

**OPTIMIZACIÓN DE APERTURAS CODIFICADAS PARA
CLASIFICACIÓN BASADA EN ESPECTROSCOPIA RAMAN
USANDO LA TÉCNICA DE SENSADO COMPRESIVO**

DIANA FERNANDA GALVIS CARREÑO

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
MAESTRÍA EN INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2014

**OPTIMIZACIÓN DE APERTURAS CODIFICADAS PARA
CLASIFICACIÓN BASADA EN ESPECTROSCOPIA RAMAN
USANDO LA TÉCNICA DE SENSADO COMPRESIVO**

DIANA FERNANDA GALVIS CARREÑO

Trabajo de investigación para optar por el título de:
Magíster en Ingeniería Química

Director:

HENRY ARGUELLO FUENTES, *PhD., M.Sc.*

Codirector:

ENRIQUE MEJÍA OSPINO, *PhD., M.Sc.*

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
MAESTRÍA EN INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2014

A Dios, quien al darme la vida, me dio consigo la oportunidad de forjarme metas como la alcanzada al desarrollar este proyecto y quien a diario derrama sobre mí bendiciones que hacen más fácil cada una de las etapas de mi vida.

A mis padres, Heriberto y Ludy, los motores de mi vida y a quienes debo la mejor parte de mí. Por ellos y para ellos son y serán siempre mis triunfos.

A mi hermana, Laura, quien ha guiado mis pasos con su ejemplo intachable. Su apoyo y enseñanza incondicional me han dado la fuerza necesaria para nunca perder de vista mis objetivos.

A mi Director, Henry Arguello, quien me acompañó con paciencia y sabiduría durante esta etapa y a quien siempre le quedaré debiendo parte de mi formación no solo académica sino personal.

A mi familia y amigos que siempre me han mostrado su apoyo haciendo de esta etapa algo maravilloso e inolvidable.

A Ti.

Diana Galvis

Índice general

Introducción	13
1. Espectroscopia Raman	17
2. Sensado compresivo de imágenes	22
2.1. Teoría de sensado compresivo	22
2.2. Sensado Compresivo en Espectroscopia Raman	26
2.3. Aperturas codificadas	28
2.4. Espectrómetros de Apertura Codificada	29
3. Sistema de Adquisición de Imágenes basado en aperturas Codificadas CASSI	32
3.1. Modelo Matemático del CASSI	33
3.2. Proceso de Reconstrucción	38
4. Diseño del Sistema	41
4.1. Diseño de aperturas codificadas	41
4.1.1. Parámetros de diseño	42
4.1.2. Diseño de aperturas codificadas	48
4.2. Espectrómetro Raman compresivo	51
4.2.1. Fuente de excitación	51
4.2.2. Aperturas Codificadas - DMD	52
4.2.3. Elemento de dispersión	53
4.2.4. Detector	54
4.2.5. Óptica en general	55

5. Simulaciones y Resultados	57
5.1. Determinación del algoritmo de reconstrucción	60
5.2. Análisis de la transmitancia en aperturas codificadas aleatorias .	61
5.3. Reconstrucciones del cubo de datos sintético con las aperturas codificadas diseñadas	63
5.4. Reconstrucciones del cubo de datos real	66
5.5. Análisis de tiempos de adquisición	67
5.6. Simulación del proceso de clasificación basada en espectros- copia Raman	68
6. Conclusiones, Contribuciones y Trabajo futuro	72
6.1. Conclusiones	72
6.2. Contribuciones	73
6.3. Trabajo Futuro	74
Bibliografía	75

