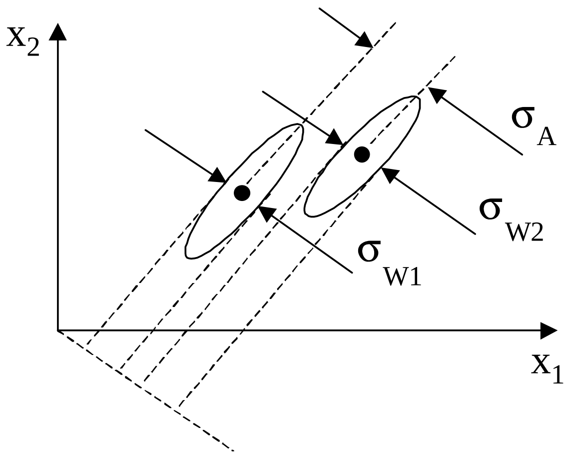
FOI-R--0382--SE
Januari 2002
ISSN 1650-1942

Metodrapport

Tomas Hallberg

En kort introduktion till principalkomponent-transformation och kanonisk diskriminantanalys av multispektrala data



Sensorteknik
Box 1165
581 11 Linköping

TOTALFÖRSVARETS FORSKNINGSINSTITUT

Sensorteknik
Box 1165
581 11 Linköping

FOI-R--0382--SE

Januari 2002

ISSN 1650-1942

Metodrapport

Tomas Hallberg

En kort introduktion till principalkomponent-transformation och kanonisk diskriminantanalys av multispektrala data

Utgivare
Totalförsvarets Forskningsinstitut - FOI
Sensorteknik
Box 1165
581 11 Linköping

Rapportnummer, ISRN
FOI-R--0382--SE

Klassificering
Metodrapport

Forskningsområde
4. Spaning och ledning

Månad, år
Januari 2002

Projektnummer
E3036

Verksamhetsgren
1. Forskning för regeringens behov

Delområde
42. Spaningssensorer

Författare/redaktör
Tomas Hallberg

Projektledare
Ingmar Renhorn

Godkänd av

Uppdragsgivare/kundbeteckning
Försvarsmakten

Tekniskt och/eller vetenskapligt ansvarig
Tomas Hallberg

Rapportens titel
En kort introduktion till principalkomponenttransformation och kanonisk diskriminantanalys av multispektrala data

Sammanfattning (högst 200 ord)
Denna rapport ger en översikt över två algoritmer för multispektral dataanalys: principalkomponent-transformen (PC-transform) och den kanoniska diskriminantanalysen (KD-analys). Algoritmerna används flitigt inom multispektral och hyperspektral fjärranalys för klassificering och identifiering av olika objekt, oftast olika typer av grödor, vegetationer och mineraler. Båda algoritmerna tar fram en uppsättning egenvektorer eller filterfunktioner som inkluderar de delar av den spektrala karaktäristiken som behövs för optimal klassificering men exkluderar redundanta data. Medan PC-transformen behandlar de olika spektralklasserna globalt utan hänsyn till enskilda spektralklassers karaktäristik, maximerar KD-analysen kvoten mellan variansen mellan klasser och variansen inom klasser, vilket optimerar klasseparationen.

Nyckelord
Principalkomponenttransform, kanonisk diskriminantanalys, multispektral, vektorrum

Övriga bibliografiska uppgifter

Språk Svenska

ISSN 1650-1942

Antal sidor: 12 s.

Distribution enligt missiv

Pris: Enligt prislista

Issuing organization
FOI – Swedish Defence Research Agency
Sensor Technology
P.O. Box 1165
SE-581 11 Linköping

Report number, ISRN
FOI-R--0382--SE

Report type
Methodology report

Research area code
4. C^4ISR

Month year
January 2002

Project no.
E3036

Customers code
1. Policy Support to the Government

Sub area code
42. Surveillance sensors

Author/s (editor/s)
Tomas Hallberg

Project manager
Ingmar Renhorn

Approved by

Sponsoring agency
Swedish Armed Forces

Scientifically and technically responsible
Tomas Hallberg

Report title (In translation)
A short introduction to the principal components transformation and the canonical discriminant analysis of multispectral data

