



Universidad de Concepción
Dirección de Postgrado
Facultad de Ingeniería - Programa de Magíster en Ciencias de la Ingeniería con
mención en Ingeniería Eléctrica



**Modelo Matemático de Componentes Principales de
Espectros de un Cuerpo Negro para Estudio y Diseño de
Canales Ópticos.**

Tesis para optar al grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería con
mención en Ingeniería Eléctrica

FRANCISCO JAVIER RAMOS CONCHA
CONCEPCIÓN-CHILE
2016

Profesor Guía: Luis Arias Parada
Dpto. de Ingeniería Eléctrica, Facultad de Ingeniería
Universidad de Concepción

Resumen

En este trabajo se propone el desarrollo de funciones ortogonales que modelen vectores bases obtenidas a través de análisis de componentes principales, PCA, para optimizar el proceso de recuperación espectral de espectros de cuerpo negro, como base para otros tipos de procesos. Según algunos autores, al utilizar las bases ortogonales como sensibilidades espectrales en canales ópticos, permiten excelentes estimaciones a través de métodos como pseudoinversa. No obstante, debido a que el cálculo de las bases entrega como resultado datos numéricos, se hace necesario proponer modelos para construirlos como canales ópticos, ya que esta propuesta es sensible si no se conoce con exactitud el componente principal que se usará como canal. Se usó el modelo matemático de las funciones ortogonales para utilizarlo en métodos de estimación modernos y también en expansiones ortogonales de la ecuación de Planck, con la cual se podría construir un espectro sumando solo unas pocas funciones con sus pesos correspondientes. En este último caso, los resultados no entregaron coeficientes de peso analíticos, por lo que no son factibles en la práctica.

Como consecuencia de este trabajo, se pudo encontrar y proponer un nuevo algoritmo para estimar espectros a partir de los canales ópticos óptimos propuestos en un estudio realizado por los profesores Luis Arias y Daniel Sbarbaro. Este método mejora las métricas de GFC y NRMSE en comparación con el propuesto de pseudoinversa y otros como Maloney-Wandell. Al realizar simulaciones con presencia de ruido electrónico, se pudo notar una sensibilidad al ruido de este algoritmo con un decaimiento en GFC de 99.9000 a 72.8485 y un empeoramiento en NRMSE de 1.3557 a 21.8887, en el peor de los casos (SNR=26 dB).

En adición, se intentó dar explicación a interrogantes (definidas en la sección 1.2.5) relacionadas a cuerpos negros y otros fenómenos observados, los cuales podrían ayudar a optimizar el problema de recuperación espectral.

A Dios y a mi familia



Agradecimientos

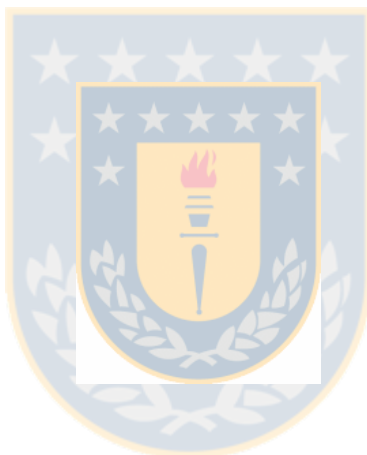
Quisiera agradecer a todas las personas que me acompañaron durante este proceso formativo personal. Además quisiera agradecer a CONICYT por la ayuda económica para fomentar el desarrollo en Chile y financiar este Magíster.



CONICYT-PCHA/MagísterNacional/2014 - 22140567

Tabla de contenidos

Resumen	I
Agradecimientos	III
Lista de figuras	VIII
Lista de tablas	X
Nomenclatura	XII
Siglas y Abreviaciones	XIV
1. Introducción	1
1.1. Introducción	1
1.2. Identificación del Problema de recuperación espectral	4
1.2.1. Radiación de Cuerpo negro	5
1.2.2. Observación General	5
1.2.3. Soluciones Actuales	8
1.2.4. Soluciones Propuestas	8
1.2.5. Interrogantes Planteadas	10

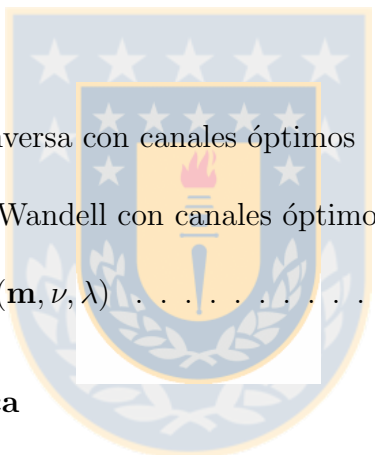


1.3.	Hipótesis	10
1.4.	Objetivos	11
1.4.1.	Objetivos generales	11
1.4.2.	Objetivos específicos	11
1.5.	Propuesta de Publicación	12
1.6.	Metodología	12
1.7.	Alcances y limitaciones	13
2.	Discusión Bibliográfica	14
2.1.	Revisión Bibliográfica	14
3.	Fundamentos Teóricos	17
3.1.	Emisividad	17
3.2.	Espectros continuos y discretos - Leyes de espectroscopía de Kirchhoff	18
3.3.	Análisis de Componentes Principales	18
3.3.1.	Definición	18
3.3.2.	Cálculo de Componentes Principales	19
3.4.	Funciones Ortogonales	21
3.4.1.	Producto interno y ortogonalidad	21
3.4.2.	Conjunto ortogonal	21
3.4.3.	Norma y Ortonormalidad	22
3.4.4.	Ortogonalidad con función de peso	22
3.5.	Expansiones en series de funciones ortogonales	22



3.6.	Polinomios de Laguerre	24
3.6.1.	Definición	24
3.6.2.	Polinomios asociados de Laguerre	24
4.	Resultados	27
4.1.	Primer componente principal siempre positivo	27
4.2.	Comportamiento polinomial de los componentes principales	28
4.3.	Significado físico al comportamiento polinomial de los componentes principales	30
4.4.	Modelo matemático exacto de los componentes principales	32
4.5.	Función que Modela el Número de Canales que Genera la Descomposición de los Componentes Principales de Espectros de Cuerpo Negro	33
4.6.	Modelo Matemático de Componentes Principales de Espectros de Cuerpo negro	34
4.6.1.	Modelo a partir del análisis de ortogonalidad	34
4.6.2.	Búsqueda de parámetros m y ν óptimos	35
4.6.3.	Comparación entre componentes principales y funciones optimizadas	36
4.7.	Simulaciones del Modelo Matemático en Métodos de Recuperación Espectral	37
4.7.1.	Método de Pseudo-inversa con canales óptimos	37
4.7.2.	Método de Maloney-Wandell	38
4.8.	Expansión en series de la Ecuación de Planck	39
4.9.	Propuesta de Nuevo Método de Recuperación Espectral	40
4.9.1.	Definición	40
4.9.2.	Simulaciones	41
4.9.3.	Discusión	49

4.9.4. Análisis de ruido	52
5. Conclusiones	55
5.1. Sumario	55
5.2. Conclusiones	56
5.3. Trabajo Futuro	57
Bibliografía	58
Apéndice	61
A. Códigos utilizados	61
A.1. Algoritmo de Pseudo inversa con canales óptimos	61
A.2. Algoritmo de Maloney-Wandell con canales óptimos	62
A.3. Función que calcula $\phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{m}, \nu, \lambda)$	62
B. Definiciones de estadística	63
B.1. Varianza	63
B.2. Covarianza	63
B.3. Correlación	63
C. Documentos	65
C.1. Reporte Interno del grupo SP&R: On the optimum number of sensors and their spectral sensitivities for spectral reconstruction: Anon-parametric approach . . .	65



Lista de figuras

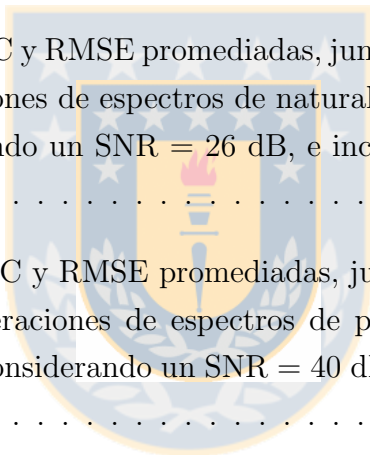
1.1.	Curvas de E_{bb} en rango de $0,1[\mu m] - 10[\mu m]$	6
1.2.	(a) Algunos espectros de cuerpo negro de \mathbf{M} . (b) Primer al sexto componente principal de \mathbf{M} con dominio $\frac{1}{\lambda}$	7
1.3.	Primeros seis componentes principales de \mathbf{M} . (a) 1er, 2do y 3er componente. (b) 4to, 5to y 6to componente.	7
3.1.	Gráfico de los primeros 7 polinomios de Laguerre.	25
3.2.	Gráfico de los primeros 7 polinomios asociados de Laguerre.	26
4.1.	Curvas de matriz de correlación. (a) Primera fila. (b) Última fila.	29
4.2.	Matriz de entrenamiento de espectros de cuerpo negro, con columnas resaltadas.	30
4.3.	Matriz de entrenamiento de espectros de cuerpo negro, con discontinuidad forzada.	31
4.4.	Matriz de correlación. (a) Gráfica de la primera fila. (b) Gráfica de la última columna.	32
4.5.	Componentes principales de espectros de cuerpo negro con discontinuidad forzada.	32
4.6.	Gráficas comparativas entre componentes principales y funciones encontradas. (a) Primer componente. (b) Segundo componente. (c) Tercer componente.	36
4.7.	Sensibilidades espectrales de una cámara Basler A602SC-2.	38

4.8. Matrices de entrenamiento de espectros. (a) Reflectancia de una carta de color de Munsell. (b) Reflexión de paisajes naturales. (c) Reflectancia de pino radiata.	42
4.9. Primeros 5 componentes principales de espectros de parches de Munsell.	43
4.10. 15 canales ópticos resultantes de la descomposición de los 5 primeros PC de parches de Munsell.	44
4.11. Métricas de calidad v/s número de canales usados en estimaciones de espectros de parches de Munsell.	45
4.12. Primeros 5 componentes principales de espectros de naturaleza.	45
4.13. 18 canales ópticos resultantes de la descomposición de los 5 primeros PC de naturaleza.	46
4.14. Métricas de calidad v/s número de canales usados en estimaciones de espectros de naturaleza.	46
4.15. Métricas de calidad v/s número de canales usados en estimaciones de espectros de pino radiata.	48
4.16. Primeros 5 componentes principales de espectros de pino radiata.	48
4.17. 20 canales ópticos resultantes de la descomposición de los 5 primeros PC de pino radiata.	49
A.1. Algoritmo de Pseudo inversa con canales óptimos	61
A.2. Algoritmo de Maloney-Wandell con canales óptimos	62
A.3. Función que calcula $\phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{m}, \nu, \lambda)$	62

Lista de tablas

1.1. Requerimientos y desventajas de técnicas de recuperación espectral.	8
4.1. Resumen del promedio de las métricas de calidad con canales óptimos derivados de componentes principales y funciones $\phi(\lambda)$ para 1001 estimaciones.	37
4.2. Resumen del promedio de las métricas de calidad con canales reales, óptimos derivados de componentes principales y derivados de funciones $\phi(\lambda)$ para 1001 estimaciones.	39
4.3. Tabla compartiva entre el método de Arias-Sbárbaro y el propuesto.	41
4.4. Métricas de calidad promediadas para estimaciones de espectros de parches de Munsell usando 4 métodos: Teórico usando $E = V\epsilon$ con una base acotada, Maloney-Wandell con canales óptimos, Arias-Sbárbaro usando pseudoinversa con canales óptimos y la técnica propuesta.	43
4.5. Métricas de calidad promediadas para estimaciones de espectros de naturaleza usando 4 métodos: Teórico usando $E = V\epsilon$ con una base acotada, Maloney-Wandell con canales óptimos, Arias-Sbárbaro usando pseudoinversa con canales óptimos y la técnica propuesta.	47
4.6. Métricas de calidad promediadas para estimaciones de espectros de pino radiata usando 4 métodos: Teórico usando $E = V\epsilon$ con una base acotada, Maloney-Wandell con canales óptimos, Arias-Sbárbaro usando pseudoinversa con canales óptimos y la técnica propuesta.	48

4.7. Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de una carta de color de Munsell usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 40 dB, e incrementando el número de canales usados.	52
4.8. Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de una carta de color de Munsell usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 26 dB, e incrementando el número de canales usados.	53
4.9. Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de naturaleza usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 40 dB, e incrementando el número de canales usados.	53
4.10. Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de naturaleza usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 26 dB, e incrementando el número de canales usados.	53
4.11. Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de pino radiata usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 40 dB, e incrementando el número de canales usados.	54
4.12. Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de pino radiata usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 26 dB, e incrementando el número de canales usados.	54



Nomenclatura

Matrices y vectores

$\mathbf{c}_{k \times 1}$: Respuesta óptica de los k canales.

$\mathbf{W}_{k \times N}^t$: Transpuesta de la matriz que contiene la sensibilidad espectral para los k canales en N longitudes de onda.

$\mathbf{E}_{N \times 1}$: Espectro medido por un instrumento patrón con una resolución de N longitudes de onda.

$\hat{\mathbf{E}}_{N \times 1}$: Espectro estimado con una resolución de N longitudes de onda.

$\mathbf{V}_{N \times n}$: Matriz que contiene los n vectores base a N longitudes de onda.

$\epsilon_{n \times 1}$: Coeficientes de la combinación lineal para n vectores base.

$\Lambda_{k \times n}^+$: Pseudo inversa de $\Lambda_{k \times n} = \mathbf{W}_{k \times N}^t \mathbf{V}_{N \times n}$.

\mathbf{V}^+ : Pseudo inversa de \mathbf{V} que contiene los canales ópticos óptimos .

\mathbf{pc}_i : i -ésimo componente principal.

\mathbf{R} : Matriz de correlación.

\mathbf{C} : Matriz de covarianza.

$\mathbf{M}_{m \times n}$: Matriz de entrenamiento de n muestras dependientes de m variables.

\mathbf{I} : Matriz identidad.

\mathbf{v}_i : i -ésimo vector propio de \mathbf{C} .

\mathbf{S} : Matriz diagonal.

\mathbf{V}^t : Transpuesta de una matriz unitaria \mathbf{V} .

\mathbf{U} : Matriz unitaria.

$\text{gen}(\mathbf{V})$: Conjunto generado por \mathbf{V} .

Escalares

C_1 : Primera constante de Planck.

C_2 : Segunda constante de Planck.

λ_i : i -ésimo valor propio de \mathbf{C} .

$\sigma_{x_i}^2$: Varianza respecto a la variable x_i .

r_{ij} : Entrada (i,j) de \mathbf{R} .

c_{ij} : Entrada (i,j) de \mathbf{C} .

a_n : Amplitud de la n -ésima función $\phi(\lambda)$.

m : Parámetro de la familia de funciones $\phi_n(m, \nu, \lambda)$.

ν : Parámetro de la familia de funciones $\phi_n(m, \nu, \lambda)$.

c : Coeficiente de compresión de $\phi(x)$.

GFC_n : GFC entre el n -ésimo componente y $\phi_n(\lambda)$.

$RMSE_n$: RMSE entre el n -ésimo componente y $\phi_n(\lambda)$.

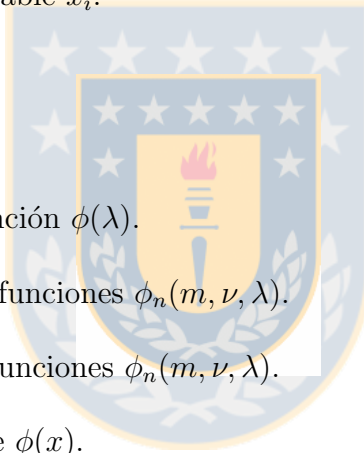
$a_{n_{opt}}$: Amplitud de la n -ésima función $\phi(\lambda)$ que minimiza el $RMSE_n$.

m_{opt} : Parámetro de la familia de funciones $\phi_n(m, \nu, \lambda)$ que maximiza la función de costo.

ν_{opt} : Parámetro de la familia de funciones $\phi_n(m, \nu, \lambda)$ que maximiza la función de costo.

GFC_{mean} : Promedio de los GFC de 1001 espectros estimados.

$NRMSE_{mean}$: Promedio de los NRMSE de 1001 espectros estimados.



Siglas y Abreviaciones

PCA : Principal Component Analysis (Análisis de Componentes Principales).

Ed. : Editorial.

TIC : Tecnologías de la Información y Comunicación.

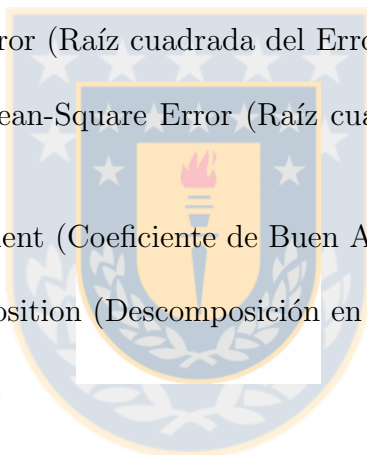
RMSE : Root-Mean-Square Error (Raíz cuadrada del Error Cuadrático Medio).

NRMSE : Normalized Root-Mean-Square Error (Raíz cuadrada del Error Cuadrático Medio Normalizado).

GFC : Goodness-of-Fit Coefficient (Coeficiente de Buen Ajuste) .

SVD : Singular Value Decomposition (Descomposición en Valores Singulares).

PC : Componentes Principales.



Capítulo 1

Introducción

1.1. Introducción

La medición de espectros es utilizada en múltiples aplicaciones y procesos, para los cuales se necesita conocer alguna variable participante. Hoy en día existen diversas aplicaciones y usos de mediciones de espectros en la industria [1] [2], [3], implicando que varios estudios [4], [5], [6], [7], [8] se enfoquen en optimizar recursos para obtener espectros de calidad al menor costo. Dado que medir un espectro de calidad puede resultar un tanto costosa debido a la implementación de arreglos hiperespectrales, en la última década se han desarrollado técnicas de recuperación espectral a partir de muestras tomadas con sensores de baja resolución espectral, y por ende más baratos [4]. Unas de las herramientas usadas en estas técnicas de estimación de espectros es PCA que entrega un set de vectores base generador de un conjunto de datos, los cuales, juntos con algunos algoritmos permiten recuperar espectros de alta calidad.

Existen varios métodos de estimaciones espectrales, siendo los más populares el de Maloney-Wandell, Imai-Berns, Shi-Healey y el Método de Estimación Wiener [2], [4], [3]. Todos ellos requieren tener conocimiento previo de espectros de muestra, o también llamados espectros de entrenamientos, los cuales se ordenan en una matriz de entrenamiento \mathbf{M} .

Se le llama canal óptico a todo el sistema que participa desde que ingresa potencia óptica, hasta que se obtiene una respuesta eléctrica (voltaje o corriente) que represente esa potencia. Se puede considerar canal óptico al conjunto de sensores y lentes que participan en la recepción de luz. De forma general y asumiendo ausencia de ruido electrónico en el sensor, el canal óptico

puede ser modelado de la siguiente forma [3],

$$\mathbf{c}_{k \times 1} = \mathbf{W}_{k \times N}^t \mathbf{E}_{N \times 1}, \quad (1.1)$$

donde \mathbf{c} es la respuesta óptica de cada canal k , $\mathbf{W}_{k \times N}^t$ contiene las sensibilidades espectrales de los k canales con un muestreo a N longitudes de onda, y $\mathbf{E}_{N \times 1}$ es el espectro incidente muestreado a N longitudes de onda.

Se puede decir que cualquier espectro \mathbf{E} a N longitudes de onda, es posible representarlo por una combinación lineal de n espectros bases con sus respectivos coeficientes de combinación como se muestra en la ecuación (1.2).

$$\hat{\mathbf{E}}_{N \times 1} = \mathbf{V}_{N \times n} \boldsymbol{\epsilon}_{n \times 1}. \quad (1.2)$$

$\hat{\mathbf{E}}_{N \times 1}$ es el espectro estimado por la combinación lineal de la base, $\mathbf{V}_{N \times n}$ es la matriz que contiene las n bases muestreadas a N longitudes de onda y $\boldsymbol{\epsilon}_{n \times 1}$ es el vector que contiene los n coeficientes de la combinación lineal.

Si la base \mathbf{V} es perfectamente generadora del espacio que contiene al espectro original, entonces $\hat{\mathbf{E}}_{N \times 1} = \mathbf{E}_{N \times 1}$. Esto generalmente no suele suceder, siendo ésta la razón a la cual se le llama a $\hat{\mathbf{E}}_{N \times 1}$ espectro estimado.

Método de Maloney-Wandell

Este método requiere de las bases lineales, espectros de entrenamiento y además de las sensibilidades espectrales de los sensores. Si se reemplaza el espectro estimado de la ecuación (1.2) en la ecuación (1.1) se obtendrá [3],

$$\mathbf{c}_{k \times 1} = \mathbf{W}_{k \times N}^t \mathbf{V}_{N \times n} \boldsymbol{\epsilon}_{n \times 1}, \quad (1.3)$$

o bien,

$$\mathbf{c}_{k \times 1} = \boldsymbol{\Lambda}_{k \times n} \boldsymbol{\epsilon}_{n \times 1}. \quad (1.4)$$

De la ecuación (1.4) se puede obtener el vector de coeficientes de la combinación lineal de la ecuación (1.2) aplicando la pseudoinversa de $\boldsymbol{\Lambda}_{k \times n}$ teniendo,

$$\hat{\mathbf{E}}_{N \times 1} = \mathbf{V}_{N \times n} \mathbf{\Lambda}_{n \times k}^+ \mathbf{c}_{k \times 1} \quad (1.5)$$

Ésta resulta ser una manera de obtener una buena recuperación espectral si se elige un número de vectores bases igual al número de canales [4] y un conjunto de espectros representativa, la cual se puede obtener calculando los Componentes Principales de la matriz de entrenamiento y ocupando los más significativos que contengan la mayor información para realizar el método.

Canales ópticos óptimos

Sea E un espectro de emisión, absorción, transmisión o reflexión, y sea \hat{E} la estimación de E a través de un método de recuperación espectral con canales definidos. Se pueden definir los canales óptimos como aquellos que minimicen el funcional $\|E - \hat{E}\|$. Éstos pueden obtenerse a partir del Análisis de Componentes Principales de la matriz de entrenamiento \mathbf{M} del proceso. Primero deben definirse cuántos vectores base se incluirán en la recuperación, a modo de no agregar ruido a la estimación.

La respuesta óptima de un sensor para recuperar el espectro \mathbf{E} está dada por la ecuación (1.6) [5], la cual resulta de despejar la ecuación (1.2).

$$\epsilon = \mathbf{V}^+ \mathbf{E} \quad (1.6)$$

Donde las filas de \mathbf{V} son las sensibilidades espectrales del sensor. Para que $\mathbf{V}^+ = \mathbf{V}^t$, se necesita que las columnas de \mathbf{V} sean ortogonales. Luego, como los Componentes Principales cumplen esta condición, al utilizarlos como sensibilidades espectrales se tendrían los canales ópticos óptimos. Como los vectores entregados por PCA pueden tomar valores negativos, se considerarán los valores absolutos de éstos, ya que las sensibilidades espectrales no pueden ser negativas por definición física. Así, por cada vector base se generarán canales adicionales.

Sea $\mathbf{W}^{(j)}$ una matriz que contiene todos los canales descompuestos del j -ésimo componente principal, entonces $\mathbf{W}_i^{(j)}$ es el i -ésimo canal generado por el j -ésimo componente.

Entonces, la j -ésima respuesta óptica estará dada por,

$$\mathbf{c}_j = \sum_{i=1}^j (-1)^{i+1} \mathbf{W}_i^{(j)} \mathbf{E} \quad (1.7)$$

Así, el espectro estimado estará dado por la ecuación (1.2).

En ambos métodos se puede utilizar canales que optimicen la recuperación. En Maloney-Wandell no se requiere mayores condiciones en las formas espectrales de estos canales, sino que se debe tener cuidado en elegir el número correcto. Por otra parte, para el método de canales óptimos, se debe considerar que los canales deben ser ortogonales entre si.

De acuerdo a últimos estudios [5], una manera óptima de recuperación se obtiene cuando los canales están diseñados con la forma espectral de los Componentes Principales de la matriz de entrenamiento para los espectros de interés [5]; siendo así como resulta atrayente modelar estos componentes a modo de un posterior diseño de los canales óptimos.

Para entender el por qué de este comportamiento, se hace necesario también estudiar el tipo de espectros que se miden, los cuales son generados por espectros de cuerpo negro multiplicados por alguna emisividad propia del proceso. Entonces se podría decir que cualquier proceso proviene de espectros de cuerpo negro y estudiar la estimación espectral de ellos puede ser el comienzo para optimizar las técnicas.

1.2. Identificación del Problema de recuperación espectral

Un espectro puede ser medido por un instrumento llamado radiómetro que está fabricado de tantos sensores como resolución espectral se necesita. Si se quiere tener información espectral y espacial, se requiere un instrumentos que contengan un arreglo matricial con la tecnología de un radiómetro repetido tantas veces como resolución espacial se necesita, o en su defecto, un sistema mecánico que recorra espacialmente el objetivo de medición, como actualmente es implementado. Por esta razón, este tipo de sistemas tienen un elevado costo y se buscan opciones alternativas con arreglos de baja resolución espectral que utilizan algoritmos, los que a su vez requieren información previa del proceso. Algunos de estos algoritmos requieren tener información espectral de los sensores que se utilizan. Así, surge un nuevo campo de estudio enfocado en los algoritmos y canales que optimicen la recuperación, los que según algunos

autores se logra cuando la forma espectral de los sensores es igual a las bases ortogonales del proceso, calculadas mediante PCA y que lamentablemente no son funciones matemáticas, sino que vectores de datos.

En este trabajo se presenta un modelo de estos vectores bases para diseñar los canales y así conocer exactamente la forma espectral para su fabricación, el cual además ayudará a dar explicación a algunas observaciones que se presentarán a continuación.

