜公司的 SpectroSuite 型分光光度计测量色卡的光谱反射率曲线,测量可见光范围内380~780 nm的光谱,采样间隔为10 nm。



图1 多光谱相机

Fig. 1 Multispectral camera

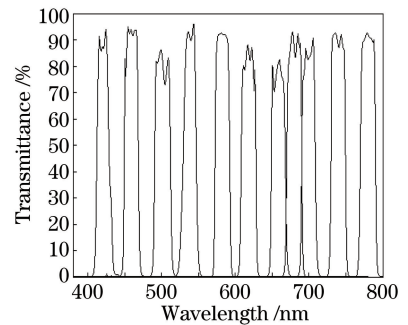


图2 滤光片的透射率曲线

Fig. 2 Transmissivity curve of filter

分别采用PCA法、PRE法和所提DRRP法进行光谱反射率重建。步骤如下:1)利用多光谱采集系统采集RAL色卡所有颜色样本的多通道响应数据集 $\mathbf{g}$ ;2)采用分光光度计采集RAL色卡所有颜色样本的光谱反射率数据集 $\mathbf{R}$ ;3)将213个RAL色卡样本数据分为训练样本( $\mathbf{g}_0, \mathbf{R}_0$ )和测试样本( $\mathbf{g}_1, \mathbf{R}_1$ )两部分;4)基于训练样本数据,使用PCA降维公式(5)求得 $\mathbf{B}\mathbf{a}_0$ ;5)基于训练样本数据,使用PRE公式(14)对训练样本集合( $\mathbf{g}_0, \mathbf{R}_0$ )进行通道响应的多项式扩展,再使用正则化公式(18)求得加入正则化限制后的转化矩阵 $\mathbf{Q}^+$ ;6)基于测试样本数据的多光谱通道响应数据 $\mathbf{g}_1$ ,使用PCA重建公式(13)求得测试样本的重建光谱反射率 $\hat{\mathbf{R}}_1$ ;7)评价重建的测试样本的光谱反射率 $\hat{\mathbf{R}}_1$ 与实际测量值 $\mathbf{R}_1$ 的精度差。



### 3.2 评价标准

对于算法的光谱反射率重建效果,以均方根误差 RMSE、适应度系数 GFC、光谱匹配偏度指数 ISSD<sup>[20]</sup>、色差  $\Delta E$  这 4 个参数作为光谱反射率重建精度的评价标准。

1) 均方根误差 RMSE 的计算公式为

$$x_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{\sum_{\lambda} [R(\lambda) - \hat{R}(\lambda)]^2}{M}}, \quad (23)$$

式中:  $R(\lambda)$  为标准光谱反射率;  $\hat{R}(\lambda)$  为重建光谱的反射率;  $M$  为测量次数。

RMSE 评价实际光谱与重建光谱之间的误差水平,其值越小,则重建光谱越接近实际光谱。

2) 适应度系数 GFC 为

$$x_{\text{GFC}} = \frac{\sum_{\lambda} R(\lambda)R(\hat{\lambda})}{\left[\sum_{\lambda} R(\lambda)^2\right]^{1/2} \left[\sum_{\lambda} R(\hat{\lambda})^2\right]^{1/2}}。 \quad (24)$$

采用 GFC 测量重建光谱与实际光谱之间的余弦夹角,  $x_{\text{GFC}} = 0 \sim 100\%$ 。当  $x_{\text{GFC}} \geq 99.5\%$  时,重建效果可以接受。当  $x_{\text{GFC}} \geq 99.9\%$  时,重建效果非常好。

3) 光谱匹配偏度指数 ISSD 为

$$x_{\text{ISSD}} = \left| \frac{\sum_{\lambda} [R(\lambda) - R(\hat{\lambda})]}{\sum_{\lambda} R(\lambda)} \right|。 \quad (25)$$