Abstract (not more than 200 words)
This report reviews shortly two different algorithms for multispectral data analysis: the principal components transform (PC transform) and the kanonical discriminant analysis (KD analysis). These algorithms are widely used in multispectral and hyperspectral remote sensing for classification and identification of different objects, e.g. different types of crops, vegetation and minerals. Both the algorithms find a set of eigenvectors or filter functions which include the spectral features which are necessary for optimal classification but exclude redundant spectral data. While the PC transform treats the different spectral classes globally without concern to class structure in the data the KD analysis will maximize the ratio between the among-class variance and the within-class variance, by which class separation is optimized.

Keywords
Principal components transform, canonical discriminant analysis, multispectral, vector space

Further bibliographic information

Language Swedish

ISSN 1650-1942

Pages 12 p.

Price acc. to pricelist

INNEHÅLLSFÖRTECKNING **SID**

1. Inledning

Denna rapport ämnar ge en kort introduktion till två olika algoritmer för transformation av multispektrala data; principalkomponenttransformation (PC-transformation) och kanonisk diskriminantanalys (KD-analys) [1-4]. Dessa metoder förekommer ofta inom multi- och hyperspektral fjärranalys av bilddata, framförallt för att kunna välja ut de viktigaste delarna av spektraldata med optimal klassificering, vilket även kan ses som en typ av datakomprimering för att ta bort redundanta data.

Vid multispektral fjärranalys används ett tiotal spektralband medan upp till några hundra kan förekomma vid hyperspektral fjärranalys. Intensitetsvärdet för en viss pixel i en bild inom ett visst spektralt intervall eller band kan beskrivas av ett vektorvärde i ett vektorrum. Detta vektorrum har lika många axlar eller dimensioner som det finns spektrala komponenter eller band för varje pixel. Matematiskt finns i princip ingen gräns för antalet dimensioner man kan hantera, medan dock t. ex. transmissionslänken mellan en fjärranalys-satellit och dess mottagarcentral på jorden har en begränsad bandbredd, eller hårddiskutrymmet som data lagras på är begränsat. Om man vill presentera data visuellt är vi begränsade till maximalt tre dimensioner. Sålunda finns det flera skäl till att komprimera spektraldata.

För tillämpningen i denna rapport är huvudsyftet att utifrån en större spektral dimension välja ett fåtal spektralband som bäst representerar eller klassificerar ett visst objekts spektrala signatur. Dessa utvalda spektralband kan för en sensor realiseras i ett antal olika optiska filter.

2. Principalkomponenttransformation

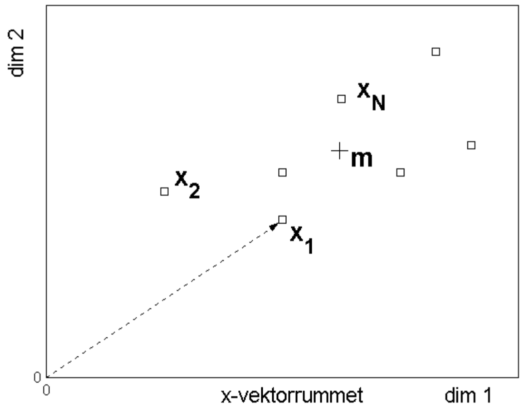
PC-transformen är även känd som Hotelling-, Karhunen-Loève- och egenvektor-transform. Den är i grunden en statistisk analys av bilddata där speciellt varians och korrelation av data analyseras. Principalkomponenterna för en stokastisk multivarierande variabel är baserade på en linjär transformation vilken ger icke-korrelerade variabler med successivt minskande varians. Transformationen av data sker linjärt via rotation i vektorrummet (eller feature space) via en ny uppsättning ortogonala basvektorer, d.v.s. principalkomponenterna. Sålunda reduceras dimensionen av vektorrummet genom att framhäva spektralkomponenter med störst vikt. De med minst vikt (redundanta data) kan tas bort, samtidigt som felet minimeras.