1.2.1. Radiación de Cuerpo negro

Un cuerpo negro es un objeto físico ideal que absorbe toda la radiación incidente en él cuando se encuentra en equilibrio termodinámico. Como no refleja ni transmite la radiación, se observa de color negro. Generalmente es usado para calibrar instrumentos ópticos ya que se conoce su fórmula de radiación, la cual fue introducida por Planck y se muestra en la ecuación (1.8) [16]:

$$E_{bb}(\lambda, T) = \frac{C_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1} \left[\frac{W}{nm \ m^2} \right]. \quad (1.8)$$

C_1 y C_2 son la primera y segunda constante de Planck respectivamente, λ es la longitud de onda en metros, y T es la temperatura en grados Kelvin.

En la figura 1.1 se muestran algunas curvas de radianza de cuerpo negro para distintas temperaturas, también llamados espectros de cuerpo negro.

1.2.2. Observación General

Luego de un análisis [6] de las bases usadas en recuperaciones de espectros continuos (es decir sin bandas de emisión/absorción), y calculadas con la técnica PCA, se nota que el primer componente es siempre positivo, nunca cruza el eje de las abscisas, y después de alcanzar su máximo, es decreciente hasta llegar casi a cero. Además, la forma espectral del primer componente sigue la forma de los espectros de cuerpo negro. Luego, el segundo componente tiene una raíz en el eje de las abscisas, y el tercer componente tiene dos, hasta llegar a la conclusión que el i -ésimo componente cruza el eje de las abscisas $(i - 1)$ veces.

Para observar mejor esto, se procede a simular 1001 espectros generados por un cuerpo negro

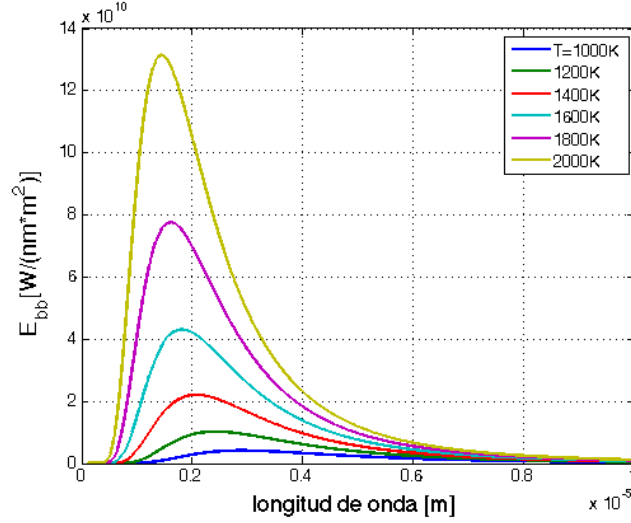


Fig. 1.1: Curvas de E_{bb} en rango de $0,1[\mu m] - 10[\mu m]$.

a partir de la ecuación de Planck para 1001 temperaturas distintas. Se ordenan estos espectros muestreados a 869 longitudes de ondas en una Matriz de Entrenamiento \mathbf{M} de 1001×869 . Algunos de los espectros generados se muestran en la figura 1.2(a).

A esta matriz \mathbf{M} se le calculan los componentes principales a través de la matriz de Covarianza los cuales se muestran en las figuras 1.3(a) y 1.3(b).

Efectivamente se nota el comportamiento previsto de los cruces por eje horizontal, donde el i -ésimo componente tiene $(i - 1)$ raíces en el eje de las abscisas.

De manera adicional se graficaron los componentes en el dominio $\frac{1}{\lambda}$ mostrados en la figura 1.2(b) donde se pudieron hacer otras observaciones.

Se puede notar que los primeros componentes tienen máximos de menor valor. Si se graficaran los máximos de los componentes, se tendría una recta creciente. Además, las últimas raíces en el eje de las abscisas de cada componente parecieran estar equidistantes, lo que permite intuir que éstas curvas están siendo originadas por una función generadora. De aquí nace la idea de modelarlos matemáticamente, para luego utilizarlos en métodos de estimación espectral. Dos de ellos serán puestos a prueba con las funciones modelo: Maloney-Wandell y el método de canales óptimos de Arias y Sbárbaro [5].

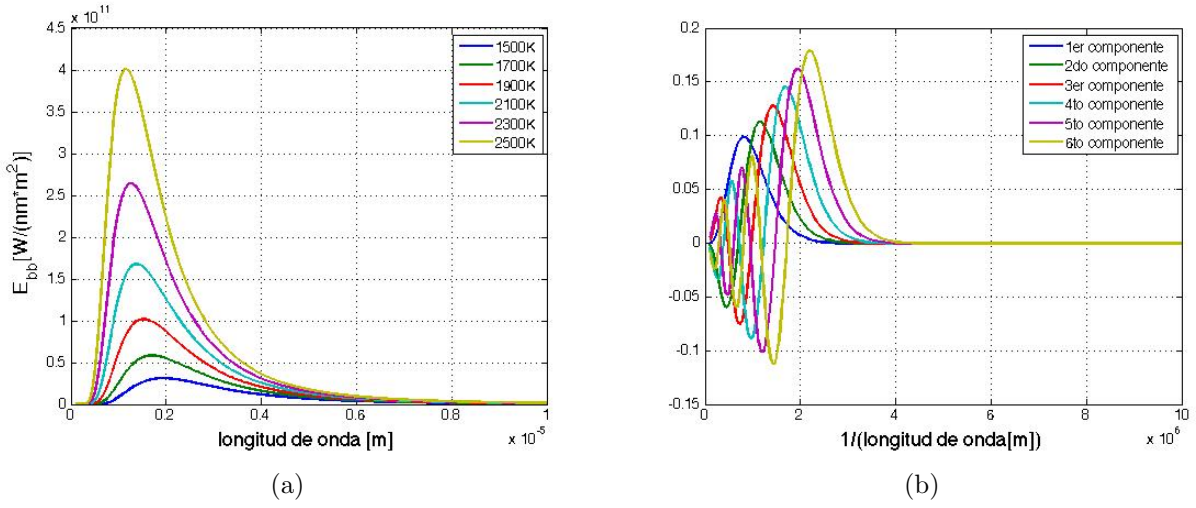


Fig. 1.2: (a) Algunos espectros de cuerpo negro de \mathbf{M} . (b) Primer al sexto componente principal de \mathbf{M} con dominio $\frac{1}{\lambda}$.

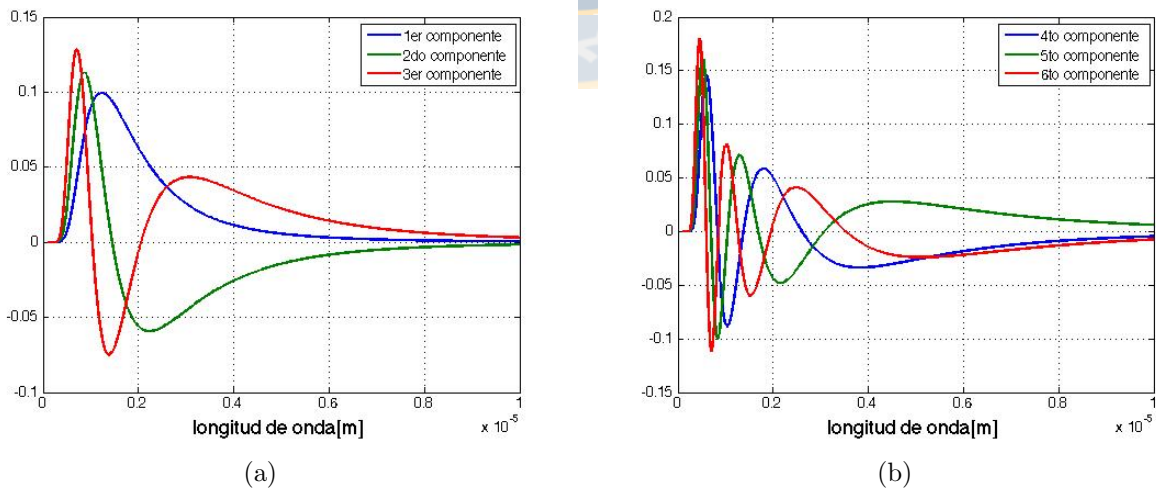


Fig. 1.3: Primeros seis componentes principales de \mathbf{M} . (a) 1er, 2do y 3er componente. (b) 4to, 5to y 6to componente.

1.2.3. Soluciones Actuales

Existen varios métodos de estimaciones espectrales, siendo los más populares el de Maloney-Wandell, Imai-Berns, Shi-Healey y el Método de Estimación Wiener. Todos ellos requieren tener conocimiento previo de espectros de entrenamientos definidos en una matriz de entrenamiento.

A continuación la tabla comparativa 1.1 [1] muestra los requerimientos y desventajas de los métodos nombrados.

Tabla 1.1: Requerimientos y desventajas de técnicas de recuperación espectral.

Método	Requerimientos	Desventajas
Maloney-Wandell	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de entrenamiento. - Sensibilidad espectral de los sensores. - Bases lineales. 	- Mapeo no-único si se usan más vectores propios que sensores.
Imai-Berns	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de entrenamiento. - Bases lineales. 	- Mapeo no-único si se usan mas vectores propios que sensores.
Shi-Healey	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de entrenamiento. - Modelos de mayor dimensión. - Conocer la sensibilidad espectral de la cámara. 	- Algoritmo lento por la búsqueda del mínimo entre la respuesta estimada y los espectros de entrenamiento.
Método de Estimación Wiener	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de entrenamiento. 	- Matriz de estimación sensible al ruido.
Método Arias-Sbárbaro	<ul style="list-style-type: none"> - Sensibilidades Espectrales (descompuestas de vectores ortogonales) 	- Sensible a la forma de los canales.

El método de Shi-Healey y de estimación de Wiener no serán considerados en las simulaciones debido a que este trabajo desarrolla funciones bases, y estos métodos no las utilizan.

1.2.4. Soluciones Propuestas

Expansión de ecuación de Planck

Al encontrar un set de funciones que cumplan esta condición de ortogonalidad y que sean base del proceso, se podría obtener cualquier espectro de la matriz de entrenamiento si se aplica una expansión lineal, donde un espectro $\hat{\mathbf{E}}(\lambda)$ será reconstruido al sumar un número determinado (idealmente infinito) de funciones ortogonales $\phi_n(\lambda)$, cada una con su coeficiente de peso correspondiente c_n como se muestra a continuación,

$$\widehat{\mathbf{E}}(\lambda) = c_0 \cdot \phi_0(\lambda) + c_1 \cdot \phi_1(\lambda) + \dots + c_n \cdot \phi_n(\lambda) + \dots \quad (1.9)$$

Al multiplicar la ecuación (3.17) por $\phi_m(\lambda)$ e integrar en el intervalo $[a, b]$ se obtiene,

$$\int_a^b \widehat{\mathbf{E}}(\lambda) \cdot \phi_m(\lambda) \cdot d\lambda = c_0 \cdot \int_a^b \phi_0(\lambda) \cdot \phi_m(\lambda) \cdot d\lambda + c_1 \cdot \int_a^b \phi_1(\lambda) \cdot \phi_m(\lambda) \cdot d\lambda + \dots + c_n \cdot \int_a^b \phi_n(\lambda) \cdot \phi_m(\lambda) \cdot d\lambda + \dots \quad (1.10)$$

Si se define el producto $\langle f_1, f_2 \rangle$ punto entre dos funciones f_1 y f_2 definidas sobre un intervalo $[a, b]$ como,

$$\langle f_1, f_2 \rangle = \int_a^b f_1(x) f_2(x) dx \quad (1.11)$$

entonces podemos escribir la ecuación (3.13) como,

$$\int_a^b \widehat{\mathbf{E}}(\lambda) \cdot \phi_m(\lambda) \cdot d\lambda = c_0 \cdot \langle \phi_0, \phi_m \rangle + c_1 \cdot \langle \phi_1, \phi_m \rangle + \dots + c_n \cdot \langle \phi_n, \phi_m \rangle + \dots \quad (1.12)$$

Se tiene que todos los términos de producto punto se hacen cero excepto para $m = n$, por lo que se tendría,

$$\int_a^b \widehat{\mathbf{E}}(\lambda) \cdot \phi_n(\lambda) \cdot d\lambda = c_n \cdot \int_a^b \phi_n^2(\lambda) \cdot d\lambda \quad (1.13)$$

Despejando el coeficiente de peso, se obtendría que,

$$c_n = \frac{\int_a^b \widehat{\mathbf{E}}(\lambda) \cdot \phi_n(\lambda) \cdot d\lambda}{\|\phi_n\|^2} \quad (1.14)$$

Por lo tanto, se podría expandir un espectro $\widehat{\mathbf{E}}$ como la siguiente sumatoria,

$$\hat{\mathbf{E}}(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \phi_n(\lambda) \quad (1.15)$$

donde

$$c_n = \frac{\langle \hat{\mathbf{E}}(\lambda), \phi_n(\lambda) \rangle}{\|\phi_n\|^2} \quad (1.16)$$

es la respuesta para el canal n .

Nuevo algoritmo propuesto

Este estudio dio lugar a un nuevo algoritmo para estimar espectros usando los mismos canales ópticos óptimos propuestos por Arias-Sbárbaro. Al comparar las métricas de calidad, se puede observar una mejora incluso mejor que la definida anteriormente como teórica ideal. Este algoritmo será explicado más adelante en la sección 4.5 de este documento.

1.2.5. Interrogantes Planteadas

Insertos en el estudio del problema de recuperación espectral, existen algunas interrogantes que al tratar de responderlas, podrían dar luces a una solución que optimice los métodos hoy utilizados. ¿Es posible explicar porqué el primer componente principal de espectros de cuerpo negro es siempre positivo y porqué los demás siguen un comportamiento polinomial? ¿Se puede encontrar un significado físico al comportamiento de estas bases (componentes principales)? Por último, respecto al número de canales ópticos que resultan de aplicar el método propuesto por L. Arias y D. Sbárbaro [5] ¿Será posible modelarlo en una expresión matemática? Frente a esta última interrogante, ya existe un modelo matemático propuesto por los mismos autores.

1.3. Hipótesis

Es posible modelar los Componentes Principales de espectros de cuerpo negro a partir de funciones ortogonales, de modo que puedan ser aplicadas en técnicas de recuperación espectral de

cuerpos reales. Las funciones encontradas serán modelos de bases para espectros de cuerpo negro. Debido a que los procesos grises proceden de los espectros de cuerpo negro, el modelo también podría asociarse a ellos. Además, este modelo puede ayudar a comprender y dar explicación a algunas observaciones particulares que se dan en espectros de cuerpos grises, como por ejemplo el comportamiento polinomial.

Al modelar con funciones ortogonales predefinidas, las funciones encontradas no necesariamente deben ser exactamente iguales a las originales, dándole prioridad a la ortogonalidad. Estas funciones además podrán ser usadas para diseñar filtros ópticos que optimicen el proceso de recuperación espectral.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivos generales

Obtener una función matemática que modele los Componentes Principales de los espectros generados por la ecuación de Planck para radiación de cuerpos negros, los que posteriormente serán usados para identificar con precisión las formas espectrales de filtros ópticos óptimos de acuerdo a métodos de recuperación espectral modernos. Todo esto con el fin de optimizar las soluciones existentes al problema de recuperación espectral. Además, estas funciones ayudarán a dar explicación a algunos fenómenos particulares de los vectores bases ortogonales de estos espectros las que se esperan encontrar en este trabajo.

1.4.2. Objetivos específicos

- Desarrollar un modelo matemático de los Componentes Principales de espectros de cuerpo negro con funciones ortogonales.
- Desarrollar un modelo alternativo con ortogonalidad en dominio finito.
- Analizar el comportamiento espectral de los componentes principales.
- Expandir la ecuación de Planck en series de éstas funciones encontradas, a modo de realizar una recuperación espectral sumando algunas funciones base.

- Encontrar un significado físico al comportamiento de estas bases (componentes principales).
- Modelar en una expresión matemática el número de canales ópticos que resultan de aplicar el método propuesto por L. Arias y D. Sbarbaro [5] al utilizar un número determinado de vectores bases.
- Encontrar en este estudio alguna aplicación para optimizar la solución al problema de recuperación espectral.

1.5. Propuesta de Publicación

El paper se encuentra en etapa de redacción y se propone el título, “A new method based on Principal Components Analysis for spectral recovery” a ser presentado en la revista Appl. Opt. (Optical Society of America).

1.6. Metodología

La metodología está dada por las siguientes etapas:

- Revisión teórica.
 - Estado del arte, revisión bibliográfica e investigación en trabajos previos.
 - Estudio y análisis de la literatura encontrada.
- Observaciones de interés.
- Modelamiento matemáticos.
 - Búsqueda de funciones que se asemejen a los componentes.
 - Optimización para maximizar la similitud.
 - Búsqueda de funciones ortogonales en dominio finito.
 - Fórmula matemática del número de canales óptimos para un determinado número de funciones base.

- Interpretaciones teóricas
 - Explicaciones de observaciones de la forma espectral del primer componente.
 - Explicaciones de observaciones del comportamiento polinomial de los vectores bases.
 - Expansión de la ecuación de Planck en estas funciones.
- Desarrollo de nuevo algoritmo de recuperación espectral
 - Desarrollo matemático
 - Comparación distintos métodos de recuperación espectral modernos.
 - Análisis de ruido
- Aplicación de las funciones
 - Simulaciones con distintos métodos de recuperación espectral modernos.
 - Análisis de similitud con distintas métricas.
 - Expansión de la ecuación de Planck en estas funciones.
- Conclusiones finales.

1.7. Alcances y limitaciones

- El alcance de la tesis solo considera el desarrollo teórico del modelo y no lo práctico, respecto a la construcción de los filtros.
- Las simulaciones durante la investigación así como el cálculo de los Componentes Principales y la recuperación espectral serán realizadas en el software Matlab.
- Debido a las propiedades de espectros de cuerpo negro, las conclusiones respecto a ellos, podrían ser válidas para procesos grises de los cuales se midan espectros continuos.
- Las simulaciones están realizadas en el dominio espectral NIR y visible, por lo que ciertas hipótesis sólo son válidas en esa banda. Aun no se prueban para otras bandas espectrales.

Capítulo 2

Discusión Bibliográfica

2.1. Revisión Bibliográfica

Antes de realizar el estudio de las características espectrales de los Componentes Principales y su modelamiento, se realizó una revisión bibliográfica en PCA, y se estudiaron diversas aplicaciones para extrapolarla en el problema de interés [9]. Se define que estos componentes son proyecciones de una base ortogonal distinta (rotada) a la original. Éstos son obtenidos para representar un set de datos o muestras específicas, que en caso de este trabajo, serán mediciones de espectros de radiación de procesos particulares. Uno de los aspectos tratados más importantes, fue identificar en qué condiciones se puede dar una interpretación práctica en el problema al cual se aplica PCA y en cuales no. Básicamente los pesos de cada uno de ellos indicarán correlación entre alguna de las variables del cual depende el set de datos [10]; esta correlación entre variables se puede observar de mejor manera a través de una representación Biplot (representación gráfica de la correlación de los componentes principales) [11]. Con el fin de identificar el motivo de la forma particular de estos vectores, se hizo un análisis profundo en la forma en el que éstos son calculados, encontrando diversas maneras para obtenerlos. Dentro de las ellas, una de las más amigable es el cálculo con la matriz de correlación de la matriz de muestras, o de forma equivalente usar la matriz de covarianza [12]. La técnica entrega un resultado rápido y simple tanto de los componentes, como de la cantidad de varianza contenida en cada uno de ellos.

Respecto a las formas espectrales de los componentes principales, se encuentra que al usar el valor absoluto de la forma espectral de los componentes principales como canales ópticos

en estimación de espectros, el resultado es óptimo en varias técnicas modernas [5]. Como este trabajo se enfoca en optimizar el problema de recuperación espectral, se realizó una revisión de los métodos más utilizados como la inversa generalizada [2], de smothing [2], de Wiener [2], Maloney-Wandell [4] [3], Imai-Berns [4] [3], Shi-Healey [4] y Arias-Sbárbaro [5], cuyas principales diferencias se presentaron en la tabla 1.1. Luego de este estudio y de considerar las observaciones del comportamiento polinomial de los componentes principales, se comenzó a estudiar algunos polinomios y funciones ortogonales (ya que los PC cumplen con ortogonalidad). Se registran y analizan con detalle las definiciones y condiciones esenciales de cualquier conjunto de funciones ortogonales, se detalla el producto interno generalizado con funciones de peso para verificar ortogonalidad y se indican los pasos a seguir para realizar expansiones de terceras funciones con las ortogonales [13]. En el trabajo de memoria de título previo a esta tesis [6], se desarrolla un modelo matemático para los componentes principales de espectros de cuerpo negro, los cuales cumplen con características como ortogonalidad e incluso ortonormalidad, debido a que la norma es conocida. Estas funciones son utilizadas para el diseño de filtros óptimos que optimizan la recuperación espectral, obteniendo buenos resultados en algoritmos como Maloney-Wandell. Estas funciones son ortogonales en el intervalo infinito positivo, lo que imposibilita buenos resultados en algoritmos como el propuesto por los profesores L. Arias y D. Sbárbaro [5]. A partir de esta observación, se estudiará el comportamiento de las funciones cuando se utilizan en expansiones lineales.

Debido a que los espectros de cuerpo negro provienen de la ecuación de Planck, se estudió una expansión de una función exponencial en series de polinomios de Laguerre y algunas aplicaciones de ésta [14]. Esta expresión matemática se hace interesante debido a que los polinomios de Laguerre tienen cierta similitud con los componentes principales de espectros reales de emisión, los cuales a su vez son derivados de la emisión de un cuerpo negro. Por último, dentro de la búsqueda de funciones ortogonales que se asimilen a los componentes de interés, se investiga acerca métodos de integración numérica donde suelen ser utilizados polinomios ortogonales para resultados numéricos más precisos. Dependiendo del método, se asignan diferentes funciones de peso, donde se presentan la de Gauss-Legendre, Gauss-Chebyshev, Gauss-Laguerre y Gauss-Hermite [15]. Estas funciones de peso también pueden ser utilizadas para demostrar la ortogonalidad de un set de funciones.

Luego de hacer la revisión bibliográfica respecto al tema de análisis de Componentes Principales y recopilar información de cómo se calculan y cómo se interpretan, se distingue que existen un par de trabajos que hace referencia a observaciones respecto a la forma espectral, indicando una relación entre el número de componente principal y la cantidad de cortes de

éste por el eje de las abscisas, sin embargo solo se ha hecho la observación de aquello sin darle un fundamento ni una explicación concreta, ya que solo se dan algunas luces que se refieren al cálculo de los componentes. Debido a que se observa un comportamiento polinomial en los componentes (cuando se habla de n -ésimas raíces para el componente $n-1$), se revisaron fundamentos teóricos de polinomios ortogonales. Respecto a encontrar algún modelo para el número de canales que se generan con n funciones bases, existe una fórmula propuesta que se adapta para espectros reales continuos. Finalmente se utilizará el modelo matemático de las formas de estos componentes, para evaluar el comportamiento en recuperaciones espectrales con bases modeladas, utilizando algoritmos modernos y reconstruyendo espectros con alguna expansión lineal, debido a la ortogonalidad de las funciones.



Capítulo 3

Fundamentos Teóricos

3.1. Emisividad

Los cuerpos reales no tienen el comportamiento espectral de un cuerpo negro, por lo que parte de la radiación incidente es absorbida, transmitida y reflejada. El proceso de emisión de radiación de un cuerpo para lograr el equilibrio térmico se caracteriza por la emisividad ϵ propia del cuerpo y se define en la ecuación (3.1).

$$\epsilon_{rb}(\lambda, T) = \frac{E_{rb}(\lambda, T)}{E_{bb}(\lambda, T)} \quad (3.1)$$

ϵ_{rb} es la emisividad de un cuerpo real, E_{bb} es la radianza de un cuerpo negro y E_{rb} es la radianza de un cuerpo real. E_{rb} y E_{bb} son obtenidos a la misma temperatura. Como un cuerpo real no es ideal, E_{bb} será mayor a E_{rb} y la emisividad será menor a 1 para cuerpos no negros.

La radianza espectral para cualquier cuerpo real se define como,

$$E_{rb}(\lambda, T) = \epsilon_{rb}(\lambda) E_{bb}(\lambda, T) \quad (3.2)$$

ϵ_{rb} depende de la longitud de onda. Si la emisividad se comporta como una constante, se deduce que el cuerpo emite radiación en la misma forma espectral que un cuerpo negro, definiéndose éstos como cuerpos grises.

3.2. Espectros continuos y discretos - Leyes de espectroscopía de Kirchhoff

Se llama espectro continuo a la curva espectral que no presenta bandas de emisión o absorción. Según Kirchhoff [17], es posible determinar físicamente cuándo estamos en presencia de espectros continuos o discretos. Las leyes pueden enunciarse de la siguiente forma:

1. Un sólido o un líquido (o un gas muy denso) incandescente, produce siempre un espectro continuo.
2. Un gas incandescente produce un espectro de líneas brillantes de emisión, sin parte continua.
3. Un espectro continuo cuando pasa a través de un gas se transforma en un espectro con líneas oscuras (de absorción).
4. Las posiciones de las líneas tanto de emisión como de absorción son características de la constitución química de la materia que las produce. Cada elemento y cada compuesto tiene sus líneas características. Los elementos absorben o emiten luz sólo de ciertas longitudes de onda. En consecuencia el estudio de un espectro permite la identificación de los elementos químicos que lo produjeron.

Si bien, cada vez que medimos un espectro, lo volvemos discreto (por muestreo), para efectos prácticos, hablaremos de espectro continuo cuando nos refiramos a un vector que represente el muestreo de un espectro continuo real.

3.3. Análisis de Componentes Principales

3.3.1. Definición

PCA es una técnica estadística que permite proyectar un set de datos multivariable en un nuevo sistema de referencia. Estos ejes estarán ordenados de tal forma que la distribución de la información (variabilidad de los datos) será máxima en el primer eje e irá decreciendo hasta

llegar a tal punto que ciertos ejes no tendrán varianza, y por ende se podrían despreciar. Así, en otras palabras, se disminuiría el número de variables de un problema.