当 2 个光谱向量完全相同时,  $x_{\text{ISSD}} = 0$ 。  $x_{\text{ISSD}}$  越小, 2 个光谱匹配程度越高;  $x_{\text{ISSD}}$  越大, 2 个光谱的匹配程度越低。

4) 色差  $\Delta E$ 。 CIELAB 颜色空间内 2 种颜色之间的欧式距离可以表示颜色的差异。如果 2 种颜色在 CIELAB 均匀颜色空间中的坐标分别为  $(L_1^*, a_1^*, b_1^*)$  和  $(L_2^*, a_2^*, b_2^*)$ , 则两者的 CIELAB 色差  $\Delta E$  为

$$\Delta E = \sqrt{(L_1^* - L_2^*)^2 + (a_1^* - a_2^*)^2 + (b_1^* - b_2^*)^2} = \sqrt{(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2}, \quad (26)$$

式中:  $\Delta L^*$  为明度差;  $\Delta a^*$  为红绿色品差;  $\Delta b^*$  为黄蓝色品差。

### 3.3 参数选取

#### 3.3.1 训练样本个数

为了保证重建算法的普适性,不同的重建算法需要选取相同个数的训练样本<sup>[21-22]</sup>。使用

Hardeberg 法<sup>[23]</sup>、Mohammadi 法<sup>[24]</sup> 和 Fvector 法<sup>[25]</sup> 得到了训练样本个数与重建光谱反射率的均方根误差平均值之间的关系,如图 3 所示。由图 3 可知:当训练样本个数为 50 时,重建光谱反射率的均方根误差平均值最小;随着训练样本个数增加,光谱反射率的均方根误差平均值稍有增大。总体来看,上述 3 种方法重建光谱反射率的均方根误差平均值均能在选取训练样本个数为 50 时达到最小。因此,训练样本的个数确定为 50。

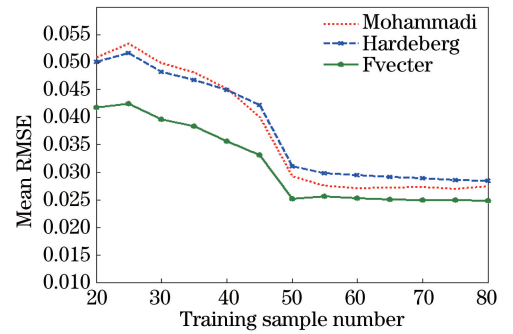


图 3 训练样本个数与重建光谱反射率的 RMSE 平均值之间的关系

Fig. 3 Relationship between training sample number and mean RMSE of reconstructed spectral reflectance

#### 3.3.2 主成分个数

根据(11)式计算重建的光谱反射率,同时根据(8)式计算前  $k$  个特征向量的累积贡献率 CVC。累积贡献率 CVC、色差  $\Delta E$  和均方根误差平均值如表 1 所示。人眼能够感知的最小色差  $\Delta E$  为 0.5<sup>[26-27]</sup>。由表 1 可知,当主成分个数  $k = 6$  时, CVC 为 99.95%,  $\Delta E$  为 0.430, RMSE 为 0.058,可以满足重建光谱的精度要求。因此,主成分个数  $k$  取 6。

表 1 不同主成分个数时的累积贡献率、色差和均方根误差

Table 1 CVC, color difference, and RMSE with different principal component numbers

$k$	CVC / %	Mean $\Delta E$	Mean RMSE
5	98.87	0.717	0.082
6	99.95	0.430	0.058
7	99.89	0.424	0.042
8	99.99	0.263	0.033

#### 3.3.3 多项式项数

根据(12)式建立不同扩展项组合多项式重建光谱反射率信息,比较重建后的均方根误差以及色差。随着多项式项数  $n$  增加,PRE 法运算量增大,因此需要通过实验对比选取合适的多项式项数。由表 2 可知:随着多项式扩展项数  $n$  增加,重建光谱的精度逐渐提高;在多项式扩展项数  $n$  达到 14 时,色

