



UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ELÉCTRICA

TÉCNICAS Y APLICACIONES DE SEPARACIÓN DE SEÑALES APLICADAS EN  
IMÁGENES HIPER ESPECTRALES

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL ELECTRICO

SERGIO FELIPE LIBERMAN BRONFMAN

PROFESOR GUÍA:  
JORGE SILVA SÁNCHEZ

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:  
ÁLVARO EGAÑA VIEDMA  
JAVIER RUIZ DEL SOLAR

SANTIAGO DE CHILE  
2016

RESUMEN DE LA MEMORIA  
PARA OPTAR AL TÍTULO DE  
INGENIERO CIVIL ELECTRICO  
POR: SERGIO FELIPE LIBERMAN BRONFMAN  
FECHA: 28/03/2016  
PROF. GUÍA: JORGE SILVA SÁNCHEZ

## **TÉCNICAS Y APLICACIONES DE SEPARACIÓN DE SEÑALES APLICADAS EN IMÁGENES HIPER ESPECTRALES**

Las imágenes hiper espectrales (HSI) son un tipo particular de imágenes obtenidas usando un arreglo de sensores sensibles a un determinado rango del espectro electromagnético. Cada pixel de ellas se relaciona a un espectro continuo en un rango de frecuencias específico. Contienen gran cantidad de información de los escenarios que capturan. Resulta interesante desde el punto de vista académico e industrial el extraer dicha información para su interpretación y mejorar la toma de decisiones.

Estas imágenes son masivas en capacidad de almacenamiento computacional y muy redundantes, pero aún así extremadamente ricas en información. Por ello, el procesamiento de señales es un paso imprescindible al momento de interpretarlas. La interpretación de la información de las HSI usando procesamiento computacional es un tema de investigación vigente y muy popular en la academia.

En esta memoria se exploran y aplican algunas de las técnicas existentes para separar la señal obtenida del sensor en un modelo compuesto por varias señales combinadas. Estas técnicas son Vertex Component Analysis (VCA), Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian (SISAL) y Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian (SUnSAL). A la base de datos utilizada la conforman pixeles simulados a partir de firmas espectrales reales e HSI adquiridas en enero de 2015 en el marco del proyecto Fondo de Fomento al Desarrollo Científico y Tecnológico (FONDEF) IDeA-CA13I-10305. Se analizan los métodos investigados, estableciendo claramente los casos en que cada uno puede ser utilizado y verificando su eficacia en cada uno de ellos. También se presentan algunas alternativas de aplicaciones que permiten utilizar los resultados de *unmixing* para obtener más información sobre los datos.

En las pruebas de extracción y reconstrucción, la combinación de usar tanto VCA como SISAL para extraer firmas espectrales en conjunto con SUnSAL para la regresión de estas firmas en el conjunto de datos es prácticamente indistinta. SISAL posee la ventaja de ajustar las firmas espectrales de VCA en condiciones de mayor grado de mezcla. Si la mezcla es leve, VCA tiene resultados levemente superiores. Se concluye también que *unmixing* puede funcionar mejor que otras técnicas de reducción de dimensionalidad, como Análisis de Componentes Principales (PCA) y el sub espacio de la señal para entrenar clasificadores de espectros.

# Agradecimientos

En este trabajo de título fueron utilizados datos obtenidos en el marco del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305 llamado “Creación de un sistema detección y caracterización de variables geometalúrgicas usando imágenes hiper espectrales” y fueron cedidos con el compromiso de contribuir a dicho proyecto con los conocimientos ganados. La “geóloga del proyecto”, como se encuentra referenciada en el capítulo 5, corresponde a Valentina Hanna Castro. A Valentina le agradezco especialmente la dedicación y el buen trabajo mostrado en las etiquetas de las HSI.

Originalmente, dichos datos provienen de la mina Florida, propiedad de Yamana Gold Inc. El Departamento de Geología de dicha instalación aportó con sus recursos humanos para facilitarnos el invaluable acceso a las muestras hiper espectrales. Su buena disposición durante la estadía, la cual se materializó en proporcionarnos transporte, cedernos parte de sus espacios y ayudarnos a movilizar bandejas de sondaje se tradujo en una experiencia enriquecedora que a la larga permitió realizar de forma exitosa esta memoria.

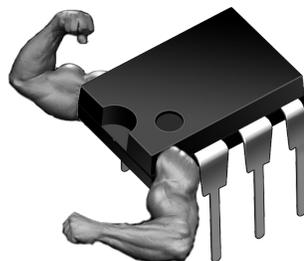
Quiero agradecer a mis padres y mis hermanos, quienes me han guiado, apoyado y brindado todo su cariño a lo largo de mi vida. Las correcciones de mi madre y hermano hicieron de este trabajo de título una mejor lectura para todos.

A mis primos, tíos, sobrinos y amigos más queridos, quienes me han acompañado siempre, en las buenas y en las malas.

Gracias a mis amigos y compañeros de los laboratorios *IDS* y *ALGES* por compartir conmigo su alegría, consejos y momentos memorables.

Gracias, también, a mis profesores por su entrega y visión.

También agradezco a Romina, quien tuvo que soportar mis momentos de estrés y nerviosismo en incontables oportunidades pero siempre tuvo una sonrisa y un buen consejo para ofrecerme en los momentos más críticos.



# Tabla de contenido

<b>1. Introducción</b>	<b>8</b>
1.1. Alcances y Objetivo General . . . . .	11
1.2. Objetivos Específicos . . . . .	11
1.3. Estructura de la memoria . . . . .	11
<b>2. Fundamentos en imágenes hiper espectrales</b>	<b>13</b>
2.1. Modelamiento de imágenes hiper espectrales . . . . .	14
2.1.1. Modelamiento matemático . . . . .	14
2.1.2. Modelo de señales . . . . .	14
2.1.3. Modelamiento computacional . . . . .	15
2.2. Comparación entre imágenes <i>RGB</i> e imágenes hiper espectrales . . . . .	16
2.2.1. Cuadros, líneas y bandas . . . . .	17
2.3. Imágenes de fluorescencia y reflectancia . . . . .	18
2.4. Correspondencia de imágenes de reflectancia y modelo de sistema lineal e invariable en el tiempo . . . . .	21
2.5. Relación entre magnitudes espectrales . . . . .	22
2.6. Mezclas de espectros . . . . .	23
2.7. Pre procesamiento hiper espectral y métodos para realizarlo . . . . .	25
2.7.1. Limitación del espectro . . . . .	25
2.7.2. Sustracción de referencia oscura . . . . .	26
2.7.3. Eliminación de bandas o líneas muertas . . . . .	27

2.7.4. Imágenes de reflectancia . . . . .	28
2.7.5. Selección de sub imágenes . . . . .	29
2.7.6. Otros pre procesamientos no considerados . . . . .	29
<b>3. Unmixing y separación de señales</b>	<b>31</b>
3.1. Fundamentos de <i>Unmixing</i> . . . . .	31
3.2. Aplicaciones de separación de señales . . . . .	34
3.3. Motivación para aplicar <i>unmixing</i> hiper espectral . . . . .	36
3.3.1. Análisis de especialistas . . . . .	36
3.3.2. <i>Unmixing</i> como etapa en pre procesamiento de Machine Learning . . . . .	37
3.3.2.1. Reducción del ruido . . . . .	37
3.3.2.2. Reducción de dimensionalidad . . . . .	37
3.4. Identificación de sub espacio de señal o Dimensionalidad Virtual (VD) . . . . .	38
3.4.1. Harsanyi-Farrand-Chang (HFC), NWHFC y Noise Subspace Projection (NSP) . . . . .	38
3.4.2. Hyperspectral Subspace Identification by Minimum Error (HySIME) . . . . .	40
3.5. Métodos de unmixing lineal . . . . .	41
3.5.1. Métodos geométricos . . . . .	41
3.5.1.1. Vertex Component Analysis (VCA) . . . . .	43
3.5.1.2. Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian (SISAL) . . . . .	44
3.5.2. Métodos estadísticos . . . . .	46
3.5.2.1. Dependent Component Analysis (DECA) . . . . .	48
3.5.3. Regresión <i>sparse</i> para <i>unmixing</i> . . . . .	49
3.5.3.1. Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian (SUnSAL) . . . . .	51
<b>4. Análisis comparativo de métodos de <i>unmixing</i> hiper espectral</b>	<b>54</b>
4.1. Pre procesamiento de HSI para unmixing . . . . .	55
4.2. Identificación de sub espacio de señal . . . . .	57

4.2.1. Estimación de ruido en HySIME . . . . .	57
4.2.2. HySIME para identificar sub espacio de señal . . . . .	58
4.3. Algoritmos geométricos . . . . .	59
4.3.1. Vertex Component Analysis (VCA) . . . . .	59
4.3.2. Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian (SISAL) . . . . .	61
4.4. Algoritmo basado en regresión <i>sparse</i> . . . . .	63
<b>5. Pruebas y resultados</b>	<b>66</b>
5.1. Origen y naturaleza de datos usados en <i>unmixing</i> . . . . .	66
5.1.1. Datos simulados . . . . .	66
5.1.2. Datos reales . . . . .	69
5.2. Resultados del pre procesamiento . . . . .	73
5.3. Extracción de <i>endmembers</i> . . . . .	74
5.3.1. Resultados de extracción en datos simulados . . . . .	76
5.3.2. Resultados de extracción en datos reales . . . . .	81
5.4. Reconstrucción de pixeles a partir de abundancias fraccionarias y <i>endmembers</i>	81
5.5. Clasificación como aplicación de <i>unmixing</i> . . . . .	84
<b>6. Conclusiones</b>	<b>87</b>
6.1. Pre procesamiento . . . . .	87
6.2. <i>Unmixing</i> . . . . .	87
6.3. Trabajos Futuros . . . . .	89
<b>Glosario y acrónimos</b>	<b>91</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>93</b>

# Índice de figuras

2.1. Estructura de una imagen hiper espectral . . . . .	15
2.2. Ejes de posición y barrido de una HSI . . . . .	18
2.3. Comparación de un espectro medido antes y después de la corrección <i>Flat Field</i>	20
2.4. Modelamiento como sistema de la adquisición de muestra hiper espectral . . . .	22
2.5. Ejemplo de mezcla de espectros puros para formar espectro mezclado . . . . .	24
2.6. Ejemplo de limitación del espectro . . . . .	25
2.7. Ejemplo de referencia oscura en visualización de HSI . . . . .	26
2.8. Ejemplo de visualización espectral de cuadro con puntos muertos . . . . .	28
2.9. Visualización de HSI usada para calcular espectro de normalización . . . . .	28
3.1. Diagrama de flujo básico de <i>unmixing</i> hiper espectral . . . . .	33
3.2. <i>Unmixing</i> geométrico . . . . .	42
3.3. <i>Setup</i> en <i>unmixing</i> estadístico . . . . .	47
3.4. <i>Setup</i> en métodos <i>sparse</i> para <i>unmixing</i> . . . . .	51
4.1. Diagrama de bloques (métodos) para <i>unmixing</i> . . . . .	54
5.1. <i>Endmembers</i> en datos simulados . . . . .	68
5.2. Fotografía de captura hiper espectral de una bandeja en mina Florida . . . . .	70
5.3. Ejemplo de remoción de bandas y líneas muertas . . . . .	71
5.4. HSI de prueba real y proyección 2D de sub espacio de la señal . . . . .	72
5.5. Limitación de espectro . . . . .	74

5.6. Resultado en sustracción de referencia oscura . . . . .	74
5.7. Efecto visual en imagen tras aplicación de corrección <i>Flat Field</i> . . . . .	75
5.8. Mapa de nivel de VCA para prueba 1 . . . . .	77
5.9. Mapa de nivel de SISAL para prueba 1 . . . . .	77
5.10. <i>Endmembers</i> computados por VCA con razón señal a ruido (SNR) de $3dB$ , $10dB$ y $20dB$ , respectivamente. . . . .	78
5.11. <i>Endmembers</i> computados por SISAL con SNR de $3dB$ , $10dB$ y $20dB$ , respectivamente. . . . .	79
5.12. <i>Endmembers</i> computados por VCA y SISAL a partir de datos con SNR de $3dB$ representados en 2 bandas principales del sub espacio de la señal. . . . .	80
5.13. <i>Endmembers</i> computados por VCA en el conjunto de datos real proyectado y no proyectado . . . . .	82
5.14. <i>Endmembers</i> computados por SISAL en el conjunto de datos real . . . . .	83
5.15. Configuración experimental para prueba de clasificación . . . . .	85
6.1. Convergencia de SISAL tras inicialización amplificada por VCA sobre datos simulados . . . . .	90

# Índice de tablas

5.1. Parámetros del algoritmo SISAL usados en las pruebas con datos simulados . .	76
5.2. Parámetros del algoritmo SISAL usados en las pruebas con datos reales . . . .	76
5.3. Resultados de regresiones para determinar abundancias fraccionarias . . . . .	84
5.4. Resultados de clasificadores presentando distintas técnicas de reducción de dimensionalidad . . . . .	86

# Índice de algoritmos

1.	Limitación de espectros en rango de operación de cámaras hiper espectrales (HSC) . . . . .	55
2.	Sustracción de referencia oscura . . . . .	56
3.	Obtención de líneas y bandas muertas . . . . .	56
4.	Corrección Flat Field . . . . .	56
5.	Estimación de ruido en HySIME . . . . .	57
6.	Cálculo del sub espacio de señal con HySIME . . . . .	58
7.	Vertex Component Analysis (VCA) . . . . .	60
8.	SISAL: algoritmo principal . . . . .	62
9.	Algoritmo de regresión <i>sparse</i> . . . . .	64
10.	Función <i>soft</i> : operador de proximidad de la norma L1 . . . . .	65

# Capítulo 1

## Introducción

La consolidación y predominancia de la tecnología CMOS, junto al explosivo crecimiento de la fotografía digital desde fines del siglo XX, han suscitado el gran interés científico de un área tecnológica denominada en la literatura académica como *remote sensing*. El objetivo clásico de esta rama de investigación es utilizar sensores para obtener información de la superficie de la tierra evitando el contacto directo con ella. Esta información se contrapone a aquella procedente de costosos estudios físicos o químicos aplicados directamente al suelo o a la superficie estudiada.

El objetivo original de *remote sensing* ha mutado para adecuarse a muchos propósitos modernos. Los sensores que antiguamente eran usados para el estudio puramente geográfico han sido modificados para poder ser usados en otras áreas tan diversas como la agricultura [46, 13], biología [32, 47, 24], geografía [34], geología [22, 8], astronomía [16, 3], criminalística [12, 26], vigilancia [42, 41], medicina [2, 18, 17] y minería [14, 45], entre varias otras. Algunos ejemplos de aplicaciones donde *remote sensing* resulta hoy imprescindible son la búsqueda y determinación de componentes esenciales de objetos astronómicos, el dimensionamiento de producción de cosecha en un campo, los sistemas de detección de falsificación de cheques o la exploración aérea de suelos para minería y agricultura.

Uno de los sensores que se han desarrollado junto a *remote sensing* son los espectrómetros.

Los espectrómetros, sensores utilizados para estudiar el comportamiento de la luz proveniente de objetos, son cada día más económicos, confiables y compactos. Esto permite que hoy existan más opciones que en el pasado para aplicar esta aún joven tecnología. Una de estas nuevas aplicaciones donde la espectrometría tiene el potencial para crecer hasta convertirse en una necesidad es en la minería.

La exploración minera es una de las etapas dentro del desarrollo de una faena que tiene los costos más elevados. Esto no solo se debe a que las extracciones de cada sondaje requieren de mano de obra, maquinaria y mantención especiales, sino porque una vez extraído el material es necesario contar con un equipo de geólogos metalúrgicos

especializados, quienes deben rotular y analizar cada segmento de sondaje. En efecto, una vez extraídos los sondajes en forma de testigos, estos deben ser enviados a análisis químicos para obtener de ellos información que permita tomar decisiones sobre la zona de exploración para la producción. Entre la extracción de sondajes mineros y los análisis químicos realizados en la etapa de exploración, el costo para las mineras asciende a unos \$400 dólares estadounidenses por metro de sondaje<sup>1</sup>.

En este ámbito, *remote sensing* aplicado a la minería se postula como una alternativa, pero cada día más como la evolución natural del análisis tradicional de sondajes. Las HSI, estructuras de datos provenientes de los espectrómetros, son muy ricas en información tanto espectral como espacial. Pese al desarrollo tecnológico en esta área, las aplicaciones tradicionales donde se utiliza análisis hiper espectral suelen no utilizar los recursos más modernos para extraer de las HSI toda la información posible. Resulta interesante entonces, desde el punto de vista académico, investigar nuevas formas para procesar los datos hiper espectrales y así poder aprovechar mejor este recurso en la industria para esta incipiente tecnología.

En ingeniería eléctrica existen varias disciplinas que permiten mejorar la extracción de información de las imágenes hiper espectrales. En particular, aplicar nuevos métodos de procesamiento de señales y de inteligencia computacional a los datos hiper espectrales posibilitaría aprovechar mejor la información contenida en ellos.

Si bien existen sistemas en el mercado que permiten obtener los datos hiper espectrales de los testigos de sondaje, procesarlos y hacer predicciones de la mineralogía de la muestra, estos aún tienen relativamente poca versatilidad y precisión [39, 40]. Además, suele ser requerido un estricto control de las condiciones de adquisición.

Las HSI son cubos de datos, es decir, arreglos tridimensionales que se obtienen a partir de un sensor llamado espectrómetro. Los espectrómetros suelen integrarse con sistemas de refrigeración, control de obturador y otros mecanismos para su óptimo funcionamiento y comercialización. Estos equipos más complejos e integrados se llaman HSC.

Las HSI contienen tanto información espacial como espectral del objeto de la escena capturada. Hay espectrómetros pensados para distintas situaciones y aplicaciones. Varían entre ellos y dependiendo de la necesidad del caso específico, la resolución espectral y espacial del sensor, el tipo de lente y el formato de las imágenes. Por ejemplo, existe un *trade off* entre ambos tipos de resolución, es decir, se suele cumplir que a mayor resolución espacial, menor es la resolución espectral máxima que se puede alcanzar y vice-versa. También existen distintos métodos de obtención de información frecuencial (por difracción y por transformada de Fourier), al igual que distintos tipos de detectores (como los construidos con PbS<sup>2</sup>, MCT<sup>3</sup> o InGaAs<sup>4</sup>; donde cada uno de ellos permite capturar un rango acotado de frecuencias).

---

<sup>1</sup>Fuente: Yamana Gold Inc.

<sup>2</sup>Sulfato de plomo

<sup>3</sup>Telururo de mercurio y cadmio

<sup>4</sup>Arseniuro de indio y galio

La información de las imágenes *RGB*<sup>5</sup> tradicionales es captada en el rango visible de la luz y está integrada en 3 canales. Que esté en el rango visible implica que los humanos podemos utilizar los ojos para capturarlas tal como si fueran cámaras de dicho rango. La información de las HSI está concentrada en muchos y pequeños intervalos de frecuencia que no se integran sino que se estudian por separado. La magnitud de un pixel en una cierta banda corresponde a la amplitud de la radiación de la superficie del objeto capturado en aquella banda. Dicha radiación puede deberse a la reflectancia de la radiación incidente desde una fuente o a la fluorescencia misma del objeto.

En esta memoria se utilizaron imágenes de una cámara hiper espectral procedentes de testigos de minería. Las HSI fueron capturadas con una HSC que opera en el rango infrarrojo de onda corta (SWIR). Las muestras provienen de la base de datos del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305. Cada pixel de las imágenes integra información de un área de superficie del testigo. Los cristales puros suelen tener una firma espectral, y como cada pixel puede contener más que un solo material, es de interés estudiar los espectros como señales. Ello posibilita hacer muchos tipos de análisis con la información contenida en una HSI. En particular, esta memoria se concentra en el procesamiento para poder identificar las moléculas individuales que puedan estar contenidas en una unidad de área del objeto capturado.

Un pixel hiper espectral que captura un área de superficie rocosa suele contener más de un tipo de material cristalino. Esto se debe a que los cristales son agrupaciones naturales de moléculas. El proceso de separación de espectros procedentes de espectrómetros se denomina “hyperspectral *unmixing*” (descomposición hiper espectral). En el estado del arte, existen muchos algoritmos que permiten descomponer un espectro en sus *endmembers* (espectros base) y en sus respectivas abundancias fraccionarias. En el caso ideal, los *endmembers* corresponden a los espectros de las moléculas encontrados en una HSI. Las firmas espectrales pueden obtenerse de una librería espectral pública [27, 43] y con ellas se puede verificar el éxito del método. Una opción de *unmixing* consiste en utilizar estas firmas espectrales para hacer la descomposición usando combinaciones de ellos.

En esta memoria se revisarán algunos algoritmos de *unmixing* de enfoque diverso y de procesamiento hiper espectral. Tras ello, se evaluarán sus desempeños y utilidad en aplicaciones simples.

---

<sup>5</sup>Sigla que se refiere al modelo de color Red (rojo) Green (verde) Blue (azul), usado ampliamente en la codificación digital de imágenes capturadas con sensores como Charged Coupled Device (CCD) y Complementary Metal Oxide Semiconductor (CMOS).

## 1.1. Alcances y Objetivo General

En esta memoria de título se analiza el problema de separación de señales en HSI en sus aspectos teóricos y prácticos, y se explican algunas vías o métodos que existen para resolverlo. De estos métodos, se estudiaron en detalle tres, los cuales fueron implementados, probados y evaluados usando datos simulados y reales de la base de datos del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305.

## 1.2. Objetivos Específicos

Dentro de los objetivos específicos del proyecto se encuentran:

- Introducir fundamentos de las HSI y la espectrometría a nuevos investigadores de la Universidad para estimular y facilitar su estudio y aplicación
- Proponer, analizar y evaluar distintos métodos y enfoques para abordar problema de separación de señales en HSI en aplicaciones de extracción de firmas espectrales y reconstrucción de espectros
- Probar métodos de *unmixing* en cuanto a reducción de dimensionalidad y extracción de características para aprendizaje automático
- Validar resultados, comparar desempeños y concluir sobre mejores métodos de separación de señales en HSI de sondajes mineros

## 1.3. Estructura de la memoria

La memoria se estructura de la siguiente forma:

- En el capítulo 1 se introducen los conceptos de imagen hiper espectral (HSI), cámara hiper espectral (HSC) y *unmixing*, al igual que las motivaciones a niveles industrial y académico. También en él se aclaran los alcances y objetivos del trabajo de título.
- En el capítulo 2 se explican los fundamentos y conocimientos básicos necesarios para comprender las HSI. También se explica el concepto de mezcla hiper espectral, el problema que busca resolver *unmixing*.
- El capítulo 3 ahonda sobre el problema de *unmixing* en particular, y separación de señales en general. En él se establecen la motivación, las principales aplicaciones y los enfoques que existen para enfrentarlo.
- El capítulo 4 desarrolla sobre cada uno de los métodos probados y detalla su implementación.

- El capítulo 5 detalla las pruebas realizadas y su respectivo resultado obtenido, haciendo observaciones objetivas sobre los mismos.
- Finalmente, en el capítulo 6 se exponen las conclusiones de este trabajo de título y una sugerencia de aplicación de esta tecnología.

## Capítulo 2

# Fundamentos en imágenes hiper espectrales

En el Advanced Mining Technology Center (AMTC), centro de investigación perteneciente a la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile (FCFM), se realizan proyectos de diversas áreas de la tecnología para su posterior integración en la industria minera nacional. De estas áreas se conforman grupos de investigación. Algunos de estos son<sup>1</sup>:

- Exploración y modelamiento de yacimientos
- Diseño y planificación minera
- Agua y sustentabilidad ambiental

Dentro de la exploración y modelamiento de yacimientos, existe un proyecto en particular, financiado por la iniciativa estatal Fondo de Fomento al Desarrollo Científico y Tecnológico (FONDEF) en su programa IDeA llamado “creación de un sistema detección y caracterización de variables geometalúrgicas usando imágenes hiperespectrales”. En el desarrollo de ese proyecto fueron obtenidas un total de 256 imágenes hiper espectrales (HSI) de testigos de sondaje. Sobre estas imágenes se aplicaron algoritmos de inteligencia computacional y de extracción de características. El objetivo de este proyecto era entrenar un clasificador de óxidos y sulfuros que se pudiera usar en modo *on line* durante la faena minera. Sus resultados se utilizaron para probar los métodos y técnicas implementadas en esta memoria.

Las HSI son conjuntos de datos provenientes de espectrómetros, muy ricas en información sobre la escena capturada y con una gran correlación tanto en el espacio como entre las bandas de frecuencia que las componen. La forma en que se obtienen los datos, así como su captura y digitalización, generalmente requiere de etapas de calibración y pre procesamiento especializadas sobre las imágenes.

---

<sup>1</sup>Fuente: <http://www.amtc.cl/>

En este capítulo se revisarán los fundamentos de las HSI: sus principales características y los modelos que éstas representan. Se explorarán algunas herramientas que permiten capturar, modelar y entender mejor el concepto de HSI, tanto desde el punto de vista teórico como el práctico. Al final del capítulo se revisarán técnicas de pre procesamiento para mejorar la calidad de las HSI previo a su procesamiento con técnicas de *unmixing* hiper espectral.

## 2.1. Modelamiento de imágenes hiper espectrales

Las imágenes hiper espectrales (HSI) o imágenes multi espectrales (MSI) son adquiridas por una HSC, sensor que se compone de varios dispositivos interconectados que permiten la adquisición de imágenes en el rango de frecuencias especificado por el *hardware* de adquisición. El principal módulo de una HSC se llama espectrómetro y en su interior tiene detectores que permiten la captura de radiación electromagnética en distintas bandas delgadas de frecuencia.

### 2.1.1. Modelamiento matemático

Una HSI, desde el punto de vista informático, consiste en un cubo de datos tridimensional. Esto significa que cada dato capturado se identifica a través de tres argumentos: dos que conforman la tupla de su posición espacial y uno que define su longitud de onda central. En ciertos casos, es la frecuencia o el número de onda, y no la longitud de onda la que describe el tercer eje del cubo. El dato que se encuentra en cada tupla  $(x, y, \lambda)$  corresponde a la respuesta del objeto capturado en la posición y la longitud de onda específicos.

En la figura 2.1 se muestra la estructura de cada HSI. La posición espacial se representa en el eje cartesiano  $x$ - $y$ . En cada punto del espacio se tiene un espectro cuyas componentes son las longitudes de onda  $\lambda$  y cuyo significado es un valor que, en este caso específico, corresponde a un valor relativo (%).

### 2.1.2. Modelo de señales

Es posible realizar varios modelamientos desde el punto de vista del procesamiento de señales. Uno en particular, que resulta conveniente para el tipo de análisis que se busca hacer en este trabajo de título, es modelar cada pixel  $P$  como una señal multi canal (donde cada canal corresponde a una banda), la cual se encuentra en un espacio bi dimensional correspondiente al punto espacial de la escena.

$$(2.1) \quad P(x, y) = (p_1, p_2, \dots, p_i, \dots, p_{L-1}, p_L)$$

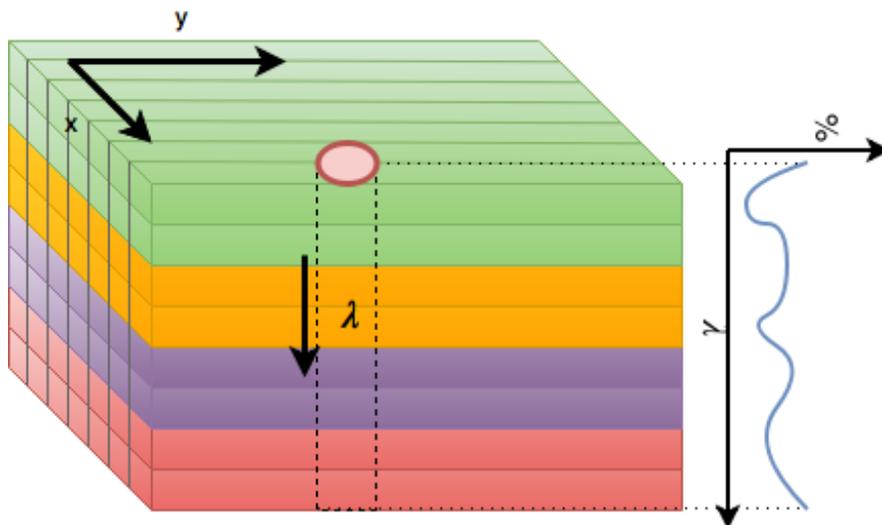


Figura 2.1: Estructura de una imagen hiper espectral

Un *espectro* corresponde al conjunto de puntos  $p_1, p_2, \dots, p_L$ , donde la componente  $p_i$  se asocia  $i$ -ésima banda.  $L$  es un número determinado por el fabricante de la HSC.

En muchas ocasiones, y en particular en todas las estudiadas en esta memoria, la posición del pixel en la imagen carece de importancia por lo que los cubos se suelen aplanar y en lugar de ser determinado por dos índices, los espectros se pasan a indexar en solo una dimensión formando una matriz de dimensiones  $L \times N$  donde  $N$  corresponde al número total de pixeles en la imagen.