Índice de figuras

1.	Representación Sistema CASSI.	15
1.1.	Esquema de Dispersión Rayleigh y Dispersión Raman.	18
1.2.	Enfoques para adquisición de imágenes espectrales.	20
2.1.	Comparación entre bases de representación.	24
2.2.	Comparación de la reconstrucción según la base de representación, usando solo el 1 %, 5 % y 10 % de los coeficientes.	25
2.3.	Componentes básicos de un espectrómetro Raman.	26
2.4.	Espectrómetro Raman de rendija.	27
2.5.	Compromiso entre la resolución y el rendimiento de la luz en espectrómetro de rendija.	28
2.6.	Efecto de la apertura codificada sobre la escena.	29
2.7.	Espectrómetro Raman de apertura codificada.	30
2.8.	Modelo de Espectrómetro basado en aperturas codificadas.	31
3.1.	Proceso de captura de una imagen espectral en el sistema CASSI.	33
3.2.	Matriz de sensado H	35
3.3.	Sistema CASSI de múltiples capturas.	36
3.4.	Matriz de sensado H	37
4.1.	Transmitancia en aperturas codificadas.	43
4.2.	Aperturas codificadas con transmitancia óptima.	45
4.3.	Frecuencia de sensado por píxel en aperturas codificadas aleatorias.	45

4.4. Análisis de dispersión de los espectros Raman sintéticos de la Aspirina, Cafeína y Paracetamol.	46
4.5. Comparación espectros con el 100 % y el 25 % de los coeficientes.	47
4.6. Aperturas codificadas diseñadas	50
4.7. Frecuencia de sensado por píxel en aperturas codificadas diseñadas	50
4.8. Dibujo esquemático del sistema compresivo de imágenes Raman, basado en aperturas codificadas	51
4.9. Imágenes del DMD.	53
4.10. Gráfica de la eficiencia absoluta de la rejilla de 600 <i>gr/mm</i> y "blaze" de 750 <i>nm</i>	54
4.11. Respuesta espectral del detector Synapse 1024 × 256.	55
5.1. Cubo de datos Raman Sintético.	58
5.2. Espectro Raman de la Aspirina.	59
5.3. Espectro Raman de la Cafeína.	59
5.4. Espectro Raman del Paracetamol.	59
5.5. Comparación entre los algoritmos GPSR y TwIST.	60
5.6. Información espectral de las reconstrucciones del cubo sintético con aperturas codificadas aleatorias.	63
5.7. Comparación de PSNR obtenidos con las aperturas codificadas aleatorias y las aperturas codificadas diseñadas.	64
5.8. Información espectral de las reconstrucciones del cubo sintético con las aperturas codificadas diseñadas.	65
5.9. Información espectral de las reconstrucciones del cubo real con las aperturas codificadas optimizadas.	67
5.10. Espectro Raman real de la Aspirina.	69
5.11. Espectro Raman real de la Cafeína.	69
5.12. Espectro Raman real del Paracetamol.	69
5.13. Imagen de clasificación química	71

Resumen

TITULO: OPTIMIZACIÓN DE APERTURAS CODIFICADAS PARA CLASIFICACIÓN BASADA EN ESPECTROSCOPIA RAMAN USANDO LA TÉCNICA DE SENSADO COMPRESIVO.¹

AUTOR: DIANA FERNANDA GALVIS CARREÑO ²

PALABRAS CLAVE: Espectroscopía Raman, Simulación, Sensado Compresivo, Aperturas Codificadas, Optimización de Algoritmos.

La Espectroscopía Raman ha sido ampliamente utilizada en el análisis de la composición química y la construcción de imágenes de mapeo de compuestos orgánicos e inorgánicos, siendo actualmente una de las técnicas analíticas más empleadas en diversas áreas de la ciencia moderna. En la actualidad, uno de los enfoques principales de los estudios realizados sobre esta técnica, se basan en la reducción del tiempo de adquisición y posterior tratamiento de las dispersiones Raman para la construcción de imágenes espectrales que permitan realizar clasificaciones químicas.