差和均方根误差均已达到相对理想的状态,再增加扩展项数  $n$  不仅会增加运算量,而且对重建精度的提高不明显。因此,多项式扩展的项数  $n$  选为 14。

表 2 不同多项式项数时的色差和均方根误差

Table 2 Color difference and RMSE with different polynomial term numbers

$n$	Mean $\Delta E$	Mean RMSE
6	0.482	0.032
9	0.383	0.023
12	0.361	0.020
14	0.345	0.020
18	0.341	0.019

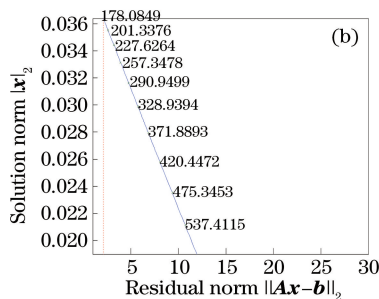
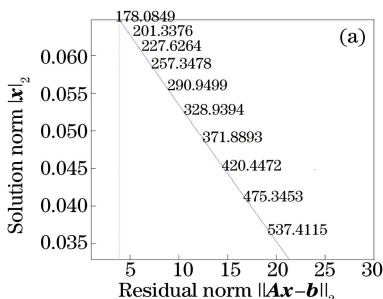


图 4 利用 L 曲线方法得到的正则化参数。(a) 训练结果 1; (b) 训练结果 2

Fig. 4 Regularization parameters obtained by L-curve method. (a) Training result 1; (b) training result 2

### 3.4 结果分析与比较

在确定训练样本个数的前提下,利用重建算法重建色卡的光谱反射率。表 3 所示为 3 种重建方法的光谱反射率重建精度。由表 3 可知,DRRP 法的适应度系数均值达到了 99.51%,表明重建的光谱反射率曲线与实际光谱反射率曲线的余弦夹角非常小,重建效果比较满意。光谱匹配偏度指数的最小

表 3 PCA、PRE 和 DRRP 方法的光谱反射率重建精度

Table 3 Spectral reflectance reconstruction accuracies of PCA, PRE and DRRP methods

Method	RMSE			GFC /%			ISSD			$\Delta E$		
	Mean	Minimum	Maximum	Mean	Minimum	Maximum	Mean	Minimum	Maximum	Mean	Minimum	Maximum
PCA	0.058	0.012	0.106	98.20	93.53	99.63	0.146	0.064	0.637	0.430	0.172	0.931
PRE	0.020	0.011	0.042	98.17	92.53	99.74	0.160	0.021	0.556	0.361	0.064	0.766
DRRP	0.018	0.007	0.032	99.51	98.81	99.96	0.106	0.011	0.359	0.283	0.060	0.412

从 RAL 色卡中任意抽取 20 个测试样本,分别采用 PCA、PRE 和 DRRP 这 3 种方法重建光谱反射率,图 5 所示为 3 种重建方法均方根误差的对比。由图 5 可知,3 种重建方法重建后的均方根误差各不相同,但是总体来看,DRRP 法对每个样本的重建均方根误差小于 PCA 法和 PRE 法,表明 DRRP 法的适应性较好。

基于光谱匹配偏度指数选取的部分样本重建光谱反射率曲线,结果如图 6 所示。图 6(a)中样本的光谱匹配偏度指数为 0.022,样本重建光谱曲线与实

### 3.3.4 正则化参数

利用 213 个颜色色卡样本数据,通过 L 曲线方法训练可得到最优的正则化参数  $\lambda_1$ 。图 4 所示为任意选取的 2 个训练结果,其中  $\mathbf{A}$  为扩展后的通道响应  $\tilde{\mathbf{g}}, \mathbf{x}$  为转换矩阵  $\mathbf{Q}^+$ 。图中实线为 L 曲线,实线上的数据为正则化参数,指向水平和竖直轴的虚线表示最优正则化参数对应的保真项和正则化项的值。由 213 个样本数据训练结果发现,尽管 L 曲线最大曲率处的保真项和正则化项的值各不相同,但几乎都在正则化参数  $\lambda_1 = 178.085$  时达到最优。因此,最优正则化参数  $\lambda_1 = 178.085$ 。