Betrakta en multispektral bildkub med N pixlar, med den spektrala vektorn $\mathbf{x}_i$ utmed den 3:e dimensionen i figur 1. Den spektrala dimensionen för $\mathbf{x}_i$ är här lika med k. I ett 2-D vektorrum kan spektralvektorerna illustreras som i figur 2.

X_1	X_2		
			X_N

$$\mathbf{x}_i = \begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \\ \vdots \\ x_{ik} \end{bmatrix}$$

Figur 1. En multispektral bildkub med spektrala komponenter $\mathbf{x}_i$.



*Figur 2. Ett tvådimensionellt vektorrum med individuella pixelvektorer och medelvektorn **m**.*

Medelvektorn **m** beräknas genom

$$\mathbf{m} = \frac{1}{\mathrm{N}} \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} \mathbf{x}_i \qquad (1)$$

För att få ett mått på spridningen av data i vektorrummet beräknas kovariansmatrisen, $\mathbf{S}_x$

$$\mathbf{S}_{\mathrm{x}} = \frac{1}{\mathrm{N-1}} \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} (\mathbf{x}_{\mathrm{i}} - \mathbf{m})(\mathbf{x}_{\mathrm{i}} - \mathbf{m})^{\mathrm{T}} \qquad (2)$$

Diagonalelementen i $\mathbf{S}_x$ är variansen av data (per spektralband) medan övriga element i matrisen beskriver korrelationen av data, där höga värden betyder stor korrelation medan låga värden betyder liten korrelation. Jämför här med elementen ρ_{ij} i korrelationsmatrisen

$$\rho_{\mathrm{ij}} = \frac{\upsilon_{\mathrm{ij}}}{\sqrt{\upsilon_{\mathrm{ii}} \upsilon_{\mathrm{jj}}}} \qquad (3)$$

där ν_{ij} är element i kovariansmatrisen, ν_{ii} och ν_{jj} är variansen av i:te respektive j:te spektralbandens data. Sålunda beskriver ρ_{ij} korrelationen mellan band i och band j.

Idén är nu att transformera data från ett vektorrum med en viss korrelationsgrad till ett annat med så låg korrelation som möjligt. Detta reducerar antalet nödvändiga dimensioner. Transformera från vektorrummet x till vektorrummet y med operatorn Φ enligt

$$\mathbf{y} = \mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}} \mathbf{x} \qquad (4)$$

där $\mathbf{\Phi}$ är en matris med egenvektorer ϕ till $\mathbf{S}_x$ med egenvärden λ i matrisen $\mathbf{\Lambda}$. Följande egenvärdesproblem skall lösas,

$$\mathbf{\Phi}\ \mathbf{\Lambda} = \mathbf{W}\ \mathbf{S}_x \mathbf{\Phi} \qquad (5)$$

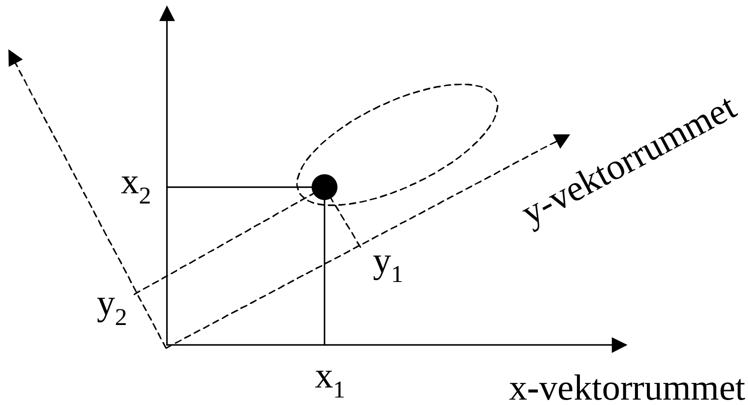
där **W** som är en diagonalmatris med viktkoefficienter eventuellt måste inkluderas för att nolla områden i spektra där atmosfären absorberar kraftigt (denna nollning kan dock göras direkt i spektrumet). I Matlab löser man egenvärdesproblemet enkelt genom kommandot *eig* eller *eigs*

([$\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Lambda}$]=eig($\mathbf{WS}_x$) eller [$\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Lambda}$]=eigs($\mathbf{WS}_x$,n)), där n anger antalet önskade egenvektorer och egenvärden). Principalaxlarna rangordnas efter storlek på egenvektorernas egenvärden, så att den första principalaxeln vilken motsvaras av den första egenvektorn, har det största egenvärdet, o.s.v. Transformen resulterar i att data (d.v.s. ϕ_1x) utmed den 1:a principalaxeln (y_1) uppvisar störst varians, vilken successivt minskar för varje lägre rangordnad principalaxel.