La aplicación de la técnica de Sensado Compresivo es empleada para reducir el tiempo en la formación de imágenes a partir de la Espectroscopía Raman, gracias a la detección y compresión simultánea de las Señales. El sistema de adquisición de imágenes basado en una apertura codificada o CASSI por sus siglas en inglés Coded Aperture Snapshot Spectral Imager, es una arquitectura óptica que aplica de manera eficiente los conceptos de la técnica de Sensado Compresivo, y cuyo principal elemento es una apertura codificada, que puede ser vista como un filtro que trasmite o bloquea información de la escena que se busca captar.

El presente trabajo describe la técnica de Sensado Compresivo aplicada a la obtención de imágenes por Espectroscopia Raman mediante la simulación del sistema CASSI, realiza la optimización de las aperturas codificadas que garantizan una eficiente reconstrucción computacional de las imágenes y presenta la selección de los componentes ópticos del sistema CASSI simulado.

Los resultados obtenidos por simulación numérica muestran que mediante la aplicación de la técnica de sensado compresivo es posible reducir de manera eficiente el tiempo de adquisición de datos en Espectroscopia Raman de Imágenes. Mediante el análisis de la relación señal a ruido (PSNR) de las reconstrucciones obtenidas con las aperturas codificadas diseñadas frente los cubos de datos reales, se puede concluir que es posible obtener resultados mayores a los 30 dB con un radio de compresión de aproximadamente 25 % , resultados que garantizan una correcta recuperación de los espectros Raman para realizar clasificaciones químicas.

¹Trabajo de Grado

²Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director, PhD, MPE. Henry Arguello Fuentes. Codirector, PhD, M.Cs. Enrique Mejía Ospino.

Abstract

TITLE: CODED APERTURE OPTIMIZATION FOR CLASSIFICATION BASED ON RAMAN SPECTROSCOPY USING COMPRESSIVE SENSING TECHNIQUE. ¹

AUTHOR: DIANA FERNANDA GALVIS CARREÑO ²

KEYWORDS: Raman Spectroscopy, Simulation, Compressive Sensing, Coded Aperture, Algorithms Optimization.

Raman Spectroscopy Imaging has been widely used in the analysis of chemical composition and construction of spectral images of organic and inorganic compounds. Its technique is currently one of the most widely used analytical techniques in various fields of modern science. One of the main approaches of studies on this technique is based on reducing the acquisition time and further processing of dispersions for Raman spectral images construction that allow chemical classifications.

Compressed Sensing technique has been used satisfactorily in Raman Spectroscopy Imaging, reducing the acquisition time by simultaneously sensing and compressing the underlying spectral signals. Coded Aperture Snapshot Spectral Imager (CASSI) is a remarkable optical architecture that efficiently implements CS in Raman Spectroscopy. The main optical element of CASSI system is the coded aperture, which can transmit or block information from the underlying scene.

This work describes the technique of Compressed Sensing in Raman Spectroscopy Imaging by using the CASSI system. In addition, this work makes the coded apertures optimization to ensure an efficient recovery of Raman Images. And, finally, presents the optical components selection of the CASSI system.

The numerical simulation results shown that the compressive sensing technique can efficiently reduce the data acquisition time in Raman Spectroscopy. By analyzing the signal to noise ratio (PSNR) of the reconstructions obtained with the designed coded apertures from real data cubes, it can be concluded that it is possible to obtain up to 30 dB with a compression ratio of about 25%, results that guarantee a successful recovery of the Raman spectra for chemical classifications.

¹Research Work

²Faculty of Physical-Chemical Engineering. Advisor, PhD, MPE Henry Arguello Fuentes. Co-director PhD, M.Cs. Enrique Mejía Ospino.