Matemáticamente, PCA es una transformación lineal que permite distribuir datos en un sistema de referencia “conveniente” para la reducción de su dimensión. En efecto, si se tiene un set de datos bidimensional que depende de \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 , se pueden rotar los ejes hasta obtener \mathbf{y}_1 e \mathbf{y}_2 de modo que estas nuevas variables, son combinaciones lineales de las dos primeras, como se muestra en las ecuaciones 3.3 y 3.4.

$$\mathbf{y}_1 = a_{11}\mathbf{x}_1 + a_{12}\mathbf{x}_2 \quad (3.3)$$

$$\mathbf{y}_2 = a_{21}\mathbf{x}_1 + a_{22}\mathbf{x}_2 \quad (3.4)$$

Los coeficientes a_{11} y a_{12} conforman un vector componente; a_{21} y a_{22} son otro vector componente. Dependiendo de la cantidad de varianza de cada uno de ellos, se les llamará primer y segundo componente principal. Luego, si se tienen d variables $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_d$, el nuevo sistema de referencia $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_d$ podrá ser representado de la forma mostrada en la ecuación (3.5).

$$\mathbf{y}_1 = a_{11}\mathbf{x}_1 + a_{12}\mathbf{x}_2 + \dots + a_{1d}\mathbf{x}_d \quad (3.5)$$

$$\mathbf{y}_2 = a_{21}\mathbf{x}_1 + a_{22}\mathbf{x}_2 + \dots + a_{2d}\mathbf{x}_d \quad (3.6)$$

⋮

$$\mathbf{y}_d = a_{d1}\mathbf{x}_1 + a_{d2}\mathbf{x}_2 + \dots + a_{dd}\mathbf{x}_d \quad (3.7)$$

3.3.2. Cálculo de Componentes Principales

Existen diferentes formas de cálculo de Componentes Principales, dando espacio a una serie de posibles hipótesis al problema de identificar las características espectrales de ellos. Dentro de ellos está el cálculo de autovectores y el método SVD. Ambos pueden trabajar sobre la matriz de Correlación \mathbf{R} o sobre la matriz de Covarianza \mathbf{C} , es decir, con y sin estandarización.

Para ambos métodos se necesita una matriz de datos a la cual aplicar PCA. A ésta se llamará Matriz de Entrenamiento $\mathbf{M}_{m \times n}$ que contiene n muestras que dependen de m variables.

La construcción de la matriz de Correlación $\mathbf{R}_{m \times m}$ se define en la ecuación (3.8).

$$\mathbf{R} = [r_{ij}] = \frac{cov(\mathbf{M}_i, \mathbf{M}_j)}{\sqrt{var(\mathbf{M}_i)var(\mathbf{M}_j)}} \quad (3.8)$$

$$\text{con } i=1,2,\dots,m \quad j=1,2,\dots,m$$

Donde \mathbf{M}_i es la i -ésima columna de la Matriz de Entrenamiento. El cálculo con la matriz de Correlación equivale a obtener componentes con variables estandarizadas, ya que la Correlación es normalizada por las desviaciones estándar, como se muestra en la ecuación (3.8).

Se muestra ahora cómo construir la matriz de Covarianza $\mathbf{C}_{m \times m}$ definida en la ecuación (3.9).

$$\mathbf{C} = [c_{ij}] = cov(\mathbf{M}_i, \mathbf{M}_j) \quad (3.9)$$

$$\text{con } i=1,2,\dots,m \quad j=1,2,\dots,m$$

En este caso, no se tendrían componentes principales estandarizados.

Cálculo de autovectores: Esta forma consiste en calcular los valores propios de la matriz \mathbf{C} (o \mathbf{R} si se quieren obtener vectores estandarizados) [12] de la forma típica mostrada en la ecuación (3.10).

$$\det(\mathbf{C} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad (3.10)$$

Y posteriormente calcular los vectores propios \mathbf{v}_i correspondientes a cada valor propio λ_i solucionando el sistema de ecuaciones representado en forma matricial en la ecuación (3.11).

$$(\mathbf{C} - \lambda_i \mathbf{I}) \cdot \mathbf{v}_i = 0 \quad (3.11)$$

$$\text{con } i=1,2,\dots,m$$

Estos m autovectores son los componentes, y aquellos que tengan mayor cantidad de información se les llama Componentes Principales. La cantidad de varianza es directamente proporcional al valor propio correspondiente, y se puede calcular su porcentaje sumando todos los valores propios que representan el 100% de la varianza. Esto quiere decir que los m vectores

propios forman una base de la Matriz de Entrenamiento tal que los principales tienen la mayor información y por ende se tendría una buena representación de las muestras sólo con ellos. De manera análoga se puede obtener Componentes Principales con la Matriz de Correlación los cuales serían estandarizados.¹

Cálculo con SVD: La segunda forma de calcularlos se realiza con descomposición en valores singulares SVD [9] a una matriz como \mathbf{C} o \mathbf{R} , donde se factoriza en 3 matrices: Una matriz diagonal \mathbf{S} y dos matrices unitarias \mathbf{U} y \mathbf{V} , de modo que se cumple,

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^t \quad (3.12)$$

En la diagonal de \mathbf{S} se encontrarán los valores propios de \mathbf{C} y en las columnas de \mathbf{V} se encontrarán los vectores propios, es decir los Componentes Principales. El análisis de varianza es el mismo que en el caso de cálculo de vectores propios.²

3.4. Funciones Ortogonales

3.4.1. Producto interno y ortogonalidad

Se dice que dos funciones son ortogonales si su producto interno es cero, es decir si,

$$\langle f_1, f_2 \rangle = \int_a^b f_1(x)f_2(x)dx = 0 \quad (3.13)$$

3.4.2. Conjunto ortogonal

Se dice que un conjunto de funciones reales $\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots\}$ es ortogonal en un intervalo $[a, b]$ si [13],

¹Nota: El comando 'princomp()' o 'pca()' en Matlab obtiene por defecto componentes no estandarizados. Si se quisiera lo contrario, habría que previamente estandarizar la matriz de entrenamiento con el comando 'zscore()'. Además ambos comandos utilizan descomposición SVD por defecto, pero también se pueden cambiar parámetros para usar el cálculo de vectores propios con 'eig'.

²En Matlab se puede realizar descomposición en valores singulares con el comando 'svd()'.

$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle = \int_a^b \phi_m(x)\phi_n(x)dx = 0 \quad (3.14)$$

para todo $m \neq n$.

3.4.3. Norma y Ortonormalidad

La norma o longitud generalizada $\|\phi_n\|$ de una función ϕ_n puede definirse a partir del producto interno como $\|\phi_n\| = \sqrt{\langle \phi_n, \phi_n \rangle}$ [13], es decir,

$$\|\phi_n\| = \sqrt{\int_a^b \phi_n(x)\phi_n(x)dx} \quad (3.15)$$

Un conjunto $\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots\}$ se dice ortonormal en un intervalo $[a, b]$ si $\|\phi_n\| = 1$ para todo $n = 0, 1, 2, \dots$

3.4.4. Ortogonalidad con función de peso

Se dice que un conjunto de funciones reales $\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots\}$ es ortogonal en un intervalo $[a, b]$ respecto a una función de peso $w(x)$ si [13],

$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle = \int_a^b w(x)\phi_m(x)\phi_n(x)dx = 0 \quad (3.16)$$

para todo $m \neq n$.

3.5. Expansiones en series de funciones ortogonales

Se hace la suposición que al tener una función f , se puede expandir en una sumatoria de funciones ortogonales, multiplicadas por un peso c_n , es decir,

$$f = c_0 \cdot \phi_0(x) + c_1 \cdot \phi_1(x) + \dots + c_n \cdot \phi_n(x) + \dots \quad (3.17)$$

Al multiplicar la ecuación (3.17) por $\phi_m(x)$ e integrar en el intervalo $[a, b]$ se obtiene,

$$\int_a^b f(x) \cdot \phi_m(x) \cdot dx = c_0 \cdot \int_a^b \phi_0(x) \cdot \phi_m(x) \cdot dx + c_1 \cdot \int_a^b \phi_1(x) \cdot \phi_m(x) \cdot dx + \dots + c_n \cdot \int_a^b \phi_n(x) \cdot \phi_m(x) \cdot dx + \dots \quad (3.18)$$

o de otra manera,

$$\int_a^b f(x) \cdot \phi_m(x) \cdot dx = c_0 \cdot \langle \phi_0, \phi_m \rangle + c_1 \cdot \langle \phi_1, \phi_m \rangle + \dots + c_n \cdot \langle \phi_n, \phi_m \rangle + \dots \quad (3.19)$$

Se tiene que todos los términos de producto punto se hacen cero excepto para $m = n$, por lo que se tendría,

$$\int_a^b f(x) \cdot \phi_n(x) \cdot dx = c_n \cdot \int_a^b \phi_n^2(x) \cdot dx \quad (3.20)$$

Despejando el coeficiente de peso, se obtendría que,

$$c_n = \frac{\int_a^b f(x) \cdot \phi_n(x) \cdot dx}{\|\phi_n\|^2} \quad (3.21)$$

Por lo tanto, se podría expandir una función f como la siguiente sumatoria,

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \phi_n(x) \quad (3.22)$$

donde

$$c_n = \frac{\langle f(x), \phi_n(x) \rangle}{\|\phi_n\|^2} \quad (3.23)$$

3.6. Polinomios de Laguerre

3.6.1. Definición

Son un conjunto de polinomios ortogonales que solucionan la ecuación diferencial 3.24 [18].

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0 \quad (3.24)$$

Una de las soluciones linealmente independiente para cada n ,

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad (3.25)$$

donde,

$$a_{k+1} = \frac{k-n}{(k+1)^2} a_k \quad (3.26)$$

Se hace notar que para cada coeficiente k mayor a n , a_{k+1} tiene valor cero, entonces $y(x)$ será un polinomio de grado n , también llamado Polinomio de Laguerre de grado n o en su nomenclatura $L_n(x)$ definidos formalmente en la ecuación (3.27).

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad (3.27)$$

La gráfica de los primeros 7 polinomios se muestra en la figura 3.1.

3.6.2. Polinomios asociados de Laguerre

Son un conjunto de polinomios ortogonales que solucionan la ecuación diferencial 3.28 [18].

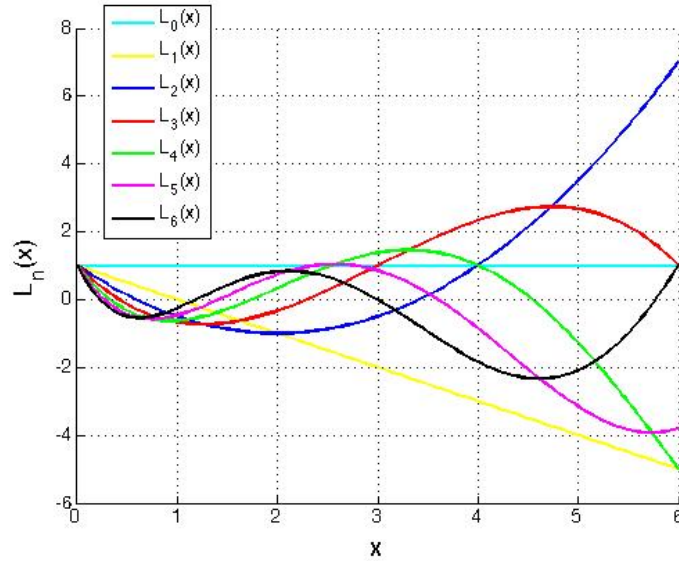


Fig. 3.1: Gráfico de los primeros 7 polinomios de Laguerre.

$$xy'' + (m + 1 - x)y' + (n - m)y = 0 \quad (3.28)$$

Se denotan como $L_n^m(x)$ y pueden generarse a partir de los Polinomios de Laguerre de la siguiente forma para $m < n$,

$$L_n^m(x) = \frac{1}{n!} \frac{d^m}{dx^m} L_n(x) \quad (3.29)$$

Se observa que para $m > n$, se tiene un polinomio nulo.

A continuación se muestra una gráfica con los primeros 5 polinomios de Laguerre para distintos valores de m .³

Se hace notar que a medida que se aumenta m , el polinomio comienza ($x = 0$) con un valor mayor y pareciera ir extendiéndose a lo largo del eje x .

³A medida que se aumentaba el valor de m , se fue aumentando el dominio x a modo de observar las raíces de hasta el último polinomio.

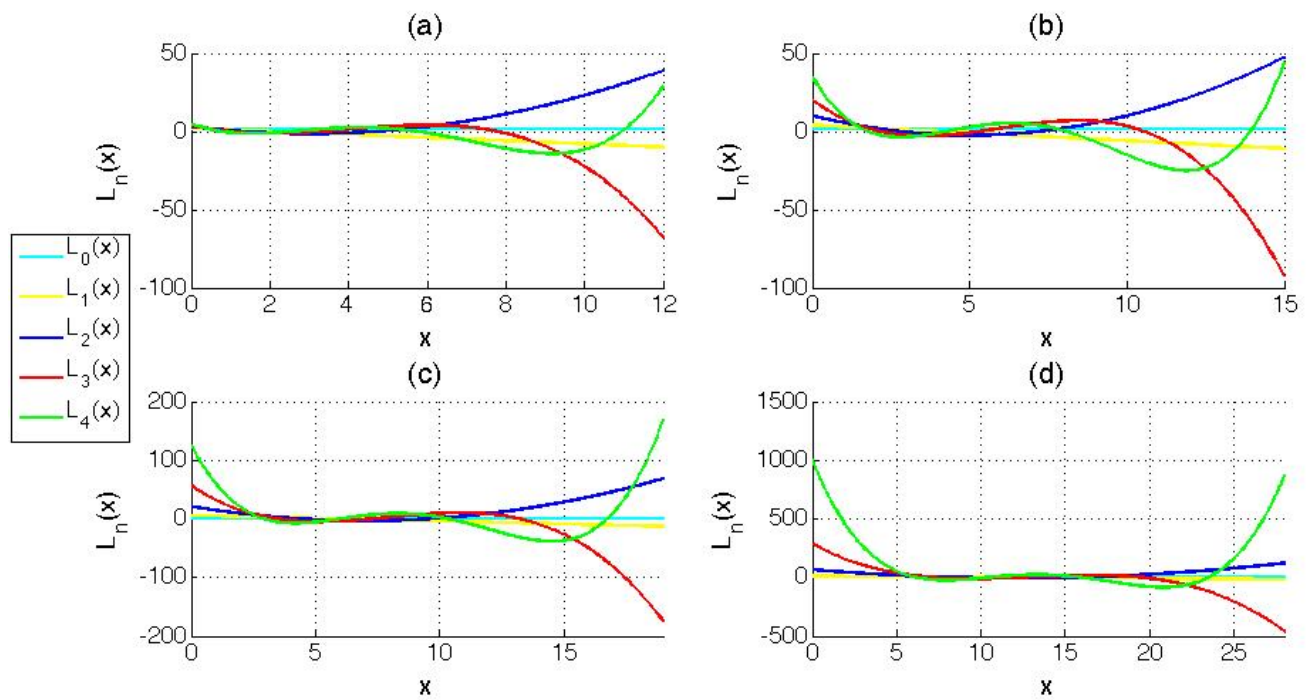


Fig. 3.2: Gráfico de los primeros 7 polinomios asociados de Laguerre.

(a) Con $m=1$ y eje x en el intervalo $[0\ 12]$. (b) Con $m=3$ y eje x en el intervalo $[0\ 15]$. (c) Con $m=5$ y eje x en el intervalo $[0\ 19]$. (d) Con $m=10$ y eje x en el intervalo $[0\ 28]$.

Capítulo 4

Resultados

A continuación se presentan ciertas respuestas a las hipótesis que resultaron del estudio de los componentes principales de espectros de cuerpo negro. Estas hipótesis son fundadas en observaciones y simulaciones que serán presentadas a continuación.

4.1. Primer componente principal siempre positivo

Se ha hecho la observación, que para todas las muestras (Matrices de Entrenamiento) de espectros, el primer componente principal es siempre positivo. La explicación para esta observación viene de la física de los espectros y de la definición de PCA.

Se sabe que un espectro, ya sea de emisión, absorción, transmisión o reflexión, por definición física es siempre mayor o igual a cero. Esto debido a que la intensidad $I(r)$ de cada uno de ellos, es definido como el cuadrado de la función radial de onda $U(r)$ emitida, absorbida, transmitida o reflejada respectivamente [16], donde r es la distancia desde el origen.

$$I(r) = |U(r)|^2 \tag{4.1}$$

El primer componente principal de una base de datos que depende de n variables X_1, X_2, \dots, X_n , es representado por el vector de la media de todas las muestras para cada variable $[\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_n]$. En procesos como matrices de entrenamiento de espectros ópticos, las variables serán las longitudes de onda, y como cada variable tendrá asociado sólo valores positivos (de intensidad), se

explica que el primer componente también será espectralmente mayor a cero.

4.2. Comportamiento polinomial de los componentes principales

Desde ahora en adelante, cuando se mencione “comportamiento polinomial”, se estará refiriendo a que el i -ésimo vector principal, tiene $i-1$ cruces por el eje de las abscisas.

Posteriormente comenzó a estudiarse la forma de la matriz de Correlación \mathbf{R} que hace que sus vectores propios tengan este comportamiento. Se sabe que la matriz es simétrica y definida positiva como toda matriz de Correlación, pero esto es así para cualquier tipo de Matriz de Entrenamiento. En seguida se observó de que la matriz \mathbf{R} tiene su primer fila y por lo tanto su primera columna decreciente como se muestra en la figura 4.1 (a), así como su última fila, y por lo tanto su última columna creciente como se muestra en la figura 4.1 (b). Después de analizar la matriz de correlación y de considerar las observaciones en el comportamiento de sus filas y columnas, se llega a la conclusión de que la forma de la matriz \mathbf{R} de espectros de un cuerpo negro es de la siguiente forma,

$$\mathbf{R} = \begin{matrix} & \text{decreciente} & & \\ \text{decreciente} & \begin{pmatrix} 1 & \dots & \cdot \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdot & \dots & 1 \end{pmatrix} & \text{creciente} \\ & \text{creciente} & & \end{matrix} \quad (4.2)$$

o puede representarse como la suma de dos matrices triangulares con diagonales unitarias, menos la matriz identidad, es decir,

$$\mathbf{R} = \mathbf{A} + \mathbf{B} - \mathbf{I} \quad (4.3)$$

donde \mathbf{A} es una matriz triangular superior con la diagonal unitaria, con sus filas decrecientes y sus columnas crecientes como se muestra en la ecuación (4.4), y \mathbf{B} es una matriz triangular inferior con la diagonal unitaria, sus filas crecientes y sus columnas decrecientes como se muestra en la ecuación (4.5).

$$\mathbf{A} = \begin{matrix} & \text{decreciente} \\ \begin{pmatrix} 1 & \dots & \cdot \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} & \text{creciente} \end{matrix} \quad (4.4)$$

$$\mathbf{B} = \begin{matrix} \text{decreciente} \\ \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdot & \dots & 1 \end{pmatrix} \\ \text{creciente} \end{matrix} \quad (4.5)$$

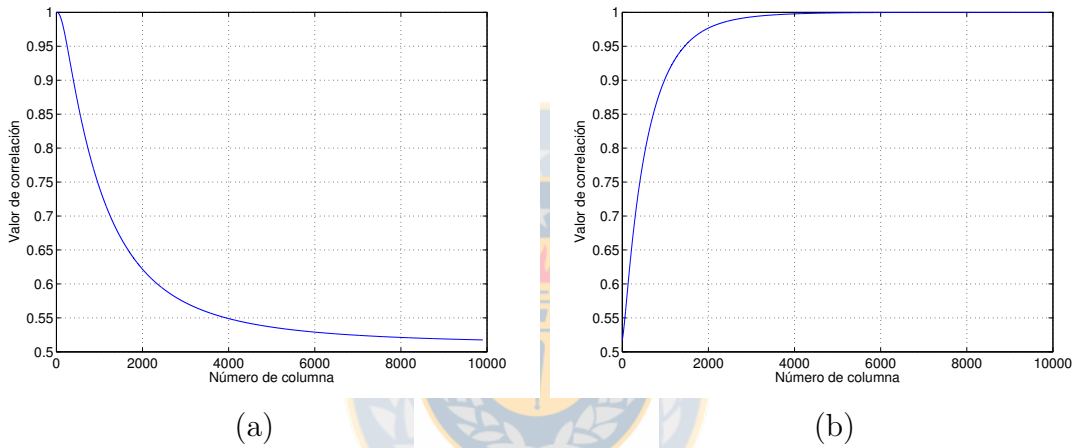


Fig. 4.1: Curvas de matriz de correlación. (a) Primera fila. (b) Última fila.

Se fabricaron matrices del tipo 4.2, y se observa el mismo comportamiento de cruces por el eje de las abscisas de los procesos de estudio. Se cree entonces que está en la forma de correlación de los espectros lo que hace los cortes en el eje de la forma observada, sin embargo, en la revisión bibliográfica no se encontró nada acerca de formas de vectores propios de matrices simétricas y/o definidas positivas. Los componentes calculados con la matriz de covarianza parecieran seguir formas similares con decaimientos hacia el eje horizontal, siendo del tipo mostrado en la ecuación (4.2) pero sin estandarización, es decir, la diagonal no será de unos, sino de las varianzas.

4.3. Significado físico al comportamiento polinomial de los componentes principales

Como se mencionó, empíricamente se obtiene la hipótesis de que el comportamiento polinomial de los componentes principales provienen de la forma de la matriz de correlación. La nueva pregunta es determinar porqué la matriz de correlación (de matrices de entrenamiento de espectros) tiene esa forma particular.

Recordamos que la matriz de correlación está definida como:

$$\mathbf{R} = [r_{ij}] = \left[\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_i \sigma_j} \right], \quad (4.6)$$

donde σ_{ij} es la covarianza entre las columnas i y j , σ_i es la desviación típica de la columna i y σ_j es la desviación típica de la columna j .

Por lo tanto, que la primera fila (y por simetría la primera columna) de la matriz de correlación sea descendente, nos indica que existe una fuerte correlación entre columnas adyacentes, y a medida que se alejan, la correlación disminuye. Esto también se puede inferir del comportamiento ascendente de la última fila (y por simetría la última columna). Gráficamente se puede observar en la figura 4.2, donde la columna marcada con rojo tendrá mayor correlación con la azul, menor con la verde y mucho menor con la amarilla.

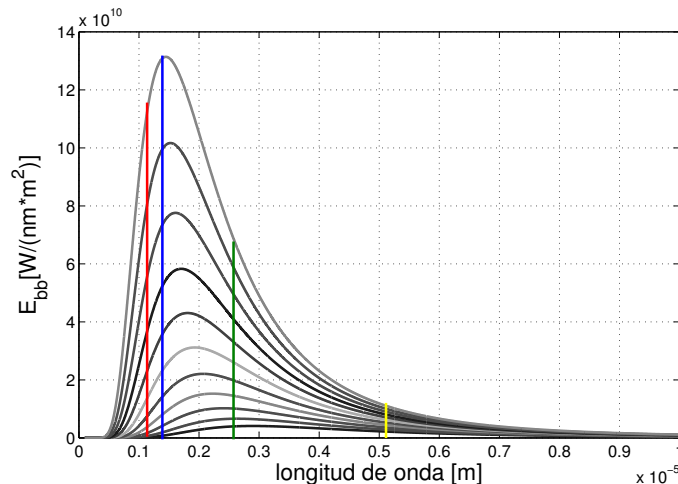


Fig. 4.2: Matriz de entrenamiento de espectros de cuerpo negro, con columnas resaltadas.

Se concluye de esta característica que:

1. Debido a la “continuidad” de los espectros, la correlación de dos columnas adyacentes es cercana a uno, ya que existen leves variaciones entre dos puntos horizontales (correspondientes al mismo espectro).
2. Cuando existe alguna discontinuidad, entonces la correlación de la columna discontinua con cualquiera de sus adyacentes no es cercana a uno.
3. Cuando existe alguna discontinuidad, entonces la correlación de la columna discontinua con cualquier columna de la matriz de entrenamiento es menor en comparación a la correlación de las mismas columnas sin discontinuidad.

La figura 4.3 muestra la misma matriz de entrenamiento pero con una discontinuidad forzada en los $2.1 \mu\text{m}$.

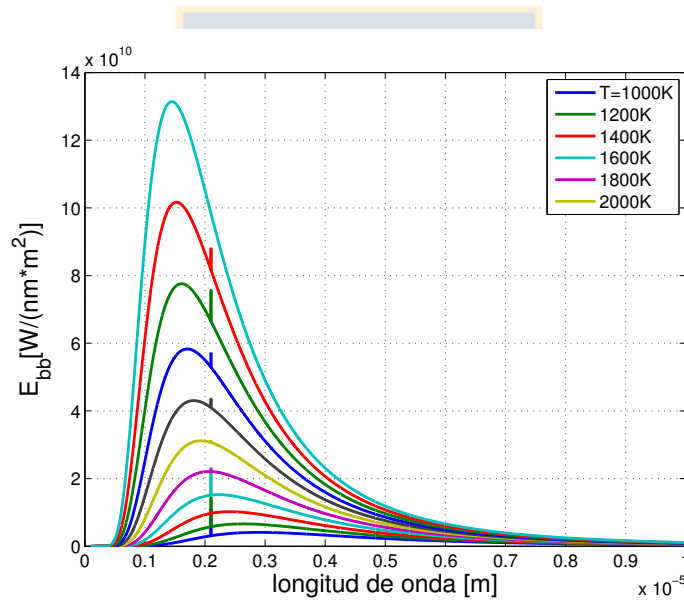


Fig. 4.3: Matriz de entrenamiento de espectros de cuerpo negro, con discontinuidad forzada.

Luego al observar la primera fila y la última columna de la matriz de correlaciones en la figura 4.4 (a) y (b) respectivamente, se puede observar claramente, que no se sigue el comportamiento común en la columna afectada por la discontinuidad, tal como se explica en la hipótesis 3. Y al observar los componentes principales de la figura 4.5, también se nota una discontinuidad en el mismo punto.

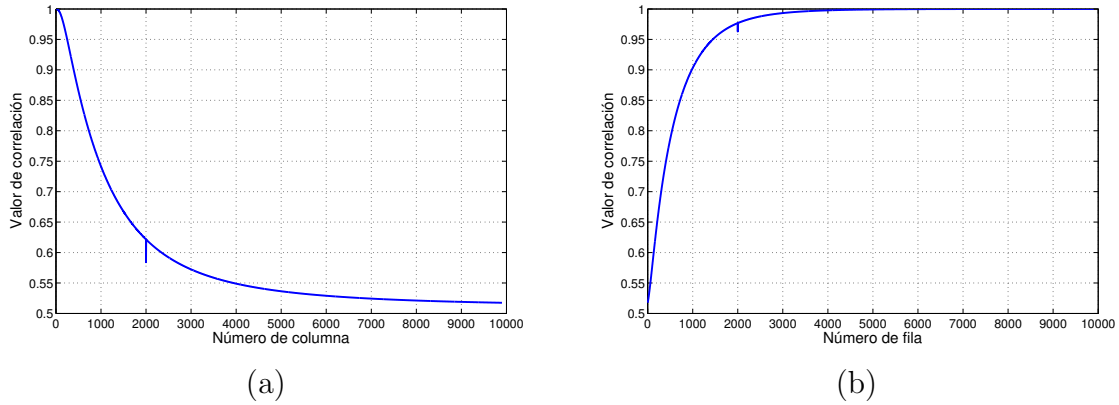


Fig. 4.4: Matriz de correlación. (a) Gráfica de la primera fila. (b) Gráfica de la última columna.