I det nya vektorrummet y är data ej korrelerade i förhållande till principalaxlarna. Detta kan visas genom att för kovariansmatrisen $\mathbf{S}_y$ för det nya rummet är elementen utanför diagonalen lika med noll, d.v.s.

$$\mathbf{S}_y = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \\ 0 & 0 & \ddots & \\ & & & \lambda_k \end{bmatrix}$$

där diagonalelementen λ_i är egenvärden för $\mathbf{S}_x$. Figur 3 visar att spektralvektorerna i det nya vektorrummet inte är korrelerade och att variansen för datamängden är störst utmed den första principalaxeln.



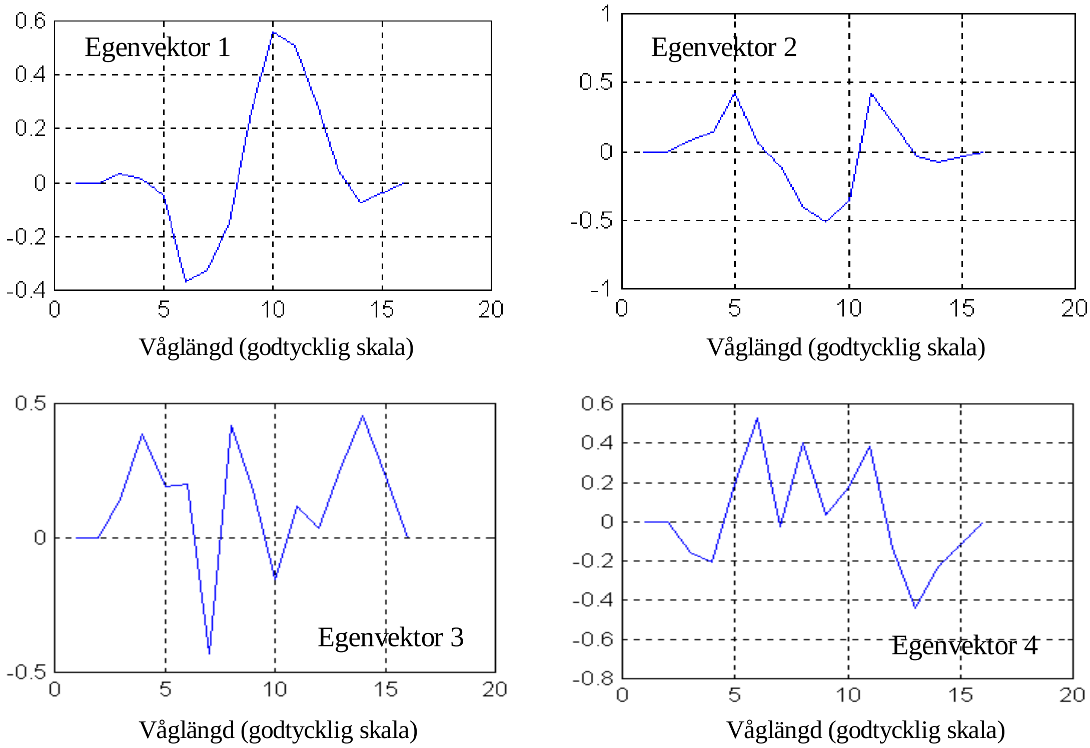
Figur 3. Illustration av ett modifierat koordinatsystem y i vilket pixelvektorerna har icke-korrelerade komponenter.