### 2.1.3. Modelamiento computacional

El valor que corresponde a cada dato depende de la resolución del convertor analógico-digital (ADC) dentro de la HSC. Si el ADC tiene una resolución de  $b$  bits, entonces los datos varían entre 0 y  $2^b - 1$  en el tipo de datos más pequeño que se ajusta a este rango. Por ejemplo, la cámara SPECIM SWIR 2014 tiene una resolución de 16 bits, por lo que el rango espectral varía en valores enteros sin signo entre 0 (ausencia de radiación) y 65535 (saturación).

En la mayoría de los métodos, es conveniente realizar una transformación del tipo de datos a punto flotante de 64 bits. Para esos métodos, el rango de los datos se traslada con una operación lineal al rango 0.0 – 1.0, donde 0.0 corresponde al 0 entero y 1.0 corresponde a la saturación. La principal ventaja de esta transformación es que los datos pasan a procesarse en el coprocesador de punto flotante, por lo que ocurren menos problemas numéricos y el resultado pasa a ser más cercano al real. Sin embargo, la transformación a su vez tiene dos desventajas: el peso digital de la imagen crece con respecto a una imagen de enteros, y se puede perder algo de precisión al regresar a enteros. El problema del peso puede causar ineficiencia en el procesamiento. Por ejemplo, si inicialmente una HSI se compone de valores

enteros de 16 bits, la conversión a punto flotante de 64 bits cuadruplica el espacio necesario en memoria del computador. El segundo problema suele no ser grave hoy en día pues la resolución de los datos es bastante alta, por lo que la diferencia entre dos valores contiguos enteros no es tan significativa.

## 2.2. Comparación entre imágenes *RGB* e imágenes hiper espectrales

Una imagen digital corresponde a una matriz de píxeles, cada uno de los cuales representa a una pequeña superficie en la escena capturada. Las celdas de los píxeles contienen una cuantificación de la energía radiada por dicha unidad de superficie. Los píxeles de las imágenes pueden cuantificarse de diferentes formas:

- la forma binaria contiene valores 1 o 0 dependiendo si la energía radiada supera o no un cierto umbral
- las imágenes monocromáticas contienen escalares en sus píxeles, donde cada valor corresponde a una intensidad de gris (el valor máximo corresponde al blanco, mientras que el mínimo corresponde al negro)
- cada píxel contiene un vector de valores

Las HSI, en particular, corresponden a imágenes digitales que en sus píxeles contienen largos vectores. No se codifican en espacios de colores, pues su principal característica es que los datos representan la respuesta en varios rangos pequeños de frecuencias. Las HSI contienen información sobre un rango de frecuencias específico (el cual depende del sensor utilizado). Su discretización espacial permite obtener un espectro por cada unidad espacial de modo desagregado. Si se compara con las imágenes tradicionales, las HSI corresponden a varias imágenes en escala de grises apiladas, cada una de las cuales representa la magnitud de absorción o transmisión de la energía en un rango de frecuencias particular.

En contraste, una imagen en el espacio de color *RGB* contiene la respuesta en frecuencia del rango visible de una escena pero integrada en solo tres bandas, lo cual se traduce en un subconjunto de colores del rango visible de longitudes de onda. Las tres bandas indican la proporción de energía en las frecuencias bajas (rojos), medias (verdes) y altas (azules) del rango visible de longitudes de onda<sup>2</sup>.

Algunos fenómenos a nivel molecular pueden percibirse solamente cuando existe la información desagregada y no cuando la información se encuentra integrada en bandas anchas. Un ejemplo relevante de esto es la absorción de la luz solar provocada por las moléculas de la atmósfera. Las moléculas de grupos OH presentes en la atmósfera absorben en forma intensa la energía de la radiación solar en frecuencias cercanas a los 1900

---

<sup>2</sup>400 – 700nm

*nm*. Este fenómeno no se podría observar de no poder obtenerse el espectro reflejado por las superficies en forma desagregada. Estudiando todos los gases de la atmósfera y sus absorciones, es posible confirmar la presencia de ciertas moléculas en un medio, con relativamente alta precisión y velocidad, y sin la necesidad de realizar análisis químicos.

### 2.2.1. Cuadros, líneas y bandas

Las HSI sin procesar tienen 3 dimensiones: dos espaciales y una frecuencial. Las espaciales equivalen a las componentes  $x$  e  $y$  en una imagen RGB tradicional, pero como las HSC modernas provienen de los escáneres de barrido, las componentes no están escaladas de igual manera. La figura 2.2 muestra el proceso de adquisición de HSI.

La componente equivalente al eje  $y$  de la figura 2.2 tiene un largo fijo según el sensor. Es este dato el que determina en gran parte la resolución espacial de la cámara. En el caso de la cámara usada en el proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305, la Specim SWIR 2014, las HSI contienen exactamente  $n_2 = 384$  píxeles. Es relevante notar que gracias a que el ancho de las HSI es constante, el área que cubre cada pixel está relacionado con la distancia del foco sobre la superficie a capturar y con el ángulo de apertura del lente. En este trabajo este es llamado el eje de las líneas pues cada una de las componentes del mismo captura una línea recta en el barrido.

Por otro lado, la componente equivalente al eje  $x$  de la figura 2.2 corresponde al eje de los *cuadros* o *frames*. Un cuadro es el elemento de captura mínimo de una HSC, y consiste en un arreglo de  $n_2$  espectros de  $L$  bandas cada uno, donde  $n_2$  y  $L$  están especificados por el fabricante de la HSC como la resolución espacial y la espectral, respectivamente.

Una HSI con  $n_1$  cuadros se dice que tiene una resolución  $n_1 \times n_2 \times L$ . El número de píxeles de una HSI es entonces  $N = n_1 n_2$ .

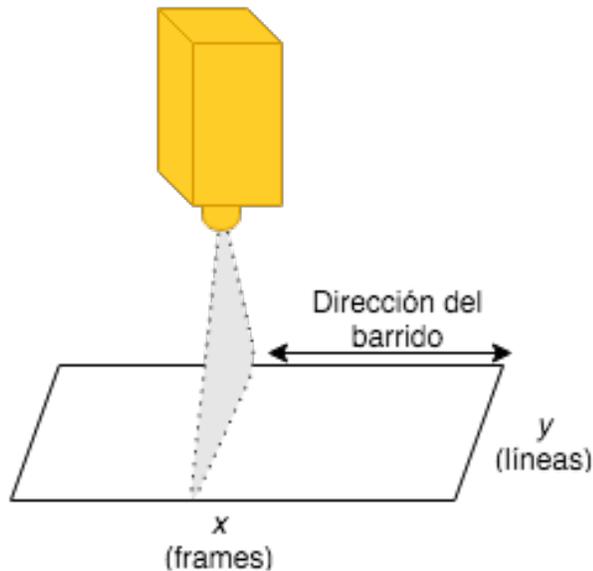


Figura 2.2: Ejes de posición y barrido de una HSI

### 2.3. Imágenes de fluorescencia y reflectancia

Al hacer un experimento en el cual se adquieren distintas imágenes con una cámara fotográfica de una escena donde sólo su iluminación varía, en cada una de ellas la manera en que se percibe la escena capturada resulta diferente. Objetos verdes, al ser iluminados con una luz roja solamente, por ejemplo, se perciben negros y opacos pues la luz incidente no es reflejada por el objeto.

En fotografía analógica, es necesaria la iluminación de la escena con una luz “blanca” y muy uniforme para obtener imágenes de alta calidad. Similarmente, en el caso de la fotografía digital se requiere de una iluminación al menos uniforme para que los filtros utilizados para normalizarla funcionen correctamente. Fotografías digitales adquiridas en condiciones controladas de radiación poseen mejor calidad que aquellas donde ésta no es controlada.

En las HSI, de no haber incidencia suficiente en una frecuencia en particular, la información que esa banda debe entregar se anula en toda la imagen capturada. En las imágenes normales, este efecto se traduce en coloraciones y tonos distorsionados con respecto a la realidad, fenómenos que no son posibles de revertir digitalmente sin conocimiento a priori de la escena.

Las HSI capturan la respuesta del flujo de fotones que inciden en la superficie de una escena. A esta imagen sin pre procesar se le llama usualmente imagen de fluorescencia (“radiance”, en inglés). Dos imágenes de fluorescencia no son comparables entre sí cuando los sensores y las condiciones de iluminación de la escena varían al momento de su respectiva

captura.

Existen métodos que, asumiendo que en la imagen hay información de cada frecuencia del rango de interés, permiten corregir la imagen y reducir el efecto deformador de la luz incidente. Esta normalización produce imágenes que en el caso ideal representan la respuesta de la superficie frente a la incidencia de luz con espectro plano. Estas imágenes corregidas se llaman imágenes de reflectancia (“reflectance”, en inglés), las cuales son mucho más adecuadas para fines comparativos y de procesamiento. Esto permite que se pueda almacenar una base de datos de HSI en que los efectos introducidos por la iluminación sean removidos tanto como sea posible. De esta misma forma se puede estimar y analizar el espectro de la iluminación utilizada para poder hacer correcciones adicionales.

Un modelo de la incidencia y emisión de luz establece que la iluminación en las imágenes de fluorescencia tiene un efecto multiplicativo en el espectro de cada pixel. Por ello, un procedimiento para corregir la luz o radiación de una HSI consiste en estimar un modelo del espectro de la radiación y luego dividir este espectro componente a componente de cada pixel de la imagen de fluorescencia. Esta corrección se conoce en fotografía y espectrometría como *Flat Field correction* [38] y es usada frecuentemente con resultados a menudo aceptables.

La ecuación 2.2 muestra, según el modelo utilizado, la relación entre imágenes de fluorescencia y reflectancia.

$$(2.2) \quad L_i = \frac{R_i}{S_i}$$

donde  $i$  corresponde al índice de una banda del espectro de un píxel,  $L$  al espectro de la fuente radiante,  $R$  al espectro de fluorescencia y  $S$  al espectro de reflectancia. Para estimar  $L$  existen varios enfoques. En *Flat Field*, en general se usa un material que se sabe tiene un espectro conocido y relativamente plano. En *remote sensing* se suele usar el espectro de una laguna o un lago como espectro de referencia.

## Example flat field correction

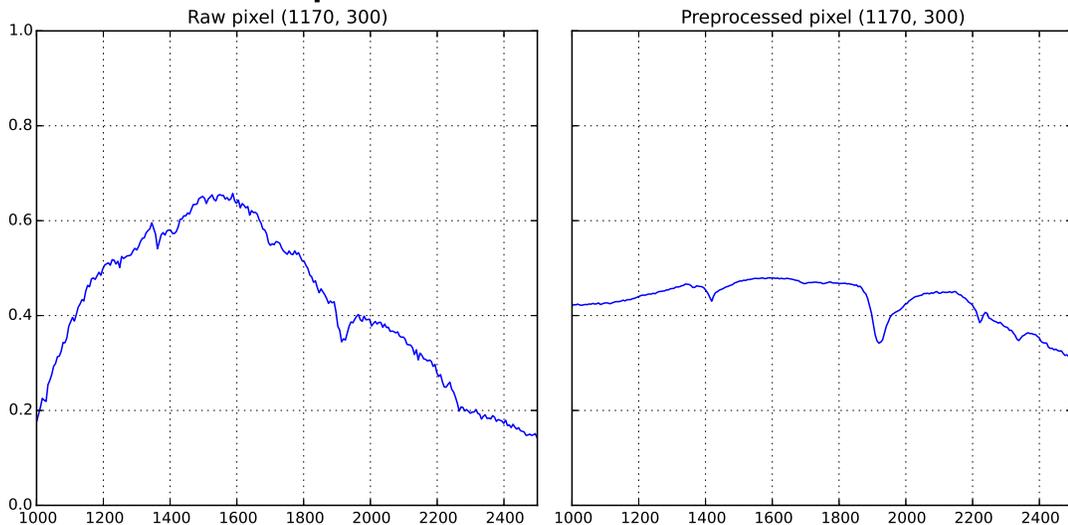


Figura 2.3: Comparación de un espectro medido antes y después de la corrección *Flat Field*

Adicionalmente a las diferencias de iluminación, la corrección *Flat Field* permite compensar las ganancias y pérdidas específicas que tienen los detectores presentes en las HSC a ciertas longitudes de onda particulares. Estas diferencias entre los detectores de una cámara y otra existen porque los detectores pueden construirse con distintas tecnologías. En efecto, a medida que la tecnología lo permite, se suelen usar materiales en los detectores que requieren condiciones más complejas para funcionar correctamente. Un ejemplo es la cámara *SPECIM SWIR 2014*, utilizada en el proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305. Esta cámara cuenta con detectores *MCT*, los cuales funcionan a 150K y operan en un rango entre 1 y  $2.5\mu m$ . La cámara cuenta con un refrigerador criogénico para preservar la temperatura del detector en un rango de operación aceptable.

Lamentablemente, *Flat Field* no es infalible para computar las imágenes de reflectancia. La principal complicación de la conversión digital de una imagen de fluorescencia a una de reflectancia es la aparición de artefactos inesperados en los espectros. Estos deben ser ignorados conscientemente por el geólogo que efectúa el análisis.

Los artefactos se deben a la falta de información en ciertas longitudes de onda de los datos capturados. Esto se debe a que las fuentes de radiación o de iluminación nunca son uniformes en frecuencia. Al usar algoritmos de Machine Learning, la existencia de los artefactos suele no incidir directamente en los resultados del análisis de las imágenes ya que estos aparecen equitativamente y sin sesgo en toda la imagen.

En la imagen 2.3 se puede observar el resultado del pre procesamiento en un pixel de una HSI (el pre procesamiento incluye aplicar *Flat Field Correction*). En el gráfico de la izquierda

se aprecia el espectro tal cual como fue medido, extraído de la imagen de fluorescencia. Por otro lado, en la imagen de la derecha se observa el espectro estimado de reflectancia. Las bandas de absorción, si bien aparecen en ambas imágenes, son más fáciles de observar en la imagen de reflectancia debido a que la luz incide en los espectros reduciendo el peso de estas características. En el espectro de reflectancia se observan algunos artefactos indeseables, especialmente las longitudes de onda superiores donde el nivel de radiación de la luz incidente es menor.

## 2.4. Correspondencia de imágenes de reflectancia y modelo de sistema lineal e invariable en el tiempo

La ecuación 2.2, la cual muestra la relación entre imágenes de fluorescencia y reflectancia, también se puede interpretar como que el comportamiento de la radiación en la superficie de un material constituye un sistema lineal e invariable en el tiempo (LTI). Hay muchos trabajos que asumen que el sistema es LTI para hacer correcciones de luz [19, 21, 38].

Una superficie que no emite radiación, sino que solo la absorbe y la refleja en algunos segmentos de su espectro electromagnético de acuerdo a sus características moleculares, se puede modelar como un sistema de una entrada (correspondiente a la radiación) y una salida (correspondiente a la fluorescencia). Ruidos y perturbaciones en la radiación se ven reflejados en la fluorescencia de las HSI. Alternativamente, se podría dejar de asumir la invariabilidad en el tiempo al considerar que parte de la energía de la radiación incidente se transforma en calor, el cual es liberado luego en forma de radiación de menor frecuencia (en el rango térmico). Sin embargo, cuando la radiación escogida corresponde a luces frías, la energía no sufre tal transformación.

Tomando en cuenta las consideraciones anteriores, la ecuación 2.2 se entiende como un sistema LTI que tiene la siguiente forma:

$$(2.3) \quad Y(f) = X(f)H(f) + \nu(f)$$

con  $X$  la radiación incidente o entrada,  $H$  el sistema que representa el efecto de la superficie sobre la radiación,  $\nu$  el ruido aditivo que puede modelarse como Gaussiano e  $Y$  el espectro de fluorescencia o salida. Todas las señales están en dominio frecuencial parametrizados por su longitud de onda. Este dominio se asume siempre inferior a la cota establecida por la radiación máxima que la estructura molecular puede reflejar de acuerdo a las interacciones onda-masa a nivel atómico modeladas por la mecánica cuántica.

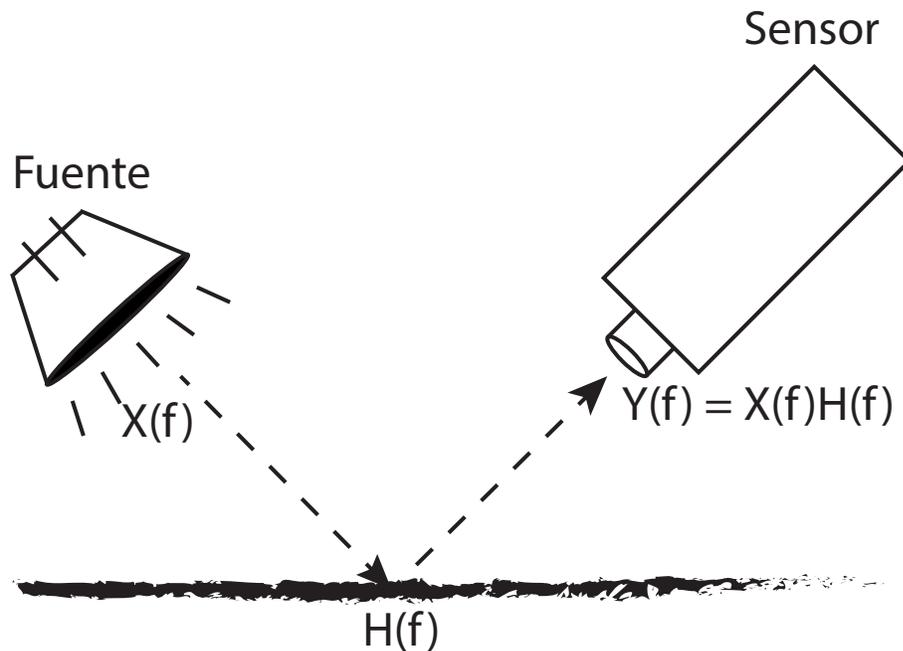


Figura 2.4: Modelamiento como sistema de la adquisición de muestra hiper espectral

La figura 2.4 muestra el sistema LTI cuando se asume que la radiación cumple con las condiciones anteriormente establecidas.

## 2.5. Relación entre magnitudes espectrales

La mayor parte de la literatura usa una de las tres siguientes magnitudes para identificar las bandas de una HSI. Estas son intercambiables, pero algunas tienen la tendencia invertida. Las magnitudes y sus respectivas unidades son:

- $w$ : número de onda ( $cm^{-1}$ )
- $\lambda$ : longitud de onda ( $nm$  o  $\mu m$ )
- $\nu$ : frecuencia ( $THz$ )

La conversión entre las magnitudes son las que se muestran en las ecuaciones 2.4, 2.5 y 2.6.

$$(2.4) \quad w = \frac{1}{\lambda}$$

$$(2.5) \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

$$(2.6) \quad w = \frac{\nu}{c}$$

Con  $c$  la velocidad de la luz en el vacío,  $c \approx 3 \times 10^8 \frac{m}{s}$ .

La base de datos utilizada en esta memoria tiene sus bandas indexadas según sus longitudes de onda en nanómetros ( $nm$ ). Esto se debe a que la cámara del proyecto FONDEF, la *SPECIM SWIR 2014* utiliza esta magnitud de forma nativa.

## 2.6. Mezclas de espectros

Las mezclas de espectros se perciben de manera natural en toda HSI debido a que los pixeles capturados por las HSC representan una unidad de área que siempre es macroscópica. En estas áreas, por más pequeñas que sean, coexisten dos o más materiales distintos que interactúan al momento de ser expuestos a la radiación incidente. Existen diferentes formas en que las mezclas se manifiestan en las HSI y esto, como se ha demostrado empíricamente [6], depende de las características físicas de la interacción entre los materiales.

Existen dos maneras en que los pixeles pueden estar mezclados desde el punto de vista físico. La primera de ellas es a nivel macroscópico, lo que se refiere a que cúmulos de moléculas que a simple vista pueden diferenciarse no alcanzan a disociarse a nivel digital y terminan compartiendo el área que captura un pixel. La otra manera es microscópica en la cual, dentro de un pixel existen moléculas que no se manifiestan en cúmulos sino que se infiltran en un material predominante. Estas moléculas, las cuales no son perceptibles sino con análisis químicos, hacen que el material predominante no aparezca capturado exactamente con su firma espectral. Desde el punto de vista matemático, cuando las mezclas son macroscópicas, puede esperarse que el mezclado de cada espectro sea lineal, mientras que cuando el mezclado es microscópico lo más probable es que hayan componentes de mezclado de espectros no lineales [6].

El modelo lineal (LMM) permite representar las HSI por la matriz de mezcla  $\mathbf{Y}$ , la matriz de *endmembers*  $\mathbf{M}$  y la matriz de abundancias fraccionarias  $\mathbf{S}$ .

Otro aspecto importante a considerar es que las firmas espectrales están descritas como presentes en moléculas que se vinculan a través de enlaces covalentes, y que con ellas forman estructuras cristalinas. Pese a esto, por ejemplo *remote sensing* es usado en escenarios vegetales, donde las células orgánicas que son ricas en agua se pueden detectar y diferenciar de entre las inorgánicas en un escenario geográfico. En algunos casos, las

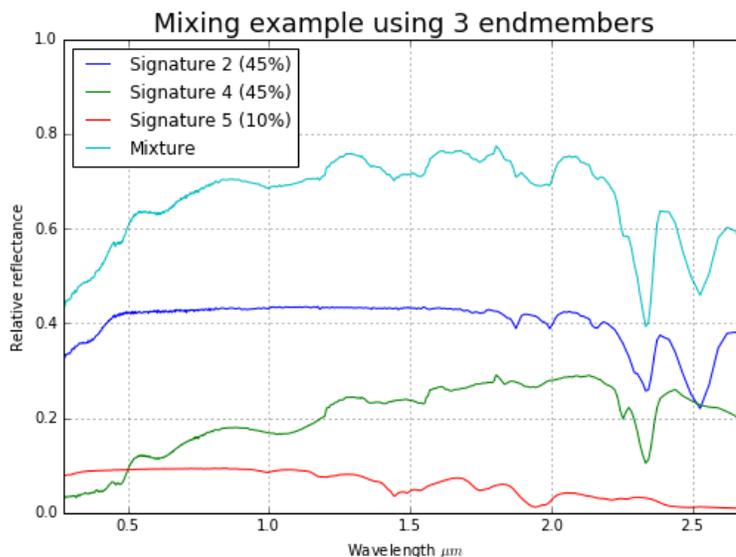


Figura 2.5: Ejemplo de mezcla de espectros puros para formar espectro mezclado

diferencias espectrales pueden estar relacionadas a pestes [13] o a contaminantes [24]. En el caso general, sin embargo, no es recomendable aplicar *unmixing* sobre células orgánicas porque los efectos de las mezclas moleculares en las células produce efectos no lineales en los espectros muy difíciles de identificar en la información espectral.

Si bien existen técnicas de *unmixing* no lineales, estos métodos son mucho menos eficientes, no tanto más efectivos y mucho más sensibles a sus parámetros que los métodos lineales. Por estas razones resulta más conveniente asumir la pérdida de eficacia de los métodos lineales y utilizarlos en configuraciones no lineales pese a que existe un máximo de efectividad al cual se puede apuntar.

En la figura 2.5 se muestra una mezcla lineal artificial de 3 espectros puros obtenidos de la base de datos Speclab V6. En este ejemplo se han combinado los 3 espectros en las proporciones que allí se especifican utilizando el LMM. El espectro resultante tiene características de los 3 espectros puros, obteniéndose bandas de absorción y peaks de los 3 materiales puros en una sola señal. El problema de *unmixing* es el inverso, donde un conjunto de estos espectros combinados es la entrada y la salida son los espectros puros, junto a su correspondiente fracción de abundancia.

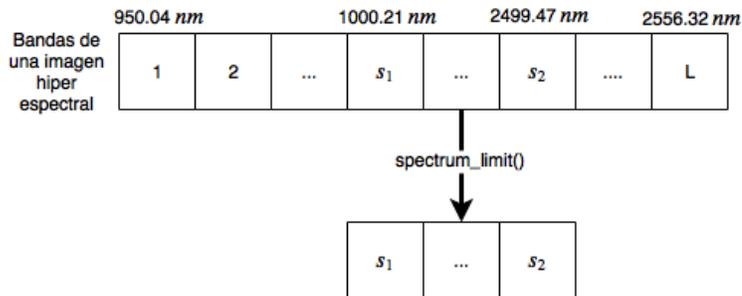


Figura 2.6: Ejemplo de limitación del espectro

## 2.7. Pre procesamiento hiper espectral y métodos para realizarlo

Una HSC entrega un arreglo de datos crudos. Estos datos, tal como los procedentes de prácticamente todos los sensores, no son adecuados para ser utilizados en un algoritmo computacional y por tanto deben ser pre procesados.

En las siguientes secciones se detalla cada uno de los efectos indeseables en las HSI, y la forma de solucionarlo implementada para este trabajo.

### 2.7.1. Limitación del espectro

Cada HSC tiene especificado un rango de longitudes de onda específico donde opera. Este rango está determinado por las longitudes de onda superior, inferior y entre ambas cotas. Cada una de estas últimas corresponde a la banda central de una delgada franja de frecuencias que integran las HSI.

Los fabricantes de las HSC suelen proporcionar especificaciones a sus clientes con el rango real en el que operan los sensores. Sin embargo, las cotas inferior y superior reales pueden no coincidir exactamente con las que tienen las HSI tras su generación.

Es necesario que exista consistencia entre los rangos del fabricante y los de las imágenes pues el fabricante no garantiza que los datos existentes fuera del rango sean fidedignos. El procedimiento del algoritmo 1 en la sección 4.1 muestra una implementación de este pre procesamiento que, a su vez, reduce la cantidad de datos y el espacio que utiliza la HSI en memoria.

La figura 2.6 muestra la limitación de un espectro proveniente del sensor utilizado en el proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305 al rango entre 1000 y 2500 nm. El sensor agrega automáticamente datos no fidedignos fuera del rango especificado.

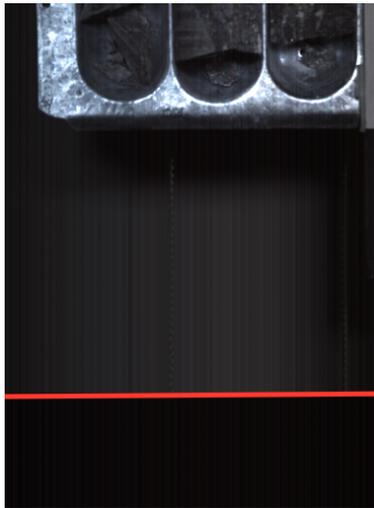


Figura 2.7: Ejemplo de referencia oscura en visualización de HSI

### 2.7.2. Sustracción de referencia oscura

Los detectores entregan un valor constante salvo por perturbaciones pequeñas cuando el obturador de una HSC está cerrado. A esta imagen, en el área de fotografía profesional y en remote sensing, se le llama “referencia oscura” de la cámara (*dark reference* en inglés). Este valor constante es normal y se debe a características constructivas de la HSC, de los materiales de sus distintos detectores y de la disposición espacial de ellos dentro del sensor. Se debe tratar esta referencia oscura como un desfase para normalizar la imagen.

Estando consciente de este detalle, a cada una de las imágenes obtenidas durante la campaña de muestreo para el proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305 se les incorporó un segmento extra con la imagen de referencia oscura obtenida durante 1 segundo después de la adquisición de la bandeja.

La referencia utilizada para la corrección de cada imagen correspondió al cuadro promedio de su respectiva imagen de referencia oscura. Se usó este cuadro para normalizar (usando la operación resta componente a componente) cada uno de los cuadros de las HSI. Para ello, se diseñó el algoritmo 2.

Eliminar este desfase de las HSI a procesar es necesario puesto que es deseable poder hacer comparables dos imágenes provenientes de sensores distintos, y además reducir el ruido eléctrico y térmico del sensor traspasado a los espectros.

La figura 2.7 muestra parte de la bandeja de sondaje, una zona fuera de la bandeja que no es de interés y bajo ella, bajo la línea roja, una sub imagen adquirida durante 1 segundo extra de donde se obtiene el cuadro de referencia oscura para normalizar esa HSI.

### 2.7.3. Eliminación de bandas o líneas muertas

Es normal que sensores tales como las HSC, donde los datos son capturados y transmitidos a tasas del orden de decenas de megabytes por segundo, produzcan imágenes corruptas. En efecto, en ocasiones algunos de los cientos de detectores que contienen las HSC pueden fallar sistemáticamente. En esos casos, existen puntos determinados por una línea y una banda específica que no tienen ninguna variabilidad a lo largo de todos los cuadros de la imagen. Este problema es muy común ya que las HSC son muy sensibles a diversos factores tales como la humedad y el polvo dentro de ellas.

El problema de bandas o líneas muertas es grave pero no suele ocurrir en un gran número de datos. Si ocurriese, es necesario enviar al fabricante la cámara para efectuarle una mantención o bien recurrir a otro sensor en mejores condiciones. Por ejemplo, para las imágenes obtenidas en las campañas de muestreo del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305, existen 4 pares (línea, banda) que se encuentran muertos. Esto implica que todos los cuadros en ese par de coordenadas frecuenciales se encuentran sin datos. Se pueden determinar cuales son las tuplas (línea, banda) para todos los cuadros de la imagen cuyos datos son siempre constantes. Los puntos rojos en la imagen 2.8, por ejemplo, muestran los datos que tienen varianza nula en todos los cuadros de esa HSI.