值达到了 0.011,说明 2 个光谱向量的吻合程度比较高,光谱匹配偏度指数也小于其他 2 种方法,进一步说明利用光谱匹配偏度指数评价 2 个光谱向量之间的差异程度是可靠的。DRRP 法得到的重建样本与实际样本的 CIELAB 色差的平均值、最大值和最小值均小于其他 2 种方法。因此,DRRP 法重建光谱的色度精度较好。

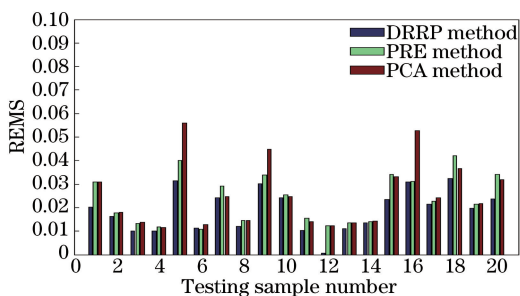


图 5 3 种重建方法对 20 个测试样本的均方根误差  
Fig. 5 RMSE of 20 testing samples with three reconstruction methods

际光谱曲线的重合度较高;图 6(b)中样本的光谱匹配偏度指数为 0.121,样本重建光谱曲线与实际光谱曲线的重合度一般;图 6(c)中样本的光谱匹配偏度

指数为 0.351,样本重建光谱曲线与实际光谱曲线重合度较差。由图 6 可知,DRRP 法重建的光谱曲线与实际光谱曲线的重合度高于其他两种方法。

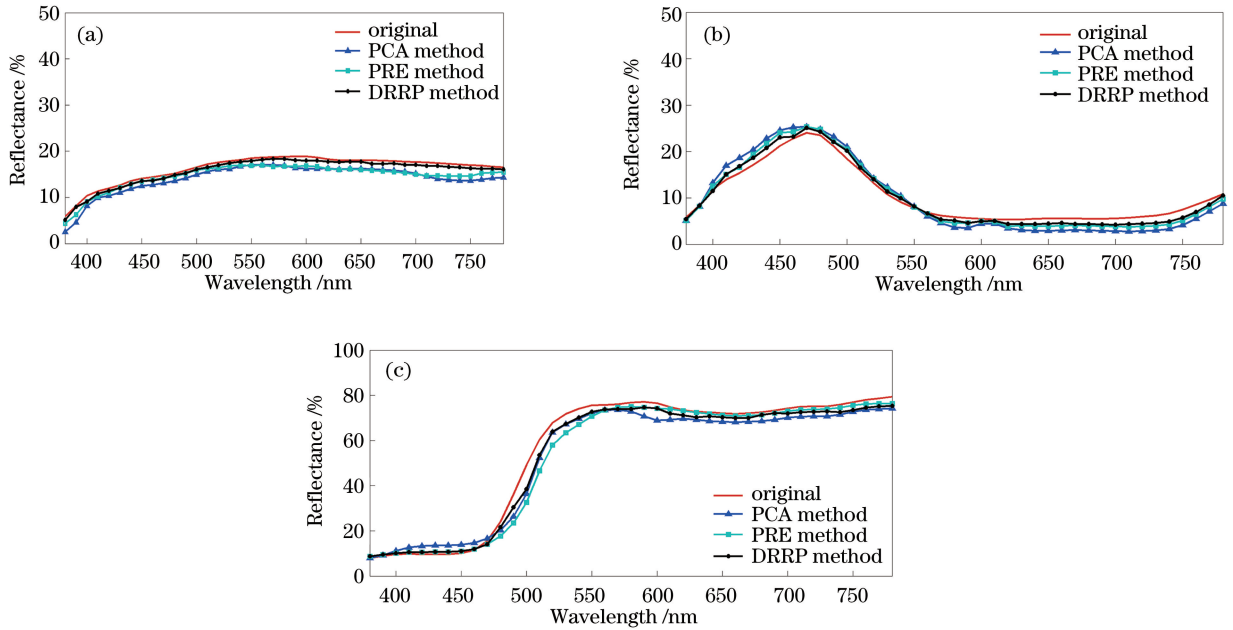


图 6 3 种重建方法的光谱反射率曲线。(a)  $x_{ISSD} = 0.022$ ; (b)  $x_{ISSD} = 0.121$ ; (c)  $x_{ISSD} = 0.351$

Fig. 6 Spectral reflectance curves with three reconstruction methods. (a)  $x_{ISSD} = 0.022$ ; (b)  $x_{ISSD} = 0.121$ ; (c)  $x_{ISSD} = 0.351$

### 3.5 应用验证

为了验证所提 DRRP 法的应用效果,针对一幅真实壁画选取比较典型的 6 个颜色参考区域进行研究。壁画色块选取区域如图 7(a)所示,其中编号 1~6 分别为 6 个参考色块。为了分析 DRRP 法进行光谱反射率重建的精度,通过多光谱系统得到 11 个通道的多光谱图像,结果如图 7(b)所示。

以壁画中 6 个参考色块为测试样本,使用 PCA、PRE 和 DRRP 方法重建光谱反射率,重建精度如表 4 所示。由表 4 可知,与 PCA 法和 PRE 法相比,DRRP 法重建的 6 个色块光谱精度的均方根误差、适应度系数、光谱匹配偏度指数都明显减小。可见,采用 DRRP 法进行光谱反射率重建能够得到

较好的光谱精度。

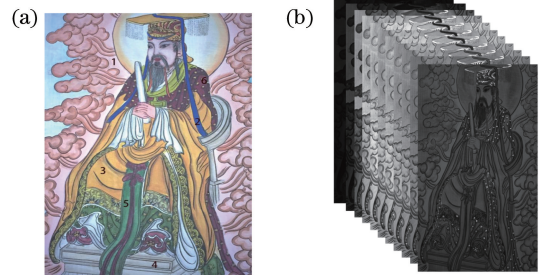