Det medelkvadratiska felet R mellan x och y ges av

$$R = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i - \sum_{i=1}^{K} \lambda_i = \sum_{i=K+1}^{N} \lambda_i \qquad (6)$$

vid valet av K basfunktioner av maximalt N stycken och med egenvärdena λ arrangerade i avtagande storleksordning. Vi konstaterar således att om K=N så är felet lika med noll. Felet minimeras genom att välja egenvektorer associerade med de största egenvärdena.

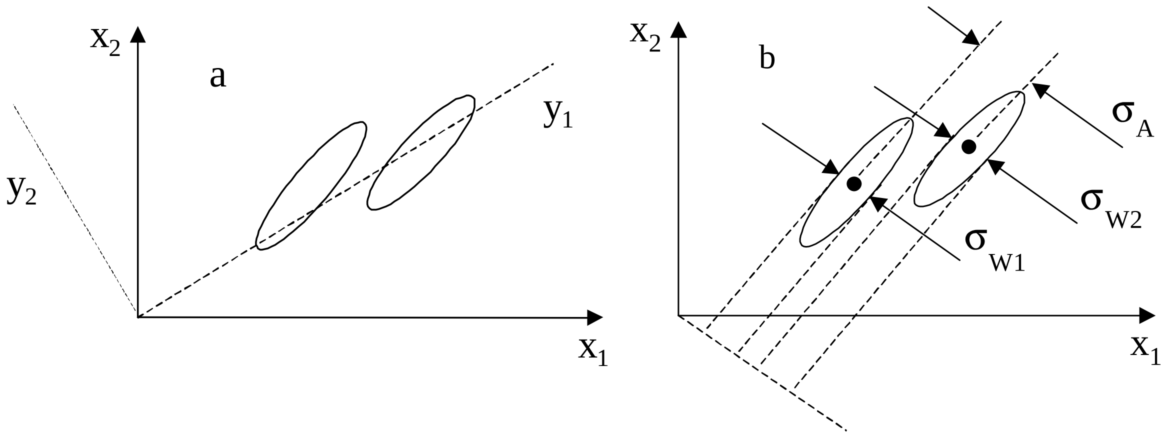
I figur 4 illustreras som exempel några olika egenvektorer rangordnade efter associerat egenvärde i avtagande storleksordning. Några olika tolkningstips gällande egenvektorerna kan här nämnas [3,4]. Viktig information finns i spektrum där värdet för egenvektorn avviker signifikant från noll. Vidare kan nollgenomgångarna för egenvektorerna ofta vara bandkanter. Figur 4 visar även det faktum att den första egenvektorn innehåller lågupplöst spektral information medan senare egenvektorer innehåller allt mer högupplöst information.



Figur 4. Exempel på egenvektorer rangordnade i storleksordning efter associerat egenvärde.

3. Kanonisk diskriminantanalys

Nackdelen med PC-transformen är dock att kovariansmatrisen $\mathbf{S}_x$ är global, d.v.s. oberoende av individuella spektralklasser. Den kanoniska diskriminantanalysmetoden optimerar klasseparationen [5], vilket illustreras i figur 5.



Figur 5. Ett hypotetiskt 2-D vektorrum med två klasser som inte är separerade i varken de ursprungliga spektralbanden eller i någon av principalaxlarna enligt figur a medan figur b visar en axel erhållen från den kanoniska analysmetoden utmed vilken klasserna är separerade.

I KD-analysen opimeras variansen som råder mellan klasserna tillsammans med den som råder inom klasserna på så sätt att följande kvot maximeras

$$\frac{\sigma_A^2}{\sigma_W^2} = \frac{\text{varians mellan klasser}}{\text{varians inom klasser}} \tag{7}$$