Introducción

Las imágenes espectrales son imágenes que contienen información espacial y espectral de una escena. La tecnología empleada para la formación de estas imágenes combina las técnicas de adquisición de imágenes tradicionales para obtener información espacial y la espectroscopia, para la obtención de la información espectral [1, 2]. De manera general, la información espectral representa la respuesta de una muestra ante la absorción o emisión de radiación electromagnética a ciertas longitudes de onda y cuya representación se hace por medio de los comúnmente llamados espectros. Por medio de las imágenes espectrales se puede realizar el estudio de información química relevante, más específicamente, se puede realizar la detección y clasificación de los compuestos de una muestra bajo estudio, gracias a que cada material presenta un espectro diferente, y estos, son catalogados como huellas dactilares o firmas espectrales que permiten su reconocimiento. Este tipo de imágenes cubre diversas áreas de aplicación dentro de las cuales se incluye la biomédica, bioquímica, agricultura, mineralogía, biofísica, detección remota, análisis de obras de arte, detección de explosivos, entre otras [3, 4, 5, 6, 7].

Dentro de la amplia cantidad de técnicas espectroscópicas, la Espectroscopia Raman es actualmente una de las técnicas analíticas más empleadas, gracias a que permite el análisis de la composición química y la construcción de imágenes de compuestos orgánicos e inorgánicos [8, 9]. Dentro de las principales ventajas que presenta esta técnica espectroscópica, están su carácter no destructivo, su aplicabilidad en cualquier estado de la materia (sólido, líquido o gaseoso) sin requerir contacto directo ni preparación previa de la muestra, su bajo costo de aplicación y la fácil accesibilidad a bancos de información con

espectros Raman de innumerables compuestos [10, 11, 12].

La Espectroscopia Raman ha surgido como herramienta para la creación de imágenes espectrales que representen la distribución de los componentes en una muestra. La medición de los espectros se realiza por medio de un barrido de múltiples puntos consecutivos de la muestra y la formación de la imagen se realiza con un proceso posterior de reconstrucción. La tecnología empleada para la formación de este tipo de imágenes es conocida como Espectroscopia Raman de Imágenes y su aplicación está enfocada para la detección y clasificación química [8, 13]. A pesar de las diversas ventajas que presenta la Espectroscopia Raman, la Espectroscopia Raman de Imágenes, como tal, presenta una gran desventaja la cual está representada por los largos periodos de tiempo necesarios para la adquisición y el posterior tratamiento de los datos para la creación de imágenes químicas. De manera más específica, la literatura reporta que los métodos de detección tradicionales requieren por el orden de 1 s por espectro, tiempo impráctico para la adquisición de grandes imágenes espectrales debido a que representaría alrededor 10^6 s o 12 días para una imagen de 1 megapixel, limitando así la gama de aplicaciones de la Espectroscopia Raman de Imágenes [11].

Recientemente ha sido desarrollada una técnica alternativa de muestreo llamada Compressed Sensing o Sensado Compresivo (SC) [14, 15], la cual representa una opción para la reducción del tiempo de adquisición y procesamiento de las imágenes obtenidas por Espectroscopia Raman. SC establece que es posible reconstruir imágenes o señales de interés a partir de una cantidad de muestras menor a la requerida por los métodos convencionales, en contraste a estos últimos, el enfoque de SC integra las tareas de muestreo y compresión en un solo proceso y realiza la respectiva reconstrucción de proyecciones aleatorias a través de algoritmos de optimización numérica [16, 17, 18].

Diferentes estudios han mostrado que la técnica de Sensado Compresivo puede ser empleada satisfactoriamente en la Espectroscopia Raman de

Imágenes [19, 20, 21]. Es posible encontrar en la literatura diversas arquitecturas para la obtención de imágenes espectrales Raman bajo los conceptos de esta técnica [22, 23]. El sistema de adquisición de señales basado en aperturas codificadas o CASSI por sus siglas en inglés (Coded Aperture Snapshot Spectral Imager) es una arquitectura óptica que explota los conceptos de SC [24, 25], y que puede ser empleada de manera eficiente para la adquisición de imágenes por Espectroscopia Raman [20, 26].