Si el procesamiento de las HSI contempla en algún momento la división por las magnitudes, entonces ignorar este problema podría incurrir errores numéricos que provocarían consecuencias nefastas en los resultados del algoritmo utilizado. Sin embargo, para solucionarlo existen dos caminos en este tipo de situaciones.

El camino más sencillo consiste en remover uno de los siguientes elementos:

- la línea completa afectada (lo cual afecta la estructura espacial de los datos, produciendo distorsión e irregularidad en la grilla)
- la banda completa afectada (lo cual elimina un gran número de datos útiles de esa banda en particular)

Cuál de los dos elementos remover depende de las dimensiones particulares de la HSI analizada y del estudio específico. Si en una aplicación no importa realmente el contenido espacial de una imagen (como en unmixing, clasificación y visualización espectral), es preferible remover la línea completa (ello elimina  $n_1L$  datos). Sin embargo, cuando la aplicación requiere de coherencia espacial (como en segmentación, visualización espacial y fusión sensorial) es preferible eliminar la banda completa (lo cual elimina un total de  $n_1n_2$  datos).

El otro camino consiste en realizar la operación morfológica de *inlining* usando información tanto espacial como espectral. Este camino resulta en un suavizado de los espectros en la zona afectada, sin eliminar información. El lado negativo de seguir este camino es que puede resultar perjudicial en aplicaciones donde el ruido debe ser estimado a partir de los puntos vecinos, como en la estimación del sub espacio de la señal.

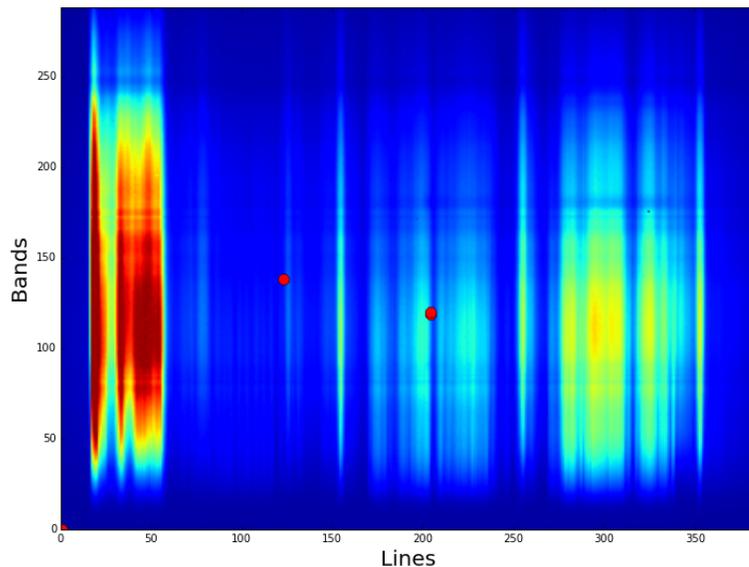


Figura 2.8: Ejemplo de visualización espectral de cuadro con puntos muertos

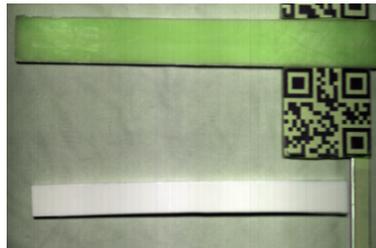


Figura 2.9: Visualización de HSI usada para calcular espectro de normalización

#### 2.7.4. Imágenes de reflectancia

Tal como se detalla en la sección 2.3, es necesario aplicar el método *Flat Field Correction* para convertir imágenes de fluorescencia en imágenes de reflectancia y así estandarizar la información espectral.

En las HSI del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305, se usan trozos de un material plástico que contiene teflón (PET) como referencia.

Si bien la referencia utilizada no tiene un espectro conocido o documentado, éste fue determinado utilizando la misma cámara usando *Flat Field Correction* con una referencia realmente plana y conocida, fabricada por el especialista en referencias hiper espectrales Spectralon.

Spectralon fabrica referencias para HSC de un material propio patentado, cuya reflectancia es casi completamente plana en un rango espectral dado y cuya proporción de reflexión está especificada [23].

La imagen mostrada en la figura 2.9 corresponde a la visualización espacial de la HSI con la que se calculó el espectro de referencia usada en terreno a partir de la Spectralon. Por otro lado, la imagen 2.3 muestra la aplicación de *Flat Field Correction* en un pixel correspondiente a un mineral mezclado.

### 2.7.5. Selección de sub imágenes

Además de los principales pre procesamientos de este trabajo mencionados en las secciones anteriores, se debió implementar una función para seleccionar sub imágenes a partir de HSI en la base de datos del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305.

Las HSI contienen decenas y a veces hasta cientos de miles de pixeles, lo que se traduce en tiempos de cómputo elevados en algunos algoritmos, en particular algunos de los usados en esta memoria. Adicionalmente, muchas de las HSI de la base de datos contienen bordes o espacios sin información útil los cuales idealmente deben ser removidos.

La función *crop* (recortar) implementada toma dos vértices opuestos de un rectángulo utilizado como máscara de la imagen y retorna una nueva HSI con un sub conjunto de los pixeles de la original.

### 2.7.6. Otros pre procesamientos no considerados

Hay otros pre procesamientos que no fueron considerados para este proyecto. Si bien algunos de ellos sí son tratados en cierta forma, no son usados en la etapa previa al procesamiento por distintos motivos. Algunos de estos pre procesamientos son los siguientes:

1. Corrección explícita de la magnitud de iluminación en toda la imagen. Notar que *Flat Field Correction* normaliza los espectros de la referencia lo que se transmite indirectamente a toda la HSI.
2. Eliminación/corrección de pixeles saturados
3. Corrección de desenfoque o *blur*. Este efecto puede considerarse parcialmente como un mezclado macroscópico, por lo que indirectamente se considera tratado o reducido.
4. Reducción de dimensionalidad espectral (ejemplos: PCA, Minimum Noise Fraction (MNF)).
5. Normalización de tamaño de pixeles en ejes espaciales. La velocidad a la que ocurre el barrido de la cámara puede provocar que se deba expandir o contraer el eje de los cuadros.
6. Reducción de ruido (*denoising*). La proyección en el sub espacio de la señal considera la maximización de la SNR, lo que es equivalente a reducir el ruido. Para aplicarlo se

deben proyectar los datos ya proyectados en el sub espacio de la señal, en su espacio original de modo que las dimensiones finales correspondan a las iniciales.

## Capítulo 3

# *Unmixing* y separación de señales

En este capítulo, se revisarán los antecedentes que existen sobre *unmixing* hiperespectral. Se explorarán primero sus fundamentos y principales variables asociadas, para luego seguir con sus aplicaciones. Se mostrarán las dos principales motivaciones que se tienen a la hora de impulsar esta técnica de pre procesamiento para finalmente concluir con el estado del arte. En él, se analizarán los distintos enfoques y formas de abordarlo.

### 3.1. Fundamentos de *Unmixing*

*Unmixing* es uno de los procedimientos más estudiados en el procesamiento de imágenes hiperespectrales (HSI). Consiste en estimar cuáles son los materiales que componen una HSI, y en qué proporciones lo hacen.

El *unmixing* lineal ideal asume que las HSI se modelan en un LMM. Produce como resultado dos elementos: una matriz de mezcla ( $\mathbf{M}$ ) y una matriz de abundancias fraccionarias ( $\mathbf{S}$ )<sup>1</sup>.

Las columnas de  $\mathbf{M}$ ,  $\{m_1, \dots, m_p\}$  se llaman los *endmembers* de la HSI. Cada *endmember* corresponde, en el caso ideal, a la firma espectral de uno de los materiales que lo componen.

La tecnología actual de HSC no puede capturar los espectros de materiales puros. Pese a eso, existen métodos de *unmixing* que asumen que los espectros puros se encuentran presentes entre las muestras hiperespectrales, por lo que se limitan a encontrar los píxeles más puros de los datos. Este proceso usualmente es rápido y sus resultados son aceptables en la mayoría de los casos. Así mismo, hay métodos que no asumen existencia de las firmas

---

<sup>1</sup>Algunos métodos de *unmixing* se concentran en sólo uno de los dos resultados, habiendo entonces métodos de cómputo de *endmembers* y métodos de regresiones para calcular abundancias fraccionarias. Pese a esta diferencia, si arroja ambos o solo uno de los resultados, en este trabajo de título se les llama indiferentemente métodos de *unmixing*.

espectrales por lo que para proceder deben estimar el conjunto de *endmembers* a partir de los pixeles capturados. Este proceso es caro computacionalmente, pero suele funcionar bien en las ocasiones en las que el primer escenario falla.

La matriz  $\mathbf{S}$  contiene  $N$  vectores columna, donde  $N$  es el número de pixeles en la HSI. Cada vector columna es de largo  $p$ . En cada una de sus componentes contiene un valor decimal. Los vectores columna representan las abundancias fraccionarias de un pixel (valores decimales entre 0 y 1), donde 0 en la fila  $i$  indica que el *endmember*  $i$ -ésimo no contribuye y 1 significa que pixel corresponde exactamente al  $i$ -ésimo *endmember*.

$\mathbf{S}$  cumple con dos propiedades fundamentales:

1. Cada valor de la matriz  $\mathbf{S}$  está estrictamente contenido en el intervalo  $[0, 1]$  (propiedad de no negatividad)
2. La suma de todos los valores de cada columna es 1 (propiedad de aditividad a 1)

El modelo lineal considera que cada pixel de la HSI consiste en la suma ponderada de los *endmembers* de la muestra, escalado por un factor de luminocidad  $\gamma \in [0, 1]$ . En forma matemática, esto se expresa en la ecuación 3.1.

$$(3.1) \quad \mathbf{X} = \gamma \mathbf{M} \mathbf{S}$$

Como cada HSI ha sido pre procesada con la corrección de *Flat Field*, el ponderador  $\gamma$  puede fijarse en 1 para los efectos de esta memoria.

En la ecuación 3.1,  $\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots, \mathbf{m}_p]$  corresponde a la matriz de mezcla o de *endmembers* ( $m_i \in \mathbb{R}^L$ ), mientras que  $\mathbf{S} = [\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_N]$  corresponde a la matriz de abundancias fraccionarias (donde  $s_i \in \mathbb{R}^p$ ). Es importante notar que las dimensiones de las matrices de LMM coinciden matemáticamente pues  $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{L \times p}$ ,  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{p \times N}$  y, desde luego,  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ .

Usualmente, se considera que los espectros son ruidosos pues corresponden a mediciones realizadas por un sensor. Este ruido se suele modelar como aditivo,

$$(3.2) \quad Y = X + n$$

El número de *endmembers*,  $p$ , en general no es conocido. En esos casos debe estimarse primero, con lo que el problema pasa a ser análogo al problema clásico denominado Blind Source Separation (BSS) de procesamiento de señales. En general,  $p \ll L$ , donde  $L$  corresponde a la resolución espectral de la cámara. Por ello, *unmixing* en sí es un proceso de reducción de dimensionalidad espectral.

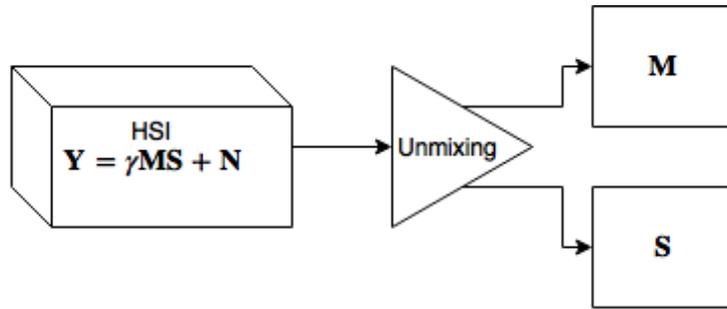


Figura 3.1: Diagrama de flujo básico de *unmixing* hiper espectral

En la figura 3.1 se muestra que para una HSI, aplicar *unmixing* consiste en estimar a partir de la matriz de espectros medidos  $\mathbf{Y}$  la matriz de mezcla  $\mathbf{M}$  y la matriz de abundancias fraccionarias  $\mathbf{S}$ .

## 3.2. Aplicaciones de separación de señales

El *unmixing* de señales no es exclusivo de las HSI pues en otras áreas del conocimiento el problema análogo a *unmixing* se denomina separación de señales “a ciegas” (en inglés BSS). Es “a ciegas” debido a que no se sabe a priori cuántas son las fuentes de la señal (equivalente al concepto de espectros puros). El problema, de acuerdo a la literatura, no está resuelto para todos los casos. La mejor solución al día de la culminación de este trabajo depende del tipo de señal estudiada. Por ello es relevante tener en cuenta la variedad de aplicaciones en las que se han estudiado métodos de separación de señales para poder llegar algún día a encontrar su solución definitiva.

Algunas de las disciplinas de aplicación y los casos típicos en donde se han utilizado técnicas de separación de señales son:

- Medicina  
Electrocardiografía (ECG), electroencefalografía (EEG), imágenes por resonancia magnética funcional (fRMN), tomografía y magnetoencefalografía (MEG). [35]
- Audio  
Separación en tiempo real para traducción simultánea, muestreo de sonidos musicales para composición de música electrónica, mejora en calidad de sonido, cancelación de voces para karaoke, renderizado estéreo a múltiples canales. [44]
- Imágenes y comunicación visual  
Extracción de características, detección de bordes. [20]
- Identificación por radiofrecuencia  
Detección y separación de señales desde varias fuentes. [11]

Hay otros campos de aplicación donde se han podido aplicar algoritmos de BSS, pero las soluciones que esta técnica entrega aún no se validan o cuentan con poca documentación de su eficacia. Algunas de estas aplicaciones son:

- RADAR  
Separación de fuentes de señales de radar.
- Microelectrónica  
Mejoramiento al manejo de ruidos internos en circuitos integrados producidos por inducción interna de señales.
- Sensores hipersensibles  
Sensores que incorporan fácilmente ruido, es posible separar lo que es ruido de lo que es señal de interés.

- Señales de procesos críticos y detección de errores

Reducción de incertidumbre en señales críticas, como las generadas en plantas nucleares, las cuales incorporan ruido en su procesamiento. Detección de los errores en señales que podrían gatillar alarmas innecesarias.

- Separación de señales sísmicas

Señales que se sabe tienen fuentes distintas, poder incorporar al modelo de su estudio a cada fuente por separado.

- Monitorización de variables de estado en procesos dinámicos

Observación de variables de estado pueden mejorar al detectar y eliminar fuentes de ruido o distorsión.

### 3.3. Motivación para aplicar *unmixing* hiper espectral

Existen al menos dos aplicaciones donde el *unmixing* hiper espectral demuestra tener importancia en el contexto de las HSI.

La primera de ellas es en el análisis de las imágenes realizado por humanos expertos en espectrometría. En estas tareas, los especialistas en espectrometría son los que manipulan, rotulan, caracterizan y examinan las HSI. Por ello, la prioridad en esta aplicación es poder extraer la mayor cantidad posible de información procesada en forma de visualizaciones para auxiliar al investigador.

La otra aplicación es en el análisis realizado por computadores de las HSI como un paso previo a una etapa de clasificación, detección u otra tarea llevada a cabo con algoritmos de *Machine Learning*. En estos casos, poder extraer la mayor cantidad de información de cada pixel sin sacrificar rendimiento y procurando no toparse con dificultades numéricas son la prioridades. Una forma de lograrlo es utilizando los algoritmos de *unmixing*.

Las secciones 3.3.1 y 3.3.2 describen más a fondo las aplicaciones de análisis de especialistas y de pre procesamiento de algoritmos de Machine Learning.

#### 3.3.1. Análisis de especialistas

Antiguamente, las HSI no existían pues las HSC por un lado no podían contener los arreglos de detectores que contienen actualmente ni por el otro podían transferir la densidad de datos necesaria como pueden hacerlo hoy. Sí existían espectrómetros, dispositivos que capturan el espectro de un área relativamente grande en un solo pixel. La forma en que se adquirían los datos impulsó el desarrollo de técnicas de *unmixing* pues las muestras eran tan pocas que resultaba necesario extraer la mayor cantidad de información posible de cada una.

A medida que avanzaba la tecnología se comenzaron a barrer áreas mayores moviendo el sensor a lo largo y ancho de la escena, pero ello resultaba muy tedioso y lento. Luego, con la disminución de su tamaño y con el aumento del *throughput*, se pudieron incorporar más detectores en una línea de escaneo permitiendo a los instrumentos realizar barridos de áreas completas en los mismos tiempos que antes se realizaban barridos de una sola línea. Los pixeles ahora cubren áreas tan reducidas como  $500\mu m$  de diámetro en ciertas aplicaciones como en el estudio geometalúrgico. Pese al tremendo avance de la tecnología de adquisición hiper espectral, se sabe que hay partículas en los materiales que son más pequeñas que  $500\mu m$  de diámetro, por lo que aún se necesita del *unmixing* para poder estudiar mejor los distintos materiales de una escena.

Es importante poder caracterizar los espectros puros de un área pues esto facilita el análisis de las muestras. Conocer los componentes de una muestra y sus fracciones relativas en cada pixel permite a los investigadores realizar cálculos estadísticos y validaciones de modelos de mezclado, investigar sobre cuantificación de abundancias, utilizar técnicas avanzadas de visualización o realizar segmentación espacial basándose en abundancias de

minerales puros, entre muchísimas otras acciones.

### **3.3.2. *Unmixing* como etapa en pre procesamiento de Machine Learning**

El *unmixing* hiper espectral puede utilizarse como una etapa dentro de las varias que conforman el pre procesamiento de algoritmos de aprendizaje o predicción por computador. Utilizarlo suele presentar ventajas en el desempeño total y en el tiempo de ejecución del algoritmo. Esto se debe a que usar *unmixing* se puede interpretar como una forma de extraer características de los espectros de una HSI.

De ser utilizados con una etapa de *unmixing*, los algoritmos de Machine Learning aprovechan la desagregación y simplificación de los datos, aumentando su rendimiento y precisión.

La eliminación de estos efectos es deseable en la etapa de pre procesamiento de los datos para así mejorar el desempeño de tareas posteriores en el procesamiento.

#### **3.3.2.1. Reducción del ruido**

El ruido es un fenómeno de contaminación de señales con componentes de alta frecuencia. La contaminación puede ocurrir en muchos niveles de la manipulación de datos hiper espectrales: en la obtención (ruidos térmicos o eléctricos), al procesar los datos (truncamiento de decimales, pérdidas de precisión al pasar de un tipo de datos a otro, overflow o underflow), al almacenar los datos (corrupción de datos al pasar de un medio a otro), etcétera. A mayor cantidad de ruido el desempeño de las técnicas de procesamiento de señales y de Machine Learning es más deficiente.

#### **3.3.2.2. Reducción de dimensionalidad**

La alta dimensionalidad tiene consecuencias tanto positivas como negativas cuando se utilizan algoritmos de aprendizaje y predicción. En un espacio de alta dimensionalidad la probabilidad de que dos clases sean separables aumenta pues existe más información, representada como características distintivas del dato, que permiten a algoritmos y personas diferenciar entre las clases. Sin embargo, al haber más dimensiones se necesita de mayor capacidad o tiempo de cómputo. En efecto, el concepto de “Maldición de la Dimensionalidad” se utiliza coloquialmente en muchas áreas de ciencia para referirse a la reacción de aumento de complejidad en forma exponencial ante la acción de agregar una nueva dimensionalidad en los datos.

### 3.4. Identificación de sub espacio de señal o Dimensionalidad Virtual (VD)

Antes de introducir las formas y métodos de *unmixing*, se presentan dos métodos de identificación del sub espacio donde las señales adquiridas presentan su máxima SNR. Este paso es fundamental cuando se desea trabajar con señales de alta dimensionalidad. La identificación del *signal subspace* trae consigo dos principales implicancias o aplicaciones en el procesamiento de HSI:

1. Reducir la dimensionalidad de las muestras hiper espectrales a un número de dimensiones igual a la cantidad de minerales capturados
2. Estimar este número para ser usado como umbral en el *unmixing*

Las HSI tienen alta dimensionalidad espectral debido a la resolución de las HSC actuales. Sin embargo, varias de las bandas que componen una HSI son redundantes o demasiado ruidosas en cuanto a la información que aportan, y los espectros viven en un sub espacio vectorial de dimensionalidad mucho menor a la que las compone originalmente.

Este pre procesamiento tiene relación con encontrar el sub espacio vectorial en el cual están los espectros de una HSI, descrito en su totalidad por una matriz de transformación lineal  $\mathbf{E}_{\hat{p}}$ . Esta matriz tiene  $\hat{p}$  columnas, cada una de las cuales es ortonormal a las demás. La proyección de los datos hiper espectrales sobre esta matriz reduce el SNR de la señal, permitiendo obtener mejores resultados en métodos de *unmixing* como DECA o SISAL.

Por otro lado, la VD es un concepto que se aplica específicamente para estimar el número de emisores en una señal.

En las secciones 3.4.1 y 3.4.2 se exploran dos técnicas para determinar el número de *endmembers*. El primero de ellos lo hace con el concepto de VD, mientras que el segundo calcula el sub espacio de la señal a partir de las HSI.

#### 3.4.1. HFC, NWHFC y NSP

Los métodos HFC son métodos estadísticos presentados en 2004 [9] que tienen como objetivo determinar la VD de un conjunto de pixeles hiper espectrales.

La VD es un concepto introducido en [9]. La definición de este concepto, según el artículo es “la cantidad mínima de fuentes de señal espectralmente diferentes que caracterizan los datos hiper espectrales desde la perspectiva de la detección de objetivos y clasificación, y no a los *endmembers* de la imagen como tales”. HFC no es, por tanto, un método que asegure necesariamente entregar el número de *endmembers* que tiene una HSI, pero sí sirve como una estimación para ser utilizada en los parámetros de los métodos de *unmixing*.

Considerando las matrices de correlación ( $\mathbf{R}$ ) y covarianza ( $\Sigma$ ) de todos los espectros de una HSI, sus valores propios indican la predominancia relativa de las componentes (o bandas) a las que se relacionan. En caso de no haber más que ruido en una componente, los valores propios de ambas matrices tendrían idealmente el mismo valor: la potencia del mismo.

La anterior afirmación se demuestra con detalles en [9], pero básicamente se explica cuando el número de muestras crece. En ese caso, la varianza de la diferencia de los valores propios de las matrices de correlación y covarianza, modelados como variables aleatorias, tiende a cero. Cuando la contribución en señal de una componente es muy pequeña, la potencia que es representada en el valor propio de cualquiera de las matrices también lo es, por lo que al no haber varianza en la diferencia, su diferencia también tiende a cero,

HFC hace uso de esta propiedad en un problema de test de hipótesis binario. Las hipótesis nula y alternativa son las siguientes:

$$(3.3) \quad H_0 : z_l = \hat{\lambda}_l - \lambda_l = 0$$

$$(3.4) \quad H_1 : z_l = \hat{\lambda}_l - \lambda_l > 0 \quad l \in [1, L]$$

donde  $\lambda_i$  y  $\hat{\lambda}_i$  corresponden a los valores propios  $i$ -ésimos de  $\Sigma$  y de  $\mathbf{R}$ , respectivamente.

El método indica que la cantidad de veces que falla la hipótesis alternativa,  $H_1$ , es precisamente el número de dimensiones virtuales de la muestra. Como los valores propios de una muestra real se encuentran sometidos a perturbaciones, la diferencia entre valores propios se compara con un umbral de tolerancia a falsas alarmas. Para establecer el valor de este umbral se puede usar un análisis con curva Receiver Operating Characteristic (ROC). Este parámetro representa la aversión al error por parte del usuario. En HFC no es posible extender un sólo valor de probabilidad de falsa alarma a todas las bandas ya que el ruido no necesariamente es uniforme en todas ellas. Para utilizar el método en aplicaciones realistas se debiera considerar un parámetro por cada componente para fijar la aversión al error en cada banda.

Un algoritmo desarrollado a partir de HFC es Noise Whitened Harsanyi-Farrand-Chang (NWHFC), el cual extiende al primero con un paso extra de estimación de ruido y *denoising* (o *whitening*). En particular, es necesario hacer un paso de reducción de ruido cuando la media de la suma de las potencias cuadráticas de los valores propios de correlación y covarianza son demasiado distintas. En esos casos, la varianza de la diferencia de ambos valores propios no tiende a cero sino que a su covarianza, y esta a su vez es mayor cuando el efecto del ruido de una banda afecta a las demás.

$$(3.5) \quad \Sigma_{nw} = \mathbf{K}_n^{-(1/2)} \mathbf{K} \mathbf{K}_n^{-(1/2)}$$

Cuando no hay muchos espectros, los valores propios de las matrices de covarianza

y correlación no cumplen con la condición de tender a cero. Para estos casos es que se desarrolló el método NSP, el cual suele tener mejores resultados que HFC y NWHFC en conjuntos de datos pequeños [9]. El método calcula la matriz de covarianza de los datos que se tienen. Luego, se le realiza *denoising* aplicando la ecuación 3.5, donde  $\mathbf{K}_n$  corresponde a la estimación de la matriz de covarianza del ruido. Ésta se puede obtener, por ejemplo, con alguno de los métodos presentados en [36, 37]. El *denoising* fija la varianza del ruido de cada banda en 1. Tras el *denoising*, los valores propios de la matriz de covarianza cumplen una de las siguientes hipótesis:

$$(3.6) \quad H_0 : z'_l = \bar{\lambda}_l = 1$$

$$(3.7) \quad H_1 : z'_l = \bar{\lambda}_l > 1 \quad l \in [1, L]$$

El número de veces que se cumple la hipótesis alternativa es el número estimado de dimensiones virtuales. El umbral se puede calcular igual que en HFC usando un análisis ROC. En este caso, un parámetro debe ser adecuado pues las dimensiones del ruido tras el *denoising* se encuentran escaladas en todas las bandas por igual.

### 3.4.2. HySIME

HySIME [28, 5] es un método presentado en 2006 que no tiene parámetro de ajuste alguno. Este método encuentra la base de vectores propios que generan el sub espacio de la señal.

El método funciona en dos pasos: primero estima el ruido a través de una regresión lineal por cada banda, y luego resuelve un problema de optimización de mínimo error cuadrático medio entre la diferencia del error de proyección de la señal y la potencia del ruido estimado.

En la primera parte del algoritmo HySIME, el ruido es estimado asumiendo que el número de bandas de una HSI es tan grande que una banda faltante se puede estimar a partir de todas las demás. La diferencia entre la señal de la banda realmente medida y la señal estimada de la banda faltante se asume aproximadamente igual al ruido que se agrega a la medición. Para estimar el ruido se usa una regresión lineal, un método eficiente y sencillo para reconstruir señales de mínimo error cuadrático medio. Este enfoque de estimación de ruido en HSI se valida en [37].

La parte final del algoritmo obtiene primero el sub espacio de componentes principales de las señales medidas, usando para ello descomposición de valores singulares para la matriz de correlación de la señal medida restando el ruido estimado. En él se proyectan la matriz de correlación del ruido y de la señal, de cuyas trazas se obtienen la potencia del ruido y el error de proyección de la señal medida para cada componente principal, respectivamente. El mínimo error cuadrático medio se encuentra considerando las bandas donde las diferencias entre las dos magnitudes se hacen negativas.

HySIME ha demostrado ser bastante robusto y veloz. Si bien gran parte de su diseño se basa en supuestos (como que el ruido es aditivo o que este no está correlacionado entre las bandas), su resultado es igual o mejor incluso que los demás algoritmos del estado del arte en condiciones con bajo SNR. Cuando el SNR es alto, el rendimiento es similar al de HFC.

HySIME fue implementado en esta memoria y su pseudo código se encuentra en los algoritmos 5 y 6 de la sección 4.2.

### 3.5. Métodos de unmixing lineal

El problema de *unmixing* lineal se ha intentado abordar desde varios puntos de vista de la computación y las matemáticas. Los casos más emblemáticos por su éxito son el geométrico, el estadístico y aquel que hace uso de regresiones *sparse* para abordarlo.

Los métodos geométricos son íntegramente técnicas de cómputo de *endmembers*, mientras que los métodos estadísticos permiten además estimar abundancias fraccionarias. Actualmente, los métodos geométricos suelen ser más veloces y menos exactos que los estadísticos debido a que no hacen suposiciones del modelo de los datos. Sin embargo, es en los primeros solamente donde se puede asegurar convergencia en tiempos finitos.

Los métodos de regresiones *sparse* son útiles cuando ya se cuenta con un diccionario de candidatos a *endmembers* y cuando sólo se requiere poder realizar una reconstrucción de las señales medidas a partir de muestras de este diccionario. En otras palabras, estos métodos se centran en identificar las abundancias de un conjunto conocido de firmas espectrales para cada muestra. Son *sparse* pues muchas de las contribuciones son naturalmente 0, lo que se modela como datos faltantes.