Följande två kovariansmatriser beräknas, $\mathbf{S}_w$ för inom klasser

$$\mathbf{S}_W = \sum_{i=1}^{L} \frac{(N_i - 1)}{N_s} \cdot \mathbf{S}_i \tag{8}$$

med L som antalet klasser, N_i antalet spektra i klass i, N_s är det totala antalet spektra inklusive samtliga klasser och $\mathbf{S}_i$ är kovariansmatrisen för klass i, och $\mathbf{S}_A$ för mellan klasser,

$$\mathbf{S}_A = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} (\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_0)(\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_0)^T \tag{9}$$

$$\mathbf{m}_0 = \sum_{i=1}^{L} \frac{N_i}{N_s} \cdot \mathbf{m}_i \tag{10}$$

där $\mathbf{m}_i$ är medelvektorn för klass i och $\mathbf{m}_0$ är den globala medelvektorn. Maximal klasseparering fås nu genom att maximera kvoten

$$\lambda = \frac{\sigma_A^2}{\sigma_W^2} = \frac{\mathbf{d}^T \mathbf{S}_A \mathbf{d}}{\mathbf{d}^T \mathbf{S}_W \mathbf{d}} \tag{11}$$

där **d** är optimal projektionsriktning. Maximering fås genom

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{d}} = 0 \tag{12}$$

vilket kan reduceras till

$$(\mathbf{S}_A - \lambda \mathbf{S}_W) \cdot \mathbf{d} = 0 \tag{13}$$

eller mera generellt skriver vi

$$(\mathbf{S}_A - \mathbf{\Lambda}\, \mathbf{S}_W) \cdot \mathbf{D} = 0 \tag{14}$$

med $\mathbf{\Lambda}$ som en diagonalmatris med egenvärdena λ och **D** en matris med egenvektorer **d**. Vi söker nu lösningen till denna *generaliserade egenvärdesekvation*. Detta löses i Matlab genom $[\mathbf{D},\mathbf{\Lambda}]$=eig($\mathbf{S}_A$,$\mathbf{S}_W$) för $\mathbf{S}_A\mathbf{D}=\mathbf{S}_W\mathbf{\Lambda}\mathbf{D}$. Som ett sista steg normaliseras den kanoniska karaktäristiken i förhållande till $\mathbf{S}_W$

$$\mathbf{D}^T \mathbf{S}_W \mathbf{D} = \mathbf{I} \tag{15}$$

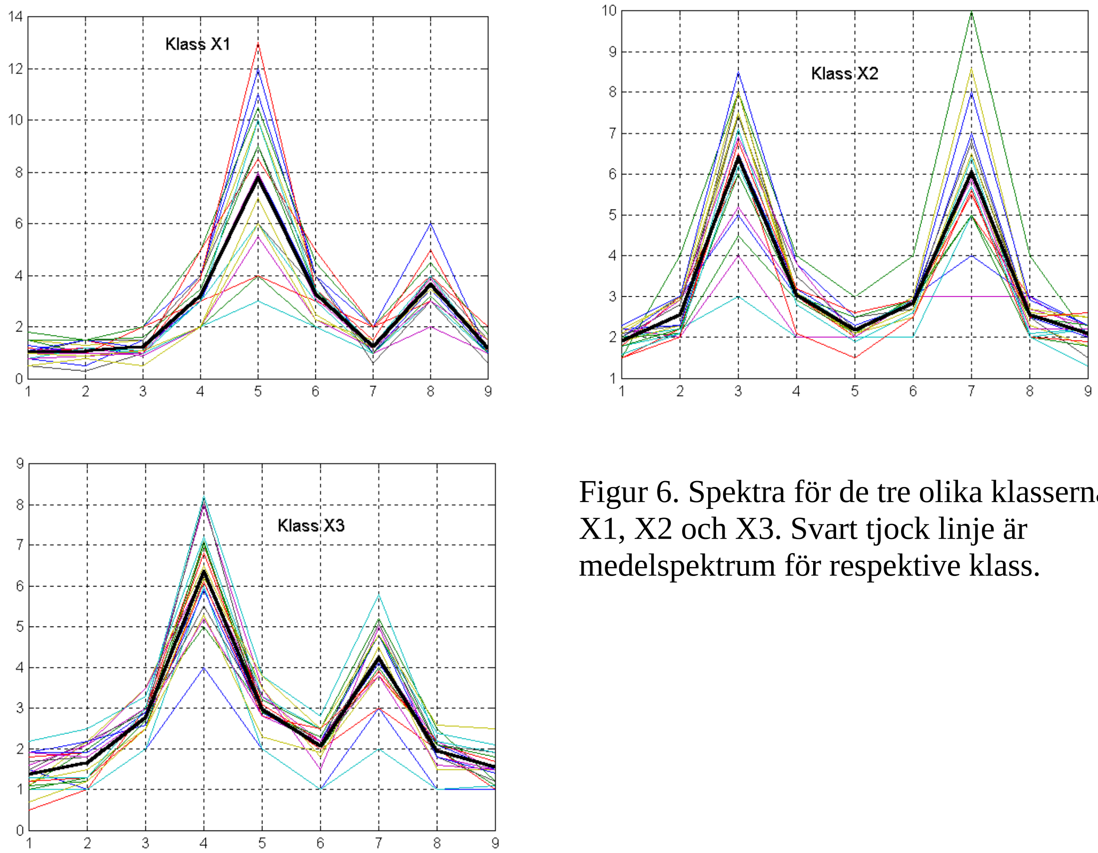
som skapar en sfärisk fördelning inom klasserna. Transformationen som ger maximal klasseparering i ett vektorrum **y** är således