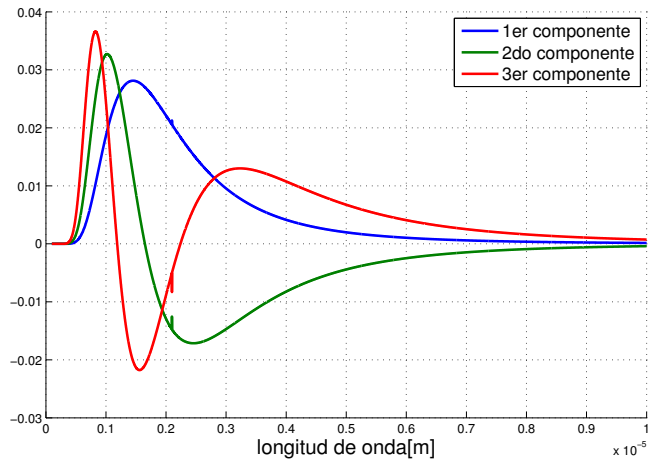


Fig. 4.5: Componentes principales de espectros de cuerpo negro con discontinuidad forzada.

4.4. Modelo matemático exacto de los componentes principales

Inicialmente se encontró un modelo matemático para los componentes principales de espectros de cuerpo negro, deducido de la definición de ortogonalidad de los polinomios asociados de Laguerre. Este modelo es presentado en la sección 4.4 de éste capítulo. Lamentablemente, este conjunto de funciones ortogonales tienen dominio infinito, y los componentes principales tienen un dominio variable, finito. Esto impide modelarlos exactamente con las funciones encontradas ya que habría que ajustar los parámetros cada vez que el dominio cambia, y al momento de acotar el dominio para hacerlo finito, se pierde la ortogonalidad.

Se investigó acerca de polinomios ortogonales que tienen dominio finito, pero los más cercanos fueron los polinomios de Legendre y de Chebyshev con dominio $[-1,1]$ [19]. Si bien se podrían hacer traslaciones y ajustar el dominio, las funciones obtenidas no se parecen a los componentes principales y no dependen de ningún parámetro para ajustarlas.

4.5. Función que Modela el Número de Canales que Genera la Descomposición de los Componentes Principales de Espectros de Cuerpo Negro

Debido a que en el método de canales óptimos propuesto por Arias-Sbárbaro es considerado el valor absoluto de los vectores base, se generan más de un canal para un solo componente. Gracias al comportamiento particular “polinomial”, se puede generar un modelo matemático para conocer el número de canales k que se tendrán con n funciones base.

La fórmula es [5],

$$k = \frac{n(n+1)}{2} \quad (4.7)$$

La ecuación (4.7) se deriva de la fórmula de la suma para una progresión aritmética de Gauss, la cual indica que para sumar los números naturales del 1 al n , basta con sumar los extremos ($1 + n = 2 + n - 1 = 3 + n - 2 \dots$) y multiplicarlos por la mitad del número total n .

Como el i -ésimo componente genera i canales, entonces para saber el número k de canales generados por n vectores bases, basta sumar los números del 1 al n , y por ende aplicar la fórmula de Gauss.

Esta fórmula es válida solo para espectros de cuerpo negro, y para procesos con espectros suaves (“continuos”), ya que al existir líneas o bandas angostas de emisión/absorción, los componentes principales tienden a tener discontinuidades en las mismas bandas de emisión/absorción, provocando más cruces por el eje de las abscisas, y por ende más canales ópticos. Este último punto se puede observar en la figura 4.5, donde los componentes principales tienen discontinuidades en la misma banda espectral donde tienen discontinuidades los espectros de entrenamiento.

4.6. Modelo Matemático de Componentes Principales de Espectros de Cuerpo negro

Se pudo encontrar un modelo a partir de los polinomios asociados de Laguerre cuando se analiza su ortogonalidad. El resumen del modelo se muestra a continuación.

4.6.1. Modelo a partir del análisis de ortogonalidad

Se puede demostrar la ortogonalidad de los polinomios asociados de Laguerre, definiéndose un segundo grupo de funciones ortonormales. En este caso, estos polinomios son ortogonales con función de peso $w(x) = x^m e^{-x}$.

Así, al efectuar el producto interno se tendrá,

$$\langle L_{n_1}^m, L_{n_2}^m \rangle = \int_0^\infty x^m e^{-x} L_{n_1}^m(x) L_{n_2}^m(x) dx = \frac{\Gamma(n+m+1)}{n!} \delta(n_1 - n_2) \quad (4.8)$$

Donde $n = n_1 = n_2$ cuando $n_1 = n_2$.

En consiguiente, funciones ortogonales pueden deducirse si se tienen las siguientes consideraciones,

$$e^{-x} = e^{-\frac{x}{2}} e^{-\frac{x}{2}} \quad (4.9)$$

$$x^m = x^{\frac{m}{2}} x^{\frac{m}{2}} \quad (4.10)$$

$$\frac{\Gamma(n+m+1)}{n!} = \sqrt{\frac{\Gamma(n+m+1)}{n!}} \sqrt{\frac{\Gamma(n+m+1)}{n!}} \quad (4.11)$$

Así, utilizando 4.9, 4.10 y 4.11 en la ecuación (4.8) se tendría que,

$$\int_0^\infty \left(\sqrt{\frac{n_1!}{\Gamma(n_1+m+1)}} x^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{x}{2}} L_{n_1}^m(x) \right) \left(\sqrt{\frac{n_2!}{\Gamma(n_2+m+1)}} x^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{x}{2}} L_{n_2}^m(x) \right) dx = \delta(n_1 - n_2) \quad (4.12)$$

O escrito de otra forma,

$$\int_0^{\infty} \phi_{n_1}(x) \phi_{n_2}(x) dx = \delta(n_1 - n_2) \quad (4.13)$$

donde,

$$\phi_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{n_1!}{\Gamma(n_1 + m + 1)}} x^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{x}{2}} L_{n_1}^m(x) \quad (4.14)$$

$$\phi_{n_2}(x) = \sqrt{\frac{n_2!}{\Gamma(n_2 + m + 1)}} x^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{x}{2}} L_{n_2}^m(x) \quad (4.15)$$

Entonces, de la ecuación (4.13) se deduce un nuevo conjunto de funciones definidas por

$$\left\{ \phi_n(x) = \sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n + m + 1)}} x^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{x}{2}} L_n^m(x) \right\} \text{ con } n \in \mathbb{N}_0 \text{ ortonormales con función de peso}$$

$w(x) = 1$ en el intervalo $[0, \infty)$.

De manera análoga, se puede notar que las funciones definidas en la ecuación (4.16) son ortonormales respecto a la función de peso $w(x) = x^{m-2\nu}$ en el intervalo $[0, \infty)$.

$$\left\{ \phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\mathbf{n}!}{\Gamma(\mathbf{n} + \mathbf{m} + 1)}} \mathbf{x}^{\nu} e^{-\frac{\mathbf{x}}{2}} \mathbf{L}_{\mathbf{n}}^{\mathbf{m}}(\mathbf{x}) \right\} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.16)$$

Son en estas últimas funciones donde se variarán los parámetros m y ν para alcanzar la máxima similitud con los componentes principales de espectros de cuerpo negro.

4.6.2. Búsqueda de parámetros m y ν óptimos

Debido a la no linealidad del grupo de funciones encontradas, no es posible aplicar un método de identificación de parámetros común. Se implementará en cambio algún método de optimización definiendo una función de costo $F(m, \nu)$, siendo en este caso encontrar el óptimo de alguna métrica de calidad como lo es el GFC.

Además de ajustar los parámetros m y ν que dan la forma espectral a las funciones, es

necesario ajustar los parámetros de compresión del eje horizontal y la amplitud óptima de la función. Para simplificar el problema y ya que el factor de compresión puede corregirse modificando los parámetros m y ν , se decidió fijarlo en $c = 4,75 \times 10^6$.

Por otro lado, se optó por buscar m y ν óptimos que asemejen $\{\phi_n(\lambda)\}$ a los componentes con funciones de costo que dependan del GFC, ya que éstos parámetros están ligados a la forma de la función y el GFC es independiente de la amplitud.

En contraparte, para determinar la amplitud óptima se utilizó mínimos cuadrados debido a la linealidad del problema.

Para las primeras tres funciones, las amplitudes que minimizaban el error fueron $a_1 = 0,323$, $a_2 = 0,312$ y $a_3 = 0,293$ considerando los parámetros $m = 6$ y $\nu = \frac{m}{2}$.

4.6.3. Comparación entre componentes principales y funciones optimizadas

Si se consideran todos los parámetros óptimos encontrados, es decir, $a_1 = 0,323$, $a_2 = 0,312$ y $a_3 = 0,293$ para $m = 6$ y $\nu = \frac{m}{2}$ se puede observar en la figura 4.6 los primeros tres componentes principales y las primeras tres funciones optimizadas.

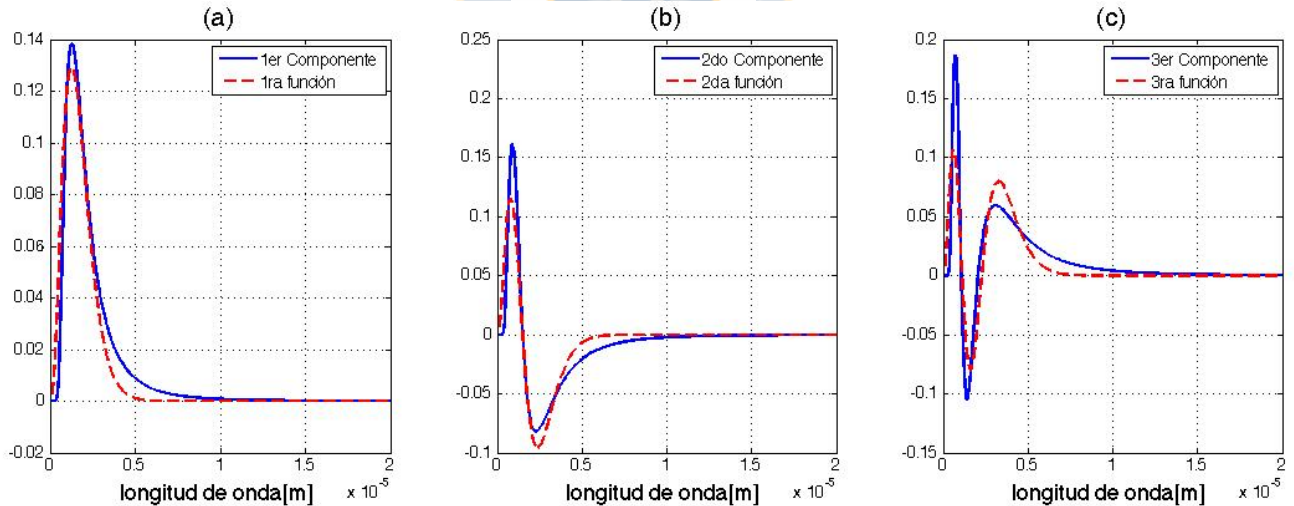


Fig. 4.6: Gráficas comparativas entre componentes principales y funciones encontradas. (a) Primer componente. (b) Segundo componente. (c) Tercer componente.

Si bien no son exactamente idénticas, las funciones encontradas tienen similitudes que per-

miten recuperaciones espectrales como si fueran los canales ópticos óptimos en métodos como Maloney-Wandell, los cuales se detallarán en el siguiente capítulo. Al medir cuantitativamente la similitud con la métrica GFC, los resultados son 93,8322 para el primer componente, 90,3223 para el segundo, y 89,0092 para el tercer componente.

4.7. Simulaciones del Modelo Matemático en Métodos de Recuperación Espectral

Para evaluar la utilidad de las funciones optimizadas se hicieron simulaciones de estimación de espectros de cuerpo negro en el rango de temperatura de $1500^{\circ}K$ a $2500^{\circ}K$ con los métodos propuestos por pseudo-inversa y Maloney-Wandell utilizando canales óptimos. Se hará una comparación de calidad utilizando las métricas de GFC y NRMSE para ambos casos utilizando los componentes principales teóricos y las funciones $\phi_n(\lambda)$.

4.7.1. Método de Pseudo-inversa con canales óptimos

En primer lugar se pondrán a prueba las funciones con el método de pseudo-inversa con el modelo propuesto por Luis Arias y Daniel Sbárbaro de canales óptimos [5] .

Hernández-Andrés [20] sugiere que una recuperación fiel requiere un $GFC > 99,5 \times 10^{-2}$, una “buena” recuperación requiere un $GFC > 99,9 \times 10^{-2}$ y una “excelente” recuperación requiere un $GFC > 99,99 \times 10^{-2}$. Es decir, la estimación con las funciones en el método propuesto no postula a una recuperación fiel. En la tabla 4.1 se observa un resumen comparativo.

Tabla 4.1: Resumen del promedio de las métricas de calidad con canales óptimos derivados de componentes principales y funciones $\phi(\lambda)$ para 1001 estimaciones.

Canales utilizados	$GFC_{mean} \times 10^{-2}$	$NRMSE_{mean} \times 10^{-2}$
Derivados de comp. prin.	99.99798	0.1547
Derivados de funciones $\phi(\lambda)$	98.75426	18.6124

El modelo basado en las funciones ortogonales encontradas no funciona de buena manera en el método de recuperación de pseudo inversa propuesto por Arias y Sbárbaro debido a que este método exige ortogonalidad en los canales óptimos en el rango del proceso para poder aplicar

$V^t = V^+$. Las funciones $\phi_n(m, \nu, \lambda)$, en cambio, son ortogonales en el intervalo $[0, \infty)$, es decir, para que el producto interno sea igual a cero, se debe integrar desde cero al infinito, lo que tanto en simulaciones como en la práctica es imposible considerar. Así, se adultera la ortogonalidad de las funciones cuando se acota el intervalo y no es posible aplicar el método.

4.7.2. Método de Maloney-Wandell

Ahora, serán puestas a prueba las funciones cuando se utiliza el método de Maloney-Wandell considerándolas únicamente en la construcción de los canales óptimos y no como los vectores bases del proceso. Se harán tres comparaciones: al usar canales reales de una cámara Basler A602SC-2, cuyas spectral sensitivities se muestran en la figura 4.7, usando los canales teóricos deducidos de los componentes principales y por último canales deducidos de las funciones $\phi(\lambda)$.

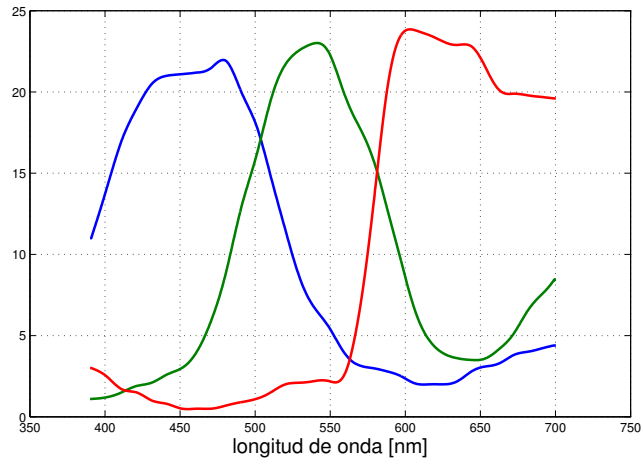


Fig. 4.7: Sensibilidades espectrales de una cámara Basler A602SC-2.

Para este método, los tres tipos de canales entregan “excelente” recuperaciones según Hernández-Andrés, pero al analizar los decimales de las métricas de calidad, se puede notar que con canales derivados de las funciones encontradas se maximiza aún más el GFC y se minimiza aún menos el NRMSE, sobre todo al compararlos con canales reales. Esto se puede ver mejor en la tabla resumen 4.2 .

Al deducir los canales óptimos de acuerdo a estos autores y aplicarlos en métodos como Maloney-Wandell, las recuperaciones espectrales son ligeramente mejores que con canales deducidos de los componentes principales teóricos obtenidos con ‘pcacov’. Esto se debe a que el

Tabla 4.2: Resumen del promedio de las métricas de calidad con canales reales, óptimos derivados de componentes principales y derivados de funciones $\phi(\lambda)$ para 1001 estimaciones.

Canales utilizados	$GFC_{mean} \times 10^{-2}$	$NRMSE_{mean} \times 10^{-2}$
Reales	99.99108	0.3167
Derivados de comp. prin.	99.99791	0.1108
Derivados de funciones $\phi(\lambda)$	99.99793	0.1106

método de Maloney-Wandell es más robusto respecto a ruido o irregularidades que otros métodos [4], permitiendo buenas estimaciones con canales que tan solo son similares a los óptimos teóricos. Aún así, los canales deducidos de $\phi_n(m, \nu, \lambda)$ funcionan mejor que los componentes por algún motivo relacionado con la forma espectral que debe estudiarse y no con la intensidad del canal.

4.8. Expansión en series de la Ecuación de Planck

De acuerdo a la ecuación (3.22), se puede expandir la ecuación de Planck (ecuación (1.8)) en serie de las funciones ortogonales encontradas como se muestra en la siguiente ecuación.

$$E_{bb}(\lambda, T) = \frac{C_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \phi_n(\lambda) \quad (4.17)$$

Al ser el conjunto de funciones $\phi_n(\lambda)$ además ortonormales con función de peso igual a 1 en el intervalo de 0 a infinito, se puede expresar el cálculo de los coeficientes de peso como,

$$c_n = \int_0^{\infty} E_{bb}(\lambda, T) \cdot \phi_n(\lambda) \cdot d\lambda \quad (4.18)$$

es decir,

$$c_n = \int_0^{\infty} \frac{C_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1} \cdot \sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n+m+1)}} \lambda^\nu e^{-\frac{\lambda}{2}} L_n^m(\lambda) \cdot d\lambda \quad (4.19)$$

Debido a que $\phi_n(\lambda)$ serán usadas como canales ópticos, de la ecuación (4.18) se deduce que c_n será la n -ésima respuesta del sistema óptico. Al conocer el valor de c_n , y conocer su expresión

dada en la ecuación (4.19) podríamos despejar ciertos parámetros como la temperatura.

Lamentablemente, esta integral no tiene solución analítica, por lo que solo es posible utilizar métodos numéricos, sin poder aislar la variable de la temperatura.

4.9. Propuesta de Nuevo Método de Recuperación Espectral

Después de analizar el método propuesto por Arias-Sbárbaro de canales óptimos y simular otros algoritmos como Maloney-Wandell usando los canales óptimos [5], se nota que en comparación a canales encontrados en cámaras reales, los algoritmos mejoran sus métricas de calidad al recuperar espectros. Es decir, la forma espectral propuesta de canales ópticos utilizando los componentes principales, permiten optimizar la estimación espectral de algunas técnicas modernas. A partir de esta observación, se hicieron pruebas del método de Arias-Sbárbaro, pero modificando el algoritmo que obtiene el espectro estimado.

Una de las técnicas de menor costo computacional, es calcular la pseudoinversa de W , y estimar el espectro despejando la ecuación (1.1) de la forma,

$$E = W^t \epsilon \tag{4.20}$$

4.9.1. Definición

Se propone considerar W como la matriz que contiene k canales generados por n componentes principales de la matriz de entrenamiento y ϵ como el vector que contiene k respuestas ópticas de cada uno de los canales. Se recuerda que el método propuesto por Arias-Sbárbaro consideran k canales ópticos generados por n componentes principales y ϵ como el vector que construye n respuestas ópticas como si fuera de cada uno de los componentes.

A continuación se muestra una tabla comparativa entre el método propuesto y el existente de canales óptimos.

Donde N es la resolución espectral y p_j es el número de cruces por el eje de las abscisas del j -ésimo componente principal. Al considerar este cambio en el algoritmo, se observan algunas mejoras en simulaciones, las cuales serán presentadas a continuación.

Tabla 4.3: Tabla compartiva entre el método de Arias-Sbárbaro y el propuesto.

	Arias-Sbárbaro	Nueva propuesta
Componentes principales	n	
Canales	$k = \sum_{j=1}^n (p_j + 1)$	
Vectores base	n obtenidos de M	k obtenidos de W
Respuestas ópticas	n	k
Dimensión de ϵ	$1 \times n$	$1 \times k$
Espectro recuperado	$\hat{E}_{AS} = V_{N \times n} \epsilon_{n \times 1}$	$\hat{E}_{NEW} = W_{N \times k} \epsilon_{k \times 1}$

4.9.2. Simulaciones

Base de datos

Para poner a prueba este algoritmo, se realizaron simulaciones en Matlab de recuperaciones espectrales utilizando 3 set de datos:

1. 1269 espectros de reflectancia de una carta de color de Munsell, mostrados en la figura 4.8 (a). Una carta de Munsell es una disposición ordenada de parches colorimétricos. Ésta carta fue utilizada como objetivo de mediciones espectrales para obtener esta base de datos.
2. 289 espectros de reflexión de paisajes naturales con cerros, árboles, flores, pasto, arena y mar [22], mostrados en la figura 4.8 (b). Esta base de datos fue medida por el grupo Spectral Processing & Radiometry (SP&R), teniendo como iluminante la luz diurna.
3. 747 espectros de reflectancia de muestras de pino radiata [21], mostrados en la figura 4.8 (c). Esta base fue medida por por el grupo Spectral Processing & Radiometry (SP&R) con muestras de laboratorio.

Los primeros 2 set de datos fueron medidos con un radiómetro SpectraScan PR-655 con 4 nm de resolución, y un dominio espectral desde 380 nm hasta 780 nm . El último set de datos fue obtenido desde los servidores del Spectral Color Research group de la University of Eastern Finland [26]. Tiene 1,7 nm de resolución con dominio espectral desde 900,57 nm hasta 1652,13 nm . Así, las matrices de entrenamiento fueron de 1269x101, 289x101 y 747x443 respectivamente.

Posterior a las simulaciones, se analizaron métricas de calidad como GFC y NRMSE promediadas, y se comparó con el modelo teórico de la ecuación (1.2). Además, estas simulaciones

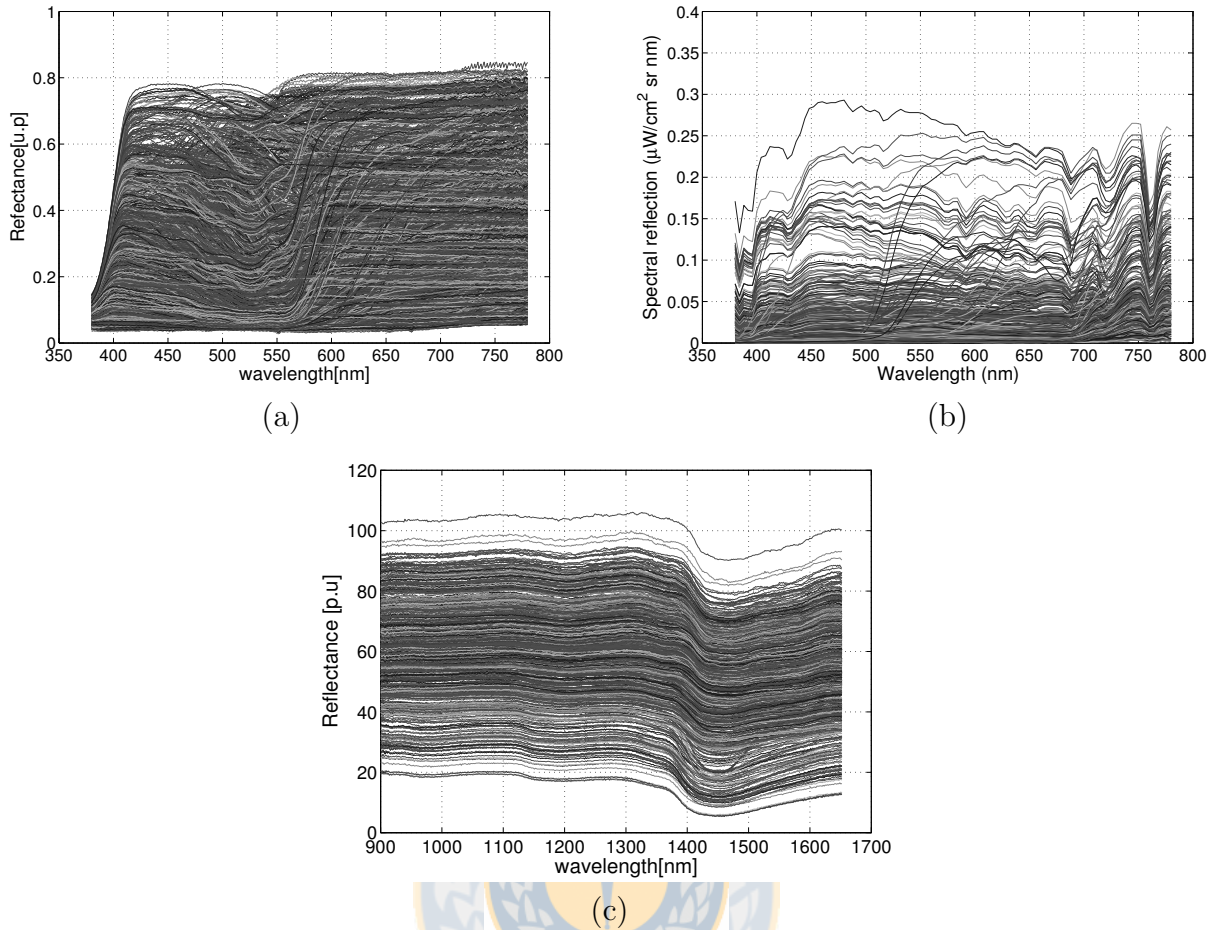


Fig. 4.8: Matrices de entrenamiento de espectros. (a) Reflectancia de una carta de color de Munsell. (b) Reflexión de paisajes naturales. (c) Reflectancia de pino radiata.

se realizaron con otros métodos modernos (manteniendo los canales óptimos propuestos y las base obtenida de PCA) para presentarlos en una tabla comparativa.