Los componentes del sistema CASSI pueden observarse en la Fig. 1. Las mediciones codificadas realizadas por el sistema y capturadas por el detector son matemáticamente equivalentes a las proyecciones aleatorias del SC. De manera general, la codificación se aplica sobre la escena (cubo de datos) $f_0(x, y, \lambda)$ por la acción de la apertura codificada $T(x, y)$, donde (x, y) representa las coordenadas espaciales y λ la coordenada espectral. El campo codificado resultante, $f_1(x, y, \lambda)$ es posteriormente modificado por la acción del elemento dispersor y finalmente capturado por el detector. El patrón de intensidad medido en el detector contiene entonces una mezcla codificada de información espacial y espectral de la escena. La reconstrucción de la señal espectral se obtiene finalmente mediante la solución de un sistema lineal de ecuaciones [24].

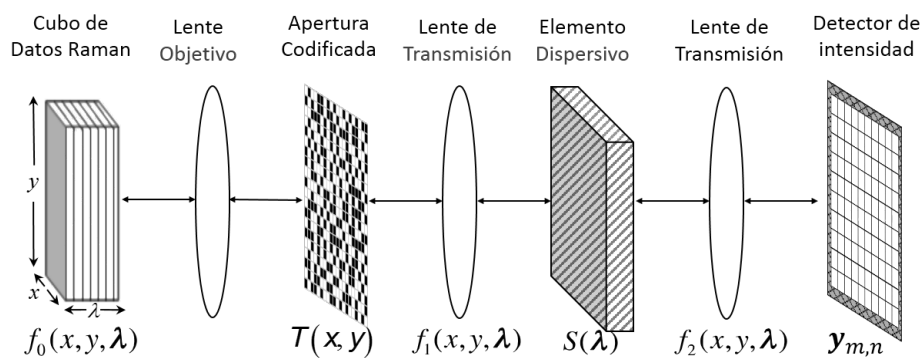


Figura 1: Representación Sistema CASSI. Los elementos negros en la apertura codificada bloquean la luz mientras que los blancos la dejan pasar.

El principal elemento óptico del sistema CASSI es la apertura codificada $T(x, y)$, la cual puede ser vista como un filtro que bloquea o transmite información de la escena a capturar. Su importancia debe a que la calidad de las reconstrucciones obtenidas por el sistema depende de su correcta selección y por esta razón deben ser correctamente diseñadas. El diseño de las aperturas codificadas tiene en cuenta principalmente el porcentaje de elementos transmisivos y el patrón de organización de estos y depende directamente del tipo y el tamaño del cubo de datos a sensar.

El presente trabajo de investigación aplica los conceptos de Sensado Compresivo mediante el empleo del Sistema CASSI para la obtención de cubos de datos Raman. La principal contribución de esta investigación, es el diseño óptimo de las aperturas codificadas empleadas en el sistema CASSI que permiten la reconstrucción eficiente de los espectros obtenidos por Espectroscopia Raman y se muestra que el empleo de un Espectrómetro Raman basado en aperturas codificadas, es una alternativa viable para la reducción del tiempo en el muestro y el procesamiento de las señales para la formación de imágenes.

El documento se encuentra organizado en 6 capítulos. Los primeros dos capítulos presentan una breve descripción de la base teórica de la Espectroscopia Raman y la técnica de Sensado Compresivo. En el tercer capítulo se presenta la descripción del modelo del sistema CASSI como Espectrómetro Raman. En el cuarto capítulo se presenta el diseño propuesto de las aperturas codificadas y la selección de los elementos ópticos que podrían emplearse para la construcción del sistema. En el capítulo 5 se encuentran los resultados de las simulaciones realizadas y finalmente, en el capítulo 6, se presentan las conclusiones, contribuciones y el trabajo futuro.

Capítulo 1

Espectroscopia Raman

Actualmente, existen diversas técnicas de espectroscopia óptica cuya esencia consiste en hacer interactuar un haz de luz con un sistema cuyas características se requieren analizar. Cuando se hace incidir un haz de luz sobre un objeto, hay una interacción luz-objeto que hace que el haz incidente sufra modificaciones por medio de las cuales se puede obtener información sobre la estructura del sistema bajo estudio. De esta manera, un haz de luz que interactúa con un objeto puede ser absorbido, dispersado o reflejado; siendo el análisis de la dispersión el fundamento de la Espectroscopia Raman [27].