$$\mathbf{y} = \mathbf{D}^T \mathbf{x} \tag{16}$$

vilken kallas för en kanonisk diskriminantfunktion. Den första kanoniska axeln eller den första kanoniska diskriminantfunktionen $\mathbf{d}_1$ (med det största egenvärdet), ger maximal diskriminering mellan klasserna i förhållande till de andra kanoniska axlarna. Dessa diskriminantfunktioner är i allmänhet inte ortogonala i förhållande till varandra. Vid beräkningen erhålles L-1 egenvektorer med egenvärden >0.

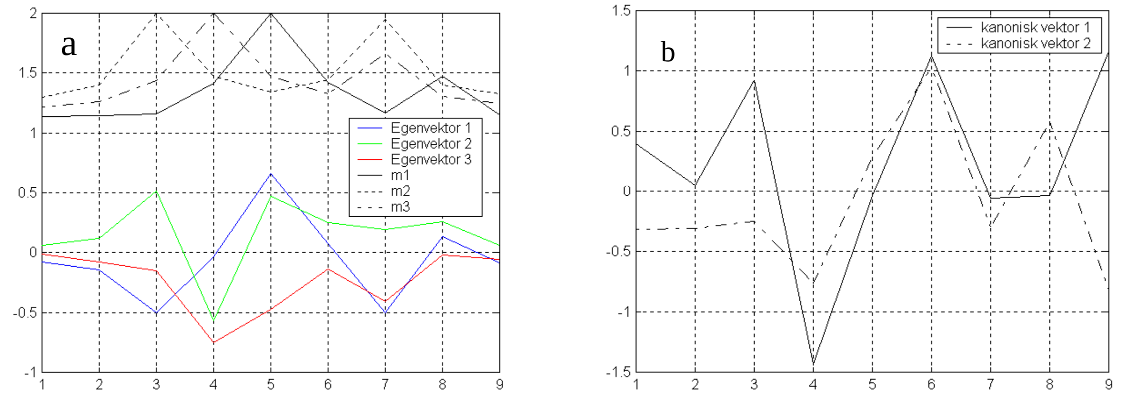
4. Exempel, 3 klasser av syntetiska spektra

För att belysa skillnaden mellan PC- och KD-analysen exemplifieras metoderna med tre olika klasser av syntetiska spektra, med 20 spektra i varje klass samplade inom 9 olika spektralband, enligt figur 6.