Los métodos a comparar con el propuesto fueron: Maloney-Wandell con canales óptimos, Arias-Sbárbaro y el teórico de la ecuación (1.2) con un la base reducida en vectores (los primeros componentes principales).

Carta de colores de Munsell

Para el set de datos de Munsell, se simuló desde 1 hasta 7 componentes principales en los 3 métodos mencionados más el teórico. Los primeros 5 vectores son mostrados en la figura 4.9 y

los 15 canales ópticos obtenidos de la descomposición de los PC se presentan en las figuras 4.10 (a), (b) y (c). Los resultados de las métricas de calidad se presentan en la tabla 4.4 junto con un resumen gráfico que se muestra en la figura 4.11 (a) para el GFC y la figura 4.11 (b) para el NRMSE, donde es posible observar en este caso, que el i -ésimo componente genera i canales ópticos, y las métricas fueron mejorando a medida que se aumentó en número de componentes principales usados en el proceso de estimación. Es preciso destacar que el algoritmo propuesto presenta métricas de calidad mejores respecto a otros métodos, e incluso sobre el modelo teórico propuesto. La explicación de esta observación será presentada al final de este capítulo. Se hace la observación luego del modelo teórico, le sigue el de Arias-Sbárbaro y finalmente Maloney-Wandell.

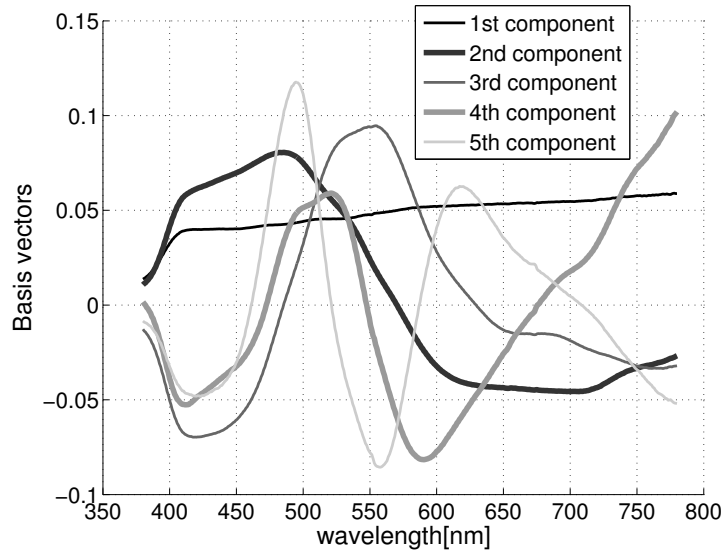


Fig. 4.9: Primeros 5 componentes principales de espectros de parches de Munsell.

Tabla 4.4: Métricas de calidad promediadas para estimaciones de espectros de parches de Munsell usando 4 métodos: Teórico usando $E = V\epsilon$ con una base acotada, Maloney-Wandell con canales óptimos, Arias-Sbárbaro usando pseudoinversa con canales óptimos y la técnica propuesta.

PC	Nº Ch	Teórico		M-W c. óptimos		A-S c. óptimos		Propuesta	
		NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC
1	1	18.8651	95.0576	18.8651	95.0576	18.8651	95.0576	18.8651	95.0576
2	3	10.9899	98.2712	11.0070	98.2690	10.9898	98.2712	9.4230	98.6869
3	6	6.7789	99.3447	6.8276	99.3361	6.7789	99.3447	3.9967	99.7918
4	10	5.1353	99.6293	5.1533	99.6269	5.1352	99.6293	2.6479	99.9075
5	15	4.2951	99.7580	4.3224	99.7550	4.2951	99.7580	2.0207	99.9444
6	21	2.7302	99.8761	2.7659	99.8730	2.7437	99.8756	0.8011	99.9900
7	28	2.1134	99.9323	2.1396	99.9305	2.1313	99.9318	0.5769	99.9954

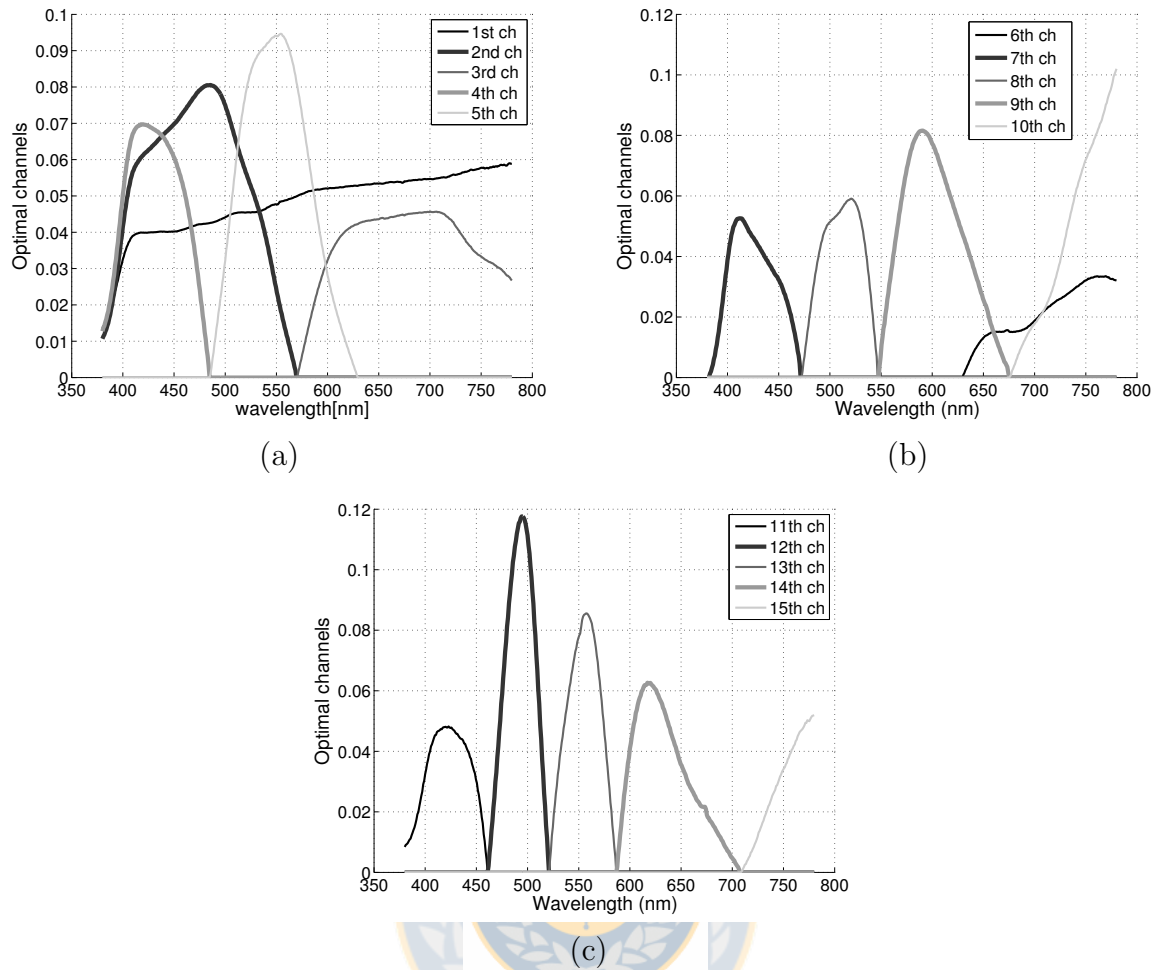


Fig. 4.10: 15 canales ópticos resultantes de la descomposición de los 5 primeros PC de parches de Munsell.

Paisajes Naturales

Para el set de datos de espectros de reflexión de paisajes naturales, hasta 7 componentes fueron probados en los 4 métodos, cuyos resultados se muestran en la tabla 4.5 y un resumen gráfico es presentado en la figura 4.14. Los primeros 5 vectores principales se muestran en la figura 4.12 y los canales que resultan de descomponerlos, se muestran en la figura 4.13 (a), (b) y (c). En este caso, el 5to componente generó más de 5 canales, lo cual se escapa del comportamiento general, pero los canales extras son considerados narrow-band. Para el 7mo componente, también fueron generados más canales de lo esperado, pero de igual forma considerados narrow band. Además la amplitud de estos canales fue tan baja, que no resulta factible fabricarlos, por lo tanto fueron despreciados. Las métricas en general fueron aumentando a medida que más canales fueron incorporados al algoritmo, a excepción del 7mo componente en

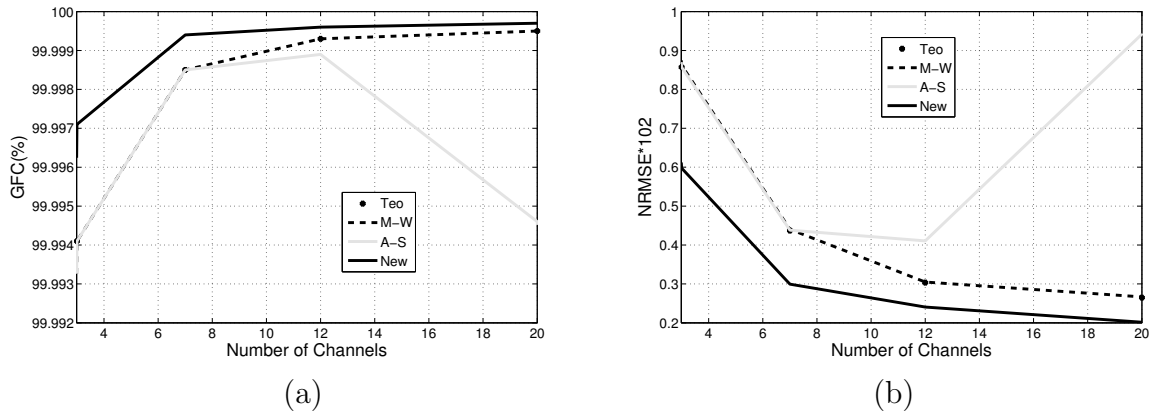


Fig. 4.11: Métricas de calidad v/s número de canales usados en estimaciones de espectros de parches de Munsell.

el método Arias-Sbárbaro, donde el GFC disminuyó y el NRMSE aumentó considerablemente. Esta última observación se debe a que el modelo es sensible a la forma exacta del componente principal, y en este caso, alguno de los canales narrow-band fueron descartados por su baja amplitud (y por ende no factibles de construir). Además nuevamente el algoritmo propuesto responde considerablemente mejor al medir el GFC y NRMSE, e incluso mejor que el teórico.

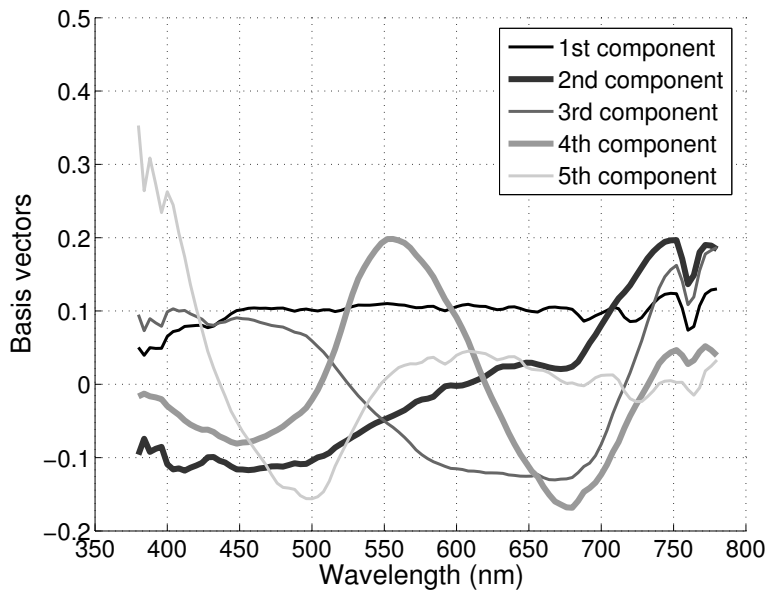


Fig. 4.12: Primeros 5 componentes principales de espectros de naturaleza.

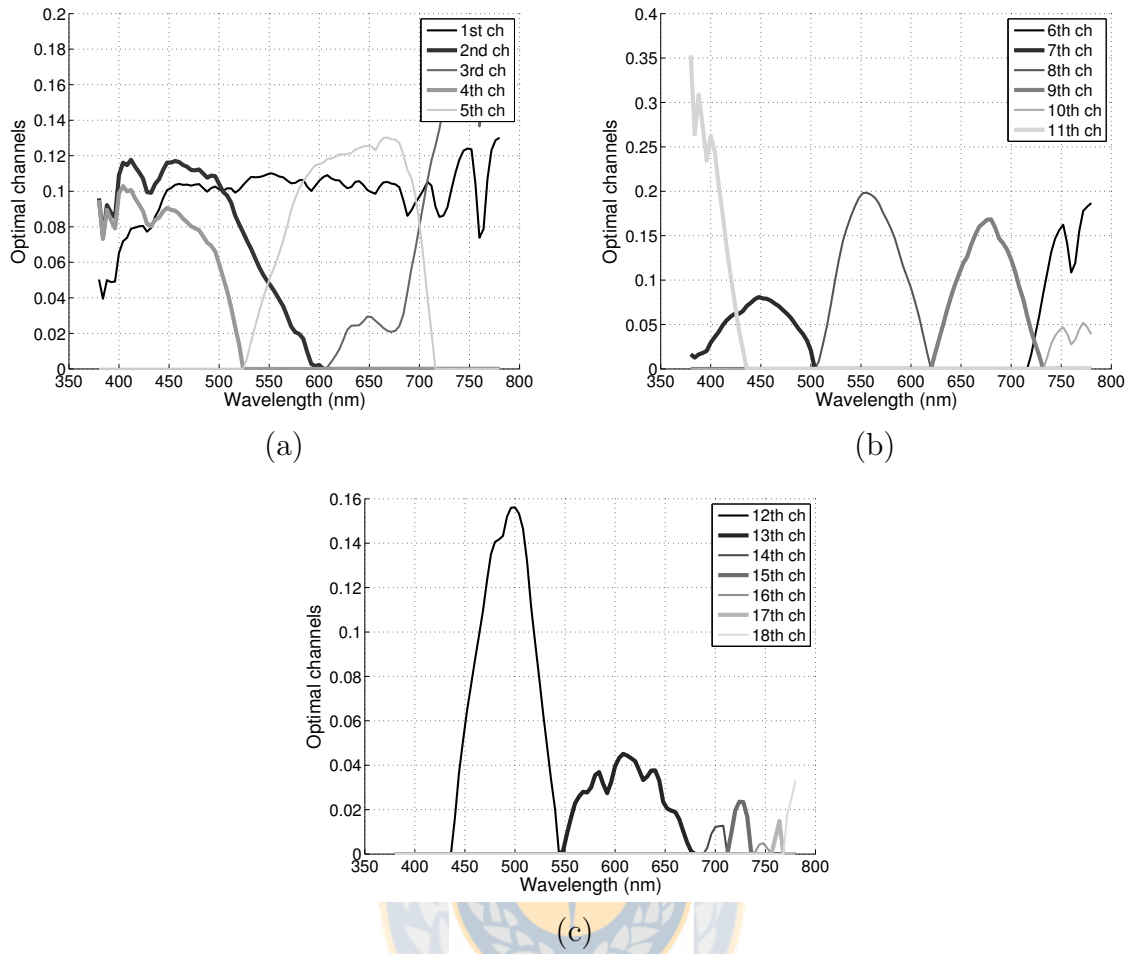


Fig. 4.13: 18 canales ópticos resultantes de la descomposición de los 5 primeros PC de naturaleza.

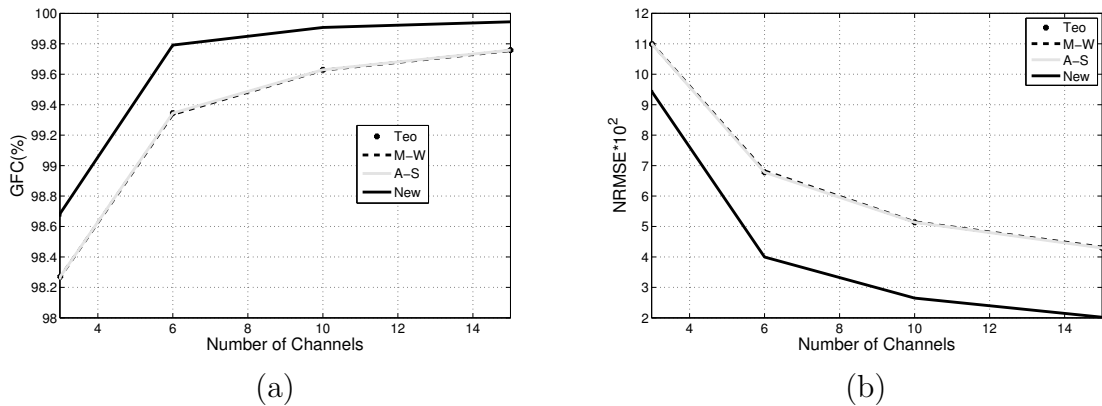


Fig. 4.14: Métricas de calidad v/s número de canales usados en estimaciones de espectros de naturaleza.

Tabla 4.5: Métricas de calidad promediadas para estimaciones de espectros de naturaleza usando 4 métodos: Teórico usando $E = V\epsilon$ con una base acotada, Maloney-Wandell con canales óptimos, Arias-Sbárbaro usando pseudoinversa con canales óptimos y la técnica propuesta.

PC	N° Ch	Teórico		M-W c. óptimos		A-S c. óptimos		Propuesta	
		NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC
1	1	16.5554	89.1911	16.5554	89.1911	16.5554	89.1911	16.5554	89.1911
2	3	7.5291	97.3153	7.6232	97.3065	7.5289	97.3153	4.7015	89.1911
3	6	3.8904	99.4444	3.9125	99.4383	3.8903	99.4444	2.5780	99.7886
4	10	2.8554	99.7170	2.8692	99.7145	2.8565	99.7170	1.3557	99.9000
5	18	2.2588	99.7707	2.2738	99.7683	2.4146	99.7603	0.6985	99.9559
6	27	1.6778	99.8404	1.6997	99.8371	1.8823	99.8296	0.4300	99.9752
7	34	1.3579	99.8801	1.3762	99.8785	8.3245	98.2604	0.3280	99.9840

Pino Radiata

Para el último set de datos correspondiente a una matriz de entrenamiento de espectros de pino radiata en la banda espectral NIR, de la misma forma que en los casos anteriores, 7 componentes fueron usados en las técnicas antes mencionadas. Los resultados son mostrados en la tabla 4.6 junto al análisis gráfico de la figura 4.15, y los primeros 5 vectores base se muestran en la figura 4.16. Respecto a estos componentes y debido a su naturaleza ruidosa, también tuvieron más cruces por el eje de las abscisas de los que se esperaban, generando hasta 20 canales ópticos sólo para los primeros 5 vectores base. Para el 6to y 7mo componente, y al igual que el caso de espectros de naturaleza, algunos canales narrow-band de poca amplitud fueron descartados. Estos canales se muestran en la figura 4.17 (a), (b) y (c). Las métricas fueron mejorando a medida que los componentes principales fueron agregándose, a excepción del 6to y 7mo cuando el método de Arias-Sbárbaro fue utilizado, lo cual es debido a la sensibilidad a la forma de los canales antes mencionada. Finalmente el algoritmo propuesto nuevamente es el mejor comparado a los demás métodos.

Tabla 4.6: Métricas de calidad promediadas para estimaciones de espectros de pino radiata usando 4 métodos: Teórico usando $E = V\epsilon$ con una base acotada, Maloney-Wandell con canales óptimos, Arias-Sbárbaro usando pseudoinversa con canales óptimos y la técnica propuesta.

PC	N° Ch	Teórico		M-W c. óptimos		A-S c. óptimos		Propuesta	
		NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC	NRMSE·10 ²	GFC
1	1	2.8472	99.8649	2.8472	99.8649	2.8472	99.8649	2.8472	99.8649
2	3	0.8572	99.9941	0.8619	99.9941	0.8572	99.9941	0.5975	99.9971
3	7	0.4372	99.9985	0.4405	99.9985	0.4381	99.9985	0.2994	99.9994
4	12	0.3034	99.9993	0.3049	99.9993	0.4107	99.9989	0.2406	99.9996
5	20	0.2648	99.9995	0.2666	99.9995	0.9421	99.9946	0.2016	99.9997
6	30	0.2387	99.9996	0.2402	99.9996	6.1719	99.7226	0.1874	99.9998
7	38	0.2273	99.9997	0.2285	99.9997	14.3240	97.9863	0.1812	99.9998

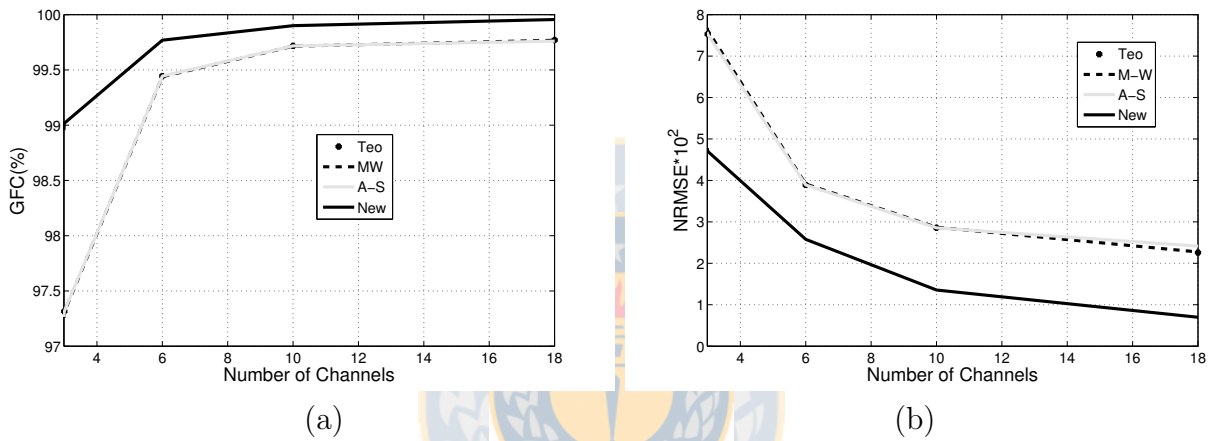


Fig. 4.15: Métricas de calidad v/s número de canales usados en estimaciones de espectros de pino radiata.

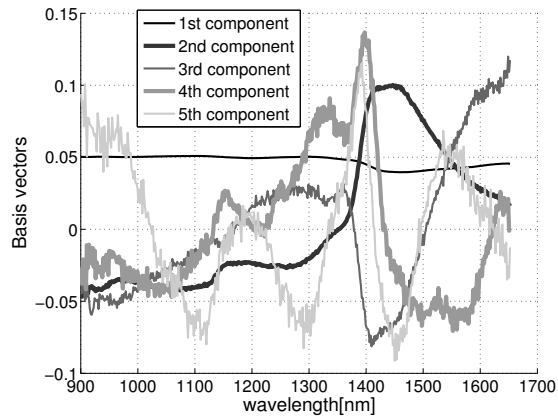


Fig. 4.16: Primeros 5 componentes principales de espectros de pino radiata.

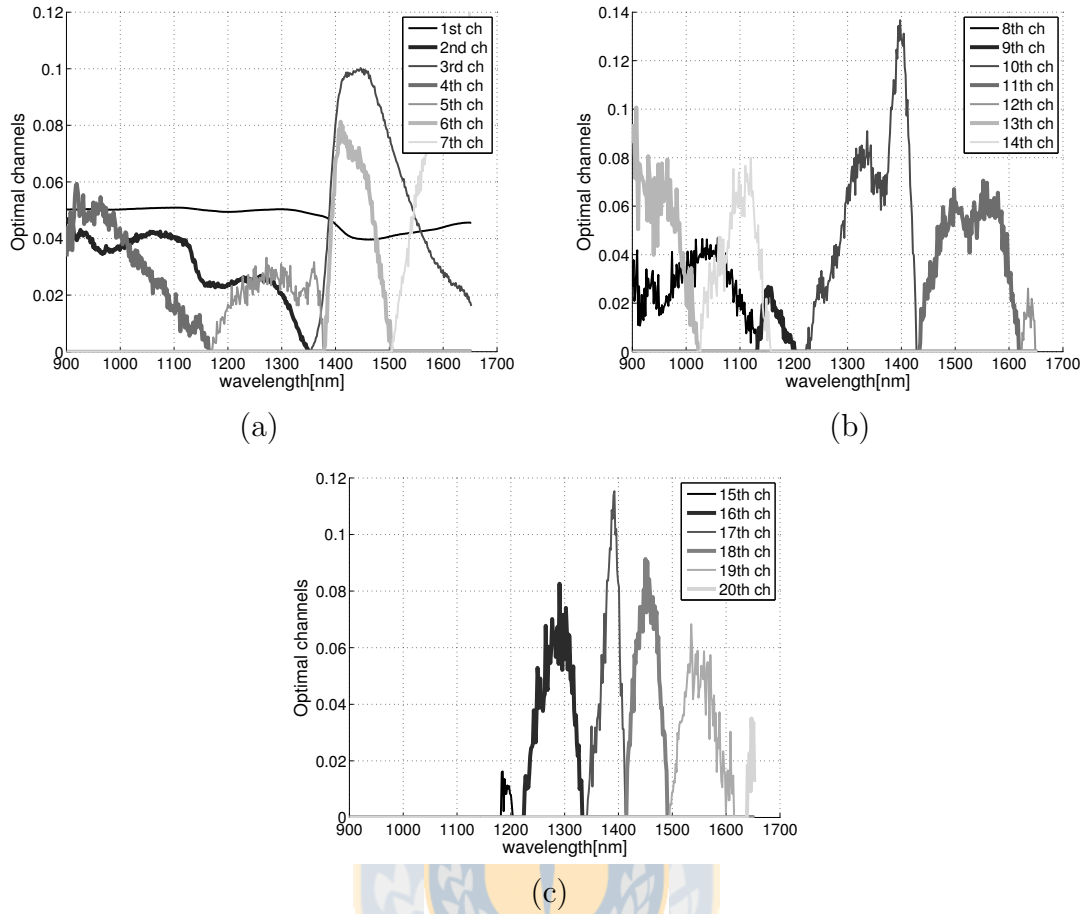


Fig. 4.17: 20 canales ópticos resultantes de la descomposición de los 5 primeros PC de pino radiata.