En 1928, el físico Indio Chendrasekhara Venkata Raman, descubrió el efecto Raman investigando la dispersión de la luz por moléculas y fue galardonado por ello con el Premio Nobel en 1930. Este científico dio nombre al fenómeno inelástico de dispersión de luz que permite el estudio de rotaciones y vibraciones moleculares. Actualmente, la Espectroscopia Raman es considerada como una de las funcionales y versátiles herramientas para el análisis de la composición de los materiales [28].

El análisis mediante Espectroscopia Raman se basa en el estudio de la luz dispersada por un material al hacer incidir sobre él un haz de luz monocromática (haz en el cual predomina una única longitud de onda) con alta energía. La interacción del campo eléctrico de una onda electromagnética con los elec-

trones del sistema con el que interactúa da lugar a la dispersión de la luz incidente. Tales interacciones inducen oscilaciones periódicas en los electrones del compuesto; por lo tanto, produce momentos eléctricos oscilantes. Lo anterior lleva a tener nuevas fuentes emisoras de radiación es decir, fuentes que reemiten radiación en todas las direcciones [29].

El proceso de dispersión es mostrado en la figura 4.4. La mayoría de la luz es dispersada con la misma frecuencia ν_i que la luz incidente y se conoce como dispersión elástica o Rayleigh, la cual no aporta información sobre la muestra. Información valiosa puede ser obtenida de la luz que cambia de frecuencia o energía durante la dispersión, $\nu_i \pm \nu_s$, donde ν_s representa una frecuencia propia de la molécula. Se dice que este tipo de dispersión es inelástica o Dispersión Raman. Si la luz dispersada presenta menor frecuencia que la luz incidente, $\nu_i - \nu_s$, se conoce como Raman Stokes e indica que la luz incidente ha dado parte de su energía a la molécula durante la interacción. Por otro lado, si la luz dispersada presenta mayor frecuencia que la luz incidente, $\nu_i + \nu_s$, se conoce como Raman Anti-Stokes e implica que la luz tomó parte de la energía de la molécula [30].

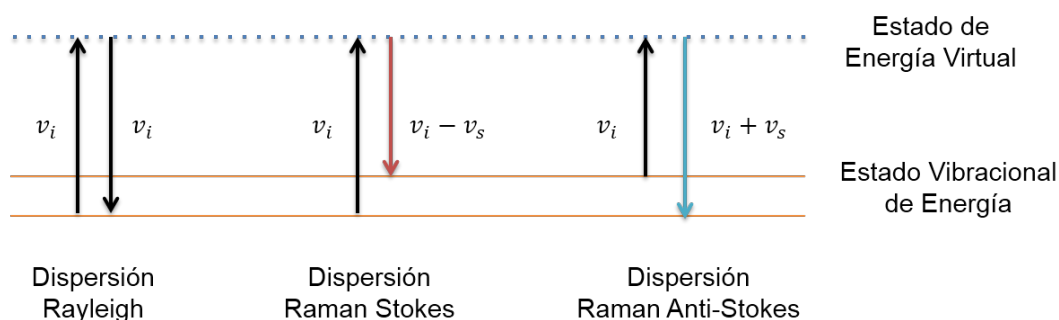


Figura 1.1: Esquema de Dispersión Rayleigh y Dispersión Raman. Cambios en niveles vibracionales de energía, con ν_i y ν_s representando la frecuencia de la luz incidente y una frecuencia propia de la molécula respectivamente.