图 7 壁画参考色块及多光谱图像。

(a) 壁画参考色块标记; (b) 11 个通道的多光谱图像

Fig. 7 Mural referential color patches and multispectral images. (a) Markings of mural referential color patches;

(b) multispectral images with 11 channels

表 4 壁画中 6 个参考色块的光谱反射率重建精度

Table 4 Spectral reflectance reconstruction accuracies of six referential color patches of mural

Number of referential color patches	DRRP method			PRE method			PCA method		
	RMSE	GFC /%	ISSD	RMSE	GFC /%	ISSD	RMSE	GFC /%	ISSD
1	0.0123	99.63	0.0931	0.0145	98.43	0.1429	0.0562	97.78	0.1325
2	0.0112	99.21	0.1568	0.0178	98.15	0.2047	0.0593	97.01	0.1930
3	0.0317	99.18	0.1613	0.0347	98.07	0.2163	0.0712	96.81	0.2013
4	0.0194	99.42	0.1236	0.0239	98.21	0.1745	0.0674	97.23	0.1701
5	0.0376	99.09	0.1702	0.0462	98.82	0.2213	0.0820	97.86	0.2113
6	0.0115	99.78	0.1072	0.0177	98.65	0.1586	0.0489	98.01	0.1489
Mean	0.0206	99.39	0.1353	0.0258	98.39	0.1864	0.0675	97.45	0.1761

为了准确地展现 PCA、PRE 和 DRRP 方法重建参考色块的色度精度,计算壁画参考色块色度中的  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$  分量值,结果如图 8 所示,其中  $L^*$  为亮度, $a^*$  为红绿, $b^*$  为黄蓝。由图 8 可知,DRRP 法重建的色块色度值更接近色块的原始色度值,能够得到比 PCA 法和 PRE 法更好的色度精度。