4.9.3. Discusión

Se pudieron hacer dos observaciones importantes respecto a las simulaciones presentadas:

1) El algoritmo de Arias-Sbárbaro decayó en sus métricas de calidad cuando canales narrow-band de poca intensidad fueron descartados. Esto se debe a la necesidad de ortogonalidad entre los componentes para poder aplicar la transpuesta como pseudoinversa, ya que al despreciar partes del componente, el producto punto entre ellos no resulta cero.

2) El algoritmo propuesto obtuvo un GFC más alto y un RMSE más bajo que cualquier método, inclusive el teórico. A continuación se presenta la explicación de este fenómeno.

Si consideramos M como un subespacio vectorial, y V como el conjunto de vectores V_j que puede generar a M , es decir,

$$M \subset \text{gen}(V) = \text{gen}(V_1, V_2, \dots, V_j, \dots) \quad (4.21)$$

Así, un espectro E que pertenece a M puede ser representado como la combinación lineal de,

$$E = V\epsilon \quad (4.22)$$

Donde ϵ es el vector que contiene los coeficientes de la combinación, y V la matriz que contiene los vectores base. Si ahora llamamos W a la matriz que contiene los canales que resultan de la descomposición en partes positivas y negativas de cada V_j , y sea W_i^j al i -ésimo canal generado por el j -ésimo componente V_j , entonces V_j será construido por la combinación lineal de todos canales que resultan de la descomposición, es decir,

$$V_j = \sum_{i=1}^{p_j+1} \alpha_i W_i^j \quad (4.23)$$

Donde $p_j + 1$ es el número de canales generado por el V_j .

De la ecuación (4.23) se deduce que W puede generar a M , e inclusive un subespacio mayor, es decir,

$$M \subset \text{gen}(V) \subset \text{gen}(W) = \text{gen}(W_1^1, W_1^2, W_2^2 \dots W_i^j \dots) \quad (4.24)$$

Como el nuevo algoritmo utiliza como base los componentes principales descompuestos, es decir W , tiene la facultad de generar espectros con más detalles que una base V como lo hace el modelo teórico. Esto se puede observar de mejor forma con el siguiente ejemplo simple: Supongamos que se requiere recuperar el vector espectro $E=[5 \ 8 \ 0 \ 9]$ y para esto, se tiene el conjunto base de 2 vectores $V_1=[1 \ 1 \ 0 \ -1]$ y $V_2=[1 \ 0 \ -1 \ -1]$. Para obtener el espectro estimado \hat{E} , se tiene que identificar los coeficientes a y b de la siguiente combinación lineal:

$$\hat{E} = aV_1 + bV_2 \quad (4.25)$$

Para encontrar las soluciones, es necesario resolver el siguiente sistema:

$$\begin{aligned}
 a + b &= 5 \\
 a + 0 &= 8 \\
 0 - b &= 0 \\
 -a - b &= 9
 \end{aligned}
 \tag{4.26}$$

Podemos notar que este sistema no tiene solución, y por lo tanto se debe realizar una estimación cercana a E .

Por otra parte, si los vectores V_1 y V_2 son separados en partes positivas y negativas, y son considerados vectores independientes, se tendría un conjunto base de 4 vectores $V_1^+=[1 \ 1 \ 0 \ 0]$, $V_1^-=[0 \ 0 \ 0 \ -1]$, $V_2^+=[1 \ 0 \ 0 \ 0]$ y $V_2^-=[0 \ 0 \ -1 \ -1]$. En este caso, para obtener el espectro estimado \hat{E} , es necesario identificar los coeficientes a , b , c , d de la siguiente combinación lineal:

$$\hat{E} = aV_1^+ + bV_1^- + cV_2^+ + dV_2^-
 \tag{4.27}$$

Para encontrar las soluciones, es necesario resolver el siguiente sistema:

$$\begin{aligned}
 a + 0 + c + 0 &= 5 \\
 a + 0 + 0 + 0 &= 8 \\
 0 + 0 + 0 - d &= 0 \\
 0 - b + 0 - d &= 9
 \end{aligned}
 \tag{4.28}$$

el cual si tiene solución real, y por ende $\hat{E} = E$. En efecto, debido a que el algoritmo propuesto descompone los canales en partes positivas y negativas, y los utiliza como vectores base independientes (a diferencia de Arias-Sbárbaro que suma las respuestas ópticas), entonces se tendrá un conjunto base de mayor dimensión y por lo tanto más representativo del verdadero conjunto generador del espectro original.

Tabla 4.7: Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de una carta de color de Munsell usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 40 dB, e incrementando el número de canales usados.

PC	N° Ch	Propuesta		M-W opt.		A-S opt.	
		NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)
1	1	16.3588 (0.0800)	96.7741 (3.4565)	18.8797 (0.0700)	95.0576 (4.9712)	18.8662 (0.0701)	95.0576 (4.9712)
2	2	9.0409 (0.0387)	99.0708 (1.0751)	11.1087 (0.0500)	98.2451 (2.1889)	24.7662 (0.0602)	94.8007 (4.3113)
2	3	7.3321 (0.0251)	99.4307 (0.4643)	11.0444 (0.0499)	98.2649 (2.1711)	10.9948 (0.0501)	98.2707 (2.1691)
3	4	5.9526 (0.0180)	99.6311 (0.3083)	7.4915 (0.0295)	99.1956 (1.1763)	13.1343 (0.0390)	97.9546 (2.1693)
3	5	4.8571 (0.0249)	99.7213 (0.4547)	6.8879 (0.0274)	99.3308 (0.9816)	13.8779 (0.0292)	97.9796 (1.3233)
3	6	4.1024 (0.0230)	99.7946 (0.2924)	6.8821 (0.0275)	99.3317 (0.9802)	6.7892 (0.0276)	99.3436 (0.9655)
4	7	4.6092 (0.0303)	99.6941 (0.6354)	5.8155 (0.0262)	99.5183 (0.7235)	7.4270 (0.0265)	99.2430 (1.0668)
4	8	5.0716 (0.0353)	99.5837 (0.9508)	5.7643 (0.0265)	99.5191 (0.7311)	6.8015 (0.0264)	99.3671 (0.9213)
4	9	5.8818 (0.0434)	99.3286 (1.5817)	5.2957 (0.0239)	99.6112 (0.5475)	15.0550 (0.0245)	97.6413 (1.2034)
4	10	6.1916 (0.0438)	99.2101 (1.9454)	5.2354 (0.0237)	99.6214 (0.5280)	5.1520 (0.0242)	99.6277 (0.5248)

4.9.4. Análisis de ruido

Finalmente, para profundizar en el estudio de este nuevo algoritmos, se realizaron pruebas simulando un ruido electrónico en la etapa de adquisición de la respuesta óptica. En algunos estudios [4] [5] orientados a estimaciones espectrales se han considerado valores de SNR de 40 dB y 26 dB, por lo tanto, fueron esos valores los utilizados en estas pruebas. Para estas simulaciones, se fue incrementando de uno en uno el número de canales ópticos que generaron los primeros 4 componentes principales y se analizaron las métricas de calidad GFC y NRMSE. La base de datos utilizada fueron las mismas matrices de entrenamiento descritas anteriormente: espectros de reflectancia de una carta de color de Munsell cuyos resultados para 40 y 26 dB son mostrados en las tablas 4.7 y 4.8 respectivamente; espectros de reflexión de paisajes naturales cuyos resultados para 40 y 26 dB son mostrados en las tablas 4.9 y 4.10 respectivamente; y espectros de reflectancia de pino radiata cuyos resultados para 40 y 26 dB son mostrados en las tablas 4.11 y 4.12 respectivamente.

Luego de presentadas estas tablas, se puede notar, sobre todo en las pruebas con 26 dB de ruido, las métricas de calidad del algoritmo propuesto decaen considerablemente, a excepción de la base de espectros de reflectancia de pino radiata donde este algoritmo alcanzó los mejores valores. En el caso de Munsell con 10 canales, el algoritmo presento un GFC de 90.7647 versus Arias-Sbárbaro que fue óptimo con un GFC de 99.5870. Y en el caso de espectros de naturaleza, este algoritmo decayó fuertemente con un GFC de 72.8485 y NRMSE de 21.8887, versus el método de Arias-Sbárbaro que fue óptimo con GFC 99.5331 y NRMSE de 4.9757. Debido a las grandes diferencias, se puede concluir que el algoritmo propuesto, en ciertos procesos, es sensible al ruido electrónico.

Tabla 4.8: Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de una carta de color de Munsell usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 26 dB, e incrementando el número de canales usados.

PC	N° Ch	Propuesta		M-W opt.		A-S opt.	
		NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)
1	1	16.4320 (0.0795)	99.7741 (3.4565)	19.2393 (0.0680)	95.0576 (4.9712)	18.9098 (0.0699)	95.0576 (4.9712)
2	2	9.2671 (0.0390)	99.0442 (1.0783)	12.3272 (0.0467)	98.0580 (2.2194)	24.7707 (0.0604)	94.8047 (4.3168)
2	3	8.5861 (0.0362)	99.0747 (1.3611)	11.7539 (0.0472)	98.1735 (2.1729)	11.1184 (0.0500)	98.2560 (2.1708)
3	4	7.9949 (0.0425)	99.1643 (1.4609)	10.5621 (0.0380)	98.5927 (1.4503)	13.1933 (0.0394)	97.9412 (2.1850)
3	5	8.4578 (0.0578)	98.5821 (2.9738)	8.0862 (0.0252)	99.1961 (0.9384)	13.9600 (0.0307)	97.9554 (1.3459)
3	6	9.2918 (0.0646)	98.0094 (4.0564)	7.8821 (0.0256)	99.2197 (0.9866)	7.0466 (0.0294)	99.3137 (0.9779)
4	7	12.0682 (0.0686)	96.4248 (6.6762)	9.1151 (0.0329)	98.9335 (1.0394)	7.6462 (0.0280)	99.2127 (1.0810)
4	8	13.8273 (0.0719)	94.5319 (9.5699)	8.3430 (0.0294)	99.1205 (0.9430)	7.0500 (0.0282)	99.3344 (0.9352)
4	9	16.0925 (0.0831)	91.9366 (12.4980)	6.8985 (0.0218)	99.4433 (0.5723)	15.1422 (0.0258)	97.6072 (1.2378)
4	10	17.0786 (0.0800)	90.7647 (13.0776)	6.5028 (0.0213)	99.5017 (0.5366)	5.5147 (0.0270)	99.5870 (0.5580)

Tabla 4.9: Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de naturaleza usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 40 dB, e incrementando el número de canales usados.

PC	N° Ch	Propuesta		M-W opt.		A-S opt.	
		NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)
1	1	16.5810 (0.0809)	89.1911 (13.3397)	17.2392 (0.0796)	88.7115 (16.2346)	16.5757 (0.0810)	89.1911 (13.3397)
2	2	11.8667 (0.0642)	93.0515 (9.9947)	11.3437 (0.0742)	94.9071 (9.0343)	20.4208 (0.0515)	88.3072 (14.2987)
2	3	5.0029 (0.0262)	98.9967 (1.4911)	9.5852 (0.0593)	96.6348 (4.6555)	7.6013 (0.0462)	97.3115 (3.7179)
3	4	5.5666 (0.0204)	99.0341 (1.3501)	8.7197 (0.0707)	96.9216 (8.3702)	10.6295 (0.0240)	97.1990 (3.4312)
3	5	8.2080 (0.0366)	98.3541 (1.5831)	7.1942 (0.0580)	98.4154 (3.1606)	13.3296 (0.0267)	95.6024 (4.5574)
3	6	7.3016 (0.0387)	98.8600 (1.1972)	6.8220 (0.0542)	98.5173 (3.4989)	4.0156 (0.0225)	99.4381 (0.9449)
4	7	7.3306 (0.0376)	98.8311 (1.2779)	12.5871 (0.1066)	93.7786 (12.7216)	5.2766 (0.0163)	99.3597 (0.9196)
4	8	7.4927 (0.0414)	98.8110 (1.3020)	7.6668 (0.0686)	97.8088 (6.5641)	8.7906 (0.0341)	98.7510 (0.8527)
4	9	7.8479 (0.0457)	98.5550 (1.7555)	6.6497 (0.0543)	98.3617 (5.3295)	4.6417 (0.0131)	99.4487 (0.8337)
4	10	9.3620 (0.0447)	97.8224 (1.9260)	6.9662 (0.0586)	98.3622 (4.0099)	3.0119 (0.0159)	99.7098 (0.7188)

Tabla 4.10: Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de naturaleza usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 26 dB, e incrementando el número de canales usados.

PC	N° Ch	Propuesta		M-W opt.		A-S opt.	
		NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)
1	1	17.0250 (0.0775)	89.1911 (13.3397)	22.3289 (0.1464)	85.7140 (28.0754)	16.9348 (0.0781)	89.1911 (13.3397)
2	2	13.0674 (0.0576)	92.8444 (9.9310)	23.2060 (0.2376)	83.0689 (33.2208)	20.8017 (0.0541)	88.2996 (14.2580)
2	3	8.0714 (0.0295)	98.5000 (1.5659)	17.8426 (0.1362)	90.3345 (19.2812)	8.5624 (0.0399)	97.2267 (3.6976)
3	4	12.3608 (0.0533)	96.3278 (3.5156)	24.0581 (0.1798)	82.5637 (25.9158)	10.7672 (0.0268)	97.1614 (3.4196)
3	5	19.9524 (0.0736)	84.9935 (13.1885)	20.7506 (0.2243)	88.1736 (22.3661)	13.6446 (0.0312)	95.4936 (4.6126)
3	6	19.5652 (0.0753)	86.8197 (11.4970)	19.0006 (0.1534)	88.0447 (22.5001)	5.5738 (0.0195)	99.3096 (0.9327)
4	7	20.0326 (0.0682)	85.4752 (12.5004)	29.9520 (0.1525)	71.4995 (29.4875)	5.9750 (0.0182)	99.2710 (0.9202)
4	8	20.1374 (0.0646)	85.7869 (10.7402)	21.1386 (0.1537)	86.1632 (21.2038)	9.0929 (0.0362)	98.6444 (0.9386)
4	9	21.6945 (0.0733)	80.9529 (13.7910)	20.7303 (0.1778)	86.2199 (24.6088)	5.9346 (0.0174)	99.2765 (0.8374)
4	10	21.8887 (0.0696)	72.8485 (14.6519)	21.0271 (0.1672)	85.2260 (26.2738)	4.9757 (0.0191)	99.5331 (0.7172)

Tabla 4.11: Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de pino radiata usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 40 dB, e incrementando el número de canales usados.

PC	Nº Ch	Propuesta		M-W opt.		A-S opt.	
		NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)
1	1	2.8467 (0.0325)	99.8651 (0.4207)	3.0487 (0.0320)	99.8649 (0.4209)	2.8467 (0.0325)	99.8651 (0.4207)
2	2	1.6116 (0.0168)	99.9593 (0.1154)	2.5916 (0.0140)	99.9498 (0.0603)	14.8043 (0.0067)	99.3345 (0.2055)
2	3	0.5975 (0.0033)	99.9971 (0.0038)	1.3042 (0.0049)	99.9901 (0.0091)	0.8572 (0.0046)	99.9941 (0.0072)
3	4	0.5705 (0.0032)	99.9973 (0.0037)	2.0666 (0.0118)	99.9668 (0.0414)	7.8448 (0.0027)	99.6488 (0.0425)
3	5	0.5391 (0.0029)	99.9977 (0.0030)	1.8593 (0.0100)	99.9741 (0.0310)	4.9308 (0.0036)	99.8334 (0.0336)
3	6	0.4539 (0.0021)	99.9985 (0.0017)	1.4459 (0.0073)	99.9852 (0.0168)	13.0473 (0.0069)	98.7661 (0.0979)
3	7	0.2997 (0.0011)	99.9994 (0.0007)	0.9890 (0.0037)	99.9942 (0.0051)	0.4381 (0.0022)	99.9985 (0.0021)
4	8	0.2944 (0.0011)	99.9994 (0.0007)	1.5309 (0.0075)	99.9830 (0.0191)	5.4078 (0.0010)	99.8486 (0.0116)
4	9	0.2910 (0.0011)	99.9994 (0.0006)	1.4404 (0.0069)	99.9851 (0.0167)	4.9429 (0.0011)	99.8591 (0.0127)
4	10	0.2584 (0.0009)	99.9995 (0.0005)	0.9761 (0.0035)	99.9941 (0.0047)	2.8947 (0.0095)	99.9643 (0.0216)
4	11	0.2438 (0.0008)	99.9996 (0.0005)	0.9108 (0.0032)	99.9949 (0.0040)	1.7451 (0.0050)	99.9751 (0.0112)
4	12	0.2425 (0.0008)	99.9996 (0.0005)	0.8619 (0.0029)	99.9955 (0.0036)	1.1636 (0.0005)	99.9919 (0.0009)



Tabla 4.12: Métricas de calidad GFC y RMSE promediadas, junto con sus desviaciones típicas (STD) para recuperaciones de espectros de pino radiata usando todas las técnicas mencionada, considerando un SNR = 26 dB, e incrementando el número de canales usados.

PC	Nº Ch	Propuesta		M-W opt.		A-S opt.	
		NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)	NRMSE·10 ² (STD)	GFC (STD)
1	1	2.8467 (0.0325)	99.8651 (0.4207)	5.1438 (0.0351)	99.8649 (0.4209)	2.8467 (0.0325)	99.8651 (0.4207)
2	2	1.6116 (0.0168)	99.9593 (0.1154)	10.0998 (0.0591)	98.9614 (1.4203)	14.8044 (0.0067)	99.3345 (0.2055)
2	3	0.5979 (0.0033)	99.9971 (0.0038)	4.2783 (0.0213)	99.9044 (0.1255)	0.8572 (0.0046)	99.9941 (0.0072)
3	4	0.5715 (0.0032)	99.9973 (0.0037)	8.8726 (0.0430)	99.1870 (0.9783)	7.8449 (0.0027)	99.6488 (0.0425)
3	5	0.5412 (0.0029)	99.9977 (0.0030)	7.8868 (0.0383)	99.4035 (0.7078)	4.9308 (0.0036)	99.8334 (0.0336)
3	6	0.4568 (0.0021)	99.9984 (0.0017)	6.3921 (0.0325)	99.6382 (0.4421)	13.0472 (0.0069)	98.7661 (0.0980)
3	7	0.3051 (0.0011)	99.9993 (0.0007)	4.0704 (0.0176)	99.8932 (0.1093)	0.4382 (0.0022)	99.9985 (0.0021)
4	8	0.3020 (0.0011)	99.9994 (0.0007)	6.7362 (0.0297)	99.6111 (0.4108)	5.4077 (0.0010)	99.8486 (0.0116)
4	9	0.3056 (0.0011)	99.9993 (0.0007)	6.5949 (0.0298)	99.6224 (0.4118)	4.9429 (0.0011)	99.8591 (0.0127)
4	10	0.2788 (0.0009)	99.9995 (0.0006)	4.3422 (0.0155)	99.8765 (0.1042)	2.8953 (0.0095)	99.9643 (0.0216)
4	11	0.2721 (0.0009)	99.9995 (0.0006)	4.0903 (0.0154)	99.8889 (0.0959)	1.7451 (0.0050)	99.9751 (0.0112)
4	12	0.2820 (0.0010)	99.9994 (0.0006)	3.9511 (0.0147)	99.8974 (0.0875)	1.1632 (0.0005)	99.9919 (0.0009)

Capítulo 5

Conclusiones

5.1. Sumario

Según una nueva propuesta para optimizar el problema de recuperación espectral, los canales óptimos se obtienen cuando se usan la forma espectral de los componentes principales de la matriz de entrenamiento del proceso. Debido a que esta propuesta es sensible al punto exacto en que el componente principal corta el eje de las abscisas, se intentó buscar un modelo matemático para la fabricación exacta de los canales. Se hizo una revisión bibliográfica y una investigación en los componentes principales de espectros de cuerpo negro con el fin de extrapolar los resultados de este trabajo en procesos similares (procesos grises). Se llegó a un set de funciones ortogonales similares a los componentes, pero no exactamente iguales. Al utilizarlas como canales, se obtienen mejores resultados versus canales de cámaras reales, pero no mejor que los vectores teóricos, esto debido a que las funciones son ortogonales en el dominio $[0, \infty)$ y los vectores teóricos son finitos. Debido a la ortonormalidad de las funciones, se utilizaron para expandir la ecuación de Planck (que define los espectros de cuerpo negro), pero no se llegó a una solución analítica. Se buscaron opciones de funciones ortogonales con dominio finito, pero lamentablemente no se parecen a los componentes principales buscados.

Se plantearon hipótesis respecto a algunas interrogantes propuestas que podrán ayudar a entender mejor el problema, y llegar a una solución que optimice el problema de recuperación espectral. Producto de este estudio, se llegó a definir un nuevo algoritmo que utiliza los canales óptimos propuestos, y que obtiene mejores resultados al comparar las métricas de calidad GFC y NRMSE. Pero al someter el algoritmo a presencia de ruido electrónico, las métricas no superaron

a los otros métodos, a excepción de un set de datos de espectros de reflectancia de pino radiata, donde la técnica propuesta fue la óptima.

Uno de los aspectos interesantes observado en las simulaciones con el nuevo algoritmo, fue que las métricas tuvieron mejor calidad que el método teórico. Las conclusiones obtenidas de este fenómeno se deben a que el método propuesto utiliza como base un conjunto de mayor cardinalidad que el teórico, y además la base del teórico puede ser generada por la base del método propuesto; y por lo tanto, el método teórico podría generar espectros más detallados.

5.2. Conclusiones

Respecto a la razón de la forma espectral de los componentes principales, se concluye que existe una relación entre la matriz de correlación y el comportamiento polinomial de sus vectores propios (los componentes principales) debido a las pruebas realizadas. Se obtiene la hipótesis que esto se debe a la continuidad de los espectros analizados. Si se tuvieran espectros con bandas de emisión o absorción, los componentes principales también tenderían a tener estas bandas marcadas y generarían uno más cruces adicionales por el eje de las abscisas. Respecto a la fórmula para determinar el número de canales que genera un set de componentes, se llegó a una ecuación que es sólo válido para procesos de espectros continuos. Si se quisiese determinar una fórmula para determinar el número de canales ópticos que genera un set de datos de cualquier clase de espectros, entonces habría que definir un criterio que considere las bandas de emisión/absorción en los espectros de entrenamiento, y qué características deberían tener para que puedan generar un canal adicional.

El modelo matemático propuesto no funciona de buena manera en el método de recuperación de pseudo inversa propuesto por Arias y Sbárbaro debido a que este método exige ortogonalidad en los canales óptimos en el rango del proceso para poder aplicar $V^t = V^+$. Las funciones $\phi_n(m, \nu, \lambda)$ son ortogonales en el intervalo $[0, \infty)$, es decir, para que el producto interno sea igual a cero, debemos integrar desde cero al infinito, pero tanto en simulaciones como en la práctica, es imposible considerar longitudes de onda en este intervalo. Así, se adultera la ortogonalidad de las funciones cuando acotamos el intervalo y no es posible aplicar el método.

Por otra parte, al deducir los canales óptimos de acuerdo a estos autores y aplicarlos en métodos como Maloney-Wandell, las recuperaciones espectrales son ligeramente mejores que con canales deducidos de los componentes principales teóricos obtenidos con 'pcacov'. Esto se

debe a que el método de Maloney-Wandell es más robusto respecto a ruido o irregularidades, permitiendo buenas estimaciones con canales que tan solo son similares a los óptimos teóricos. Aún así, los canales deducidos de $\phi_n(m, \nu, \lambda)$ funcionan mejor que los componentes por algún motivo relacionado con la forma espectral que debe estudiarse y no con la intensidad del canal.

Si bien no se pudo encontrar un set de funciones exactas a la forma espectral de los componentes principales, éstas funcionarían como “buenos” canales ópticos en cualquier método de estimación espectral. No resulta factible buscar un modelo exacto, ya que los componentes principales varían con cualquier modificación en la matriz de entrenamiento, por lo tanto, habría que buscar un set de funciones para cada matriz.

Respecto al nuevo algoritmo propuesto, se puede concluir que en ausencia de ruido, este método se desempeña mejor (respecto a las métricas calculadas) que los analizados en todos los set de datos. En el caso de presencia de ruido electrónico con 40 dB se nota una leve desventaja en comparación a los otros algoritmos estudiados, y para 26 dB, ésta diferencia se hace más notoria con diferencias en GFC de 26% y diferencia de NRMSE de 0,17. La única excepción fue en el set de datos de Pino Radiata, donde el método se desempeñó como el óptimo. Se puede concluir que el algoritmo propuesto puede ser muy sensible al ruido en algunos tipos de procesos, y se recomienda realizar pruebas previas (para medir la sensibilidad) cuando se requiera utilizarlo en un caso en particular.

5.3. Trabajo Futuro

- Extrapolar los resultados de este trabajo a otra banda espectral como el infrarrojo.
- Investigar herramientas matemáticas que permitan resolver analíticamente los coeficientes de expansión de la ecuación de Planck.
- Definir un criterio para determinar cuántos canales genera un set de componentes principales de una matriz de entrenamiento con espectros con bandas de emisión o absorción.
- Construir los canales óptimos, luego de determinar cuales son los que permitan una mejor reconstrucción espectral.
- Validar las hipótesis de este trabajo, realizando más pruebas y estudios en el tema.