Aunque las regresiones *sparse* son adecuadas para la mayoría de los casos en que se desean conocer las fracciones de abundancia, se pueden usar varias regresiones no necesariamente *sparse* para encontrar las abundancias fraccionarias aproximadas. Esto a veces es deseable pues no siempre existe la capacidad de cómputo para realizar un procesamiento iterativo y demandante de recursos. Entre las muchas opciones de las regresiones *sparse* se encuentran Least Squares (LS), la inversa de la matriz de mezcla proyectada y PCA.

#### 3.5.1. Métodos geométricos

El objetivo de esta clase de algoritmos es encontrar los vértices que determinan al *simplex*, o envoltura convexa de los píxeles de una HSI. Una definición de *simplex* es el conjunto conexo más pequeño que contiene a todos los datos estudiados.

Despreciando el ruido, si se asume que el mezclado es lineal y si se conocen los vértices del *simplex*, entonces se puede asumir que éstos son en realidad los *endmembers* de la HSI (un buen ejemplo de esto lo representa la imagen de datos simulados en la figura 5.1). Una

combinación lineal de los vértices siempre puede producir cualquier otro pixel de una HSI en el caso de ausencia de ruido [6].

Para la aplicaciones de métodos geométricos existen dos clases de escenarios. Los *endmembers* puros se pueden encontrar como datos en el conjunto de pixeles, lo que ocurre sobre todo en las HSI de yacimientos de minerales puros o en laboratorios. En esos casos, el problema consiste en simplemente encontrar los *endmembers* de entre el conjunto de pixeles de entrada. El otro escenario se presenta cuando los vértices no se encuentran presentes en la HSI. En aquel caso, el más común por lo demás, es necesario estimarlos a partir de algún criterio, o bien asumir que los vértices del *simplex* son aproximados por los extremos geométricos de la señal medida.

Algunos algoritmos de *unmixing* pertenecientes a esta clase son Vertex Component Analysis (VCA), *N-FINDR*, Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian (SISAL), Minimum Volume Transform (MVT), Pixel Purity Index (PPI) y Gift Wrapping Algorithm (GWA). De ellos, los más populares son VCA y N Finder Algorithm (N-FINDR) debido a su simplicidad de implementación y rapidez de ejecución.

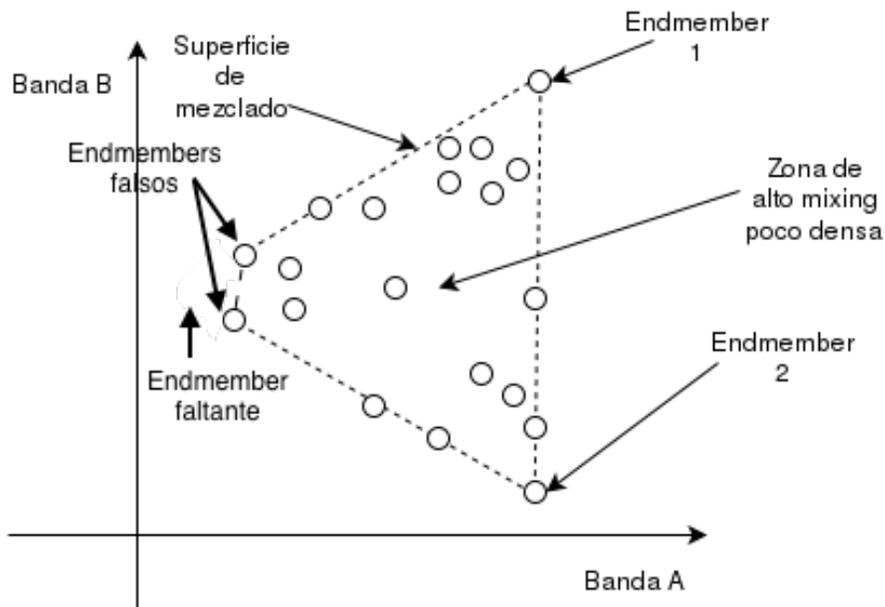


Figura 3.2: *Unmixing* geométrico

La figura 3.2 muestra la ubicación de los *endmembers* en un caso de mezcla de espectros visualizado usando solo dos bandas. Los *endmembers* en el *unmixing* geométrico se ajustan en los vértices del *simplex*. Algunos de ellos asumen la existencia de errores en la delimitación del *simplex*, colocando los *endmembers* en posiciones más realistas. Para el funcionamiento óptimo de los métodos de *unmixing* geométricos, el nivel de mezcla de los pixeles no debe ser demasiado elevado. El sector medio del *simplex* relativamente debe ser menos denso que los

bordes.

En este trabajo de título se presentan dos métodos geométricos. VCA es un método puramente geométrico de proyecciones sucesivas a direcciones ortogonales entre si. SISAL, por otro lado, es un método en que calcular el volumen mínimo del *simplex* se modela como un problema de optimización. Ambos métodos se suelen usar por si solos o como punto de partida de algoritmos más complejos o de otras clases.

Ambos métodos fueron implementados y probados como alternativas de extracción de *endmembers*. Tanto VCA como SISAL fueron desarrollados por académicos del Instituto de Telecomunicações, el cual es parte del Instituto Superior Técnico (IST) de la Universidad de Lisboa en Portugal. Ambos métodos son no supervisados.

### 3.5.1.1. Vertex Component Analysis (VCA)

VCA es un algoritmo de cómputo de *endmembers* desarrollado en 2005 y presentado en la referencia [31]. Sus únicas entradas son la matriz de muestras,  $\mathbf{Y}$ , y el número de *endmembers* a determinar,  $p$ . Esto lo hace ideal para ser utilizado como inicialización de métodos más complejos. El método asume la existencia de los *endmembers* entre los datos de entrada.

El algoritmo, según citan sus autores, se basa en dos premisas:

1. Los *endmembers* son los vértices de un *simplex* conformado por los datos
2. La transformación afín de un *simplex* también es un *simplex*

En la publicación de 2005, está estipulado que opera tanto con datos proyectados como no proyectados.

La manera en que VCA funciona es proyectando iterativamente los pixeles en la dirección ortogonal al sub espacio vectorial generado por los *endmembers* detectados en cada iteración. Cada nuevo *endmember* corresponde a un extremo de la proyección. El algoritmo itera hasta que se agota el número pedido de firmas espectrales a determinar.

Al comienzo del método, es necesario computar un hiper plano ( $\mathbf{u}$ ) adecuado que sea no ortogonal a todos los datos ( $\mathbf{r}$ ), es decir que

$$(3.8) \quad \mathbf{r}^T \mathbf{u} \neq 0, \forall \mathbf{r} \in \mathbf{R}$$

Para hacerlo se utiliza una proyección en los componentes principales de los pixeles, ya sea en un espacio de la misma dimensionalidad que los datos de entrada (utilizando Singular Value Decomposition (SVD)) o un espacio de dimensionalidad menor (utilizando PCA). Utilizar uno u otro método de proyección depende del ruido que afecta a las muestras. Cuando el

ruido es poco, la información útil reside en todas las bandas por lo que es conveniente buscar un plano que no sea ortogonal al ruido. Sin embargo, cuando el ruido es considerable, es conveniente encontrar un hiper plano que sí lo sea, asumiendo para ello que el ruido reside en las componentes con menor varianza de la proyección. Proyectar datos ruidosos en el hiper plano ortogonal al ruido y no a la señal aumenta la SNR. El umbral de ruido determinado heurísticamente en el artículo original es

$$(3.9) \quad SNR_{th} = 15 + 10 \log_{10}(p) dB$$

Una vez determinado un hiper plano adecuado puede comenzar la iteración. Al inicio de la iteración, el algoritmo escoge un hiper plano ortogonal al espacio conformado por los *endmembers* identificados en la iteración anterior. Tras ello, se proyectan todos los datos hiper espectrales en el nuevo plano, identificando el punto máximo (más alejado del nuevo origen) como un vértice en dicha dirección. Este vector se agrega en el conjunto solución. VCA itera hasta agotar los *endmembers* solicitados.

### 3.5.1.2. Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian (SISAL)

SISAL es un algoritmo de *unmixing* geométrico basado en minimización de volumen del *simplex* que contiene a los datos. Su referencia en la literatura es [29].

Tiene como principal ventaja sobre VCA que no asume existencia de los *endmembers* entre los píxeles de la HSI analizada.

El algoritmo opera realizando una minimización iterativa del volumen conformado por el *simplex* de la HSI. Usa *splitted* y *augmented lagrangians*, dos técnicas de optimización matemática, para forzar que el problema sea convexo y así su solución sea alcanzable. Esta clase de métodos permiten resolver problemas con restricciones complejas, realizando una optimización a una serie de problemas sin restricciones que tiende al problema original (los lagrangianos originales del problema se estiman paso a paso).

De acuerdo a lo mencionado por sus autores en [29], SISAL lidia con que la restricción de positividad de las abundancias fraccionarias es fuerte, y la reemplaza por restricciones suaves más simples de resolver numéricamente pero que pierden su significado original.

Para lograr reemplazar el problema por otro resoluble, el método considera un parámetro que el usuario debe elegir al momento de usar SISAL. El parámetro de regularización tiene efectos directos sobre la forma en que opera el método. Elegir un valor bajo consiste en relajar el problema pudiéndose lograr resultados erróneos, mientras que uno alto hace que el método tienda más al problema con la restricción dura pero agregando complejidad para resolverlo. Este parámetro actúa en el método como un ponderador de una función de discriminación:

$$\begin{aligned}
(3.10) \quad & \mathbf{Q}^* = \arg \min_{\mathbf{Q}} -\log |\det (\mathbf{Q})| \\
& \text{s.a.: } \mathbf{1}_p^T \mathbf{Q} = \mathbf{a}^T \\
& \mathbf{Q}\mathbf{Y} \geq 0
\end{aligned}$$

donde  $\mathbf{a}^T = \mathbf{1}_n \mathbf{Y}^T (\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T)^{-1}$  y  $\det (\mathbf{Q}) = \det (\mathbf{M}^{-1})^2$  es inversamente proporcional al volumen del *simplex* conformado por los *endmembers* [25].

Si pudiera resolverse, el problema 3.10 sería el que obtendría las soluciones óptimas del problema de *unmixing*, ya que la función objetivo  $\mathbf{Q}^*$  se encarga de obtener el volumen mínimo que envuelve a todas las muestras. Sin embargo, hay dos problemas que impiden converger a la solución solamente con esta formulación. En primer lugar, el Hessiano de  $-\log |\det \mathbf{Q}|$  no es necesariamente una matriz semi definida positiva por lo que el problema 3.10 no es siempre convexo. El segundo problema está en la restricción de positividad,  $\mathbf{Q}\mathbf{Y} \geq 0$ , la cual es demasiado estricta y por tanto debe ser relajada para solucionar el problema.

Estos problemas sí se pueden solucionar parcialmente usando las técnicas promovidas por SISAL: *splitted variables* y *augmented lagrangians*.

$$\begin{aligned}
(3.11) \quad & \mathbf{Q}^* = \arg \min_{\mathbf{Q}} -\log |\det (\mathbf{Q})| + \lambda \|\mathbf{Q}\mathbf{Y}\|_h \\
& \text{s.a.: } \mathbf{1}_p^T \mathbf{Q} = \mathbf{a}^T
\end{aligned}$$

El problema equivalente al de la ecuación 3.10 que soluciona la complejidad de la restricción de positividad es el que resulta de aplicar *augmented lagrangian* con la función *hinge* (visagra) al problema original. Dicha formulación es la que se muestra en la ecuación 3.11, donde  $\lambda$  corresponde al parámetro de regularización y  $\|x\|_h$  corresponde a la llamada función *hinge*, la cual se define en la ecuación 3.12. La función *hinge* es comúnmente usada en aplicaciones de clasificación como una función de discriminación suave. En este caso, la función puede usarse para forzar que “relativamente” todos los *endmembers* tengan una participación positiva en las mezclas de minerales en los pixeles.

$$\begin{aligned}
(3.12) \quad & \|\mathbf{X}\|_h = \sum_{ij} h(|\mathbf{X}_{i,j}|) \\
& h(x) = \max \{-x, 0\}
\end{aligned}$$

<sup>2</sup>La inversión de  $\mathbf{M}$  existe pues se asume que esta matriz, al igual que  $\mathbf{Q}$ , son matrices cuadradas de dimensiones  $(p \times p)$ . Esta dimensionalidad se debe a que los datos se encuentran proyectados en un sub espacio de dimensión  $p$ , y que cada *endmember* encontrado o cada columna de la matriz  $\mathbf{M}$ , es linealmente independiente (LI).

En segundo lugar, el hecho que no sea un problema siempre convexo se puede solucionar resolviendo en cada paso una aproximación cuadrática de la función objetivo. Estas aproximaciones formuladas en cada iteración de un ciclo de sub problemas no continuos, convexos y suaves convergen siempre a una solución sub óptima, pero resultan muy veloces de procesar.

SISAL viene a solucionar los problemas que presenta VCA en cuanto a ofrecer soluciones de los datos faltantes. Es, también, más tolerante que VCA a *outliers* sin dejar de ser escalable al aplicarse sobre una gran cantidad de datos.

### 3.5.2. Métodos estadísticos

Los métodos estadísticos para *unmixing* tienen como finalidad la estimación de una serie de parámetros de distribuciones de probabilidad que explican la forma en que los *endmembers* se combinan en una HSI.

De acuerdo a [6] se ha confirmado que esta clase de métodos funcionan mejor que los geométricos cuando el grado de mezcla en los datos es grande. Esto se debe a que cuando la mezcla de los *endmembers* es excesiva, la cantidad de *endmembers* en las caras de la envoltura convexa que envuelve a los datos es menor, y los lados del *simplex* no se distinguen fácilmente. Esto implica que los métodos estadísticos suelen no requerir que los vectores retornados como *endmembers* se encuentren entre los datos de entrada.

Algo que los métodos estadísticos hacen mejor que los métodos geométricos es tomar en cuenta la variabilidad de las firmas espectrales [6]. Ellos asumen que cada material tiene una cierta variabilidad en una misma imagen dada por factores físicos y químicos como la temperatura y la presencia de contaminantes, respectivamente. Estos métodos soportan la variabilidad pues modelan los *endmembers* como muestras de una distribución probabilística y no como vectores fijos.

Esta forma de visualizar el problema se origina directamente del problema básico de separación de señales. Se suele usar inferencia Bayesiana para determinar parámetros que permiten caracterizar a las matrices de *unmixing* pues a mayor grado de conocimiento de las señales hiper espectrales, mayor es la probabilidad que se obtenga una buena estimación de los parámetros.

$$(3.13) \quad P(\Theta|\mathbf{X}) = \frac{P(\mathbf{X}|\Theta)P(\Theta)}{P(\mathbf{X})}$$

En la ecuación 3.13 se establece la base teórica sobre la que se construyen todos los métodos de inferencia bayesiana, Ella representa que conocer la distribución de los parámetros a calcular ( $\Theta$ ) dada una medición ( $\mathbf{X}$ ) está determinado por la probabilidad condicional de las observaciones sujetas a ciertos parámetros, ponderada por la distribución

de éstos, y a su vez dividida por la probabilidad de la evidencia.  $P(\mathbf{X}|\Theta)$  corresponde en la práctica a una función de verosimilitud obtenida a partir del modelo de observaciones. La probabilidad a priori de los parámetros,  $P(\Theta)$  es asumida o escogida antes de conocer los resultados, y luego esta elección es validada. Finalmente, la distribución marginal o probabilidad de la evidencia del modelo,  $P(\mathbf{X})$ , depende solamente de la medición y no de los parámetros, por lo que no es relevante en su estimación.

El problema de inferencia en general resulta mucho más exigente computacionalmente que el problema de determinación de vértices de un volumen. Por ello, los algoritmos estadísticos deben ser usados preferentemente sólo cuando la estimación dada por las proyecciones geométricas no entregan resultados satisfactorios.

Entre los algoritmos de *unmixing* que existen y que pertenecen a la clase de métodos estadísticos destacan los Bayesianos: Independent Component Analysis (ICA) [30] y Dependent Component Analysis (DECA) [6].

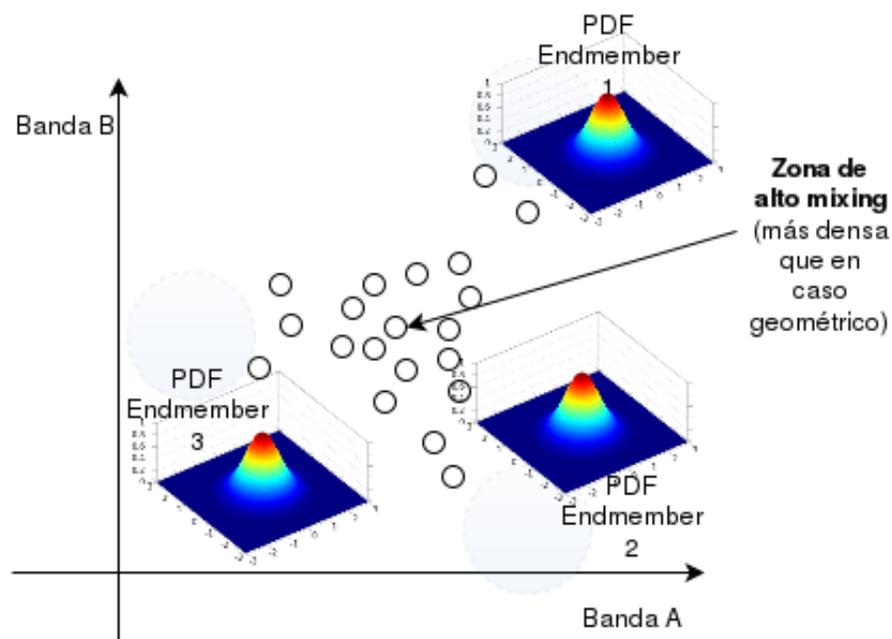


Figura 3.3: Setup en *unmixing* estadístico

La figura 3.3 muestra que los *endmembers* se modelan como vectores aleatorios sobre el espacio espectral. Los *endmembers* en el *unmixing* estadístico no se asumen constantes, lo que se ajusta mejor con el modelamiento físico y la naturaleza del dato. Los métodos de *unmixing* estadísticos se comportan mejor que los geométricos cuando el sector medio del *simplex* es denso.

En esta memoria de título se estudia el funcionamiento del algoritmo DECA solamente debido a que éste fue específicamente diseñado para *unmixing* hiper espectral. Uno de los

supuestos fuertes de ICA es que las fuentes de las señales a determinar son independientes estadísticamente. DECA se basa en el problema resuelto por ICA añadiendo las restricciones fuertes de dependencia en HSI: suma a 1 y no negatividad.

Pruebas preliminares con DECA indicaron que el conjunto de datos que se tenía no era adecuado para este método, por lo que no fue implementado. No obstante, se consideró hacer un análisis completo del método debido a su enfoque distinto para resolver el problema de *unmixing*.

### 3.5.2.1. Dependent Component Analysis (DECA)

DECA es un algoritmo de inferencia estadística no supervisado publicado por primera vez en 2005 [30] y complementado en 2009 [29] con técnicas iterativas de cómputo y un método de estimación del número de modos de Dirichlet. Fue desarrollado por los mismos académicos del Instituto Superior Técnico (IST) de la Universidad Técnica de Lisboa que presentaron los métodos VCA y SISAL. Este método no requiere que los espectros puros se encuentren en la imagen. Sus entradas son la matriz de pixeles mezclados,  $\mathbf{Y}$ , el número de *endmembers* a determinar,  $p$ , y el número de nodos de Dirichlet a utilizar,  $k$ . Sus salidas son ambas matrices buscadas en *unmixing*: la matriz de mezcla  $\mathbf{M}$  y la matriz de abundancias fraccionarias  $\mathbf{S}$ .

DECA es una extensión del método de BSS llamado ICA para casos de fuentes correlacionadas como el de las HSI. ICA se basa en el supuesto de independencia de las fuentes de la señal para efectuar una separación usando un modelo Mezcla de Distribuciones Gaussiana (MOG). Ello deshabilita a ICA para ser usado en el problema de separación de señales hiper espectrales. No obstante, están documentadas aplicaciones con condiciones bien específicas de ruidos suficientemente altos y *endmembers* suficientemente distintos donde se ha utilizado ICA, obteniéndose resultados razonables [30].

En el caso de DECA, la palabra *dependent* (o dependiente) es usada pues se toman en cuenta la restricciones de las imágenes hiper espectrales (ver sección 3.1), y se usa un modelo Mezcla de Distribuciones Dirichlet (MOD) en lugar de MOG debido a la dependencia inherente que conlleva esta distribución. En esta clase de distribuciones se respeta la suma a 1 de las abundancias fraccionarias de manera automática. Los parámetros del modelo corresponden a la matriz de abundancias estimada, y ellos se determinan usando un algoritmo de estimación iterativo llamado Generalized Expectation Minimization (GEM). GEM sirve para encontrar un conjunto de parámetros que maximizan la verosimilitud de una distribución arbitraria, y se suele usar cuando no hay forma analítica de encontrar los parámetros óptimos. Ello es necesario en este caso pues la verosimilitud de la matriz de mezcla no es derivable de forma analítica. El estimador GEM converge a una estimación de máxima verosimilitud local.

$$(3.14) \quad p_{\mathbf{S}}(\mathbf{s}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{q=1}^K \epsilon_q \underbrace{\frac{\Gamma(\sum_{j=1}^p \theta_{qj})}{\prod_{j=1}^p \Gamma(\theta_{qj})} \prod_{j=1}^p s_j^{\theta_{qj}-1}}_{D(\mathbf{s}|\theta_q)}$$

La ecuación 3.14 muestra el modelo MOD, donde  $\Theta$  corresponde al conjunto de parámetros a estimar ( $\Theta = \{\epsilon_1, \dots, \epsilon_K, \theta_1, \dots, \theta_K\}$ ). La función Gamma es una extensión de la notación factorial para argumentos reales y se define como

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} s^{x-1} e^{-s} ds$$

La estimación de  $\Theta$  en cada paso,  $\hat{\Theta}^{(t)}$ , se realiza iterativamente hasta que los parámetros se estabilizan. En cada iteración, tras terminar con la estimación de  $\hat{\Theta}^{(t)}$ , se actualiza la estimación de la matriz de mezcla,  $\hat{\mathbf{M}}$  y del valor de la estimación de las abundancias fraccionarias,  $\hat{\mathbf{S}}$ . Está demostrado que GEM converge a un óptimo local, por lo que es necesario establecer un buen punto de partida del algoritmo DECA. Tal punto de partida se puede obtener fácilmente usando un algoritmo geométrico.

### 3.5.3. Regresión *sparse* para *unmixing*

Una regresión *sparse* es un método que intenta encontrar en una biblioteca espectral (*spectral library* predefinida el conjunto mínimo de elementos que componen una señal sujeto a ciertas restricciones. Es, por lo tanto, un método semi supervisado para realizar *unmixing* de señales, en el que es necesario contar a priori con una base de datos (o bien un conjunto de *endmembers* encontrados por algún otro método) que contenga al menos los materiales que se van a identificar.

A diferencia de los métodos geométricos o estadísticos, en el problema de regresión *sparse* no se desean extraer *endmembers* a partir de los datos, sino más bien representar a partir de un conjunto mínimo de firmas espectrales conocidas cada espectro de la HSI. Una regresión *sparse* se representa entonces como cada solución de la ecuación 3.15.

$$(3.15) \quad \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad s.a. \quad \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2 \leq \delta, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}$$

donde  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$  es el vector de abundancias fraccionarias de un cierto pixel de largo  $m$ , y donde  $m$  corresponde al número de firmas espectrales en el diccionario. Por otro lado,  $\|\mathbf{x}\|_0$  corresponde a la norma  $L_0$  de  $\mathbf{x}$ , es decir, al número de componentes de  $\mathbf{x}$  mayores a 0.  $\mathbf{A}$  corresponde al diccionario de firmas espectrales de dimensiones  $B \times m$ , donde  $B$  es el número de bandas de cada firma espectral. Finalmente,  $\delta$  es un real mayor a igual a 0 que indica la tolerancia al error de reconstrucción.

Si bien la solución del problema 3.15 es única en el caso de *unmixing* hiper espectral sin ruido, el problema es extremadamente difícil de solucionar computacionalmente (en efecto, es *NP-completo*). Existen, sin embargo, varios enfoques para aproximarse a su solución, y muchos otros que hasta el día de hoy se siguen publicando.

En procesamiento de señales, es clásico el problema de encontrar la base generadora óptima de una señal. En el caso de que las firmas espectrales del diccionario fueran ortogonales entre sí y normales, bastaría con multiplicar los vectores espectrales con los píxeles medidos para encontrar el conjunto de abundancias fraccionarias buscado. Sin embargo, este no es el caso ya que materiales distintos poseen firmas con características similares. Por ejemplo, cuando las moléculas de dos minerales distintos las conforman los mismos aniones (como todos los carbonatos,  $CO_3^{2-}$ , y los sulfatos,  $SO_4^{2-}$ ) o cuando existe presencia de agua en las muestras, las cuales se ven distorsionadas en ciertas bandas.

Una posibilidad estudiada para resolver el problema 3.15 es reemplazar la norma L0 por la norma L1, convirtiendo el problema en uno convexo (problema introducido por primera vez por Scott S. C. y cols. [10], denominando al método Basis Pursuit (BP)). Ello relaja el problema original, haciéndolo computable sin incurrir a los problemas de la minimización de la norma L2 (solución sub óptima denominada Method of Frames (MOF)). El problema se convierte, así, en el clásico Constrained Basis Pursuit Denoising (CBPDN) de procesamiento de señales (ecuación 3.16), cuyo caso límite cuando  $\delta = 0$  se convierte en el problema Constrained Basis Pursuit (CBP).

$$(3.16) \quad \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad s.a. \quad \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2 \leq \delta, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}$$

Al agregar la restricción de suma a 1 de las abundancias fraccionarias, el problema se simplifica aún más a uno denominado Fully Constrained Least Squares (FCLS). No obstante, debido a factores tales como los errores de modelamiento y el ruido resulta ser mejor no agregar esta restricción al problema. En efecto, la solución de CBPDN suele tener mejores índices de reconstrucción que la del problema FCLS en el ámbito de *unmixing* hiper espectral [4]. La opción de usar uno u otro modelamiento se deja al criterio del usuario, quien puede activar o desactivar las restricciones según su necesidad particular.

En esta memoria se revisará la implementación de un método que soluciona el problema Constrained Sparse Regression (CSR), análogo al CBP. El algoritmo se denomina SUnSAL, y permite obtener una estimación de la matriz de abundancias fraccionarias a partir de los datos y una base de firmas espectrales conocida.

A la fecha de la publicación de este trabajo de título, existen y han sido probados con éxito varios otros algoritmos de regresión *sparse*. Entre estos métodos se encuentran Weighted Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian (WSUnSAL), Total variation Weighted Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian (WSUnSAL-TV) y Non-local Sparse Spectral Unmixing (NLSSU) [15]. SUnSAL fue el seleccionado para ser analizado debido a su agilidad y simplicidad.

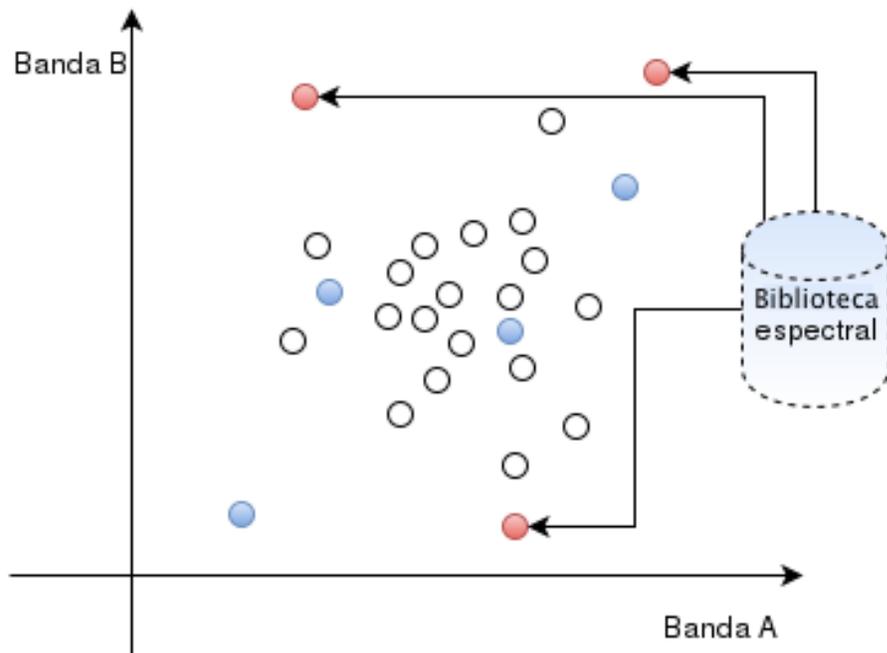


Figura 3.4: *Setup* en métodos *sparse* para *unmixing*

En la figura 3.4 se observa un sub espacio de dos bandas para la visualización de los espectros en el espacio. Los algoritmos de regresión *sparse* hacen uso de restricciones y suposiciones en base a observaciones físicas para situar en el espacio firmas espectrales provenientes de una biblioteca espectral. Las firmas espectrales que no tienen participación en ningún pixel de acuerdo a criterios *sparse* no va en el conjunto solución. A todas las firmas espectrales presentes en una HSI se le calcula su abundancia fraccionaria con la cual y junto a la biblioteca espectral, pueden reconstruir la HSI.