Las variaciones que se presentan en la frecuencia durante el fenómeno de dispersión Raman son equivalentes a variaciones de energía. Gracias a la in-

teracción luz-material, las moléculas pueden entrar de manera transitoria a un estado de energía virtual el cual deben abandonar para regresar a un nivel de energía permitido y esto lo hacen emitiendo un haz de luz, ver figura 4.4. La frecuencia a la cual el haz de luz es liberado dependerá del salto energético realizado por la molécula; tanto la energía requerida para pasar de un estado a otro como los diferentes estados energéticos son propios de cada molécula, por tanto, un espectro Raman puede ser visto como una huella dactilar cuyo análisis permite realizar una detección y clasificación química de la muestra. La principal diferencia entre la Espectroscopia Raman y otras técnicas espectroscópicas, es que las señales Raman son producto de la dispersión de la luz y no de la absorción o emisión. Como consecuencia, el efecto de dispersión Raman es independiente de la longitud de onda del laser incidente.

Recientemente, la Espectroscopia Raman de Imágenes ha surgido como una nueva modalidad que permite de manera no invasiva y no destructiva, obtener imágenes espectrales de alta resolución para determinar la composición química de las muestras bajo análisis. La Espectroscopia Raman de Imágenes, combina la Espectroscopia Raman y los conocimientos de tratamiento de señales y digitalización de imágenes con el propósito de visualizar la distribución de los componentes de una muestra [31]. Miles de espectros Raman se adquieren de todo el campo de visión para crear imágenes químicas. Estas imágenes en función de las intensidades Raman y las coordenadas espaciales, permiten la evaluación de la heterogeneidad química de una muestra en términos de la distribución espacial de la muestra y sus constituyentes moleculares [9, 13].

Gracias a que la Espectroscopia Raman de Imágenes tiene la capacidad de adquirir tanto información espectral como espacial, ésta es una herramienta que cubre un gran rango de disciplinas científicas incluyendo la medicina, biología, ciencia de los materiales, seguridad alimenticia, entre otros [21, 30].

Las técnicas convencionales para la obtención de imágenes espectrales o imágenes Raman sobre las tres dimensiones, dos espaciales (x, y) y una es-

pectral (λ), se basan en dos enfoques: serial y de imagen directa. El enfoque serial involucra una adquisición por punto (whiskbroom) o por línea (push-broom) y requiere numerosas mediciones para obtener un cubo de datos completo. En el mapeo por punto, se hace un barrido por las dos dimensiones espaciales (x, y) y un espectro es obtenido de cada posición. En el mapeo por línea, un láser de línea es barrido a lo largo de la coordenada x o y y usando un detector de dos dimensiones, se puede obtener la información espacial y espectral de cada línea. En contraste, en el enfoque de imagen directa, todos los puntos espaciales de una muestra son sensados simultáneamente de una sola medición obtenida al iluminar de manera global la muestra. La figura 1.2 representa el ejemplo de las técnicas mencionadas [2, 13, 32].