Bibliografía

- [1] CARLOS A. TORO N., *Desarrollo de Sistemas de Adquisición Multiespectral para el Monitoreo y Caracterización de Procesos Industriales*, Tesis para optar al grado de Doctor en Ciencias de la Ingeniería con mención en Ingeniería Eléctrica, 2014, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción.
- [2] W. K. PRAT AND C. E. MANCILL, *Spectral estimation techniques for the spectral calibration of a color image scanner*, Appl. Opt.15, pp 73-75, 1976.
- [3] L. ARIAS, S. TORRES, *On the Flame Spectrum Recovery by Using a Low-Spectral Resolution Sensor*, C. San Martin and S.-W. Kim (Eds.): CIARP 2011, LNCS 7042, pp. 256-263, 2011.
- [4] M. LOPEZ, J. HERNÁNDEZ, E. VALERO, AND J. ROMERO. *Selecting algorithms, sensors, and linear bases for optimum spectral recovery of skylight*, J. Opt. Soc. Am. A 24, 942–956, 2007.
- [5] L. ARIAS AND D. SBÁRBARO, *Optimum number of sensors and their spectral shapes for spectral reconstruction: A non-parametric approach.*, Reporte interno del Laboratorio SP&R, 2014.
- [6] FRANCISCO J. RAMOS C., *Desarrollo Matemático de los Componentes Principales de Espectros de Cuerpo Negro, como Base de Otros Procesos*, Tesis para optar al título de Ingeniero Civil en Telecomunicaciones, 2015, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción.
- [7] LAURENCE T. MALONEY, BRIAN A. WANDELL, *Color constancy: a method for recovering surface spectral reflectance*, Journal Opt. Soc. Am. A , Vol. 3, No. 1, Enero 1986, pp 29-33.
- [8] GERSHON BUCHSBAUM, ORIN BLOCH, *Color categories revealed by non-negative matrix factorization of Munsell color spectra*, Journal Vision Research, Volume 42, Issue 5, March 2002, Pages 559-563.

- [9] CHRISTOPHER M. BISHOP, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Ed. Springer, 2006.
- [10] MANUEL TERRÁDEZ G. Y OTROS, *Proyecto E-MATH: Uso de las TIC en asignaturas cuantitativas aplicadas*, Universitat Oberta de Catalunya, 2001.
- [11] JOSÉ LUIS V. VILLARDÓN, *Análisis de Componentes Principales*, Universidad de Salamanca, Departamento de Estadística.
- [12] SANTIAGO DE LA FUENTE F., *Componentes Principales*, Universidad Autónoma de Madrid, 2011.
- [13] DENNIS G. ZILL, *Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado*, 6ta edición, Ed. International Thomson, 1997.
- [14] J. SÁNCHEZ-RUIZA, P. LÓPEZ-ARTÉSC, J.S. DEHESAB, *Expansions in series of varying Laguerre polynomials and some applications to molecular potentials*, Journal of Computational and Applied Mathematics, v153, Issues 1-2, pp 411-421, 2003.
- [15] ALICIA CORDERO, JOSÉ HUESO, JUAN TORREGROSA, *Cálculo numérico: Teoría y problemas*, Ed. UPV, 2004.
- [16] B.SALEH, JOHN WILEY & SONS, *Fundamentals of Photonics*, Inc. 1991, p.668.
- [17] JOSÉ MAZA SANCHO, *Curso EH2802*, Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Septiembre 2015.
- [18] WIKIPEDIA, THE FREE ENCYCLOPEDIA, http://es.wikipedia.org/wiki/Polinomios_ortogonales
- [19] J.C MASON, D.C HANDSCOMB, *Chebyshev Polynomials*, 1ra edición, Ed. Chapman & Hall - CRC, 2003.
- [20] JUAN I. QUIJANO R., *Quality metrics for spectral estimation*, Thesis work, Master in Photonics, Escola Tècnica Superior d'Enginyeria de Telecomunicació de Barcelona, 2010.
- [21] MARIO G. ROJO GUZMAN., *Estimación de porcentaje de humedad en pino radiata utilizando espectroscopia de reflectancia en el infrarrojo cercano (NIR) y regresión lineal múltiple por mínimos cuadrados parciales (RPLS)*, Tesis para optar al título de Ingeniero Civil en Telecomunicaciones, 2013, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción.

- [22] FABIÁN E. MEZA BARRUETO, *Desarrollo de método de diseño de sensores óptimos para recuperación espectral y colorimétrica*, Tesis para optar al título de Ingeniero Civil en Telecomunicaciones, 2015, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción.
- [23] DIANA D. SUHR, *Principal Component Analysis vs. Exploratory Factor Analysis*, SAS Institute Inc, Statistics and Data Analysis, paper 203-30.
- [24] HYNDMAN, ROB J. KOEHLER, ANNE B., *Another look at measures of forecast accuracy*, International Journal of Forecasting, vol. 22, Issue 4, pp. 679-688, 2006.
- [25] LUIS F. RESTREPO, SANDRA L. POSADA, RICARDO R. NOGUERA, *Application of the principal component analysis in the evaluation of three grass varieties*, Colombian journal of animal science and veterinary medicine, vol. 25, No 2, pp. 258-266, 2012.
- [26] J. HILTUNEN, *Spectral Data Base: The reflectance spectra of 1269 matt Munsell color chips*.



Apéndice A

Códigos utilizados

A.1. Algoritmo de Pseudo inversa con canales óptimos

```
close all, clear all, clc

%% Grafica de radianza espectral teorica v/s longitud de onda

lambdai=linspace(1*10^-7,1*10^-5,869); %vector de longitud de onda
C1=1.191*10^-16; %Primera constante de Planck
C2=1.438*10^-2; % Segunda constante de Planck
T=1500:1:2500; % Vector Temperatura
RTi=zeros(length(lambdai),length(T)); %matriz de entrenamiento

for i=1:length(T)
    RTi(:,i)=(C1./(lambdai.^5)).*(1./(exp((C2./(lambdai.*T(i))))-1));
end
RTi=RTi';
V=pcacov(RTi); %% V contiene los componentes principales
base1=(V(:,1:3)); %se eligen los primeros 3 pc

G=f_laguerre(6,2,3,lambdai); %se generan las funciones phi
a=0.75*[0.323; 0.312; 0.293]; %se multiplican por su a_n optimo
for i=1:length(a)
    G(:,i)=G(:,i)*a(i);
end

W=descomp_optimos(G); %se descomponen los canales optimos
base1=G;
j=1;
%% Se realizan 1001 recuperaciones espectrales
%% para toda la matriz de entrenamiento

for i=1:length(T)
    RT_p=RTi(i,:);
    c1=RT_p*W(:,1); % modelo de la camara.
    c2=(RT_p*W(:,2))-(RT_p*W(:,3));
    c3=(RT_p*W(:,4))-(RT_p*W(:,5))+(RT_p*W(:,6));
    e=[c1 c2 c3];
    espectro_recuperado=base1*e';
    GFC(j) = gfc(RT_p,espectro_recuperado'); % se calcula el GFC
    NRMSE(j) = nrmse(RT_p,espectro_recuperado'); % se calcula el NRMSE
    j=j+1;
end
```

Fig. A.1: Algoritmo de Pseudo inversa con canales óptimos

A.2. Algoritmo de Maloney-Wandell con canales óptimos

```

close all, clear all, clc

%% Grafica de radianza espectral teorica v/s longitud de onda

lambdai=linspace(1*10^-7,2*10^-5,869); %vector de longitud de onda
C1=1.191*10^-16; %Primera constante de Planck
C2=1.438*10^-2; % Segunda constante de Planck
T=1500:1:2500; % Vector Temperatura
RTi=zeros(length(lambdai),length(T)); %matriz de entrenamiento

for i=1:length(T)
    RTi(:,i)=(C1./(lambdai.^5)).*(1./(exp((C2./(lambdai.*T(i))))-1));
end
RTi=RTi';
V=pcacov(RTi); % V contiene los componentes principales
basel=(V(:,1:3)); %Se guarda una base con los primeros 3 pc

G=f_laguerre(6,2,3,lambdai); %Se generan las funciones phi
a=[0.323; 0.312; 0.293]; %Se multiplican por su a_n Óptimo
for i=1:length(a)
    G(:,i)=G(:,i)*a(i);
end

W=descomp_optimos(G); %Se descomponen los canales Óptimos
W=W(:,1:3); %Se eligen 3 canales
j=1;

%% Se realizan 1001 recuperaciones espectrales
%% Para toda la matriz de entrenamiento

for i=1:1:length(T)
    RT_p=RTi(i,:);
    ck=W'*RT_p'; %% modelo lineal de la camara.
    Vi=W*(basel); %se escogen solo 3 componentes
    VPseu=pinv(Vi); % calculamos la pseudoinversa.
    ER=basel*VPseu*ck; %% ER es el espectro recuperado
    GFC(j) = gfc(RT_p,ER'); %%Calculo del GFC
    NRMSE(j) = nrmse(RT_p,ER'); %Calculo del NRMSE
    j=j+1;
end

```

Fig. A.2: Algoritmo de Maloney-Wandell con canales óptimos

A.3. Función que calcula $\phi_n(\mathbf{m}, \nu, \lambda)$

```

function G=f_laguerre(alpha,div,n,x)
% parametros m,nu,numero de funciones y la v.d
comp=4750000; % coeficiente de compresion
for i=0:n-1
    L=Laguerre_coeff(i,alpha); %calculo de los polinomios de laguerre
    f=sqrt(factorial(i)/(gamma(i+alpha+1)));
    G(i+1,:)=f.*exp(-(comp*x).^/2).*((comp*x).^(alpha/div)).*...
        *(polyval(L,(comp*x)));
end
G=G';

```

Fig. A.3: Función que calcula $\phi_n(\mathbf{m}, \nu, \lambda)$

Apéndice B

Definiciones de estadística

B.1. Varianza

La varianza es una medida de la dispersión de los datos y se calcula de la forma definida en la ecuación (B.1).

$$Var(X) = E[(X - \mu)^2] = E[X^2] - \mu^2 \quad (B.1)$$

B.2. Covarianza

La covarianza indica el grado de variación conjunta de dos variables. Es el dato básico para determinar si existe una dependencia entre ambas variables y se define como,

$$\sigma(X, Y) = E[(X - E[X])(Y - E[Y])] \quad (B.2)$$

B.3. Correlación

La correlación indica la fuerza, dirección y proporcionalidad de una relación entre dos variables estadísticas. Existen varios coeficientes que miden correlación, siendo uno de los más usados el coeficiente de Pearson definido en la ecuación (B.3).

$$\rho_{X,Y} = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X\sigma_Y} = \frac{E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)]}{E[(X - \mu_X)^2]E[(Y - \mu_Y)^2]} \quad (\text{B.3})$$



Apéndice C

Documentos

- C.1. **Reporte Interno del grupo SP&R: On the optimum number of sensors and their spectral sensitivities for spectral reconstruction: Anon-parametric approach**



On the optimum number of sensors and their spectral sensitivities for spectral reconstruction: A non-parametric approach

Luis Arias and Daniel Sbarbaro, *Senior Member, IEEE*

Abstract—The need for systems with fast response and high spatial-spectral resolution at low costs has led many authors and companies to design systems based on a set of sensors with sensitivities tuned to reconstruct spectral information. The design of such sensitivities has been carried out using parametric representations and complex optimization solvers. This work, however, proposes a simple, non-parametric method for determining the optimal number and spectral sensitivities of effective optical channels for real-time spectral or colorimetric reproduction. The advantage of this approach lies in the fact that it does not bias estimates by assigning predefined parametric functions nor does it require the use of iterative algorithms to find optimal sensors. The optimal number of sensors and their spectral sensitivities are directly obtained by using a set of representative basis vectors chosen to reproduce spectrum of a spectral data with minimum variance. To illustrate the performance of the proposed approach, optimal spectral sensors were estimated for skylight recovery, illustrating the similarities of these results with others found in the literature for the same spectral data set. In addition, Munsell color patches and natural scenes spectra were also used to find a set of optimal spectral sensitivities. The results show that the optimal number of channels is, in general, higher than the number of basis vectors, providing an improved spectral reconstruction compared to the one estimated using classical retrieval techniques. From the spectral point of view, these results open new avenues to design cost effective optimal imaging devices like cameras, scanners and fast multi-hyperspectral systems.

Index Terms—Spectral sensitivity, optimal sensors, spectral reconstruction.

I. INTRODUCTION

IN spectral or colorimetric characterization, each part of the imaging system has a direct influence on the reproduction of spectral information from a real image. From a spectral or colorimetric point of view, a fundamental part of a system for acquiring and/or reproducing images is the detector, which, combined with optical filters, generates a multichannel acquisition system [1], [2]. Thus, multispectral systems carry information from a few number of optical channels per pixel, to hundreds of channels, providing more spatial-spectral information from targets of fixed scenes. However, as the number of optical channels increases, systems become more complex and expensive, making them impractical for uncontrolled and

real-time applications where fast sensor responses and high spatial-spectral resolutions, at low cost, are needed. [3], [4].

Fortunately, in many real applications spectral information can be synthesized using lower dimensions. Thus, several approaches have been proposed in the last decades to represent spatial-spectral information by using few broadband optical channels, together with advanced recovering spectrum techniques [5], [6], [7], [8], [9], [10], [11]. However, these methods are only effective if these few broadband channels are designed to reduce spectral differences between recovered spectrum and real spectral targets [12], [13]. With this purpose in mind, several parametric techniques have been proposed to determine the number of optical channels and their spectral sensitivities by minimizing spectral or colorimetric differences between the reproduced and the real spectrum, or color [3], [14]. However, these solutions are complex and suboptimal, missing colorimetric or spectral information from the spectral target [15]. Several authors have optimized spectral sensitivities by assuming that they can be represented by some nonlinear functions with free parameters. These nonlinear parametrizations typically consider Gaussian functions [15], [16], [12], and physical constraints such as positive functions [17], [18]. However, all these assumptions introduce a bias in the final estimates. Several approaches have been proposed to find the parameters of these functions by minimizing a cost function defined in terms of spectral or colorimetric differences. The nonlinear parametrizations lead to non-convex optimization problems; therefore, advanced optimization methods, such as modified Newton methods with gradient projection, will be required [17]. The main problem, in this context, is that these recursive algorithms do not guarantee global convergence: i.e. their convergence depends on the initial conditions.

Many authors have proposed alternative approaches to optimize spectral sensitivity functions. For instance in [16], they search for equally-spaced central wavelength channels, in [19], [12] use exhaustive search over a grid of possible values, and in [9] use the maximization of orthogonality based on the characteristics of reference spectra. All these methods have been widely used and evaluated by the scientific community for the development of vision and spectral characterization systems [3]. However, the results are sometimes inconsistent, because for the same application, different numbers of channels have been reported in the literature [20].

In this paper, we present a simple and effective non-iterative and non-parametric method for determining both the optimal number of optical channels and their spectral sensitivities for

L. Arias is with the Department of Electrical Engineering, Universidad de Concepcion, Casilla 160-C, Concepcion, Chile and with Center for Optics and Photonics, Universidad de Concepcion, Casilla 4012, Concepcion, Chile (e-mail: luarias@udec.cl).

D. Sbarbaro is with the Department of Electrical Engineering, Universidad de Concepcion, Casilla 160-C, Concepcion, Chile (e-mail: dsbarbar@udec.cl).

spectral or colorimetric reconstruction. To the best of our knowledge, this is the first work that addresses the estimation of these without using iterative algorithms, shedding light on the relationship between the characteristics of the spectral data and the effective number of filters required.

This paper is organized as follows: Section II describes the spectral estimation problem. In Section III, the non-parametric method for optimal design of optical systems is presented. By using an open-access and measured spectral databases, Section IV illustrates, the application of the proposed algorithm for Gaussian sensors design for optimum spectral recovery of skylight, and for determining the effective number and their sensitivities for optimal spectral or colorimetric recovery, comparing retrieval performance with other methods available in the literature. Finally, in Section V, concluding remarks are given.

II. SPECTRAL ESTIMATION PROBLEM

Let us denote as $E(\lambda)$ any real spectrum in the form of emittance, reflectance, absorption or transmittance from any process, where λ represents any wavelength in the band $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$. Suppose now that the spectral measurement process is carried out by means of a digital radiometer that samples the measured spectrum band using N channels. From this, the measured sampled spectrum using the i th channel is precisely $E(\lambda_i)$ with $i = 1, \dots, N$ and $\lambda_i \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}]$ for all i .

The spectral estimation problem considers as a goal to estimate a high-spectral resolution data by using a low-spectral resolution optical system; i.e. an optical system with k channels, where $k < N$, and typically $k \ll N$. Assuming a linear behavior of the optical system, the optical sensor responses can be modeled, in matrix notation as:

$$\rho = \omega^t E + \sigma, \quad (1)$$

where ρ is a vector of sensor outputs, ω is a N -by- k matrix containing the spectral sensitivity (in practice, represented by the responsivity of the detector and filters transmittance) of the k channels, E is a column vector representing the impinging spectrum in the optical array, sampled at N wavelength, and σ is a vector representing additive noises. For simplicity we will consider that the additive noise is previously known and then it can be subtracted to ρ .

The problem of estimating a high-spectral resolution spectrum E from k sensor responses is an ill-posed problem and therefore, some additional information must be considered in order to have meaningful estimates. *A priori* knowledge of the spectral target has been used to regularize the problem and to have consistent estimates [1], [21], [22], [23], [24], [12]. Let us assume that a set of spectra from a target has been measured and collected in a *learning matrix*, L , composed of p linear-independent samples measured at N channels. The dimension of L is p -by- N . Suppose now that the spectra in L can be linearly approximated by a linear model described in terms of a set of $n < N$ basis functions as follows:

$$E^{(r)} = V\epsilon, \quad (2)$$

where the symbol (r) means an approximated spectrum in terms of the n basis vectors, V is a N -by- n basis matrix, capable of reconstruct any spectrum contained in L , and column vector ϵ contains the n coefficients for the linear combination. Considering this approach, matrix V has been classically obtained by means of principal component analysis (PCA), non-negative matrix factorization (NNMF) or the independent component analysis (ICA) [12].

In essence, the pseudoinverse of Eq. 2 provides an optimal solution for spectral recovery, where the optical sensor responses are represented by ϵ and the different spectral sensitivities are obtained from the rows of the pseudoinverse of matrix V . However, the rows of V^+ can have negative values, representing the more important constraint for real optical systems design. In section III we deal with this constraint.

Considering Eq. 1 and Eq. 2, there are two approaches to address the estimation problem. The first one does not explicitly use the sensor spectral sensitivities and therefore does not require the sensor model. A representative method using this approach was proposed by Wiener *et al.* [11]. This method models the recovered spectrum as

$$\hat{E}^{(r)} = Q\rho, \quad (3)$$

where the mapping operator Q is found by minimizing the squared error between recovered $\hat{E}^{(r)}$ and $E^{(r)}$ over the learning samples. The solution to this problem is given by $Q = \rho_L^+ E_L^{(r)}$, where the symbol $(+)$ means pseudoinverse, ρ_L is a k -by- p matrix and $E_L^{(r)}$ is a N -by- p matrix.

A second method was proposed by Imai *et al.* [23]. This method uses a model relating the sensor output ρ and ϵ ; i.e. $\epsilon = Q_1\rho$. The matrix Q_1 can be estimated using the learning samples measured with a radiometer and solving a least square problem leading to $Q_1 = \epsilon_L \rho_L^+$. The spectrum can be recovered by replacing this relationship in Eq. 3, achieving:

$$\hat{E}^{(r)} = VQ_1\rho. \quad (4)$$

One of the main disadvantages of these methods is that both, L and ρ should be measured at the same time with the radiometer and the optical sensor system, respectively. Thus, some experimental spatial-temporal issues must be taken into consideration to obtain the learning samples.

The second approach explicitly uses the sensor spectral characteristics. Hence, the matrix Q_1 can be directly calculated as follows :

$$Q_1 = [\omega^t V]^+. \quad (5)$$

By replacing Eq. 5 on Eq. 4, the recovered spectrum $\hat{E}^{(r)}$ is:

$$\hat{E}^{(r)} = V[\omega^t V]^+ \rho. \quad (6)$$

This method, known as the Maloney-Wandell method [21], [22], has been widely used due to its simplicity and good spectral reconstructions [12]. The information concerning the sensor spectral sensitivities is provided by manufacturers in terms of a normalized spectral sensitivity (in dimensionless

units); but, in this case, the gain of each channel must be estimated. Eq. 6 clearly shows the nonlinear dependence of the estimated spectrum with respect to the spectral sensitivity of each channel, the number of optical channels and chosen basis vectors.

III. OPTIMUM SENSORS AND THEIR RELATION WITH BASIS FUNCTIONS

This work presents a simple and effective non-parametric approach for determining the optimum spectral sensitivity and the number of optical channels. To do so, model Eq. 2 provides the basis for finding the sensitivities function for recovering spectrum E , by:

$$\epsilon = V^+ E, \quad (7)$$

where rows of V^+ represent the optimal spectral sensitivities. Since the rows of V^+ can have negative values, it is well known they cannot represent physically realizable spectral sensitivities. In order to deal with this problem, we propose a simple decomposition, taking into account that negative sensitivities can be represented in their positive form, but considering its respective response as negative on the recovering spectrum process. Thus, we propose to decompose each row of V^+ in terms of its positive and negative parts, defining a new set of realizable optimal positive channels, corresponding to the absolute values of each part.

Considering this approach, if the number of zero crossing wavelengths for row j of V^+ ; i.e. $[V^+]_j$, is p_j ; then row $[V^+]_j$ can be represented by a linear combination of $P_j = p_j + 1$ positive row vectors w_i^j , as follows:

$$[V^+]_j = \sum_{i=1}^{P_j} \alpha_i^j w_i^j = U^j W^j, \quad (8)$$

where W^j is a matrix of P_j -by- N and vector $U^j = [\alpha_1^j, \dots, \alpha_{P_j}^j]$. The rows of W^j are the new set of P_j realizable optimal positive channels associated to row $[V^+]_j$. The values of coefficients α_i^j will be 1 if vector w_i^j corresponds to a positive part of $[V^+]_j$, while if vector w_i^j corresponds to a negative part, then α_i^j will be -1 . In addition, vectors w_i^j have the following properties:

$$w_i^j T w_k^j = 0, \quad \forall i \neq k \quad (9)$$

$$[V^+]_j T [V^+]_j = \sum_{i=1}^{P_j} w_i^j T w_i^j. \quad (10)$$

Hence, the coefficient ϵ_j at Eq. 7 is calculated as the sum and subtraction of the P_j optimal sensors responses under certain impinging spectrum E , as:

$$\epsilon_j = U^j W^j E. \quad (11)$$

Once column vector ϵ is calculated, then the pseudoinverse of Eq. 7 is used for recovering spectrum \hat{E} .

Considering this approach, the optimal total number K of optical channels to achieve in theory an exact spectral match $E^{(r)} = \hat{E}$ in the recovering process, will be exactly

$$K = \sum_{j=1}^n P_j, \quad (12)$$

where n is the number of basis functions. This is an important result providing a non-iterative method, finding the number and the behavior of the optimal spectral sensitivities. The method estimates the optimal number of channels required to recover a set of spectra by inspecting the zero crossing wavelengths for rows of V^+ . In this context, two aspects should be highlighted: historically it has been widely accepted that the number of optical channels k should be equal to the number of basis vectors n , a simple fact which has been experimentally demonstrated [10], [12], [8]. However, we have demonstrated that in general the optimal number of sensors will be higher than the number of basis vectors; i.e. $K > n$. In addition, if several physical constraints are imposed, such as spectral sensitivities shapes e.g. Gaussian behavior, then the results provided by the proposed approach can be used to set suitable initial conditions, such as center wavelength location of sensors, band-width and relative height between them, to any nonlinear optimization algorithm aiming to find optimal sensor sensitivities.

In the next section, the proposed approach is applied to several optimal spectral sensitivity estimations and spectral recovery problems, considering classical real spectral databases such as: skylight spectra, reflectance of Munsell color patches and natural scenes under skylight illumination.

IV. COMPUTATIONAL RESULTS

Some of the most popular spectral data sets for evaluating spectral or colorimetry reconstruction techniques are the ones obtained from spectral reflectance of Munsell color patches, natural spectra and skylight illumination. The number of basis required to recover a spectrum with high degree of accuracy for Munsell colors are between three to eight basis as reported in [20], [22], [24], [25], between three to ten for natural scenes [26], [8], [12], [9] and between three to six for skylight recovery [12].

In this work, we estimate the number of basis vectors required for summarizing the spectral information contained in the learning samples by performing PCA. This method has reported, for several applications, good results in dealing with practical issues [20], [27] compared to NNMF and ICA [28], [12], [29], [30]. Since PCA provides orthogonal vectors pointing in the direction of maximum variance, then the number of vectors, n , was estimated by considering the variance contribution *per* components.

First, to illustrate the performance of the proposed technique, a standard open-access database having 55 spectra from Color Imaging Laboratory (see <http://www.ugr.es/colorimg/>), University of Granada, Spain [31] was considered. A total of six eigenvectors summarizing 1567 skylight spectra were previously used by the authors to estimate three to five optimal Gaussian spectral sensors considering the same number of basis vectors, respectively. The authors estimated the sensors spectral sensitivities by means of an exhaustive search, varying as much as possible central wavelength, bandwidth

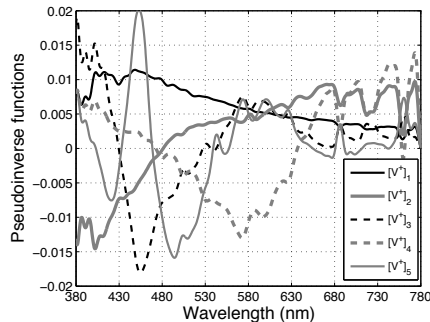


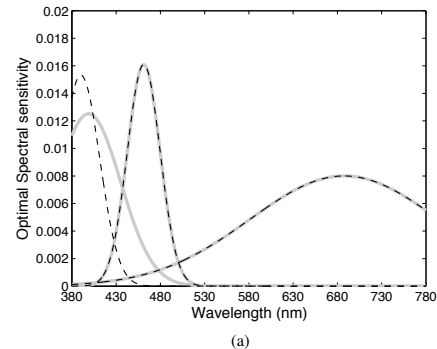
Fig. 1. Pseudoinverse of the first five basis vectors selected for skylight recovery [31].

and relative height between sensors. They also considered the effect of the optical system noise on the estimated optimal sensors. Then, the authors used Maloney-Wandell technique to evaluate three, four and five optimum sensors, and reported in Fig. 1 from [12].