图 9 所示为利用 DRRP 法对 6 个壁画参考色块进行光谱反射率重建的光谱曲线。由图 9 可知,DRRP 法能够有效地重建壁画中 6 个参考色块的光谱反射率,重建反射率曲线与使用分光光度计测量的实际反射率曲线的重合度较高。

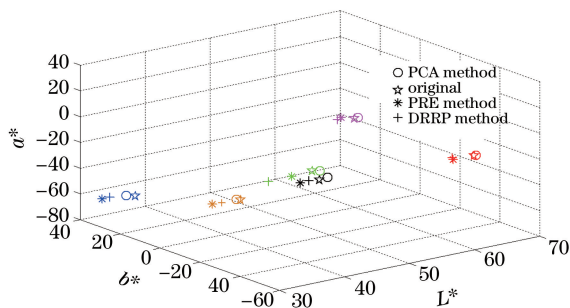


图 8 不同重建方法得到的壁画参考色块的 CIELAB 色度分布空间

Fig. 8 CIELAB chromaticity distribution space of mural referential color patches obtained by different reconstruction methods

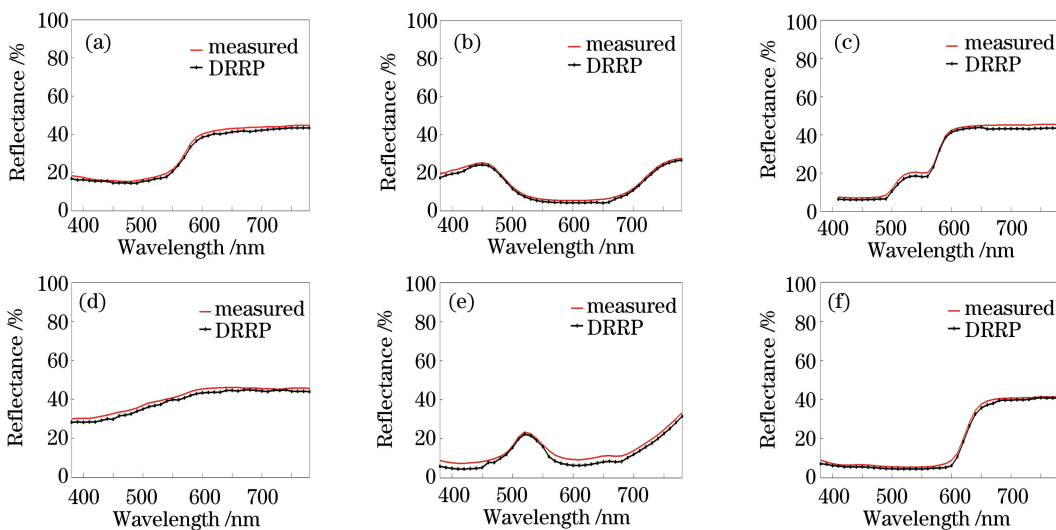


图 9 壁画中 6 个参考色块的重建光谱曲线与实际光谱曲线。(a)色块 1;(b)色块 2;(c)色块 3;(d)色块 4;(e)色块 5;(f)色块 6

Fig. 9 Reconstructed and measured spectral reflectance curves of six referential color patches of mural.