### 3.5.3.1. Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian (SUNSAL)

SUNSAL es un algoritmo versátil y moderno que soluciona varios problemas de optimización, incluyendo CSR y FCLS. El método fue presentado por primera vez en 2010 por José Bioucas-Dias y Mario Figueiredo del Instituto Superior Técnico de Lisboa, Portugal [4].

La formulación de CSR se muestra en la ecuación 3.17<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>En efecto, Constrained Least Squares (CLS) es el problema CSR cuando  $\lambda = 0$ .

$$(3.17) \quad \begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{x}\|_1 \\ \text{s.a.} \quad & \mathbf{x} \geq 0 \\ & \mathbf{1}^T \mathbf{x} = 1 \end{aligned}$$

Este problema de optimización se usa como una aproximación al de la ecuación 3.15. Si bien su solución no tiene forma analítica como LS y CLS, debido a la norma L1 de la función objetivo, sí existen métodos numéricos que permiten llegar a soluciones iterativamente.

SUnSAL es la versión simplificada del problema Constrained Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian (C-SUnSAL), un algoritmo muy similar a SUnSAL excepto por que el problema que intenta resolver asume los probables errores de modelamiento que pueden haber tras el *unmixing*. La formulación en forma de problema de optimización que asume C-SUnSAL es CBPDN, el cual muestra en la ecuación 3.18.

$$(3.18) \quad \begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & \lambda \|\mathbf{x}\|_1 \\ \text{s.a.} \quad & \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2 \leq \delta \\ & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \\ & \mathbf{1}^T \mathbf{x} = 1 \end{aligned}$$

CBPDN es más flexible y supuestamente superior como formulación que CSR debido a que incorpora el término  $\delta$  para asumir las diferencias que se encontrarán entre los espectros reconstruidos y los medidos.

Ambos métodos funcionan aplicando la técnica de minimización denominada Alternating Direction Method of Multipliers (ADMM), la cual está basada en *Splitting Augmented Lagrangians*, la misma técnica aplicada en SISAL y DECA para subdividir el problema de optimización en sub problemas más sencillos de computar con restricciones débiles. C-SUnSAL, sin embargo, efectúa primero *denoising* sobre los datos y luego itera usando ADMM. Pese a la superioridad de su formulación, este método no ha demostrado su supremacía frente a SUnSAL, el cual tiene tasas de reconstrucción mayores. Por eso, analizar C-SUnSAL en lugar de SUnSAL no presenta ninguna ventaja.

ADMM es una técnica que además de resolver problemas de optimización complejos como CSR, asegura su convergencia en las formulaciones, aunque esta puede no ser rápida [7]. Permite que problemas de la forma de la ecuación 3.19 se puedan resolver. Entre otros, los problemas que se pueden llevar a esta forma son 3.17 y 3.18 por medio de *augmented Lagrangians*.

$$(3.19) \quad \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_1(\mathbf{x}) + f_2(\mathbf{G}\mathbf{x})$$

Consiste en la resolución de sucesiones como ecuaciones de recurrencia, dos de las cuales corresponden a las soluciones de variables del problema primal y una del problema dual. Por medio de ADMM, es posible estimar la matriz de abundancias fraccionarias iterativamente y con distintas posibilidades de combinaciones en las restricciones.

## Capítulo 4

# Análisis comparativo de métodos de *unmixing* hiper espectral

En este capítulo, se muestra un análisis de cada técnica y procedimiento estudiado para este trabajo. Un resumen de los métodos se observa en la figura 4.1. En la figura, los bloques sólidos corresponden a cada método implementado y analizado. Se observa que no solo se analizan métodos de *unmixing* como lo son VCA, SISAL y SUnSAL, sino que también se exploran cuatro etapas de pre procesamiento y un módulo para la determinación del número de *endmembers* ( $p$ ) y del sub espacio de la señal ( $E_p$ ).

El objetivo del desarrollo realizado es procesar las HSI y así obtener un conjunto de espectros puros, o *endmembers* ( $\mathbf{E} = [e_1, e_2, \dots, e_p]$ ), y su respectiva matriz de mezclado  $\mathbf{M}$ . Los métodos se implementaron considerando que, en el futuro, ellos serían usados en el contexto de una aplicación colaborativa o comercial, por lo que se programaron de manera documentada y portable.

Se utilizó para cada uno de los métodos anteriores y todas sus funciones dependientes

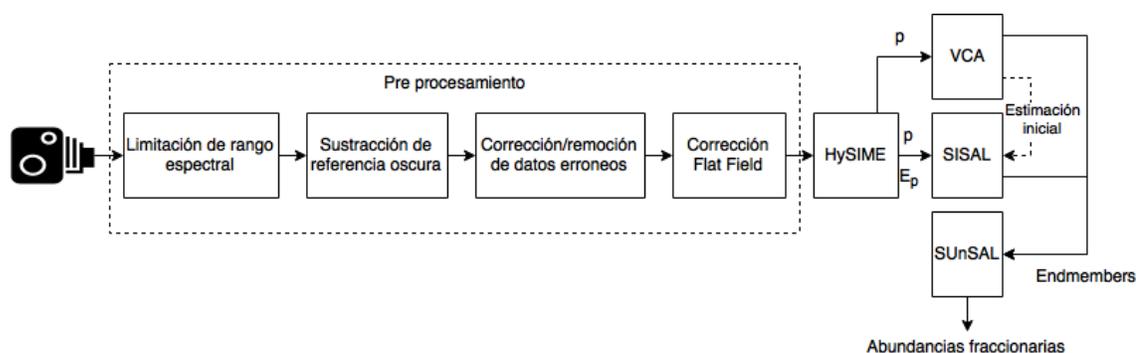


Figura 4.1: Diagrama de bloques (métodos) para *unmixing*

el lenguaje de programación Python <sup>3</sup>, el cual brinda versatilidad, portabilidad y escalabilidad al desarrollo realizado.

En las secciones siguientes se explican detalles de la implementación y un análisis teórico de cada técnica y procedimiento estudiados. En primer lugar se revisará en detalle el pre procesamiento aplicado a los datos previo a su procesamiento con los algoritmos de *unmixing*. Luego, se explica el detalle de estos algoritmos de descomposición. A cada método se le adjunta su respectivo pseudo código y una explicación de su funcionamiento.

## 4.1. Pre procesamiento de HSI para unmixing

Los métodos de pre procesamiento descritos en la sección 2.7 fueron implementados para ser utilizadas en el contexto del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305. Usadas en el orden descrito, el resultado de ejecutar la secuencia del pre procesamiento programado se analiza en la sección 5.2.

---

### Algoritmo 1: Limitación de espectros en rango de operación de HSC

---

```

Datos:  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times L}$ ,  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^L$ ,  $b_{\min} \in \mathbf{R}$ ,  $b_{\max} \in \mathbf{R}$ 
Resultado:  $\mathbf{Y}' \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times L'}$ ,  $\mathbf{w}' \in \mathbb{R}^{L'}$ 
1 /*  $L$  corresponde al número de bandas de la imagen original */
2 /*  $\mathbf{w}$  corresponde a la lista ordenada de longitudes de onda centrales
   de cada banda en la imagen original */
3 /*  $n_1$  y  $n_2$  son las dimensiones espaciales de la HSI */
4 /*  $b_{\min}$  y  $b_{\max}$  son los límites del rango de operación de la HSC */
5  $s_1 \leftarrow -1$ ;
6  $s_2 \leftarrow -1$ ;
7 Para cada banda  $l \in [1 : \text{largo}(\mathbf{w})]$ : hacer
8   Si  $s_1 = -1$  y  $b_{\min} \leq \mathbf{w}[l]$ , entonces
9      $s_1 \leftarrow l$ ;
10  sino, si  $b_{\max} \geq \mathbf{w}[l]$ , entonces
11     $s_2 \leftarrow l$ ;
12  $\mathbf{w}' \leftarrow \mathbf{w}[s_1 : s_2]$ ;
13  $\mathbf{Y}' \leftarrow \mathbf{Y}[:, :, s_1 : s_2]$ ;

```

---

En los anteriores códigos fue necesario contar con una herramienta ágil y versátil para el cálculo matricial. La librería *Numpy*<sup>2</sup> resultó especialmente útil para esta tarea y agilizó tanto la programación como la manipulación misma de los datos en su etapa de pre procesamiento.

<sup>1</sup><http://www.python.org>

<sup>2</sup><http://www.numpy.org>

---

**Algoritmo 2: Sustracción de referencia oscura**

---

**Datos:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times L}$ ,  $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{g \times n_2 \times L}$   
**Resultado:**  $\mathbf{Y}' \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times L}$

```
1 /* L corresponde al número de bandas de la imagen original */
2 /* D corresponde a una imagen de referencia oscura. Los cuadros de la
   imagen son g, y el resto de sus dimensiones son arbitrarios pero
   iguales a los de Y */
3 d ← cuadro_promedio(D);
4 Y' ← Y;
5 Para cada cuadro f ∈ [1 : n1] hacer
6   Y'[f] ← Y[f] - d;
```

---

---

**Algoritmo 3: Obtención de líneas y bandas muertas**

---

**Datos:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times L}$   
**Resultado:**  $(\mathbf{l} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n)$

```
1 /* L corresponde al número de bandas de la imagen original, mientras
   que n1 y n2 corresponden a las dimensiones de los cuadros y de las
   líneas respectivamente */
2 V ← varianza(Y);
3 dead_lines_bands ← [];
4 /* varianza() retorna una varianza por cada línea y banda, usando los
   datos de cada cuadro. V es una matriz donde para cada (i, j), i
   corresponde a una línea y j a una banda */
5 Para i = 1:n2, j = 1:L hacer
6   Si V[i, j] = 0, entonces
7     dead_lines_bands ← (i, j);
```

---

---

**Algoritmo 4: Corrección Flat Field**

---

**Datos:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times L}$ , ref\_teflón  $\in \mathbb{R}^L$ , fit, fft  
**Resultado:**

```
1 /* referencia_teflón es la referencia del teflón de acuerdo al material
   con espectro conocido (ver sección 2.7.4) */
2 /* fit y fft son los índices que representan los límites del teflón en
   el eje de los cuadros de cada imagen (inicio y final,
   respectivamente) */
3 mf ← computar_cuadro_promedio(Y[fit:fft]); // mf ∈ ℝn2 × L
4 light_cuadro ← mf / ref_teflón;
5 Para cada cuadro f de Y hacer
6   f = f / light_cuadro;
```

---

## 4.2. Identificación de sub espacio de señal

HySIME consiste en dos bloques de código, lo cuales son ejecutados en secuencia. El primer bloque se encarga de la estimación del ruido de la HSI. Este paso es opcional si ya se cuenta con otra estimación de ruido alternativa. El segundo bloque, por su parte, se encarga de la regresión lineal de cada banda con respecto a todas las demás. La combinación de ambos bloques permite aproximar el error de estimación, y con ello determinar si una banda aporta con información a la HSI.

En las secciones 4.2.1 y 4.2.2 se explica cada uno de estos bloques.

### 4.2.1. Estimación de ruido en HySIME

El pseudo código usado para determinar el ruido de la señal es el que se señala en el algoritmo 5:

---

#### Algoritmo 5: Estimación de ruido en HySIME

---

**Datos:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{L \times N}$   
**Resultado:**  $\xi \in \mathbb{R}^{L \times N}$

- 1  $\mathbf{Z} \leftarrow \mathbf{Y}^T$ ; //  $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{N \times L}$
- 2  $\hat{R}_y \leftarrow \frac{1}{N} \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T$ ;
- 3 **Para cada banda  $l$  hacer**
- 4      $d_l \leftarrow [1, \dots, 1, 0, 1, \dots, 1]$ ; // único 0 está en la posición  $l$  del vector  $d_l$
- 5      $\mathbf{A} \leftarrow \hat{R}_{y(d_l, d_l)}^{-1}$ ;
- 6      $\mathbf{b} \leftarrow \hat{R}_{y(d_l, l)}^{-1}$ ;
- 7      $c \leftarrow \hat{R}_{y(l, l)}^{-1}$ ;
- 8      $\mathbf{d} \leftarrow \hat{R}_{y(d_l, l)}$ ;
- 9      $\mathbf{Z}_{\delta_l} \leftarrow \mathbf{Z}_{(d_l)}$ ;
- 10      $\beta_l \leftarrow (\mathbf{A} - \frac{1}{c}(\mathbf{b}^T \mathbf{b})) \mathbf{d}^T$ ;
- 11      $\xi_l \leftarrow \mathbf{z}_l - \mathbf{Z}_{\delta_l} \beta_l$ ;

---

El primer paso consiste en inicializar el método, definiendo como  $\mathbf{Z}$  a la inversa de la matriz de píxeles  $\mathbf{Y}$ . Es posible notar que  $\mathbf{Y}$  consiste en una matriz bidimensional donde cada columna  $\mathbf{y}_i$  corresponde a un espectro medido en  $L$  bandas de frecuencia. En total, la matriz  $\mathbf{Y}$  contiene  $N$  píxeles (columnas) medidos. La matriz  $\mathbf{Z}$  tiene en cada fila un vector espectral medido, y en cada columna la medición completa de cada banda de longitud de onda de la imagen.

Tras definir  $\mathbf{Z}$ , en la línea 2 se calcula la matriz de correlación de bandas. La matriz se usa para calcular el valor auxiliar  $\mathbf{d}$ , mientras que su inversa se usa para calcular los valores auxiliares  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $c$ . Cada uno de estos valores depende de una sola banda,  $l$ , por lo que se

calcula cada valor auxiliar para cada banda. Estos valores auxiliares se usan en la línea 10 para calcular la regresión lineal sin la banda  $l$ . Tras ello, en la línea 11, se calcula el error de estimación. Este error es el ruido estimado en la banda  $l$ ,  $\xi_l$ . El algoritmo 5 retorna una matriz cuyas filas son los  $L$  vectores  $\xi_l$ .

#### 4.2.2. HySIME para identificar sub espacio de señal

Contando con una estimación del ruido, se puede encontrar el sub espacio de la señal de una HSI. La segunda parte de HySIME, mostrada en el algoritmo 6, cuenta con la estimación de ruido  $\xi$  como parámetro.

---

##### Algoritmo 6: Cálculo del sub espacio de señal con HySIME

---

**Datos:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ ,  $\xi \in \mathbb{R}^{L \times N}$

**Resultado:**  $\mathbf{E}_k \in \mathbb{R}^{L \times k}$

- 1  $\hat{\mathbf{R}}_y \leftarrow \frac{1}{N} \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T$ ;
  - 2  $\hat{\mathbf{R}}_n \leftarrow \frac{1}{N} \xi \xi^T$ ;
  - 3  $\mathbf{E} \leftarrow \text{VectoresPropios}(\hat{\mathbf{R}}_y)$ ;
  - 4  $\mathbf{p} \leftarrow \text{diagonal}(\mathbf{E}^T \hat{\mathbf{R}}_y \mathbf{E})$ ;
  - 5  $\sigma^2 \leftarrow \text{diagonal}(\mathbf{E}^T \hat{\mathbf{R}}_n \mathbf{E})$ ;
  - 6  $\Delta \leftarrow 2\sigma^2 - \mathbf{p}$ ;
  - 7  $k \leftarrow |\{i \mid \Delta_i < 0\}|$ ;
  - 8  $\pi \leftarrow \text{argsort}(\Delta)$ ;
  - 9  $\mathbf{E}_k \leftarrow \mathbf{E}_{(\pi(1:k))}$ ;
- 

Se inicia el algoritmo 6 con los datos hiper espectrales y con la estimación de ruido. Se calcula primero la correlación de la señal medida ( $\hat{\mathbf{R}}_y$ ) y del ruido ( $\hat{\mathbf{R}}_n$ ), tal como se muestra en las líneas 1 y 2, respectivamente. Tras ello, en la línea 3, se almacenan en las columnas de la matriz  $\mathbf{E}$  los vectores propios de la matriz  $\hat{\mathbf{R}}_y$ ,  $(e_1, e_2, \dots, e_l)$ .

El algoritmo utiliza las matrices de correlación de la medición y del ruido estimado para solucionar un problema de optimización. La función objetivo es el error cuadrático medio entre la contribución de la señal (la cual aumenta con el número de dimensiones) y la contribución del ruido (disminuye con el número de dimensiones). La primera es calculada en la línea 4 del algoritmo, mientras que la segunda se calcula en la línea 5. Una optimización explicada en la referencia [5] permite extraer solamente las diagonales de estas matrices para ahorrar gran cantidad de cómputo. La resta de la línea 6 calcula el error cuadrático medio usando las trazas de cada matriz de forma eficiente. En la misma matriz se seleccionan aquellos valores que minimizan el error, o lo que es lo mismo, se seleccionan los valores negativos en la función a minimizar. El sub espacio se compone de la misma cantidad de vectores propios que aquellos valores que en la optimización resultan negativos (línea 7).

En la línea 8 del algoritmo se utiliza la función *argsort*. Ésta almacena los índices del vector de errores cuadráticos en el orden de más significativos a menos significativos en

términos de contribución al sub espacio. Ello resulta muy conveniente a la hora de visualizar resultados en el sub espacio de la señal, pues las componentes con mayor cantidad de información de la señal son siempre las primeras 2 o 3. Finalmente, la línea 8 ordena los índices de la matriz de vectores propios que se va a retornar según el resultado del vector de errores cuadráticos, y la línea 9 almacena y retorna el conjunto de vectores que constituyen la matriz del sub espacio de la señal.

## 4.3. Algoritmos geométricos

### 4.3.1. Vertex Component Analysis (VCA)

El pseudo código de VCA corresponde al algoritmo 7. El método consiste en dos partes fundamentales. La primera tiene como objetivo encontrar el mejor plano inicial donde proyectar todos los píxeles de la imagen de manera de que la segunda parte siga un camino óptimo en sus proyecciones sucesivas. La segunda parte corresponde al loop principal, el cual tiene por objetivo encontrar un plano ortogonal a todos los *endmembers* encontrados en los pasos anteriores. En este plano, se proyectan todos los píxeles y así se encuentra el píxel extremo que el método define como otro *endmember*. Ambas partes se dividen muy bien en la práctica: entre las líneas 1 y 17, y entre las líneas 18 y 25, respectivamente.

La primera parte del algoritmo utiliza varias técnicas de álgebra lineal para encontrar el hiper plano inicial. La línea 1 calcula el umbral que determina el método para encontrar el hiper plano, para lo cual utiliza la ecuación 3.9. Usando los datos de entrada y la proyección calculada en la línea 4, se calcula una estimación de la SNR de la captura de datos en la línea 5. La estimación de la SNR se realiza usando el error de proyección de los datos en las  $p$  componentes principales de la matriz de covarianza [31].

Si la SNR resulta ser inferior al umbral calculado, ello significa que la componente  $p$  de los píxeles proyectados es muy ruidosa por lo que conviene reducirla al mínimo. En ese caso, el hiper plano es computado a partir de la proyección de los datos en las  $p - 1$  componentes principales de la matriz de covarianza. En ese caso, se aprovecha el cálculo de la matriz de covarianza realizado para estimar la SNR y se retornan los datos anteriormente proyectados salvo la última componente en los otros  $p - 1$  vectores propios de manera de proyectarlos en el espacio original. Los datos retornados al espacio original tienen rango  $p - 1$ , lo que los hace ser hiper planos no ortogonales entre sí en el espacio  $p$ . Por otro lado, la línea 8 encuentra la mayor norma entre los vectores, la cual es reemplazada por la componente  $p$  de los píxeles proyectados en la línea 9.

Por otro lado, si la SNR resulta ser superior o igual al umbral, entonces la proyección se realiza en los vectores singulares de la matriz de correlación ya que ello optimiza la SNR total de los píxeles. El hiper plano es computado usando la ecuación 3.8.

Contando con el hiper plano inicial, VCA itera en un ciclo donde en cada paso se calcula el plano  $f$ , el cual es ortogonal a un sub espacio conformado por los hiper planos utilizados

---

**Algoritmo 7: Vertex Component Analysis (VCA)**


---

**Datos:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ ,  $p \in \mathbb{R}$   
**Resultado:**  $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{L \times p}$

- 1  $SNR_{th} \leftarrow 15 + 10 \log_{10} p$ ;
- 2  $\hat{\Sigma}_{\mathbf{Y}} \leftarrow \text{Covarianza}(\mathbf{Y})$ ; //  $\hat{\Sigma}_{\mathbf{Y}} \in \mathbb{R}^{L \times L}$
- 3  $\mathbf{U} \leftarrow \text{VectoresPropiosOrdenados}(\hat{\Sigma}_{\mathbf{Y}} \hat{\Sigma}_{\mathbf{Y}}^T)$ ;
- 4  $\mathbf{X} \leftarrow (\mathbf{U}_{:, [1:p]})^T (\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}})$ ; //  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{p \times N}$
- 5  $S\hat{N}R \leftarrow \text{EstimarSNR}(\mathbf{Y}, \mathbf{X})$ ;
- 6 **Si**  $S\hat{N}R < SNR_{th}$ , **entonces**
- 7      $\mathbf{Z} \leftarrow \mathbf{U}_{:, [1:p-1]} \mathbf{X}_{[1:p-1], :} + \bar{\mathbf{Y}}^T$ ; //  $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{L \times N}$
- 8      $c \leftarrow \text{máx}_j \|\mathbf{Z}_{:, j}\|$ ;
- 9      $\mathbf{X}_{p,:} \leftarrow [c, \dots, c]^T$ ; //  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{p \times N}$
- 10 **De lo contrario**
- 11      $\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{Y}} \leftarrow \text{Correlacion}(\mathbf{Y})$ ; //  $\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{Y}} \in \mathbb{R}^{L \times L}$
- 12      $\mathbf{U} \leftarrow \text{VectoresPropiosOrdenados}(\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{Y}} \hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{Y}}^T)$ ;
- 13      $\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{U}_{:, [1:p]}^T \mathbf{Y}$ ; //  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{p \times N}$
- 14      $\mathbf{u} \leftarrow \text{Media}(\mathbf{X})$ ; //  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{p \times 1}$
- 15      $\bar{\mathbf{U}} \leftarrow [\mathbf{u}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}]$ ; //  $\bar{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{p \times p}$
- 16      $\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} / \bar{\mathbf{U}}^T \mathbf{X}$ ;
- 17      $\mathbf{Z} \leftarrow \mathbf{U}_{:, [1:p]} \mathbf{Z}$ ; //  $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{L \times N}$
- 18  $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{0}^{p \times p}$ ,  $\pi \leftarrow \mathbf{0}^p$ ,  $n \leftarrow 1$ ;
- 19 **mientras**  $n = 0 \leq p$  **hacer**
- 20      $\mathbf{w} \sim N(0, \mathbf{I}_p)$ ; //  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^p$
- 21      $\mathbf{f} \leftarrow ((\mathbf{I}_p - \mathbf{A}\mathbf{A}^+) \mathbf{w}) / \|(\mathbf{I}_p - \mathbf{A}\mathbf{A}^+) \mathbf{w}\|$
- 22      $i \leftarrow \arg \text{máx}_j (\mathbf{f}^T \mathbf{X}_{:, j})$ ;
- 23      $A_{:, n+1} \leftarrow \mathbf{X}_{:, i}$ ;
- 24      $\pi_{n+1} \leftarrow i$ ;
- 25      $n \leftarrow n + 1$ ;
- 26  $\mathbf{M} \leftarrow \mathbf{Y}_{p, (\pi)}$ ;

---

hasta el paso anterior. Este paso se hace gracias a la operación de pseudo inversa ( $A^+$ ) [33] en la línea 21. Se calcula al vector que resulta ser el extremo de la proyección sobre este nuevo hiper plano, y se almacena el vector en el conjunto resultante. Se itera hasta que el número de vértices encontrado es igual a  $p$ , el número requerido de *endmembers* determinado por HySIME.

#### 4.3.2. Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian (SISAL)

En SISAL, los datos de entrada  $\mathbf{Y}_p$  se asumen en el sub espacio de la señal para ahorrar cálculo que de otra manera resultaría costoso debido a los dos ciclos anidados que componen el método. En otras palabras, un paso necesario sobre los datos a modo de pre procesamiento es determinar el sub espacio de la señal  $\mathbf{E}_p$  y proyectar los datos  $\mathbf{Y}$  en él:  $\mathbf{Y}_p = \mathbf{E}_p \mathbf{Y}$ .

El método *SISAL* consiste en optimizaciones iterativas a una función objetivo, computada en la línea 8. Para lograr ese objetivo, se consideran dos ciclos anidados. El primero consiste en la resolución de  $n_i$  problemas estrictamente convexos, posibilitado por la aproximación cuadrática calculada de la función objetivo. El segundo resuelve el problema denominado Split Augmented Lagrangian (SAL).

Las líneas 1 y 2 del algoritmo preparan los datos, centrándolos y normalizando la varianza en las componentes del espacio proyectado por medio de un procedimiento denominado *spherize* [29] o *whitening*. Tras ello, se inicializan las variables y constantes del método. Luego, las líneas 3 a 5 inicializan la matriz de mezcla, su inversa (que es sobre la que se itera) y una matriz auxiliar. El operador  $\otimes$  corresponde al producto de Kronecker, el cual corresponde a una ponderación de cada componente de la primera matriz por la segunda matriz completa, y su posterior concatenación en la matriz solución.

Tras ello, el algoritmo entra a un ciclo que itera hasta alcanzar una condición de convergencia, que en este caso consiste simplemente en iterar un número fijo de veces  $n_i$  (pero el número de iteraciones bien podría estar en función de una medida de error) minimizando en cada iteración la función objetivo del problema. Dicha función consiste en el volumen del *simplex* menos una penalización suave dada por la función *hinge* aplicada a los datos por el vector  $\mathbf{q}$  (correspondiente a la matriz  $\mathbf{Q}$  convertida en vector de columnas concatenadas). Dicha función resulta ser convexa gracias al monomio que contiene a la función *hinge*.

El problema de minimización sin restricciones se resuelve usando el método SAL, implementada dentro del ciclo que va desde las líneas 12 hasta la 20. La iteración termina comprobando que la función objetivo disminuya en lugar de aumentar tras utilizar SAL, lo que en caso de necesitarse se corrige encontrando un vector en el desplazamiento de la última iteración que minimice la función, asegurando convergencia a un mínimo local.

El método SAL resuelve primero el problema cuadrático, utilizando para ello el gradiente de la solución hasta la iteración anterior, una estimación de los lagrangianos y la función *hinge* de discriminación (los términos de la línea 15). La línea 17 consiste en una estimación

---

**Algoritmo 8: SISAL: algoritmo principal**

---

**Datos:**  $\mathbf{Y}_p, p, \mu > 0, \tau > 0, n_i, n_{al}$   
**Resultado:**  $\mathbf{M}$

- 1 Proyectar  $\mathbf{Y}_p \in \mathbb{R}^{p \times N}$  a espacio afín;
- 2 Whitening  $\mathbf{Y}_p$ ;
- 3  $\mathbf{M}_0 \leftarrow VCA(\mathbf{Y}_p, p)$ ; //  $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{p \times p}$
- 4  $\mathbf{Q}_0 \leftarrow \mathbf{M}_0^{-1}$ ; //  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{p \times p}$
- 5  $\mathbf{A} \leftarrow (\mathbf{Y}_p^T \otimes \mathbf{I})$ ; //  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p^2 \times p^2}$
- 6 **repetir**
- 7      $\mathbf{q}_k \leftarrow \text{vec}(\mathbf{Q}_k)$ ; //  $\mathbf{q}_k \in \mathbb{R}^{p^2 \times 1}$
- 8      $l_k \leftarrow -\log(\text{abs}(|\mathbf{Q}_k|)) + \mu \|\mathbf{Q}_k \mathbf{Y}_p\|_h$ ;
- 9      $\mathbf{g}_k \leftarrow -\mathbf{q}_k^{-1}$ ; //  $\mathbf{g}_k \in \mathbb{R}^{p^2 \times 1}$
- 10      $\mathbf{Z}_0 \leftarrow \mathbf{Q}_k \mathbf{Y}_p$ ; //  $\mathbf{Z}_0 \in \mathbb{R}^{p \times N}$
- 11      $\mathbf{D}_0 \leftarrow \mathbf{0}_{p, N}$ ; //  $\mathbf{D}_0 \in \mathbb{R}^{p \times N}$
- 12     **repetir**
- 13          $\mathbf{b} \leftarrow \mu \mathbf{q}_k - \mathbf{g}_k + \tau \text{vec}((\mathbf{Z}_t + \mathbf{D}_t) \mathbf{Y}_p^T)$ ; //  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{p^2 \times 1}$
- 14          $\mathbf{a} \leftarrow \text{vec}(\mathbf{1}_p^T \mathbf{Q}_k)$ ; //  $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{1 \times p}$
- 15          $\mathbf{q}_k \leftarrow \mathbf{F}^{-1} \mathbf{b} - \mathbf{F}^{-1} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{F}^{-1} \mathbf{B}^T)^{-1} (\mathbf{B} \mathbf{F}^{-1} \mathbf{b} - \mathbf{a})$ ;
- 16          $\mathbf{Q}_k \leftarrow \text{mat}(\mathbf{q}_k)$ ;
- 17          $\mathbf{Z}_{t+1} \leftarrow \text{soft}_-(\mathbf{Q}_k \mathbf{Y}_p - \mathbf{D}_t, \mu/\tau)$ ;
- 18          $\mathbf{D}_{t+1} \leftarrow \mathbf{D}_t - (\mathbf{Q}_k \mathbf{Y}_p - \mathbf{Z}_{t+1})$ ;
- 19          $t \leftarrow t + 1$ ;
- 20     **mientras**  $t < n_{al}$ ;
- 21     **mientras**  $-\log(\text{abs}(|\mathbf{Q}_k|)) + \mu \|\mathbf{Q}_k \mathbf{Y}_p\|_h > l_k$  **hacer**
- 22          $\mathbf{q}_k \leftarrow 0.5(\mathbf{q}_k + \mathbf{q}_{k-1})$ ;
- 23          $\mathbf{Q}_k \leftarrow \text{mat}(\mathbf{q}_k)$ ;
- 24      $k \leftarrow k + 1$ ;
- 25 **mientras**  $k < n_i$ ;
- 26  $\mathbf{M} \leftarrow \mathbf{Q}_{k-1}^{-1}$

---

de proximidad de los puntos del problema primal de *PPA*. Finalmente, la parte de *Augmented Lagrangians* consiste en la estimación paso a paso de los lagrangianos del problema, el cual se denomina en la literatura Proximal Point Algorithm (*PPA*), resuelto en el problema dual al original (línea 18).