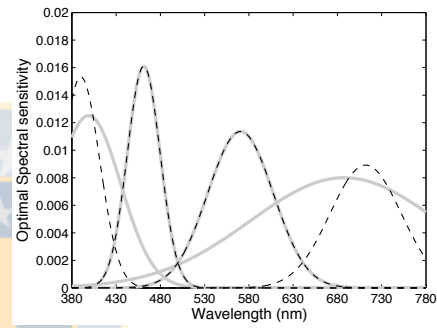
For this database, and considering the first five eigenvectors reported in [31], the proposed method was used. The pseudoinverse of the matrix V considering the first $n = 5$ basis vectors is depicted in Fig. 1. Then, by decomposing each row $[V^+]_j$ with $j = 1, \dots, 5$, in terms of its positive and negative parts, a set of $K = 17$ new realizable positive channels is defined. Note that $[V^+]_1$ is always positive and it has similar spectral behavior compared to skylight spectra.

In order to compare the estimated spectral sensitivities with the superimposed-Gaussian sensors obtained in [12], a Gaussian function was fitted (with a 95% of confidence bound) to each one of the 16 optimal channels (note that the first optical channel was not fitted due to its high broadband characteristics not considered in [12]). Then, Maloney-Wandell technique was applied using the entire database, considering a signal-to-noise ratio (SNR) of 40dB and 26dB over sensors responses. A combination function was implemented in Matlab to select the three to five optimal Gaussian spectral sensors from the total of 16 optimal positive channels, selecting those channels such that metrics values are optimized. Metrics such as GFC (goodness-of-fit coefficient) and PSNR (peak-signal-to-noise-ratio) [32], [28] were used to evaluate spectral differences, and ΔE_{ab}^* metric to evaluate colorimetric differences (using an equi-energy illuminant). Table 1 summarizes optimum channels which optimize spectral and colorimetric metrics values. These optimal channels are depicted in Fig. 2. Notice that the optical sensors reported in [12] are very similar to those estimated with the proposed method providing very close estimates for central wavelengths, bandwidths and relative height between sensors. It is important to stress that these results were obtained without using an exhaustive search.

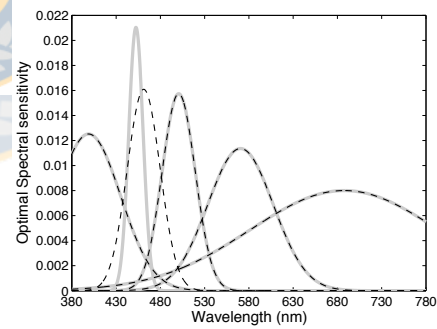
Additional experiments are carried out to determine the number of optimal optical channels and their sensitivities for spectral or colorimetric reproduction. The spectral data sets consider a ColorChecker of 140 color patches as target for



(a)



(b)



(c)

Fig. 2. Optimal spectral sensitivity sensors for skylight recovery. Solid lines denote SNR = 40dB, and dashed curves denote SNR = 26dB. Figs. (a), (b) and (c) should be compared with Fig. 1 at reference [12], respectively.

Munsell color evaluation, and a total of 280 reflected spectra from trees, flowers, grass and sea reflections having skylight as illuminant. A SpectraScan PR-655 spectroradiometer was used to build matrix L for each data set, in the spectral band between 380-780nm, with 4nm steps. The dimension of matrix L is 140-by-101 for color charts and 280-by-101 for natural scenes. Figs. 3(a) and (b) show the respective measured spectral data sets. PCA was applied to each data set

TABLE I
OPTIMUM THREE TO FIVE GAUSSIAN OPTICAL CHANNELS WHICH OPTIMIZE SPECTRAL AND COLORIMETRIC METRICS VALUES. REPORTED METRICS VALUES ARE THE OPTIMUM OVER THE ENTIRE 55 SKYLIGHT SPECTRA, CONSIDERING AN ADDITIVE WHITE-GAUSSIAN SENSOR NOISE OF 40 DB AND 26DB.

N^o of channels	3		4		5	
SNR (dB)	40	26	40	26	40	26
Max GFC(%)	99.9666	99.5046	99.9560	99.0896	99.9428	98.7349
Max PSNR	10.1896	-3.2479	9.2967	-4.2368	8.0527	-5.3143
Min ΔE_{ab}^*	0.2038	1.0016	0.1881	0.9784	0.1880	0.7859
Optimum Channels	2-3-5	3-4-5	2-3-5-9	4-5-9-10	2-3-9-13-14	2-3-5-9-14

and the variance contribution *per* component was evaluated, where six components explain the 99.73% of the variance for colors chart and five components explain the 99.75% of the variance associated to natural scenes. These results agree with previous reports [22], [26], and therefore we consider $n = 6$ basis vectors for spectral or colorimetric reconstruction of Munsell colors, and $n = 5$ for natural spectra. The basis vectors are depicted in Figs. 3(c) and (d). After decomposing the pseudoinverse of these basis vectors in terms of its positive and negative parts, the proposed technique provides the estimated optimal sensor spectral sensitivities, achieving a total of $K = 22$ and $K = 17$ optical channels, for color patches and natural scenes, respectively. These optimal channels are depicted in Fig. 4 and Fig. 5, respectively. Note that optimal optical channels tend to have narrow spectral bandwidth as the number of basis vectors increases, as previously authors have also experimentally noted [12].

Once the optimal sensors have been calculated, the coefficients ϵ_j are obtained from Eq. 11 and the recovered spectrum is estimated by Eq. 7. To evaluate the performance of the proposed approach, GFC and PSNR metrics were used to quantify spectral differences, and ΔE_{ab}^* metric for colorimetric differences (using an equi-energy illuminant) for the whole color patches and natural spectra.

In order to have a reference to compare the proposed approach, the approximated spectra $E^{(r)}$ was directly computed by Eq. 2 using selected basis for both spectral data sets. The spectral and colorimetric differences with respect to original spectra in terms of the defined metrics are summarized in Table II, row $E^{(r)}$. These values represent the best case, since $E^{(r)}$ is the estimate with minimum variance for a given number of basis vectors.

Using the proposed technique, the spectra of color patches was estimated with $K = 22$ optimal optical channels, as depicted in Fig. 4. The performance in terms of the different metrics is summarized in Table II, row $\hat{E}_0^{(r)}$. Note that the results are almost the same values obtained by the approximated spectrum ($E^{(r)}$). The slight differences can be attributed to the low-spectral resolution of the spectroradiometer; i.e. the use of an instrument with higher-spectral resolution will enable a more accurate estimation of the zero-crossing point, decreasing the spectral aliasing associated to the contours, achieving the same level of performance.

The same procedure was applied to natural spectral scenes, using the total of $K = 17$ optimal optical channels as depicted in Fig. 5. The corresponding metric values are summarized in Table II, row $\hat{E}_0^{(r)}$. Similar results are also achieved.

To carry out a comparative study, we estimate the spectrum by the Maloney-Wandell (MW) recovering technique. To this end, a Gaussian-spectral sensitivities camera, with six equi-spaced channels for Munsell color and five equi-spaced channels for natural spectra, each one at 50nm of spectral width, was simulated. Then, Eq. 6 was evaluated for Munsell color recovery with $n = 6$ basis vectors and with $n = 5$ for natural spectra recovery. The metrics values achieved are also summarized in Table II, row $\hat{E}_{MW}^{(r)}$. Note that the proposed non-parametric method outperforms Maloney-Wandell technique.

In spite of these excellent results, a practical limitation of the proposed approach is the high number of optimal channels required (22 for Munsell colors and 17 for natural spectra recovery); being in this way less attractive for practical applications than the Maloney-Wandell. In order to lead with this practical limitation, it is proposed to select only one optimal channel *per* basis vector at the expense of losing accuracy in the spectral reconstruction. For each pseudoinverse of basis vector we will select the channel that minimize the following cost function:

$$\min_{i \in \{1, \dots, P_j\}} \left[[V^+]_j - \alpha_i^j w_i^j \right]^T \left[[V^+]_j - \alpha_i^j w_i^j \right]. \quad (13)$$

By using properties (9) and (10), the problem posed by (13) is equivalent to finding the channel with the maximum inner product; i.e.

$$\max_{i \in \{1, \dots, P_j\}} w_i^{jT} w_i^j \quad (14)$$

Thus, the six optical channels $CH1$, $CH2$, $CH5$, $CH10$, $CH12$ and $CH20$ were selected for color patches and the five optical channels $CH1$, $CH3$, $CH5$, $CH8$ and $CH11$ were selected for natural spectra. Then, these channels were used to estimate recovered spectrum $\hat{E}_{OPTMW}^{(r)}$ by applying Maloney-Wandell technique. The metric values are summarized in Table II, row $\hat{E}_{OPTMW}^{(r)}$. For Munsell color charts, the Maloney-Wandell technique implemented with only a subset of optimal channels has significantly improved GFC and PSNR metrics values, while for natural spectra samples, Maloney-Wandell technique has improved PSNR and ΔE_{ab}^* metrics values for the whole set.

V. CONCLUSION

The problem of finding the number of effective optical channels and their spectral sensitivities, for an optimum spectral reconstruction, was addressed using a non-parametric method. Under this framework, the optimal number of optical

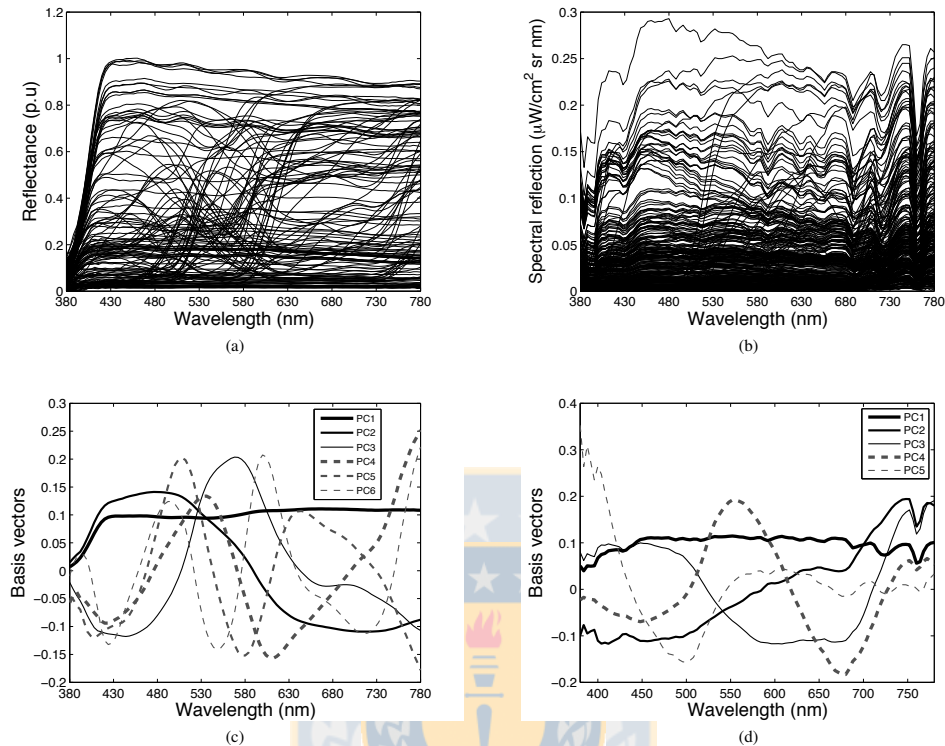


Fig. 3. (a) Reflectance spectral database from ColorChecker of 140 color patches. (b) Spectral database from reflections of natural scenes. (c) First six principal basis vectors selected for spectral recovery of Munsell color reflectance and (d) first five principal basis vectors selected for spectral recovery of natural scenes spectra.

channels and their sensitivity strictly depend on a set of basis vectors calculated using *a-priori* information, and on the zero-crossing points of their respective pseudoinverses. By means of a simple decomposition, each optimal sensitivity can be expressed in terms of physically realizable optical channels. Thus, in general, the number of channels will not necessarily be equal to the number of selected basis vectors.

As an illustration, the proposed approach was used to set initial conditions to estimate a total of 3 to 5 optimal Gaussian spectral sensors, calculated for skylight recovery and under different noise ratio. The obtained results, using a standard open-access database, are consistent with those previously calculated using parametric methods with exhaustive search.

Additional experiments were carried out to evaluate the proposed methods, estimating the number and spectral sensitivity of channels for an optimum spectral recovery of Munsell color and natural scenes reflectances. The results not only illustrate the effectiveness of the proposed approach for spectral recovery, but also show better performance compared with the Maloney-Wandell method using equally spaced Gaussian channels. In addition, the proposed strategy to reduce the number of used optimal channels, based on the maximization of

the inner product between channels associated to each optimal sensitivities, shows promising results since it outperforms the results obtained by the Maloney-Wandell technique.

The presented technique establishes a new framework, able to estimate the optimal number of sensors and their spectral sensitivities for spectral and/or colorimetric reconstruction. In addition, the results of this method can also be used as initial estimates for parametric method improving its convergence. These results open avenues to design fast and cost effective optimal colorimeters and hyper-multispectral systems applied to image capture devices, like cameras and scanners, and image display devices, like printers and screens.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank the Spectral Processing and Radiometry group at the Optoelectronic laboratory, University of Concepcion, for providing the spectral database. This work was supported by Fondecyt Project 11110364 and from PIA-CONICYT PFB0824.

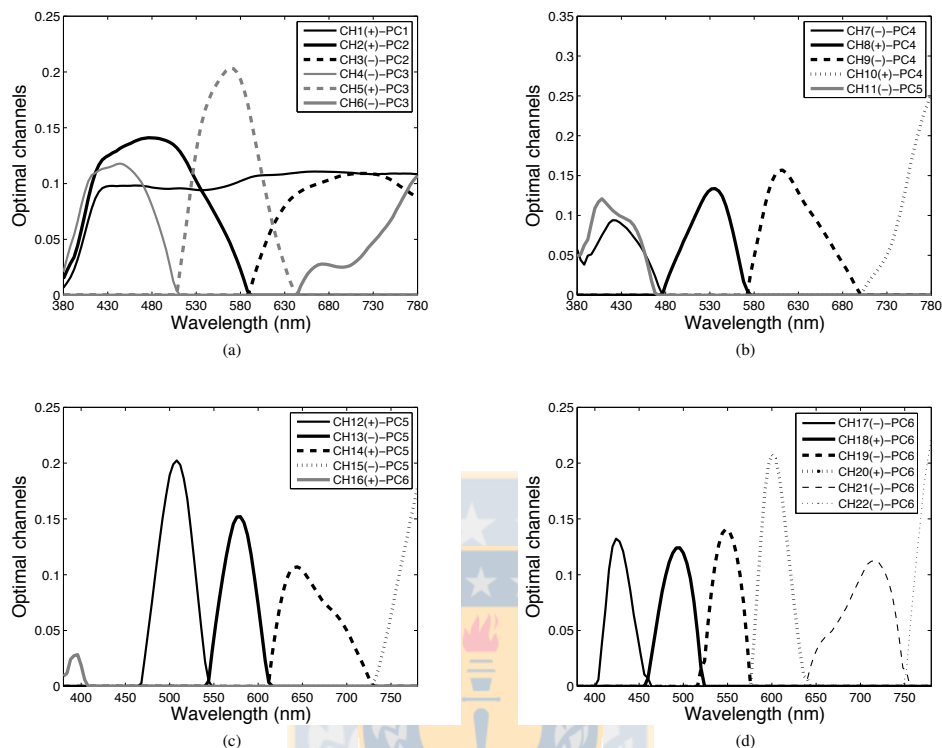


Fig. 4. Optimal 22 optical channels for Munsell color spectral recovery, associated to correspondent basis vector and ρ_{opt} sign.

REFERENCES

- [1] S. Tominaga, "Multichannel vision system for estimating surface and illuminant functions," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 13, no. 11, pp. 2163–2173, 1996.
- [2] F. Imai, M. Rosen, and R. Berns, "Comparison of spectrally narrow-band capture versus wide-band with a priori sample analysis for spectral reflectance estimation," *IS&T/SID Eighth Color Imaging Conference, Society for Imaging Science and Technology*, vol. 2000, no. 1, pp. 234–241, 2000.
- [3] J. Y. Hardeberg, "Acquisition and reproduction of color images: colorimetric and multispectral approaches," *Ph.D. dissertation (Ecole Nationale Supérieure des Télécommunications)*, 1999.
- [4] J. L. Nieves, E. M. Valero, S. M. C. Nascimento, J. Hernandez, and J. Romero, "Multispectral synthesis of daylight using a commercial digital ccd camera," *Appl. Opt.*, vol. 44, no. 27, pp. 5696–5703, 2005.
- [5] H. Haneishi, T. Hasegawa, A. Hosoi, Y. Yokoyama, N. Tsumura, and Y. Miyake, "System design for accurately estimating the spectral reflectance of art paintings," *Appl. Opt.*, vol. 39, no. 35, pp. 6621–6632, 2000.
- [6] R. Shrestha and J. Hardeberg, "Spectrogenic imaging: A novel approach to multispectral imaging in an uncontrolled environment," *Opt. Express*, vol. 22, no. 8, pp. 9123–9133, 2014.
- [7] M. Shi and G. Healey, "Using reflectance models for color scanner calibration," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 19, pp. 645–656, 2002.
- [8] E. M. Valero, J. L. Nieves, S. M. C. Nascimento, K. Amano, and D. H. Foster, "Recovering spectral data from natural scenes with an rgb digital camera and colored filters," *Color Res. Appl.*, vol. 32, no. 5, pp. 352–360, 2007.
- [9] H. Maitre, F. Schmitt, J. Crettez, Y. Wu, and J. Hardeberg, "Spectrophotometric image analysis of fine art paintings," *IS&T/SID's 4th Color Imaging Conf., Color Science, Systems and Appl.*
- [10] V. Cheung and S. Westland, "Characterization of trichromatic color cameras by using a new multispectral imaging technique," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 22, no. 7, pp. 352–360, 2005.
- [11] W. K. Pratt and C. E. Mancill, "Spectral estimation techniques for the spectral calibration of a color image scanner," *Appl. Opt.*, vol. 15, pp. 73–75, 1976.
- [12] M. Lopez, J. Hernandez, E. Valero, and J. Romero, "Selecting algorithms, sensors, and linear bases for optimum spectral recovery of skylight," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 24, no. 4, pp. 942–956, 2007.
- [13] J. Jiang, J. G. D. Liu, and S. Susstrunk, "What is the space of spectral sensitivity functions for digital color cameras?" *IEEE Workshop on Applications of Computer Vision (WACV)*.
- [14] D. Connah, J. Hardeberg, and S. Westland, "Comparison of linear spectral reconstruction methods for multispectral imaging," *Proceeding of IEEE Conference on Image Processing (ICIP'04)*, vol. 3, pp. 1497–1500, 2004.
- [15] M. Parmar and S. J. Reeves, "Selection of optimal spectral sensitivity functions for color filter arrays," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 19, no. 12, pp. 3190–3203, 2010.
- [16] Z. Sadeghipoor, Y. Lu, and S. Susstrunk, "Optimum spectral sensitivity functions for single sensor color imaging," *Proc. SPIE Digital Photography VIII.*, vol. 8299.
- [17] M. J. Vrhel and H. J. Trussell, "Optimal color filters in the presence of noise," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 4, no. 6, pp. 814–823, 1995.
- [18] G. Sharma, H. J. Trussell, and M. J. Vrhel, "Optimal nonnegative color scanning filters," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 7, no. 1, pp. 129–133, 1998.
- [19] P. Vora and H. J. Trussell, "Measure of goodness of a set of color-scanning filters," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 10, no. 7, pp. 1499–1508, 1993.

TABLE II
SPECTRAL AND COLORIMETRIC METRICS VALUES AND STANDARD DEVIATION (STD), CALCULATED BETWEEN THE WHOLE ORIGINAL SPECTRA AND:
APPROXIMATED SPECTRA $E^{(r)}$; RECOVERED SPECTRA USING PROPOSED TECHNIQUE ($\hat{E}_0^{(r)}$); RECOVERED SPECTRA USING MALONEY-WANDELL (MW)
METHOD $\hat{E}_{MW}^{(r)}$; AND RECOVERED SPECTRA USING MW METHOD WITH CHOSEN SUBSET OF OPTIMAL CHANNELS $\hat{E}_{OPTMW}^{(r)}$.

Spectral test	Method	GFC	PSNR	ΔE_{ab}^*
		Mean (STD)	Mean (STD)	Mean (STD)
Munsell color chart	$E^{(r)}$	99.3659 (0.8945)	36.7200 (5.3277)	0.5089 (0.3900)
	$\hat{E}_0^{(r)}$	99.3655 (0.8945)	36.6836 (5.3037)	0.5090 (0.3900)
	$\hat{E}_{MW}^{(r)}$	98.3094 (2.3569)	32.9324 (5.7511)	0.3243 (0.2905)
	$\hat{E}_{OPTMW}^{(r)}$	99.3367 (0.9248)	36.4457 (5.3905)	0.5347 (0.4074)
Natural reflectances	$E^{(r)}$	99.7039 (0.7835)	58.3249 (8.1691)	0.0315 (0.0335)
	$\hat{E}_0^{(r)}$	99.7038 (0.7836)	58.3120 (8.1637)	0.0314 (0.0338)
	$\hat{E}_{MW}^{(r)}$	99.6935 (0.7913)	58.0151 (8.2322)	0.0801 (0.0627)
	$\hat{E}_{OPTMW}^{(r)}$	99.6909 (0.8009)	58.0972 (8.1806)	0.0199 (0.0259)

- [20] O. Kohonen, J. Parkkinen, and T. Jaaskelainen, "Databases for spectral color science," *Color Res. Appl.*, vol. 31, no. 5, pp. 381–388, 2006.
- [21] L. T. Maloney and B. A. Wandell, "Color constancy: a method for recovering surface spectral reflectance," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 3, no. 1, pp. 29–33, 1986.
- [22] L. T. Maloney and B. A. Wandell, "Evaluation of linear models of surface spectral reflectance with small numbers of parameters," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 3, no. 10, pp. 1673–1683, 1986.
- [23] F. H. Imai and R. S. Berns, *Spectral estimation using trichromatic digital cameras*, 1999, vol. 3, pp. 42–48.
- [24] G. Buchsbaum and O. Bloch, "Color categories revealed by non-negative matrix factorization of munsell color spectra," *Vision Reseach*, vol. 42, pp. 559–563, 2002.
- [25] J. Parkkinen, J. Hallikainen, and T. Jaaskelainen, "Characteristic spectra of munsell colors," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 6, no. 2, pp. 318–322, 1989.
- [26] M. J. Vrhel and R. Gershon, "Measurement and analysis of object reflectance spectra," *Color Res. Appl.*, vol. 19, no. 1, pp. 4–9, 1994.
- [27] M. Lopez, J. Hernandez, and J. Romero, "Developing an optimum computer-designed multispectral system comprising a monochrome ccd camera and a liquid-crystal tunable filter," *Appl. Opt.*, vol. 47, no. 24, pp. 4381–4390, 2008.
- [28] D.-Y. Tzeng and R. Berns, "A review of principal component analysis and its applications to color technology," *Color Res. Appl.*, vol. 30, no. 2, pp. 84–98, 2005.
- [29] L. Arias, D. Sbrbaro, and S. Torres, "Removing baseline flame's spectrum by using advanced recovering spectrum techniques," *Appl. Opt.*, vol. 51, no. 25, pp. 6111–6116, 2012.
- [30] F. Imai, R. Berns, and D. Tzeng, "A comparative analysis of spectral reflectance estimated in various spaces using a trichromatic camera system," *J. Imaging Sci. Technol.*, vol. 44, no. 4, pp. 280–287, 2000.
- [31] J. Hernandez, J. Romero, J. Nieves, and R. Lee., "Color and spectral analysis of daylight in southern europe," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 18, no. 6, pp. 1325–1335, 2001.
- [32] F. Imai, M. Rosen, and R. Berns, "Comparative study of metrics for spectral match quality," *CGIV First European Conference on Colour Graphics, Imaging, and Vision*, pp. 492–496, 2002.



Daniel Sbarbaro got a degree in electrical engineering from the Universidad de Concepcion, Concepcion, Chile, in 1984, and the Ph.D. from Glasgow University, Glasgow, U.K., in 1993. He was an Alexander von Humbolt Fellow at the Control Engineering Laboratory, Ruhr University, Bochum, Germany, in 1998. He also held visiting research position at the Daimler-Benz research institute, Berlin and at Stuttgart University in 1993 and 2009 respectively. He has co-authored more than 40 papers in international Journals and 70 papers in International Conferences. He is IEEE senior member and member of ISA. He is currently Professor with the Department of Electrical Engineering, Universidad de Concepcion.



Luis Arias received the Ph.D. degree from University of Concepcion. Currently he is assistant professor at Electrical Engineering Department, University of Concepcion. Since 2005 he has held research position at Aerospace and Mechanical Engineering Department, University of Liege, Belgium. He has carry out research in radiometry and optoelectronics, applied to flame sensing and combustion monitoring and authored several papers on the design and application of new spatial-spectral models, monitoring techniques and optical hardware-design.

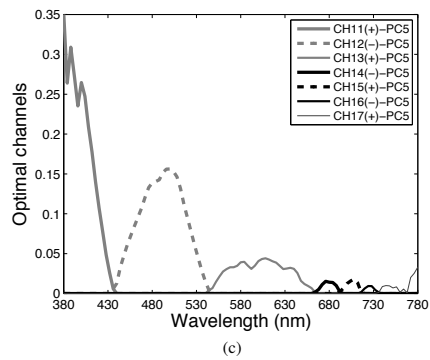
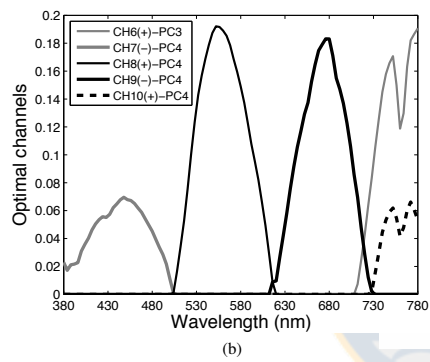
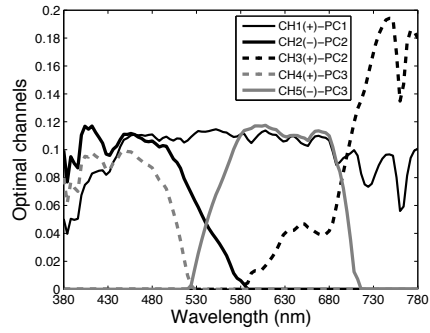


Fig. 5. Optimal 17 optical channels for natural scenes spectral recovery, associated to correspondent basis vector and ρ_{opt} sign.