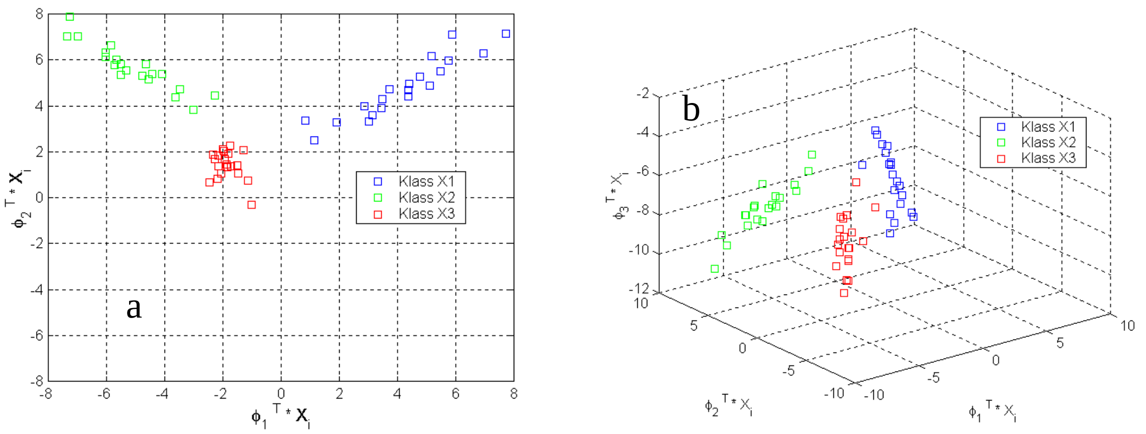


Figur 6. Spektra för de tre olika klasserna X1, X2 och X3. Svart tjock linje är medelspektrum för respektive klass.

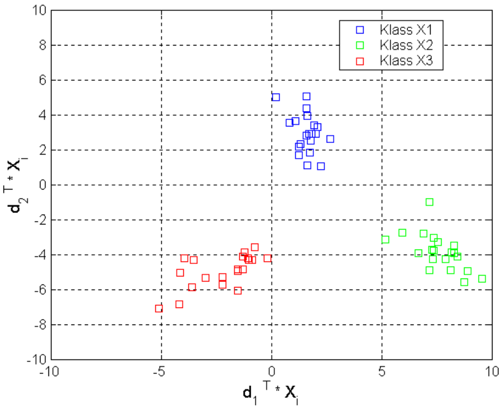
Egenvektorer och egenvärden beräknas för PC-analysen (genom ekv. (1), (2) och (5)) och i figur 7a ges de tre egenvektorerna som har de största egenvärdena (16, 4 och 3). Erhållna egenvektorerna för KD-analysen (L-1 stycken) visas i figur 7b (genom ekv. (1), (2), (8)-(10), (14) och (15)). Spektraldata transformeras för PC- och KD-analysen genom ekv. (4) respektive (15). Klassernas fördelning i det så erhållna vektorrummet med PC-analysen visas i 2-D och 3-D i figur 8 och vi konstaterar att maximal varians av data fås utmed den första principalaxeln. Resultatet av KD-analysen i figur 9 visar att klasserna är tydligare separerade och mera sfäriskt fördelade jämfört med resultaten i figur 8.



Figur 7. Egenvektorerna med de tre största egenvärdena för PC-transformen tillsammans med medelspektra för de tre klasserna visas i (a) medan (b) visar de två erhållna egenvektorerna från KD-analysen.



Figur 8. Data transformerat med de av PC-analysen erhållna egenvektorerna ϕ_1, ϕ_2 och ϕ_3 plottat i 2-D (a) och 3-D (b).



Figur 9. Data transformerat med de av KD-analysen erhållna egenvektorerna d_1 och d_2.

5. Referenser

1 Richards, J.A., Jia, X, *Remote Sensing Digital Image Analysis, An Introduction*, 3:e upplagan, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, ISBN 3-540-64860-7, 1999.

2 Schowengerdt, R.A., *Remote Sensing, Models and Methods for Image Processing*, 2:a upplagan, Academic Press, ISBN 0-12-628981-6, 1997.

3 Chen, C-C.T, Landgrebe, D.A., A Spectral Feature Design System for the HIRIS/MODIS Era, IEEE transactions on geoscience and remote sensing, **27** (6) 681, 1989.

4 Wiersma, D.J., Landergebe, D.A., *Analytical Design of Multispectral Sensors*, IEEE transactions on geoscience and remote sensing, **GE-18** (2) 180, 1980.

5 Fisher, R.A., The Utilization of Multiple Measurements in Taxonomic Problems, Annals of Eugenics, **7**, 179-188, 1936.