En el algoritmo 8 se utilizan las funciones transformadoras del tipo de datos. En efecto, *vec* y *mat* corresponden a la conversión de matrices cuadradas a vectores columna concatenados verticalmente y vice versa, respectivamente.

SISAL se presenta como un complemento de VCA debido a que resuelve sobre los resultados de este último la necesidad de incluir *endmembers* no presentes en los datos espectrales. Ello lo logra a través de la optimización del volumen del *simplex* realizada por VCA, la cual estira o comprime para ajustarse mejor a la geometría del *simplex*.

#### 4.4. Algoritmo basado en regresión *sparse*

En esta sección se detalla la implementación realizada del método de regresión *sparse* compuesto por LS, CLS y SUnSAL para la resolución flexible del problema CSR. Es flexible pues algoritmo elige cuándo es conveniente cuál de los tres métodos dependiendo de las restricciones solicitadas por el usuario y del parámetro de regularización,  $\lambda$ .

La implementación de SUnSAL se puede apreciar en el algoritmo 9. Allí se observa que, dependiendo de las condiciones de entrada se utilizan alguno de los 3 métodos comentados anteriormente.

Las primeras 3 líneas del algoritmo consisten en un simple escalamiento de los datos de entrada para normalizar su varianza en cada componente.

En la línea 4 se considera el caso en que ambas restricciones, suma a 1 y no negatividad, están apagadas por el usuario, y el parámetro  $\lambda$  está fijado en 0. La solución del problema es la regresión lineal con LS, implementada como una pseudo inversa a la matriz de mezcla ( $M^+$ ) [33] la cual pre multiplica la matriz de pixeles hiper espectrales. En este caso, la salida no cuenta con las propiedades que una matriz de abundancias fraccionarias debe tener, y por tanto es una solución rápida que en ningún caso puede asegurar ni *sparsidad* ni su acercamiento a la realidad.

La siguiente condición que se analiza es la de la línea 6, donde se considera el caso de que existe una sola restricción activada: la de suma a 1. Ésta se puede ver como una restricción de igualdad y en este caso el valor de  $\lambda$  es irrelevante pues su producto con la norma L1 de las abundancias fraccionarias no depende de él. Por ello, la solución a este problema es similar al de la condición de la línea 4 y corresponde a un problema de CLS, el cual tiene solución cerrada que se obtiene al derivar su lagrangiano. La solución existe, al menos, mientras se cumpla que la matriz de correlación de los *endmembers* sea invertible. En caso que no lo sea, el problema tal como se planteó no tendría solución. La solución general

---

**Algoritmo 9: Algoritmo de regresión *sparse***

---

**Datos:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ ,  $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{L \times p}$ ,  $\lambda \in (\mathbb{R}^+)^{L \times N}$ ,  $\text{noneg} \in \{0, 1\}$ ,  
sumauno  $\in \{0, 1\}$ ,  $\mathbf{u}_0, \mathbf{d}_0$   
**Resultado:**  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{p \times N}$

- 1  $\mu \leftarrow (10/N) \sum_{i,j} \lambda_{i,j} + 0.01$ ;
- 2  $ny \leftarrow \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i,j} Y_{i,j}^2}$ ;
- 3 Escalar  $\mathbf{Y}, \mathbf{M}$  por  $1/ny$  y  $\lambda$  por  $1/ny^2$ ;
- 4 **Si**  $\text{noneg} = 0$  y  $\text{sumauno} = 0$  y  $\lambda = 0$ , **entonces**
- 5      $\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{M}^+ \mathbf{Y}$ ;
- 6 **sino, si**  $\text{noneg} = 0$  y  $\text{sumauno} = 1$ , **entonces**
- 7      $\mathbf{F} \leftarrow \mathbf{M}^T \mathbf{M}$ ;
- 8      $\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{F}^{-1} \mathbf{M}^T \mathbf{Y} - \mathbf{F}^{-1} \mathbf{1}_p (\mathbf{1}_p^T \mathbf{F}^{-1} \mathbf{1}_p)^{-1} (\mathbf{1}_p^T \mathbf{F}^{-1} \mathbf{M}^T \mathbf{Y} - \mathbf{1}_N^T)$ ;
- 9 **De lo contrario**
- 10      $k \leftarrow 0$ ;
- 11      $\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{M}^T \mathbf{M} + \mu \mathbf{I}$ ;
- 12     **Si**  $\text{sumauno} = 0$ , **entonces**
- 13          $\mathbf{C} \leftarrow 0$ ;
- 14     **De lo contrario**
- 15          $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{B}^{-1} \mathbf{1} (\mathbf{1}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{1})^{-1}$ ;
- 16     **repetir**
- 17          $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{M}^T \mathbf{y} + \mu (\mathbf{u}_k + \mathbf{d}_k)$ ;
- 18          $\mathbf{S}_{k+1} \leftarrow \mathbf{B}^{-1} \mathbf{w} - \mathbf{C} (\mathbf{1}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{w} - 1)$ ;
- 19          $\nu_k \leftarrow \mathbf{S}_{k+1} - \mathbf{d}_k$ ;
- 20         **Si**  $\text{noneg} = 0$ , **entonces**
- 21              $\mathbf{u}_{k+1} \leftarrow \text{soft}(\nu_k, \lambda/\mu)$ ;
- 22         **De lo contrario**
- 23              $\mathbf{u}_{k+1} \leftarrow \max(0, \text{soft}(\nu_k, \lambda/\mu))$ ;
- 24          $\mathbf{d}_{k+1} \leftarrow \mathbf{d}_k - (\mathbf{S}_{k+1} - \mathbf{u}_{k+1})$ ;
- 25          $k \leftarrow k + 1$ ;
- 26     **mientras** *criterio no se haya alcanzado*;

---

de CLS no asegura siempre *sparsidad*, pero sí en este caso específico<sup>3</sup>.

El último escenario es el de SUnSAL, el cual se ejecuta desde la línea 9 en adelante. En él, se inicializa el iterador y las matrices constantes del método ADMM. Luego se entra en el ciclo que calcula iterativamente la solución al problema primal ( $\mathbf{S}_k$ ), la del problema dual ( $\mathbf{u}_k$ ) y los lagrangianos del problema dual de la ecuación 3.17 ( $\mathbf{d}_k$ ). La matriz constante  $\mathbf{C}$  se anula cuando la restricción de suma a uno se encuentra desactivada. Así mismo, la restricción de no negatividad se desactiva ejecutando la línea 21 en vez de la 23.

Las líneas 21 y 23 hacen uso de la función *soft*. Esta función consiste en el operador de proximidad de la norma L1 y se define en la función mostrada en el algoritmo 10.

---

**Algoritmo 10:** Función *soft*: operador de proximidad de la norma L1

---

**Datos:**  $\mathbf{X}$ ,  $T$

**Resultado:**  $\mathbf{Y}$

1 **Si**  $\sum_{i,j} |T_{i,j}| = 0$ , **entonces**

2      $\mathbf{Y} \leftarrow \mathbf{X}$ ;

3 **De lo contrario**

4      $\mathbf{Y} \leftarrow \max\{|\mathbf{X}_{i,j}| - T, 0\}$ ;

5      $\mathbf{Y} \leftarrow \frac{\mathbf{Y}_{i,j}}{\mathbf{Y}_{i,j} + T} \mathbf{X}$ ;

---

---

<sup>3</sup>Según [4] asegura *sparsidad* cuando los espectros son no negativos, sin embargo, los métodos de extracción de *endmembers* pueden no necesariamente forzar esta condición.

## Capítulo 5

# Pruebas y resultados

En este capítulo se describen las pruebas realizadas sobre los métodos de *unmixing* explorados. Se analiza y prueba su correcto funcionamiento y aplicabilidad en los ámbitos estudiados.

Tras cada prueba se comenta el resultado obtenido. Primero, se analizan los orígenes de los datos y los resultados del pre procesamiento realizado sobre las HSI reales. Luego se muestra y comenta el resultado particular de cada prueba descrita.

### 5.1. Origen y naturaleza de datos usados en *unmixing*

En este trabajo de título se usaron datos tanto simulados como reales. El para qué y el cómo se obtuvieron estos datos se describe en las siguientes secciones.

#### 5.1.1. Datos simulados

Se usaron datos simulados para aprender la forma en que los métodos de *unmixing* operan, y para comprobar que las implementaciones de los métodos fueran correctas.

Los datos simulados permiten comprobar cómo se comportan los métodos ante situaciones puntuales, como ante la presencia de ruido o con datos faltantes. En el caso de esta memoria, estos se usaron debido a que se podía controlar su geometría y ruido.

El principal problema de los datos simulados es que su modelamiento ocurre a través de combinaciones lineales, mientras que la naturaleza de los datos hiper espectrales generalmente se encuentra regida por fenómenos no lineales difíciles de modelar [6]. La mayoría de los métodos, sin embargo, asume que los datos se comportan de manera lineal. Por ello, los métodos de *unmixing* lineal siempre mostrarán desempeños mejores con datos que efectivamente son lineales.

La generación de datos simulados se implementó usando la librería de cálculo numérico *Numpy*<sup>1</sup> de Python 3<sup>2</sup>. De dicha librería se utilizaron métodos de generación de datos aleatorios siguiendo distribuciones binomial y Dirichlet, al igual que métodos de suma y multiplicación de matrices.

En primer lugar, se modeló la cantidad de *endmembers* que contribuyen a cada pixel. Para ello, se escogió aleatoriamente un número entero en el rango  $[2, n_e]$ <sup>3</sup> usando una distribución binomial con los siguientes parámetros:

- **n** (número entero de eventos a modelar): constante igual a  $n_e - 2$
- **p** (probabilidad de ocurrencia de cada evento)

El resultado del experimento binomial entregó un entero entre 0 y  $n_e - 2$ . Sin embargo, fue necesario modelar el número de *endmembers* por pixel lo cual requirió utilizar el soporte  $[2, n_e]$ . Este rango aseguró que al menos cada pixel recibiera contribución de dos firmas espectrales, evitando la existencia de pixeles puros.

Para las pruebas, se quiso parametrizar la contribución media de todos los pixeles en EPPP *endmembers*, por lo que el parámetro  $p$  se calculó con la ecuación 5.1<sup>4</sup>.

$$(5.1) \quad p = \frac{\text{EPPP} - 2}{n_e - 2}$$

Por otro lado, la distribución de Dirichlet se usó para simular las abundancias fraccionarias de las mezclas de pixeles. Sus parámetros se fijaron en  $\alpha_i = \frac{1}{x} \quad \forall i \in [1, K]$  y el orden  $K = x$  en cada pixel, donde  $x$  corresponde al número de *endmembers* que contribuían en cada pixel. Este valor fue el escogido por la función de densidad de probabilidad binomial.

Para simular se utilizaron firmas espectrales provenientes de una base de datos disponible libremente en internet: USGS SpecLab V6 [43]. De ella fueron obtenidas 6 firmas espectrales: Andradita, Augita, Calcita, Crisotilo, Epidota y Yeso.

La elección de las firmas espectrales fue hecha tras una revisión de la base de datos. Se usó como criterio la máxima variabilidad espectral aparente entre los espectros seleccionados. En la imagen 5.1 superior se muestran las firmas espectrales usadas como *endmembers* para estas pruebas. Por otro lado, la imagen inferior muestra el espacio simulado proyectado en 2 de las bandas del sub espacio de la señal. En este ejemplo, los parámetros escogidos fueron EPPP = 3 y SNR = 15.

En la imagen 5.1 inferior, se observan los vectores que integran el volumen cuyos vértices corresponden a las firmas espectrales de la base de datos (estrellas de colores). Entre cada

<sup>1</sup><http://www.numpy.org>

<sup>2</sup><http://www.python.org>

<sup>3</sup> $n_e$  = número de *endmembers*

<sup>4</sup>Se despejó de la igualdad conocida  $\mathbb{E}\{B(n, p)\} = np$

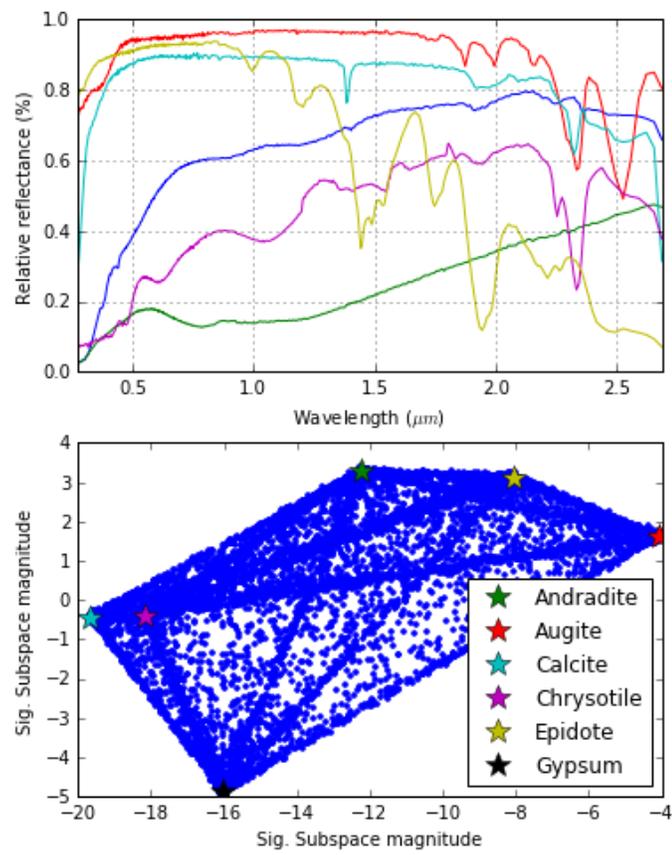


Figura 5.1: *Endmembers* en datos simulados

par de firmas espectrales en el espacio simulado se sitúan muchos píxeles que representan poseer sólo la contribución de dicho par de *endmembers*. El grueso de los datos simulados se encuentra determinado por 3 de las 6 firmas espectrales, como fue establecido con la ecuación 5.1 y el parámetro *Endmembers* promedio por píxel (EPPP) de la simulación. Ello se traduce en que las caras del *simplex*, interiores y exteriores, son las que concentran el mayor número de píxeles de la geometría. Es importante notar lo simple de la geometría que, aunque alta en dimensionalidad, conforma un *simplex* que claramente y a simple vista posee 6 *endmembers*. La realidad de los datos reales, como se logra ver en la siguiente sección, no es la misma.

En la misma figura 5.1, tanto en el gráfico superior como en el inferior, puede observarse el efecto del ruido agregado (Gaussiano y aditivo), el cual provoca que existan muestras fuera del volumen conformado por los *endmembers*. Estos datos se denominan en *Machine Learning outliers*, y su detección y eliminación se deja como trabajo futuro. Los *outliers* se modelan por sus anomalías en las abundancias fracciones (suma a 1 o no negatividad que no se cumplen) y son, en parte, los que provocan la existencia de *endmembers* fuera del rango  $[0, 1]$  de las firmas espectrales resultantes tras aplicar *unmixing*.

### 5.1.2. Datos reales

Los datos reales fueron usados en las pruebas para dos fines particulares:

1. Comparar los métodos entre sí
2. Estudiar las complicaciones que existen al momento de utilizar métodos de *unmixing* sometidos a variabilidad espectral real y al ruido de los sensores

En esta memoria se utilizaron datos originalmente adquiridos para el proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305. Todas las HSI fueron tomadas en las dependencias de mina Florida de Yamana Inc., específicamente dentro de la testigoteca, una edificación donde el Departamento de Geología de la mina almacenaba y estudiaba los testigos de sondajes.

Las condiciones de captura en la testigoteca no fueron constantes ni controladas. Las temperaturas ambiente oscilaron entre 25 y 35 grados celsius. Existió contaminación lumínica externa dada por la variabilidad en la posición solar durante el día y por las sombras producidas por estas con respecto al montaje experimental y a los inmuebles del espacio donde se trabajó.

Las imágenes fueron tomadas manteniendo fija la HSC (en este caso, una Specim SWIR 2014) y moviendo las bandejas de sondaje bajo ella con un carro motorizado de velocidad controlada. Las bandejas se desplazaban siempre en el mismo sentido a  $80\text{mm/s}$  con el carro controlado. La cámara capturaba cuadros a una frecuencia de 120 *muestras por segundo*. El tiempo de exposición o integración de la cámara se configuró en  $2.5\text{ms}$ . Esta configuración, con el vidrio del lente a una altura de  $67\text{cm}$  de las superficies de los testigos de sondaje

permitió que los píxeles pudieran aproximar cada uno a un área cuadrada de  $0.6941mm$  de lado.

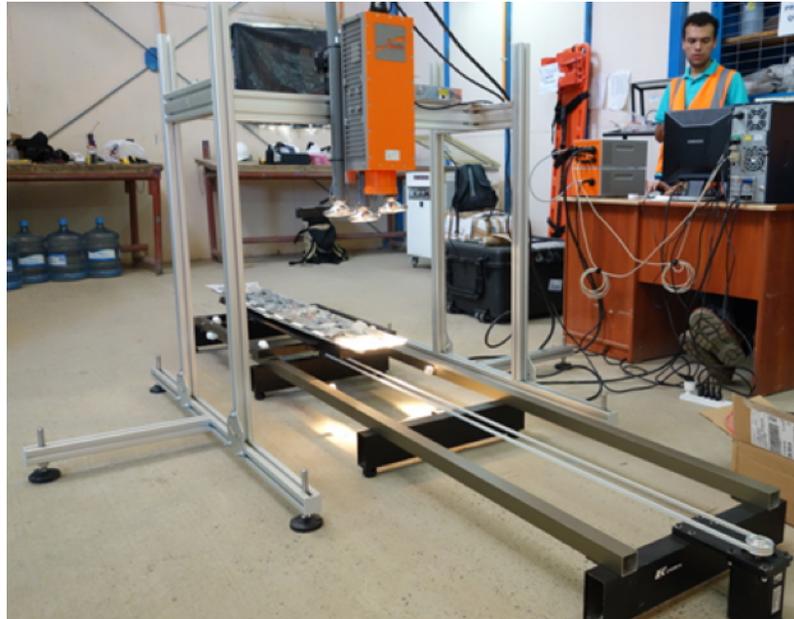


Figura 5.2: Fotografía de captura hiper espectral de una bandeja en mina Florida

En la imagen 5.2 se observa el montaje de captura de HSI para este proyecto. Se puede ver que las bandejas de sondaje, que eran abiertas una por una, eran colocadas sobre un carro de desplazamiento lineal de velocidad controlada. La intensa iluminación que se observa sobre el área de captura corresponde a tres ampolletas halógenas de cuarzo alimentados con corriente continua a 12V.

Pequeños ajustes realizados en el montaje experimental durante la toma de muestras provocaron cambios en la posición de los focos de iluminación artificial entre algunas capturas. Ello se traduce en que los patrones de iluminación no se mantenían imagen a imagen.

Tras capturar cada bandeja, la cámara permanecía adquiriendo datos con el obturador cerrado durante 1 segundo. El cuadro de inicio de la referencia oscura fue escrito en el encabezado de cada imagen para su posterior procesamiento.

En la mina fueron capturadas en total 264 imágenes de fluorescencia, quedando almacenadas en formato ENVI. Todas las imágenes capturadas sin pre procesar poseían 288 bandas de longitudes de onda entre  $903.99\text{nm}$  y  $2515.88\text{nm}$ . La cámara utilizada define su operación real entre  $1000\text{nm}$  y  $2500\text{nm}$ .

Durante el proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305, algunos píxeles de un sub grupo de las HSI fueron etiquetadas por clases conocidas de minerales. En el proyecto se probó que tomando dos conjuntos disjuntos de información espectral y sus respectivas etiquetas de mineralización, es posible entrenar métodos de clasificación con uno de los conjuntos y

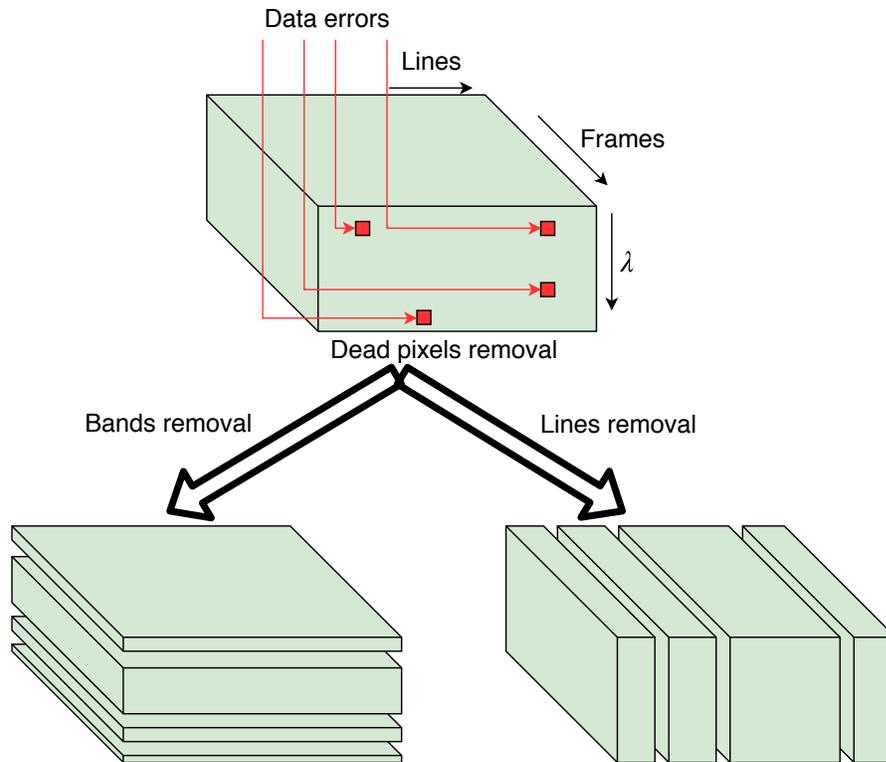


Figura 5.3: Ejemplo de remoción de bandas y líneas muertas

que estos sean capaces de discernir entre las clases presentes en el otro conjunto. Esto fue probado con varios métodos de clasificación y usando técnicas como validación cruzada.

Para las pruebas de extracción de *endmembers* y reconstrucción de píxeles se utilizó una pequeña región de una HSI en lugar de una imagen completa. Esto se estableció así para conseguir resultados en tiempos prudentes, ya que por un lado el número de píxeles escala cuadráticamente al aumentar el tamaño de las imágenes y por el otro, algunos algoritmos de *unmixing* tienen complejidades supra lineales. La región extraída corresponde a un rectángulo comprendido entre los puntos espaciales (965, 260) y (1321, 347) de la HSI identificada internamente como ALH1401-17. La HSI de pruebas (que se puede visualizar en la parte izquierda de la figura 5.4) cuenta con 31416 píxeles de 288 bandas del SWIR cada uno. Previo a extraer la imagen y antes de hacer cualquier cálculo, se pre procesó la HSI con todos los procedimientos descritos en la sección 4.1, tras lo cual se recodificó y reescaló (con una operación lineal) cada componente, originalmente en enteros de 16 bits sin signo (0 a 65535) al rango 0.0-1.0 en decimales de doble precisión.

Tras la utilización del algoritmo 3 para la obtención de las líneas y bandas muertas (representadas en forma de tuplas), se debió tomar una decisión sobre la forma de eliminar los errores. La solución de corregir los valores erróneos no fue realizada, debido a que los resultados en la estimación de ruido se veían afectados en las coordenadas del cubo hiper

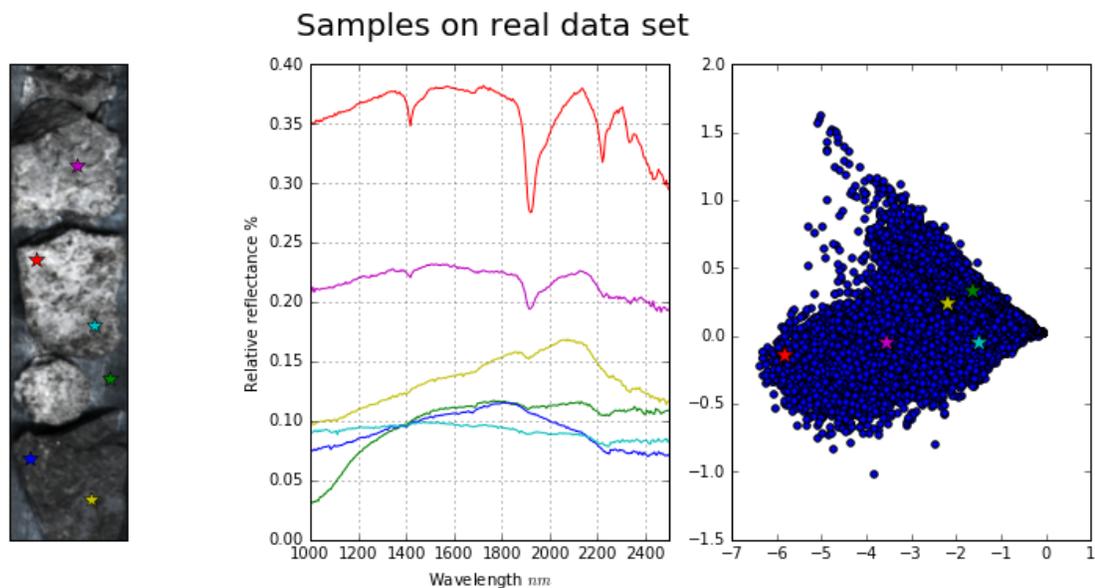


Figura 5.4: HSI de prueba real y proyección 2D de sub espacio de la señal

espectral. En lugar de ello, las bandas completas de pixeles fueron removidas de la imagen. Este se hizo debido a que, de acuerdo a la ecuación matemática presentada en la sección 2.7.3, los datos removidos serían  $n_1L \approx 350 \times 270 \approx 100.000$  si se removiera la línea y  $n_1n_2 \approx 350 \times 90 \approx 30.000$  si se removiera la banda con problemas. En otras palabras, se removerían cerca de un 30 % más de datos en caso de borrar la línea completa frente al caso de eliminar la banda completa. La figura 5.3 muestra los dos caminos posibles de eliminación de datos erróneos. En estas pruebas, se trabajó exclusivamente con el resultado de eliminar las líneas completas, lo cual se muestra en la rama inferior derecha de la figura.

En la figura 5.4 izquierda se muestra una visualización espacial de la sub imagen hiper espectral de naturaleza real usada para probar algoritmos de *unmixing*. Al centro de la misma figura se pueden observar algunos de los espectros medidos de materiales escogidos de forma manual en la sub imagen. A la derecha se observa otra visualización de los datos, esta vez en una proyección en 2 dimensiones del sub espacio de la señal de la HSI. Los colores de los espectros en las tres imágenes coinciden, por lo que se puede visualizar aproximadamente dónde en el sub espacio se encuentran los *endmembers*.

La SNR de la sub imagen, dato que dimensiona la calidad de la medición de una señal, fue medida usando el método de error de proyección utilizado en *VCA* según [31]. Su valor calculado asumiendo que en la imagen hay 6 *endmembers* fue aproximadamente  $33.4110dB$ .

Por otro lado, se usó la misma sub imagen para la prueba de clasificación con algoritmos de *unmixing*, pero con la información adicional de las clases más representativas para cada uno de estos pixeles. En la práctica, se usaron los 28967 pixeles etiquetados por la geóloga del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305. Estos pixeles etiquetados se encontraban asociados,

cada uno, a una clase específica dada por el mineral preponderante (sujeto al criterio de la geóloga) en la región de la HSI donde el pixel se ubicaba. Estas clases eran las siguientes: calcopirita, esfalerita, epidota y cuarzo.