(a) Color patch 1; (b) color patch 2; (c) color patch 3; (d) color patch 4; (e) color patch 5; (f) color patch 6

## 4 结 论

提出了一种基于主成分分析和正则化多项式相结合的光谱反射率重建 DRRP 法,并评价了采用该方法进行光谱反射率重建的效果。实验结果表明,DRRP 法同时考虑了光谱数据和通道响应对重建精度的影响,对光谱数据进行主成分分析降维和对通道响应进行多项式扩展,并加入 Tikhonov 条件来避免数据不稳定和随机噪声带来的病态问题,降低了多光谱数据处理过程中的数据量,达到了提高算法重建精度的目的。在应用验证实验中,DRRP 法重建效果优于 PCA 法和 PRE 方法,具有较好的实际应用意义,能够在一定程度上满足工业领域中对颜色质量评估、颜色高精度复原等的需求。

## 参 考 文 献

- [1] Ren P Y, Liao N F, Chai B H, *et al.* Spectral reflectance recovery based on multispectral imaging [J]. *Optical Technique*, 2005, 31(3): 427-433.  
任鹏远, 廖宁放, 柴冰华, 等. 基于多光谱成像的光谱反射率重建[J]. *光学技术*, 2005, 31(3): 427-433.
- [2] He S H, Liu Z, Chen Q. Research of spectral dimension reduction method based on matrix  $\bar{\mathbf{R}}$  theory [J]. *Acta Optica Sinica*, 2014, 34(2): 0233001.  
何颂华, 刘真, 陈桥. 基于矩阵  $\bar{\mathbf{R}}$  理论的光谱降维方法研究[J]. *光学学报*, 2014, 34(2): 0233001.
- [3] Zou J P, Yang J, Li H N, *et al.* Study of spectral reflectance reconstruction based on matrix  $\mathbf{R}$  method



- [ ] . Acta Optica Sinica, 2014, 34(s2): s233001.  
邹纪平, 杨葭, 李宏宁, 等. 基于  $R$  矩阵法光谱反射率重建研究[J]. 光学学报, 2014, 34(s2): s233001.
- [4] He S H, Gao Y, Chen Q, *et al.* The set up of primary pigments liner mixing space in spectral color reproduction[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(3): 0333001.  
何颂华, 高媛, 陈桥, 等. 光谱颜色复制中对基色色料线性混合空间的建立[J]. 光学学报, 2016, 36(3): 0333001.
- [5] Luo M, Bu Y, Xu J H, *et al.* Optical element surface defect measurement based on multispectral technique[J]. Chinese Journal of Lasers, 2017, 44(1): 0104001.  
罗茂, 步阳, 徐静浩, 等. 基于多光谱技术的光学元件表面疵病检测[J]. 中国激光, 2017, 44(1): 0104001.
- [6] Yang W P, Xu N, Duan J J, *et al.* Application and development of multispectral imaging technology in color reproduction[J]. Journal of Yunnan University of Nationalities (Natural Science Edition), 2009, 18(3): 191-197.  
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.
- [7] Liang H D. Advances in multispectral and hyperspectral imaging for archaeology and art conservation[J]. Applied Physics A, 2012, 106(2): 309-323.
- [8] Shen Y, Zhang L, Bai C X, *et al.* Frame multispectral imaging based on light field imaging[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(5): 053007.  
沈燕, 张磊, 柏财勋, 等. 基于光场成像的画幅式多光谱成像方法[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(5): 053007.
- [9] Li J C, Liu Z, Chen G X. Colorant selection based on gamut analysis and cluster analysis[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(6): 0633001.  
李金城, 刘真, 陈广学. 一种基于色域分析与聚类分析的基色筛选[J]. 光学学报, 2012, 32(6): 0633001.
- [10] Wang Y F, Tang Z N. Dimensionality reduction method based on combination of PCA and ICA[J]. Optical Technique, 2014, 40(2): 180-183.  
王一帆, 唐正宁. 基于 PCA 和 ICA 的多光谱数据降维方法[J]. 光学技术, 2014, 40(2): 180-183.
- [11] Tsutsumi S, Rosen R M, Berns S R. Spectral color management using interim connection space based on spectral decomposition [J]. Color Research and Application, 2008, 33(4): 282-299.
- [12] Wang Y, Wang Z M, Wang Y F. Nonlinear dimensionality reduction of multi-spectral images for color reproduction [J]. Optics and Precision Engineering, 2011, 19(5): 1171-1178.  
王莹, 王忠民, 王义峰. 面向色彩再现的多光谱图像非线性降维方法[J]. 光学精密工程, 2011, 19(5): 1171-1178.
- [13] Long Y Q, Wang H Q, Wang K, *et al.* Study on spectral reconstruction method based on optimized selected samples [J]. Imaging Science and Photochemistry, 2017, 35(1): 88-96.  
龙艳群, 王慧琴, 王可, 等. 基于样本优化选取的光谱重建方法研究[J]. 影像科学与光化学, 2017, 35(1): 88-96.
- [14] Martinkauppi J B, Shatilova Y, Kekäläinen J, *et al.* Polynomial regression spectra reconstruction of arctic charr' s RGB [M]// Trémeau A, Schettini R, Tominaga S. Computational color imaging. Berlin: Springer-Verlag, 2009: 198-206.
- [15] Neumaier A. Solving ill-conditioned and singular linear systems: a tutorial on regularization[J]. SIAM Review, 1998, 40(3): 636-666.
- [16] Xie D H, Li R, Wan X X, *et al.* Iterated Tikhonov regularization for spectral recovery from tristimulus [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(1): 201-205.  
谢德红, 李蕊, 万晓霞, 等. 基于迭代 Tikhonov 正规化的三刺激值重建光谱方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(1): 201-205.
- [17] Chu D L, Lin L J, Tan R C E, *et al.* Condition numbers and perturbation analysis for the Tikhonov regularization of discrete ill-posed problems [J]. Numerical Linear Algebra with Application, 2011, 18(1): 87-103.
- [18] Hansen P C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve[J]. SIAM Review, 1992, 34(4): 561-580.
- [19] Wang Y, Gong Y. Design of multispectral imaging spectrometer using linear variable filter[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(1): 013003.  
王颖, 巩岩. 线性渐变滤光片型多光谱成像光谱仪设计[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(1): 013003.
- [20] Li S X, Liao N F, Sun Y N. A new parameter for evaluating spectral estimation precision of multispectral camera[J]. Spectroscopy and Spectral