## 5.2. Resultados del pre procesamiento

El pre procesamiento, aplicado en la secuencia mostrada en la figura 4.1 se aplicó solamente a las HSI reales, aquellas que fueron obtenidas para el proyecto FONDEF IDeA-CA131-10305. Las imágenes simuladas no requerían de pre procesamiento pues correspondían a imágenes artificiales sin puntos muertos, en el rango correcto, sin variabilidad en la iluminación y desde un comienzo imágenes de reflectancia.

A cada HSI de naturaleza real en la base de datos se le aplicaron los siguientes cambios:

- se le aplicó la limitación de espectro lo cual significó una reducción del total inicial de 288 bandas a 268 bandas. El nuevo rango de longitudes de onda de cada imagen fue  $1000.21nm$  a  $2499.26nm$ . La figura 5.5 muestra, a la izquierda, la sub región de imagen de prueba. A la derecha de esa imagen se muestra el espectro de prueba tomado de la posición de interés, que es donde se interceptan las líneas rojas en la imagen de la izquierda. En rojo se muestran las bandas removidas tras la limitación del espectro. En todos los pixeles de la HSI el mismo rango fue removido.
- se le realizó la sustracción de referencia oscura. Luego, se le removió el área obtenida con el obturador cerrado. La figura 5.6 muestra el resultado de sustracción de referencia oscura en parte de una HSI. A la izquierda de ella se observa el desfase de los detectores como perturbaciones verticales (especialmente si se observa el teflón de referencia). A la derecha se observa cómo la corrección redujo hasta casi eliminar este efecto de la HSI.
- se ejecutó el pre procesamiento que removió los datos erróneos de la captura. El procedimiento eliminó de cada HSI las 3 bandas que contenían líneas muertas. Ello redujo la resolución espectral de 268 a 265 longitudes de onda (un ejemplo visual de ello en la figura 5.3, rama inferior derecha).
- se usó la transformación *Flat Field Correction*. En las imágenes 2.3 y 5.7 se observa cómo la corrección *Flat Field* removió:
  1. el efecto modulador de la radiación en la superficie
  2. el efecto de gradiente lumínico dado por la variabilidad de la iluminación

La figura 5.7 muestra el efecto de la corrección *Flat Field* en cuando al gradiente lumínico en la HSI. A la izquierda se muestra la imagen sin la corrección *Flat Field*. Por otro lado, a la derecha se muestra la imagen corregida, lo que atestigua la disminución del gradiente lumínico (sobre todo al observar el teflón de referencia), la remoción del

### Spectrum limiting

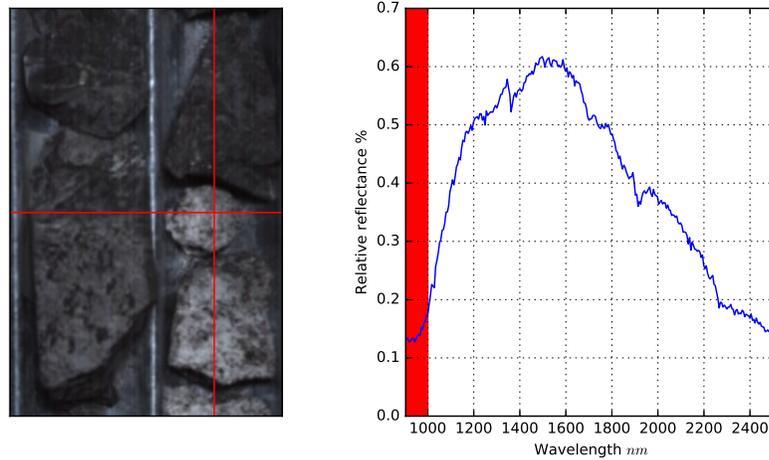


Figura 5.5: Limitación de espectro

### Dark reference subtraction

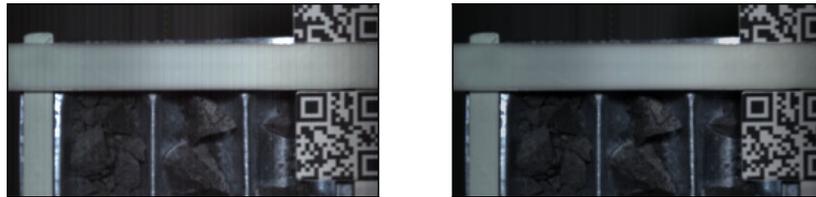


Figura 5.6: Resultado en sustracción de referencia oscura

efecto modulador de los espectros y la aparición de artefactos (estos últimos efectos son más visibles en la figura 2.3).

- se cortaron espacialmente con la función *crop* para poder procesar más rápido con los algoritmos de *unmixing*. Ello se debió a la complejidad de los algoritmos, a la baja tasa de optimizaciones ocupadas y a los recursos limitados de capacidad de procesamiento presentes a la hora de programar y probar los algoritmos.

## 5.3. Extracción de *endmembers*

La prueba de extracción de *endmembers* consistió en aplicar métodos de extracción de *endmembers* al conjunto de datos simulado y real, para luego evaluar y visualizar el resultado de estos en gráficos espectrales. Usando la proyección en el sub espacio de la señal sobre los

## Flat Field Correction



Figura 5.7: Efecto visual en imagen tras aplicación de corrección *Flat Field*

datos y los resultados de la extracción, y tomando las dos primeras bandas de esta proyección, fue posible visualizar en un gráfico espacial el *simplex* y la posición de los *endmembers* en él. Por otro lado, las firmas espectrales de los *endmembers* se visualizaron en un mismo gráfico de longitud de onda vs. reflectancia.

El algoritmo VCA funciona tanto con datos proyectados en el sub espacio de la señal como en el espacio original. Por otro lado, SISAL funciona solamente con datos proyectados. En las pruebas realizadas con los datos simulados, VCA fue usado con datos sin proyectar. Por otro lado, el mismo método fue usado tanto con los datos reales proyectados en el sub espacio de la señal como con los datos reales en el espacio vectorial original.

Para evaluar el desempeño de la extracción de *endmembers*, se usó a modo de coeficiente de error la suma media de las distancias Spectral Angle Mapper:  $\theta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \cos^{-1} \frac{\mathbf{x}\mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|}$  (SAM) entre los *endmembers* reales y los vectores correspondientes encontrados por cada algoritmo. En el caso de los *endmembers* detectados por SISAL, los espectros fueron regresados a su espacio vectorial original antes de evaluarlos.

Los algoritmos de extracción no ordenan los resultados de acuerdo al orden que tienen los espectros en la matriz de mezcla original. Por ello, se realizó una permutación de las columnas de la matriz de mezcla encontrada a partir de las correspondencias entre espectros reales y extraídos. Estas correspondencias fueron identificadas encontrando la mínima distancia angular SAM entre un vector identificado y cada una de las firmas espectrales usadas para simular.

El coeficiente de error es de por sí comparable entre todas las pruebas si el número de *endmembers* permanece constante. Ello se puede asegurar si no se cambia el conjunto de datos pues HySIME calcula el número de *endmembers* de forma completamente determinística.

Los coeficientes de error entre matrices de mezcla se usaron para crear mapas de nivel parametrizados por la SNR y el EPPP. Estos mapas de nivel permitieron comparar tanto el efecto de las configuraciones en cada método, como el desempeño del método en sí con respecto a los otros.

El algoritmo VCA carece de parámetros, lo cual lo hace ser muy sencillo de utilizar. SISAL,

por otro lado, fue usado en los datos simulados con los siguientes parámetros:

Tabla 5.1: Parámetros del algoritmo SISAL usados en las pruebas con datos simulados

Parámetro	Valor
$n_i$	160
$n_{al}$	10
$\mu$	0.01
$\tau$	100

SISAL fue usado en los datos reales con los siguientes parámetros:

Tabla 5.2: Parámetros del algoritmo SISAL usados en las pruebas con datos reales

Parámetro	Valor
$n_i$	50
$n_{al}$	30
$\mu$	0.008
$\tau$	80

### 5.3.1. Resultados de extracción en datos simulados

En esta prueba, se obtuvieron los mapas de nivel de las figuras 5.8 y 5.9 para los algoritmos VCA y SISAL, respectivamente. También se obtuvieron gráficos de las firmas espectrales calculadas, los que se muestran en las figuras 5.10 y 5.11 para cada método, respectivamente. Finalmente, se obtuvo la figura 5.12, la cual muestra espacialmente la ubicación de los datos hiper espectrales simulados, los *endmembers* reales y los *endmembers* encontrados por cada método de extracción utilizado.

En los mapas 5.8 y 5.9, los mayores valores indican peores rendimientos. Se observa que al aumentar el nivel de ruido (o al disminuir la SNR), ambos algoritmos tienen peores rendimientos que a niveles moderados y bajos de ruido, lo cual es esperable. Sin embargo, al aumentar el nivel de mezcla (al aumentar el EPPP), VCA y SISAL presentan diferencias sustantivas. A SNR moderados (entre 15 y 25 dB), VCA se comporta peor al aumentar el nivel de mezcla, lo que se condice con el resultado del artículo [31]. Sin embargo, SISAL tiene un comportamiento inverso al de VCA, lo que lo hace adecuado para aplicaciones con alto nivel de mezcla de pixeles (HSI con mucho blur, HSI aéreas y espaciales).

La figura 5.10 y 5.11 muestran visualmente el resultado de la extracción de *endmembers* realizada para VCA y SISAL, respectivamente, bajo distintos niveles de ruido. En todos los casos, la simulación de los datos se realizó con el parámetro EPPP fijado en 3. Se puede observar que en general la extracción fue acorde a lo esperado, lográndose prácticamente los mismos espectros en el resultado que en las firmas espectrales usadas. Por supuesto, la imagen más ruidosa (3 dB) tiene perturbaciones, los cuales no se pudieron remover en VCA ya que este método busca el *endmember* entre los datos ruidosos en lugar de calcularlo o

VCA performance in mixture matrix distances

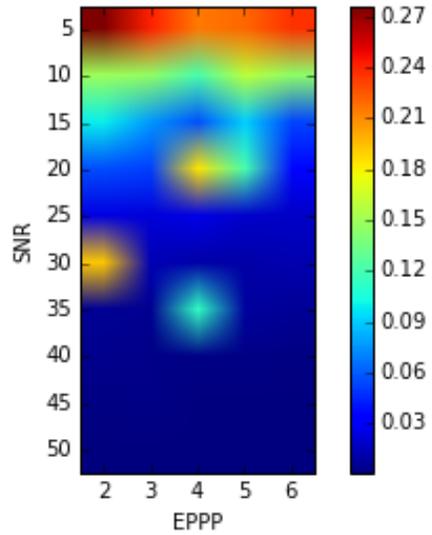


Figura 5.8: Mapa de nivel de VCA para prueba 1

SISAL performance in mixture matrix distances

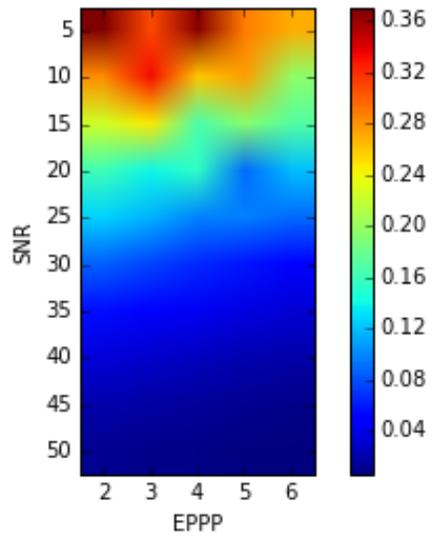


Figura 5.9: Mapa de nivel de SISAL para prueba 1

### Endmember extraction with VCA under different SNR conditions

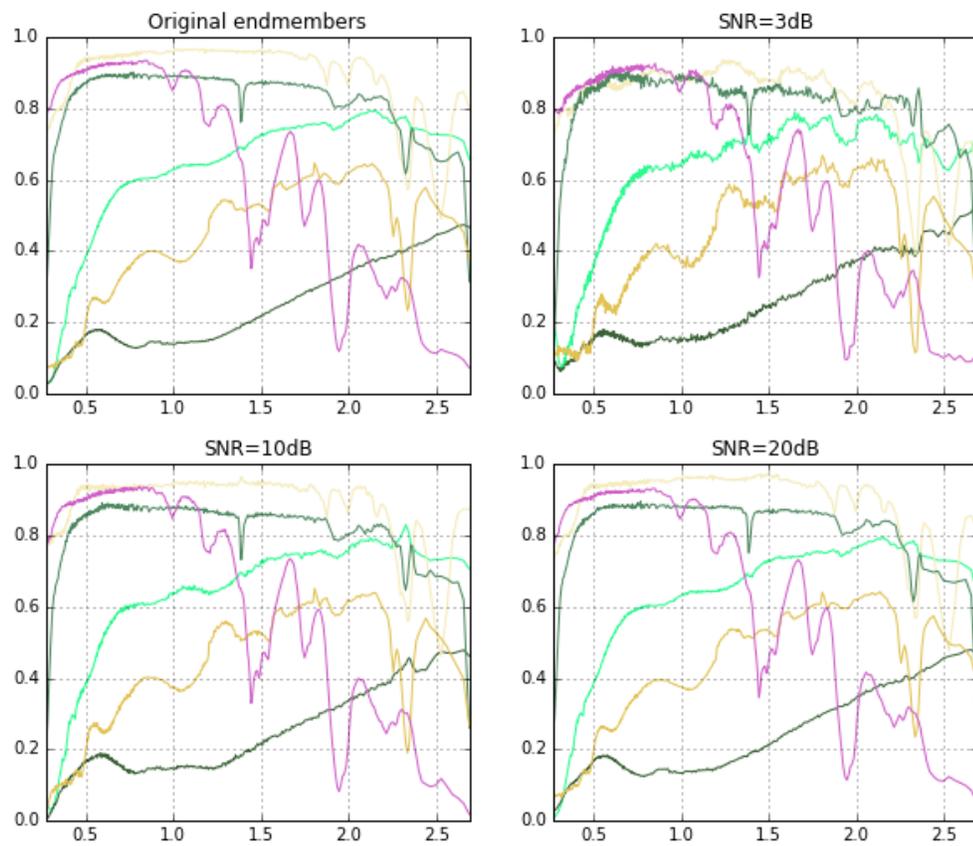


Figura 5.10: *Endmembers* computados por VCA con SNR de  $3dB$ ,  $10dB$  y  $20dB$ , respectivamente.

### Endmember extraction with SISAL under different SNR conditions

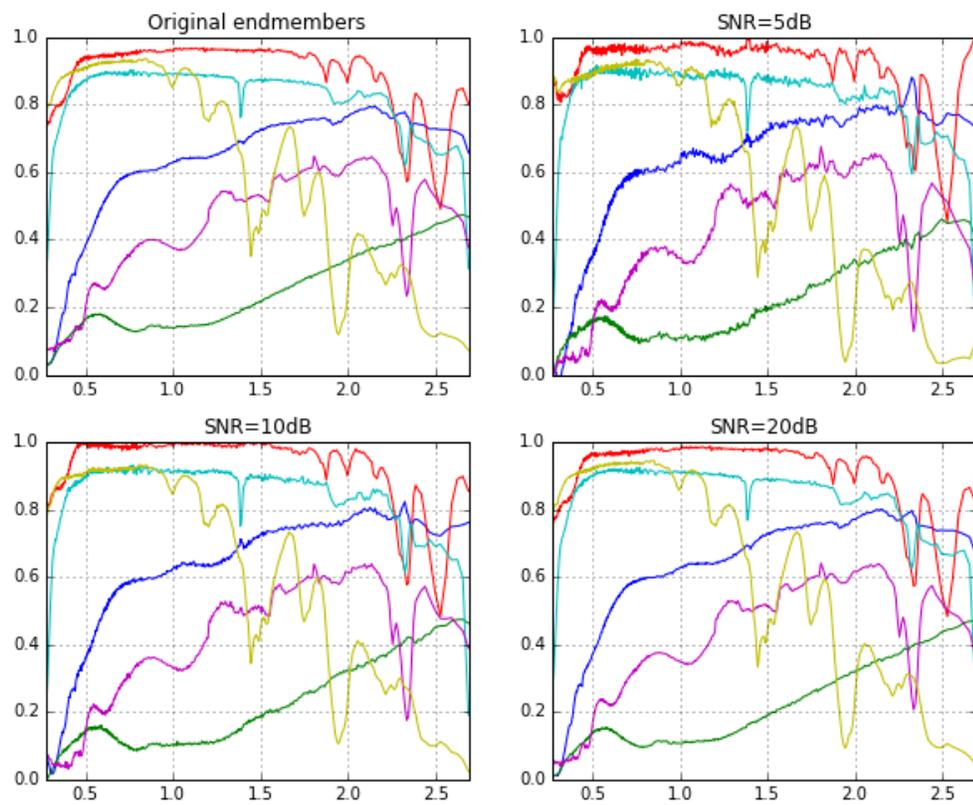


Figura 5.11: *Endmembers* computados por SISAL con SNR de  $3dB$ ,  $10dB$  y  $20dB$ , respectivamente.

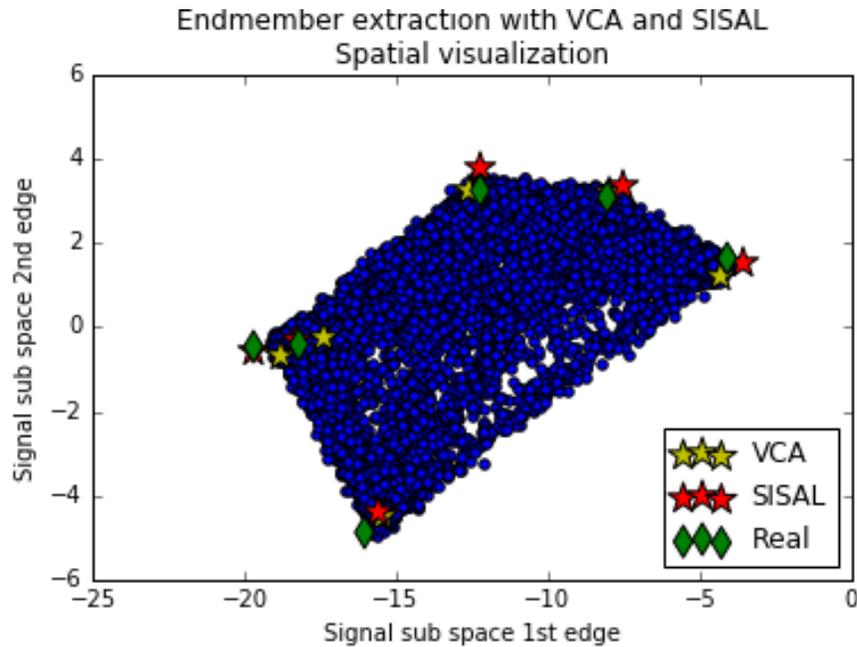


Figura 5.12: *Endmembers* computados por VCA y SISAL a partir de datos con SNR de  $3dB$  representados en 2 bandas principales del sub espacio de la señal.

estimarlos. En el caso de la extracción con SISAL, algunos *endmembers* se salieron del rango 0-1, lo cual es un error debido a las perturbaciones. Sin embargo, limitando el espectro para no traspasar esos niveles, los resultados parecen coherentes. En esos casos, lo que se observa en las bandas afectadas por la salida del rango del espectro es una total absorción o una total reflexión de la radiación por parte de la superficie observada, parece ser una solución adecuada a este problema.

El gráfico 5.12, por otro lado, muestra el desempeño de VCA y SISAL en una visualización de los píxeles en la proyección 2D más potente del sub espacio de la señal. Este resultado se obtuvo para el caso de mayor ruido, (SNR =  $3 dB$ ). Allí se muestran los *endmembers* reales usados para la simulación en el sub espacio de la señal de los píxeles, graficados como diamantes verdes. Estos puntos se comparan con los *endmembers* encontrados por VCA no proyectado (estrellas amarillas) y por SISAL (estrellas rojas). Para observarlos, ambos resultados son proyectados al espacio de visualización. Los píxeles proyectados se muestran como puntos azules y circulares.

En ese gráfico se puede observar que tanto VCA como SISAL son capaces de computar de manera bastante precisa los vértices de geometrías multidimensionales en presencia de ruido aditivo gaussiano. Si bien los resultados en términos absolutos indican que VCA tiene una ligera ventaja en este conjunto de datos particular, en ocasiones SISAL tiene un comportamiento más lógico que VCA: en lugar de elegir un píxel adecuado de entre los disponibles como lo hace VCA, SISAL realiza una proyección del vértice en una posición donde VCA podría identificar el *endmember* si éste no faltara.

### 5.3.2. Resultados de extracción en datos reales

El algoritmo HySIME detectó 19 *endmembers* para ser computados en el conjunto de datos reales. Usando este número como el objetivo de VCA proyectado, VCA no proyectado y SISAL, se obtuvieron las estimaciones de los respectivos *endmembers* de este conjunto de datos. Con ellos, se crearon las visualizaciones espectrales de los gráficos 5.13 y 5.14.

El resultado de la aplicación de VCA sobre datos proyectados y no proyectados, respectivamente, se observa en la figura 5.13. Allí, los diamantes y triángulos de los gráficos superiores representan a los *endmembers* detectados por VCA proyectado y no proyectado, respectivamente. El lado izquierdo de la figura muestra los 19 *endmembers* detectados en el caso proyectado. La parte superior muestra que los extremos de la proyección parecen corresponder a los vértices del *simplex*. En la parte inferior, sin embargo, se puede observar la alta redundancia en este resultado. Por otro lado, la figura 5.13 derecha superior muestra menos *endmembers*, y estos parecen no ser los vértices del *simplex*, al menos en la visualización 2D del sub espacio de la señal. En efecto, fueron 19 los *endmembers* calculados, pero 12 de ellos presentaban una Media cuadrática (RMS) extremadamente baja, por lo que fueron eliminados del resultado. En la práctica, fueron 7 los *endmembers* encontrados en el espacio original por VCA. En la parte inferior derecha se muestran los espectros de los *endmembers* encontrados por VCA en el espacio original.

Por otro lado, la figura 5.14 muestra los resultados de aplicar el algoritmo SISAL al conjunto de datos real. En esta prueba se usaron como parámetros los mostrados en la tabla 5.2. En la imagen se observan los 19 *endmembers* detectados por SISAL, tanto en la visualización 2D del sub espacio de la señal como en la visualización espectral. Se puede observar que SISAL encuentra una envoltura convexa lejana a los bordes del conjunto de datos.

## 5.4. Reconstrucción de pixeles a partir de abundancias fraccionarias y *endmembers*

Para esta prueba se compararon los pixeles reales y las reconstrucciones de estos tras multiplicar la matriz de mezcla y la de abundancias encontradas con los algoritmos de extracción y regresión *sparse*, respectivamente. Para hacer la comparación, se utilizó el error cuadrático medio (MSE) entre ambas matrices de pixeles. Dicho cálculo se logró sumando los MSE de cada pixel con su correspondiente reconstrucción. Los valores de error finales resultaron comparables pues el conjunto de datos reales usados en las pruebas fue el mismo.

Al hacer este cómputo, se probaron varios parámetros de la implementación de las regresiones para obtener las matrices de abundancias. Estos fueron: el modelamiento como regresión de LS (sin restricciones y  $\lambda = 0$ ), regresión CLS (restricción de suma a 1, solamente, y  $\lambda$  arbitrario) y CSR (todos los demás casos).

El valor de  $\lambda$ , en los casos donde era requerido por el método, se determinó

### Projected and non projected VCA

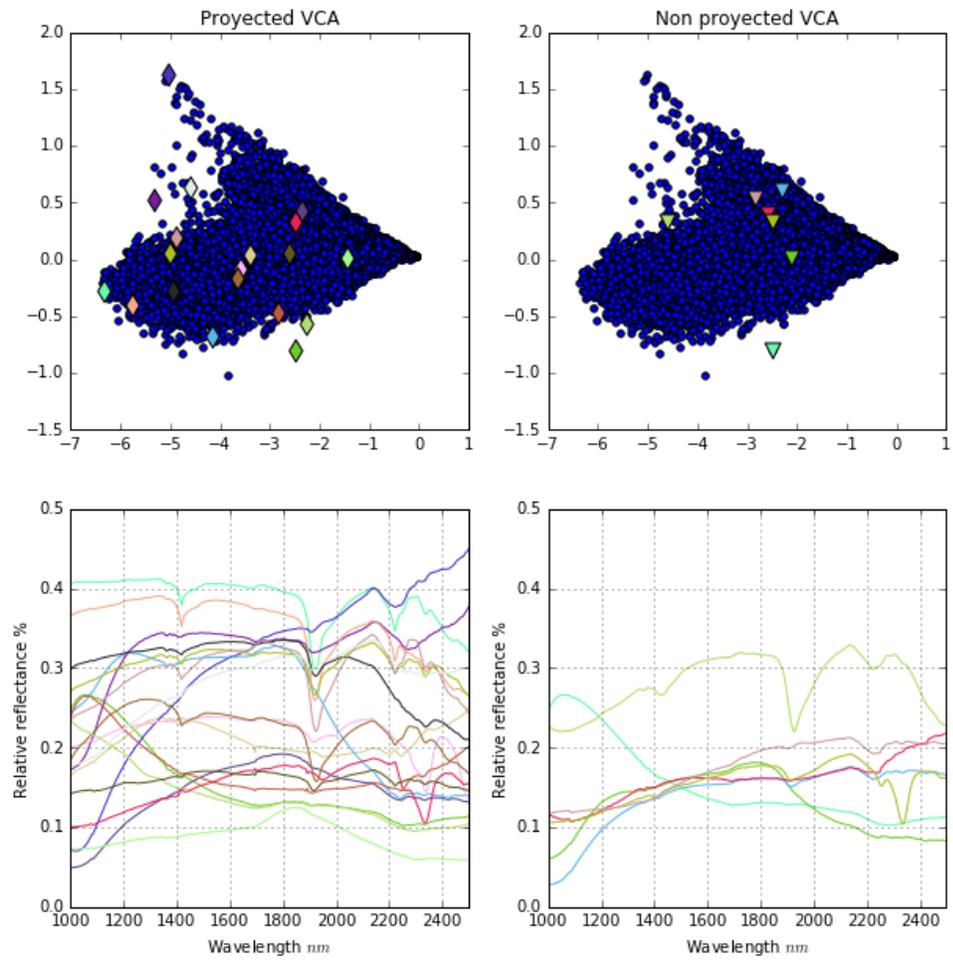


Figura 5.13: *Endmembers* computados por VCA en el conjunto de datos real proyectado y no proyectado

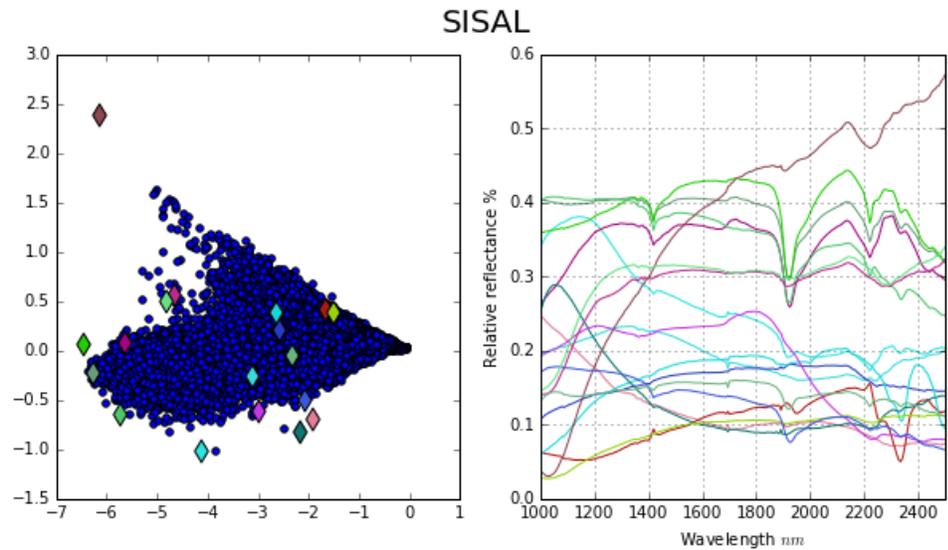


Figura 5.14: *Endmembers* computados por SISAL en el conjunto de datos real

empíricamente. Esto se hizo eligiendo de un gráfico el punto que minimizara la suma de las diferencias cuadráticas de cada pixel, comparando así las matrices generada y la real. Esta determinación se tomó en cada caso estudiado. En los casos donde  $\lambda = 0$  minimizaba la función objetivo, se tomó el valor  $\lambda = 1$  como referencia solamente.

Se ejecutó VCA y SISAL para extraer la matriz de mezcla de un conjunto de datos real. Esta matriz, que contenía los *endmembers* encontrados por cada método, fueron usados como librería espectral del método SUnSAL para obtener la matriz de abundancias fraccionarias. Con estas dos matrices, se obtuvo una reconstrucción del conjunto de datos, la cual fue evaluada usando el MSE entre los pixeles reconstruidos y los originales.

Tabla 5.3: Resultados de regresiones para determinar abundancias fraccionarias

Extracción de <i>endmembers</i>	Res. $s_{i,j} \geq 0$	Res. $\sum_j s_{j,i} = 1$	$\lambda$	MSE de recons.
VCA proyectado	No	No	0	0.04451
	No	No	1	6.6485
	Si	No	1	6.6485
	Si	Si	0.0	0.2497
	No	Si	-	0.04465
VCA no proyectado	No	No	0	0.01398
	No	No	1	12.7786
	Si	No	1	12.7786
	Si	Si	0.01	2.25767
	No	Si	-	0.02173
SISAL	No	No	0	0.04451
	No	No	1	5.5400
	Si	No	1	5.5400
	Si	Si	9	2.31532
	No	Si	-	0.04465

En la tabla 5.3 se presentan los resultados obtenidos en la reconstrucción de las HSI a partir de las matrices de mezcla y de abundancias fraccionarias computadas. El resultado usando la regresión *sparse* para resolver el problema considerando sólo la restricción de suma a 1 es la que presenta los menores errores cuadráticos medios (y por tanto, los mejores rendimientos) para ambos algoritmos de extracción. Si bien el algoritmo de LS aparenta tener un mejor rendimiento, presenta la desventaja de no ofrecer ninguna restricción ni de forzar *sparsidad* en las abundancias, por lo que no se justifica la preferencia por este método. Es importante forzar *sparsidad* ya que solo así se puede entender que los pixeles los conformen pocos minerales (lo que es una hipótesis realista) y no la totalidad de los que se encuentran en la muestra hiper espectral estudiada.

En cuanto al rendimiento de cada algoritmo de extracción de *endmembers*, el que obtiene los mejores resultados de reconstrucción es SISAL por un estrecho margen.

## 5.5. Clasificación como aplicación de *unmixing*

En el marco del proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305 se debió trabajar con clasificadores de clases pixeles que pudieran discriminar entre minerales oxidados y sulfurados. Los clasificadores usados en el proyecto fueron entrenados usando los pixeles pre procesados sin aplicar *unmixing*. De estos clasificadores sencillos se obtuvieron desempeños promedio de todas las clases del orden del 70%. Este conjunto de clases incluyó tanto minerales con notorias características en su firma espectral (*features*) en el rango de

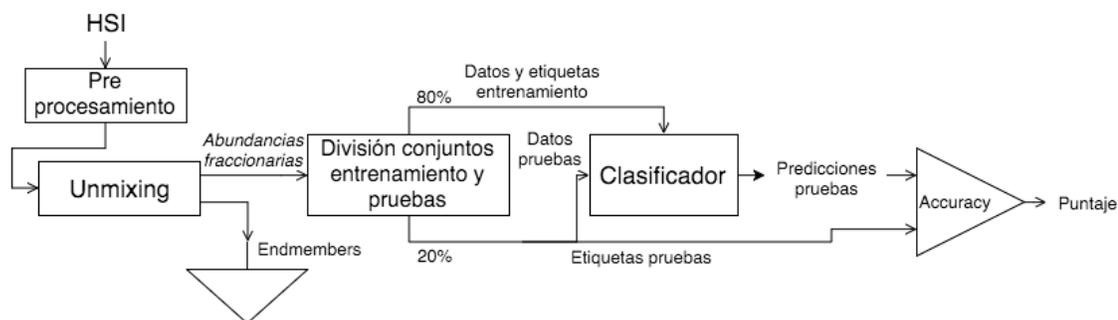


Figura 5.15: Configuración experimental para prueba de clasificación

longitudes de onda SWIR, como materiales que eran más bien planos y carentes de características espectrales en dicho rango<sup>5</sup>.

En la sección 3.2 se planteó como una aplicación de *unmixing* la reducción de dimensionalidad para aplicar métodos de inteligencia computacional a los datos más ágilmente (requiriendo menos memoria y menor tiempo de cómputo) y con una mayor conservación de la información. Para ello, se probó entrenar y probar sobre los datos destinados a esta aplicación un clasificador del tipo uno contra uno (1 Vs. 1) conformado por una serie de Support Vector Machines (SVM) de kernel lineal. Este clasificador se entrenó usando una librería de *machine learning* de Python 3 llamada Scikit Learn.

A los clasificadores se les fijó el parámetro  $c = 15.0$  y luego se entrenaron usando un 80% de las muestras etiquetadas de la imagen, dejando el resto de los píxeles para la prueba en sí. Los datos de entrada del clasificador correspondieron a las matrices de abundancias fraccionarias entregadas por el algoritmo SUnSAL. Evidentemente, para hacer los clasificadores y sus predicciones comparables entre sí, se entrenó y probó cada clasificador con los mismos píxeles. En la figura 5.15 se puede apreciar un diagrama con la configuración experimental para esta prueba.

En este caso, tanto VCA como SISAL fueron probados sobre los datos proyectados en el sub espacio de la señal. Los datos proyectados tenían dimensionalidad espectral 20. SUnSAL, por otro lado, se utilizó activando solamente la restricción de suma a 1. En esta configuración, el valor de  $\lambda$  no afectó al método, por lo que no hubo parámetros que ajustar en este algoritmo salvo el número de iteraciones de ADMM (fijado siempre en 100).

En esta prueba se comprobó, por un lado, el desempeño de VCA y SISAL para extraer *endmembers* en datos reales. Por el otro, se evaluó el desempeño de SUnSAL para construir matrices de abundancias fraccionarias capaces de ser usadas en aplicaciones tales como la de un clasificador. Se comparó, también, el resultado del clasificador en la proyección del sub espacio de la señal y la proyección en las componentes principales de los píxeles.

La precisión, medida de puntaje obtenida por cada método usado en la clasificación,

<sup>5</sup>El cuarzo, la esfalerita y la calcopirita, los tres en el conjunto de datos real usado, se encuentran en este sub conjunto de clases.

correspondió al porcentaje de muestras correctamente clasificadas sobre el resto. El tipo de error obtenido no fue relevante en las pruebas realizadas en este trabajo, pese a que pudieron haber sido considerables las ganancias en *performance* si se hubieran resuelto las confusiones más recurrentes de forma dirigida.

En la tabla 5.4 se observan los resultados obtenidos para los clasificadores usando distintos métodos para reducir la dimensionalidad y para extraer características de los datos reales.

Tabla 5.4: Resultados de clasificadores presentando distintas técnicas de reducción de dimensionalidad

Reducción dimensionalidad	<i>Accuracy</i> <sup>6</sup>
Ninguna	0.806178
Proyección sub espacio señal	0.801001
Proyección comp. principales	0.800310
Abundancias f. VCA + SUnSAL ( $\sum_i s_i = 1$ )	0.815844
Abundancias f. SISAL + SUnSAL ( $\sum_i s_i = 1$ )	0.814463

Dentro de los métodos y parámetros probados, todos tuvieron rendimientos similares por lo que los resultados no son concluyentes, pero el que obtuvo los mejores resultados maginales fue el clasificador que hace uso de la matriz de abundancias fraccionarias obtenidas usando SUnSAL con la restricción de suma a 1 y VCA para extraer los *endmembers*. Este resultado resulta ligeramente superior al mismo método SUnSAL usando SISAL para extraer los *endmembers*, aunque ello puede deberse a un desajuste de los parámetros.

---

<sup>6</sup>(Verdaderos positivos + verdaderos negativos)/(Total muestras)

## Capítulo 6

# Conclusiones

En este capítulo se presentan las conclusiones obtenidas a partir de la investigación y desarrollo llevados a cabo en este trabajo de título.

### 6.1. Pre procesamiento

Los métodos presentados para pre procesar las HSI constituyen un paso trascendental, no solamente en el marco de esta memoria, si no que en todos los trabajos que hacen uso de HSI provenientes directamente de HSC. En efecto, todas las imágenes, sin importar su origen, requieren pasar por etapas de pre procesamiento para ser procesadas correctamente.

De los métodos de pre procesamiento presentados, los más trascendentales son el de sustracción de referencia oscura y la corrección *Flat Field*. En caso de aplicarse, cualquier HSI quedaría bien con desfases inesperados en las líneas, o bien en función de la magnitud y calidad de iluminación de la muestra a la hora de la captura. Los demás son opcionales pues dependen de la condición y especificación de la HSC usada.

### 6.2. *Unmixing*

De los métodos de *unmixing* estudiados, tres fueron implementados y probados sobre datos simulados y verídicos. VCA con los datos sin proyectar en el sub espacio de la señal resultó ser, por un estrecho margen, el que tiene el mejor desempeño al correr con todos los datos probados y con las pruebas establecidas. Se observa que este método pudo realizar una casi perfecta extracción de *endmembers* sobre datos tal como fueron simulados, tanto en condiciones de alta y baja SNR. También es el método que entregó mejores desempeños con los datos reales al ser usado en combinación con la regresión *sparse* que provee SUnSAL para reducir la dimensionalidad de los pixeles y usarse en un clasificador simple (81.58 %

de rendimiento). En el caso de las pruebas de reconstrucción con los datos simulados, el algoritmo también fue el que mejor se desempeñó en casi todas las condiciones, exceptuando en el problema de optimización FCLS, donde ambas restricciones (suma a 1 y no negatividad) se encontraban simultáneamente activadas.

El desempeño de SISAL, por otro lado, se demuestra como marginalmente inferior al de VCA bajo las condiciones probadas en esta memoria. Sin embargo, se sospecha que este resultado está fuertemente condicionado con los parámetros usados para ejecutarlo. Si bien el método se describe como “sub óptimo” [29] debido a su convergencia en un mínimo local de volumen del *simplex*, este método no debió presentar peores resultados que VCA debido a que el segundo inicializaba al primero. Las condiciones donde parecía ser superior a VCA, sin embargo, no fueron probadas<sup>1</sup>. Pese a ello, el método se desempeñó suficientemente bien en los casos probados, lo que quedó evidenciado con el alto rendimiento en el ejercicio del clasificador (sobre 81.44 %) y en el bajo error de reconstrucción obtenido con los datos simulados (el mismo que VCA para los casos más favorables probados). SISAL superó ligeramente a VCA en la reconstrucción FCLS, donde obtuvo un MSE de 54.67 vs. VCA, que obtuvo 55.00.

Por otro lado, la implementación realizada de regresiones basada en SUnSAL resultó ser un método útil para encontrar la matriz de abundancias fraccionarias de una HSI en casos donde se deseaba imponer ninguna, una o ambas restricciones a la vez. La configuración que resultó tener los mejores resultados fue sin restricciones, pero ello nunca logra representar la realidad o naturaleza de las HSI. Por ello, la configuración preferida es suma a 1 activada y no negatividad desactivada. En ese caso, los vectores de fracciones se podían arreglar fácilmente con operaciones lineales y así representar fielmente la naturaleza de los sensores hiper espectrales, mientras que en casos donde esto no fue necesario se obtuvieron los mejores resultados, tal como ya se comentó en el párrafo anterior.

En una lectura veloz y sin detenimiento de esta memoria, se podría pensar que el método óptimo de *unmixing* actualmente existente es una combinación de VCA y SUnSAL. Sin embargo, muchos de los métodos que están siendo desarrollados actualmente presentan mejoras sobre los estudiados en este trabajo. Algunos de ellos, por ejemplo, contemplan un mejor manejo (detección y remoción) de *outliers*, enfoque que logra disminuir el rigor de las restricciones, y así obtiene matrices de abundancias fraccionarias y de *endmembers* más cercanas a la realidad y con mejores *benchmarks* [1].

Por otro lado, puede mal entenderse la predilección del autor de este trabajo por VCA dados sus mejores resultados. Sin embargo, dentro de las combinaciones de métodos y pruebas realizadas en este trabajo en particular, el método que el autor de esta memoria recomendaría y consideraría más seriamente en una aplicación final sería SISAL en combinación con SUnSAL para realizar la tarea de *unmixing*. Ello se debe a dos razones fundamentales:

---

<sup>1</sup>Este parece ser un caso ficticio, donde los vértices del *simplex* y un contorno considerablemente grande en torno a ellos serían removidos del conjunto de datos. En esas condiciones, SISAL establecería los vértices del *simplex* en una posición muy cercana a la correcta.

1. SISAL presentó tasas de errores muy similares a las de VCA en casos controlados (datos reales estudiados) y cercanos al ideal en los casos simulados, pero está especificado su funcionamiento en casos de cantidades moderadas de datos faltantes con bastante éxito [29].
2. VCA se suele usar como un método de inicialización en los métodos de *unmixing* más complejos. Tal es el caso de SISAL, el cual minimiza en cada iteración el volumen dado por el *simplex* que conforma su conjunto solución. En la imagen 6.1 se observa una inicialización hecha con VCA donde la matriz de mezcla obtenida es amplificada por 4 (puntos rojos más lejanos a las estrellas verdes). En este caso sintético y sin ruido, se muestra una convergencia casi perfecta de SISAL a los vértices del *simplex* real (estrellas verdes). Con un conjunto de parámetros adecuado, dada la inicialización de VCA, SISAL puede ajustarse mejor a geometrías complejas (con más *endmembers* y con un mayor nivel de mezcla) que su contendor.

En esta memoria se ha logrado introducir el tema de imágenes hiper espectrales de forma que cualquier nuevo investigador del área de procesamiento de señales, sea este alumno de pregrado o postgrado, pueda interiorizarse en este apasionante tema. También se han dejado las puertas abiertas a continuar la investigación de *unmixing*, problema cuya solución definitiva aún no se conoce pero que promete revolucionar la extracción de información de las HSI. Esta afirmación se basa en los alentadores resultados obtenidos en la prueba de clasificación de píxeles, resultado que puede marcar un precedente en cómo se pueden entender las características de los espectros en sí, y en cómo se puede aprovechar mejor esta información de forma cualitativa.

### 6.3. Trabajos Futuros

El desarrollo de este trabajo de título se realizó de forma paralela al proyecto FONDEF IDeA-CA13I-10305. Si bien este proyecto finalizó exitosamente el primero de diciembre de 2015, actualmente se está empezando una segunda etapa que contempla continuar investigando y desarrollando herramientas para acercar el área de análisis hiper espectral a aplicaciones comerciales útiles para la minería nacional.

En la segunda etapa se espera utilizar parte de la teoría de *unmixing* estudiada en este trabajo de título para mejorar el desempeño de los detectores de óxidos y sulfuros en las HSI. La tarea se traducirá en la práctica, en incorporar los códigos programados para este proyecto, y utilizarlos para el análisis y procesamiento de las HSI capturadas en terreno. Otras tareas que continuarán desarrollándose en este proyecto son:

- Segmentación de HSI con algoritmo *HSLIC*
- Extracción de características espectrales aprovechando información (valles y picos) de firmas espectrales

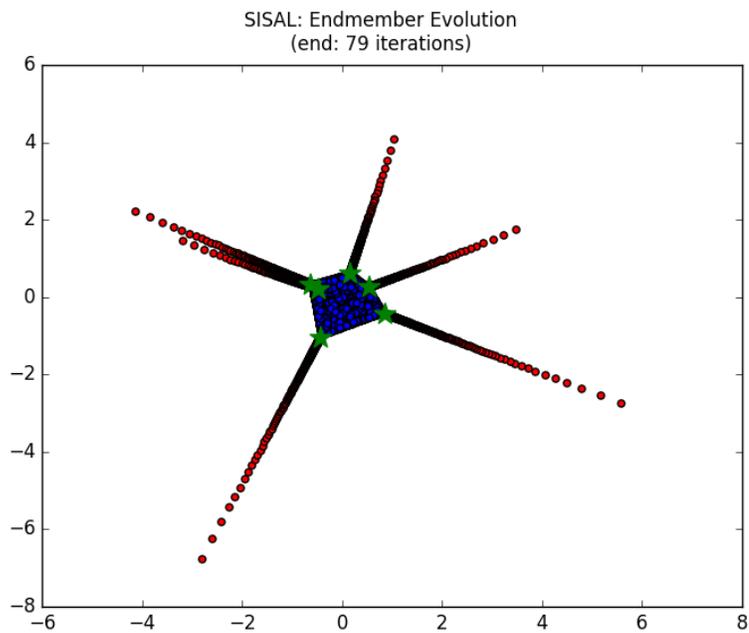


Figura 6.1: Convergencia de SISAL tras inicialización ampliada por VCA sobre datos simulados

- Extracción de características espaciales aprovechando etiquetamiento y segmentación validada
- Manejo de grandes volúmenes de datos para procesamiento eficiente de la información
- Eliminación de datos espectrales fuera de rango o con grados de ruido de niveles destructivos (denominados en *Machine Learning outliers*)
- Paralelización de métodos para lograr cómputo eficiente y en tiempo real
- Modularización de los algoritmos en librerías para uso eficiente en distintas aplicaciones

Todas estas tareas materializarán patentes comerciales y productos comercializables, lo que traerá beneficios a la industria nacional e internacional. Por otro lado, la investigación y el desarrollo llevados a cabo traerá beneficios a la universidad y a la comunidad científica a través de las publicaciones realizadas, y de la línea de investigación académica creada en la Universidad.

## Glosario

**ADC** conversor analógico-digital

**ADMM** Alternating Direction Method of Multipliers

**AMTC** Advanced Mining Technology Center

**BP** Basis Pursuit

**BSS** Blind Source Separation

**CBP** Constrained Basis Pursuit

**CBPDN** Constrained Basis Pursuit Denoising

**CCD** Charged Coupled Device

**CLS** Constrained Least Squares

**CMOS** Complementary Metal Oxide Semiconductor

**CSR** Constrained Sparse Regression

**C-SUnSAL** Constrained Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian

**DECA** Dependent Component Analysis

**EPPP** *Endmembers* promedio por pixel

**GEM** Generalized Expectation Minimization

**HSC** cámaras hiper espectrales

**HSI** imágenes hiper espectrales

**MOF** Method of Frames

**MSE** error cuadrático medio

**MSI** imágenes multi espectrales

**NSP** Noise subspace projection

**FCFM** Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile

**FCLS** Fully Constrained Least Squares

**FONDEF** Fondo de Fomento al Desarrollo Científico y Tecnológico

**GWA** Gift Wrapping Algorithm

**HFC** Harsanyi-Farrand-Chang

**HySIME** Hyperspectral Subspace Identification by Minimum Error

**ICA** Independent Component Analysis

**LI** linealmente independiente

**LMM** Linear Mixing Model:  $\mathbf{Y} = \mathbf{X} + \mathbf{N} = \gamma\mathbf{MS} + \mathbf{N}$

**LS** Least Squares

**LTI** lineal e invariable en el tiempo

**MVT** Minimum Volume Transform

**NLSSU** Non-local Sparse Spectral Unmixing

**NSP** Noise Subspace Projection

**N-FINDER** N Finder Algorithm

**NWHFC** Noise Whitened Harsanyi-Farrand-Chang

**MOG** Mezcla de Distribuciones Gaussiana

**MOD** Mezcla de Distribuciones Dirichlet

**MNF** Minimum Noise Fraction

**PCA** Análisis de Componentes Principales

**PPA** Proximal Point Algorithm

**PPI** Pixel Purity Index

**ROC** Receiver Operating Characteristic

**RMS** Media cuadrática

**SAL** Split Augmented Lagrangian

**SAM** Spectral Angle Mapper:  $\theta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \cos^{-1} \frac{\mathbf{x}\mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|}$

**SISAL** Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian

**SNR** razón señal a ruido

**SUnSAL** Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian

**SVD** Singular Value Decomposition

**SVM** Support Vector Machines

**SWIR** infrarrojo de onda corta

**VCA** Vertex Component Analysis

**VD** Dimensionalidad Virtual

**WSUnSAL** Weighted Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian

**WSUnSAL-TV** Total variation Weighted Sparse Unmixing by variable Splitting and Augmented Lagrangian

# Bibliografía

- [1] Yoann Altmann, Steve McLaughlin y Alfred Hero. «Robust linear spectral unmixing using anomaly detection». En: *Computational Imaging, IEEE Transactions on* 1.2 (2015), págs. 74-85.
- [2] Thomas Arnold, Martin De Biasio y Raimund Leitner. «High-sensitivity hyper-spectral video endoscopy system for intra-surgical tissue classification». En: *Sensors, 2010 IEEE*. IEEE. 2010, págs. 2612-2615.
- [3] Olivier Berne y col. «Non-negative matrix factorization pansharpening of hyperspectral data: An application to mid-infrared astronomy». En: *Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS), 2010 2nd Workshop on*. IEEE. 2010, págs. 1-4.
- [4] José M Bioucas-Dias y Mário AT Figueiredo. «Alternating direction algorithms for constrained sparse regression: Application to hyperspectral unmixing». En: *Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS), 2010 2nd Workshop on*. IEEE. 2010, págs. 1-4.
- [5] José M Bioucas-Dias y José MP Nascimento. «Hyperspectral subspace identification». En: *Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on* 46.8 (2008), págs. 2435-2445.
- [6] José M Bioucas-Dias y col. «Hyperspectral unmixing Overview: Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches». En: *Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing, IEEE Journal of* 5.2 (2012), págs. 354-379.
- [7] Stephen Boyd y col. «Distributed optimization and statistical learning via the alternating direction method of multipliers». En: *Foundations and Trends® in Machine Learning* 3.1 (2011), págs. 1-122.
- [8] Sabine Chabrilat y col. «Use of hyperspectral images in the identification and mapping of expansive clay soils and the role of spatial resolution». En: *Remote Sensing of Environment* 82.2 (2002), págs. 431-445.
- [9] Chein-I Chang y Qian Du. «Estimation of number of spectrally distinct signal sources in hyperspectral imagery». En: *Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on* 42.3 (2004), págs. 608-619.
- [10] Scott Shaobing Chen, David L Donoho y Michael A Saunders. «Atomic decomposition by basis pursuit». En: *SIAM journal on scientific computing* 20.1 (1998), págs. 33-61.

- [11] Yannick Deville, Jacques Damour y Nabil Charkani. «Multi-tag radio-frequency identification systems based on new blind source separation neural networks». En: *Neurocomputing* 49.1 (2002), págs. 369-388.
- [12] MD D.P. Lyle. *Hyperspectral Imaging and Corpse Location*. URL: <https://writersforensicsblog.wordpress.com/2010/09/12/hyperspectral-imaging-and-corpse-location/>.
- [13] Ritaban Dutta y col. «Salad leaf disease detection using machine learning based hyper spectral sensing». En: *SENSORS, 2014 IEEE*. IEEE. 2014, págs. 511-514.
- [14] Ye Fawang y col. «Application of airborne hyper-spectral remote sensing technique to uranium prospecting: A case study of Baiyanghe area, Xinjiang». En: *Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS), 2012 4th Workshop on*. IEEE. 2012, págs. 1-5.
- [15] Ruyi Feng, Yanfei Zhong y Liangpei Zhang. «Non-local sparse spectral unmixing for remote sensing imagery». En: *Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS), 2012 4th Workshop on*. IEEE. 2012, págs. 1-4.
- [16] E Keith Hege y col. «Hyperspectral imaging for astronomy and space surveillance». En: *Optical Science and Technology, SPIE's 48th Annual Meeting*. International Society for Optics y Photonics. 2004, págs. 380-391.
- [17] Liu Hongying y col. «Efficacy Evaluation of AAV2-EPO to Diabetic Retinopathy Based on Molecular Hyperspectral Imaging System». En: *Measuring Technology and Mechatronics Automation (ICMTMA), 2015 Seventh International Conference on*. IEEE. 2015, págs. 411-414.
- [18] Yibing Hou y col. «Design of a novel LD-induced hyper-spectral imager for breast cancer diagnosis based on VHT grating». En: *Photonics and Optoelectronics (SOPO), 2011 Symposium on*. IEEE. 2011, págs. 1-4.
- [19] MicrolImages Inc. *Tutorial Analysing Hyperspectral Images with TNTMips*. 2013.
- [20] Juha Karhunen y col. «Applications of neural blind separation to signal and image processing». En: *Acoustics, Speech, and Signal Processing, 1997. ICASSP-97., 1997 IEEE International Conference on*. Vol. 1. IEEE. 1997, págs. 131-134.
- [21] MS Kim, YR Chen, PM Mehl y col. «Hyperspectral reflectance and fluorescence imaging system for food quality and safety». En: *Transactions-American Society of Agricultural Engineers* 44.3 (2001), págs. 721-730.
- [22] Fred A Kruse, Joseph W Boardman y Jonathan F Huntington. «Comparison of airborne hyperspectral data and EO-1 Hyperion for mineral mapping». En: *Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on* 41.6 (2003), págs. 1388-1400.
- [23] LabSphere. *Spectralon SRM-99S*. URL: [http://host.web-print-design.com/labsphere/products/reflectance\\_materials\\_and\\_coatings/srm\\_space\\_grade.htm](http://host.web-print-design.com/labsphere/products/reflectance_materials_and_coatings/srm_space_grade.htm).
- [24] Martin Georg Ljungqvist y col. «Near-infrared hyper-spectral image analysis of astaxanthin concentration in fish feed coating». En: *Imaging systems and techniques (IST), 2012 IEEE International Conference on*. IEEE. 2012, págs. 136-141.

- [25] MathPages. *Simplex Volumes and the Cayley-Menger Determinant*. URL: <http://www.mathpages.com/home/kmath664/kmath664.htm>.
- [26] Aythami Morales y col. «The use of hyperspectral analysis for ink identification in handwritten documents». En: *Security Technology (ICCST), 2014 International Carnahan Conference on*. IEEE. 2014, págs. 1-5.
- [27] JPL - NASA. *Aster Spectral Library*. URL: <http://speclib.jpl.nasa.gov>.
- [28] Jose Manuel Peixoto Nascimento. «Unsupervised hyperspectral unmixing». Tesis doct. Universidade Técnica de Lisboa, 2006.
- [29] José MP Nascimento y José M Bioucas-Dias. «Learning dependent sources using mixtures of Dirichlet: Applications on hyperspectral unmixing». En: *Hyperspectral Image and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing, 2009. WHISPERS'09. First Workshop on*. IEEE. 2009, págs. 1-5.
- [30] José MP Nascimento y José M Bioucas Dias. «Does independent component analysis play a role in unmixing hyperspectral data?». En: *Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on* 43.1 (2005), págs. 175-187.
- [31] José MP Nascimento y José M Bioucas Dias. «Vertex component analysis: A fast algorithm to unmix hyperspectral data». En: *Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on* 43.4 (2005), págs. 898-910.
- [32] Guo Peiyuan y col. «Research on marine and freshwater fish identification model based on hyper-spectral imaging technology». En: *Intelligent Human-Machine Systems and Cybernetics (IHMSC), 2013 5th International Conference on*. Vol. 1. IEEE. 2013, págs. 369-372.
- [33] Roger Penrose. «A generalized inverse for matrices». En: *Proc. Cambridge Philos. Soc.* Vol. 51. 3. Cambridge Univ Press. 1955, págs. 406-413.
- [34] Meghavi Prashnani y Ravi Shankar Chekuri. «Identification of military vehicles in hyper spectral imagery through spatio-spectral filtering». En: *Image Information Processing (ICIIP), 2013 IEEE Second International Conference on*. IEEE. 2013, págs. 527-532.
- [35] Carlos G Puntonet. «Procedimientos y aplicaciones en separación de señales (BSS-ICA)». En: *Departamento de Arquitectura y Tecnología. Universidad de Granada* (2000).
- [36] RE Roger. «Principal components transform with simple, automatic noise adjustment». En: *International journal of remote sensing* 17.14 (1996), págs. 2719-2727.
- [37] RE Roger y JF Arnold. «Reliably estimating the noise in AVIRIS hyperspectral images». En: *International Journal of Remote Sensing* 17.10 (1996), págs. 1951-1962.
- [38] James A Seibert, John M Boone y Karen K Lindfors. «Flat-field correction technique for digital detectors». En: *Medical Imaging'98*. International Society for Optics y Photonics. 1998, págs. 348-354.
- [39] SPECIM. *sisuCHEMA*. URL: <http://www.specim.fi/index.php/products/geology/sisuchema>.
- [40] SPECIM. *sisuROCK*. URL: <http://www.specim.fi/index.php/products/geology/sisurock>.

- [41] David Stein, Jon Schoonmaker y Eric Coolbaugh. *Hyperspectral imaging for intelligence, surveillance, and reconnaissance*. Inf. téc. DTIC Document, 2001.
- [42] Christopher M Stellman y col. «Real-time hyperspectral detection and cuing». En: *Optical Engineering* 39.7 (2000), págs. 1928-1935.
- [43] USGS. *Digital Spectral Library*. URL: <http://speclab.cr.usgs.gov/spectral-lib.html>.
- [44] Emmanuel Vincent y col. «Blind audio source separation». En: *Queen Mary, University of London, Tech Report C4DM-TR-05-01* (2005).
- [45] Nan Wang, Chen Du y Qi Ming Qin. «Local spatial analysis in surface information extraction of coal mining areas with high fractional vegetation cover using multi-source remote sensing data». En: *Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS), 2013 IEEE International*. IEEE. 2013, págs. 2625-2628.
- [46] Yao Yanmin y col. «Soil moisture monitoring using hyper-spectral remote sensing technology». En: *Geoscience and Remote Sensing (IITA-GRS), 2010 Second IITA International Conference on*. Vol. 2. IEEE. 2010, págs. 373-376.
- [47] Yuanzhi Zhang, Wing-Kee Huen y PO Ang. «The Hyper-Spectral Characteristics of Coral Species and Habitats in Hong Kong». En: *Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing, IEEE Journal of* 6.2 (2013), págs. 746-753.