Analysis, 2007, 27(8): 1461-1464.

李遂贤, 廖宁放, 孙雨南. 一个评价光谱估计精度的新参数[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(8): 1461-1464.

[21] Cheung V, Westland S. Methods for optimal color selection [J]. Journal of Imaging Science and Technology, 2006, 50(5): 481-488.

[22] Jia Z Y. Spectral reflectance reconstruction of multi-spectral imaging based on optimized sample [J]. Journal of Information and Computational Science, 2015, 12(7): 2535-2544.

[23] Hardeberg J Y. Acquisition and reproduction of color images: colorimetric and multi-spectral approaches [M]. Paris: Universal-Publishers, 2001.

[24] Mohammadi M, Nezamabadi M, Berns R S. Spectral imaging target development based on hierarchical cluster analysis [C]. Proceedings of the 12<sup>th</sup> Color Imaging Conference, 2004: 59-64.

[25] Shen H L, Zhang H G, Xin J H. Optimal selection of representative colors for spectral reflectance reconstruction in a multispectral imaging system [J]. Applied Optics, 2008, 47(13): 2494-2502.

[26] Zhang X Y, Yang W P, Feng J, *et al.* Comparison of ICA and PCA in spectrum reconstruction [J]. Journal of Yunnan Normal University, 2007, 27(3): 28-35.

张小燕, 杨卫平, 冯洁, 等. 光谱重建中 ICA 和 PCA 的对比[J]. 云南师范大学学报, 2007, 27(3): 28-35.

[27] Huang M, Shi C J, Li Z Y, *et al.* Influences on observers color discrimination with normal color vision [J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(9): 0933001.

黄敏, 史春洁, 李泽阳, 等. 色觉正常观察者辨色差异影响研究[J]. 光学学报, 2016, 36(9): 0933001.