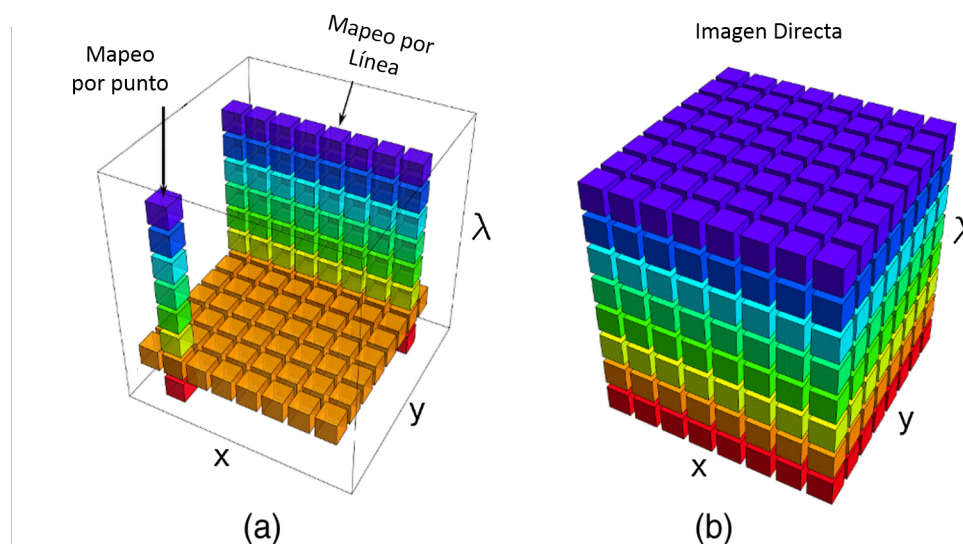


Figura 1.2: Enfoques para adquisición de imágenes espectrales. a) Enfoque serial (por punto o por línea), b) Enfoque de imagen directa. x y y representan las coordenadas espaciales y λ la coordenada espectral [32].

Dentro de las metodologías nombradas, el número de datos durante el proceso de sensado varía considerablemente y cada uno de estos presenta por su parte ciertas limitaciones. Por una parte, en el enfoque serial, dado que las regiones de escaneo están limitadas por el tamaño del láser (punto o línea), escanear áreas significativas requiere una gran cantidad de tiempo. Por otro

lado, en la metodología de imagen directa, los espectrómetros tradicionales presentan una menor resolución espectral al aumentar el tamaño de la muestra bajo análisis [22, 33].

Teniendo en cuenta que la Espectroscopia Raman de imágenes requiere largos periodos de tiempo para su adquisición, aproximadamente un segundo por espectro, investigaciones recientes apuntan a aumentar la velocidad de adquisición de señales Raman con el fin de explotar los beneficios de esta técnica [34]. Una alternativa para reducir el tiempo de adquisición y procesamiento de las señales obtenidas por Espectroscopia Raman y al mismo tiempo, remover las limitaciones existentes en la resolución espectral, es mediante el empleo de espectrómetros de apertura codificada que funcionen bajo los conceptos de Sensado Compresivo. Diferentes estudios muestran que esta técnica puede ser empleada satisfactoriamente en la Espectroscopia Raman de Imágenes [22, 20]. En los capítulos 2 y 3 se describe la técnica de Sensado Compresivo y el sistema de aperturas codificadas propuesto para el desarrollo del presente trabajo.

Capítulo 2

Sensado compresivo de imágenes

2.1. Teoría de sensado compresivo

Los enfoques tradicionales para el muestreo de señales e imágenes se basan en el teorema de muestreo de Nyquist/Shannon, el cual establece que cuando se muestrea una señal, para evitar la pérdida de información y poder reconstruir la señal original, la frecuencia de muestreo debe ser mayor que el doble del ancho de banda de la señal de entrada [35]. En aplicaciones como la adquisición de imágenes por medio de los métodos tradicionales, el número de muestras resultante es tan grande que se hace necesario realizar un proceso de compresión mediante el uso de algoritmos para facilitar su almacenamiento y transmisión.

Recientemente, Candes [15], Romberg [14] y Donoho [17] han desarrollado una teoría de sensado alternativa llamada Compressed Sensing o “Sensado Compresivo” (SC), la cual es una técnica no adaptativa de detección y compresión de señales que establece que es posible reconstruir imágenes o señales con precisión a partir de un número de muestras menor al que establece el criterio de Nyquist/Shannon, a través de algoritmos de optimización numérica [15] [36] [37]. El éxito de esta técnica radica en que los procesos de sensado y compresión son llevados a cabo simultáneamente, de forma tal que el número de muestras requeridas se reduce considerablemente. Para esto, la teoría de CS

explota la hipótesis de que la mayoría de las señales son dispersas o pueden ser representadas de manera dispersa en alguna base de representación Ψ [15, 17].

Una señal es dispersa si la mayor parte de su energía está concentrada en un porcentaje reducido de sus componentes [15, 38]. Lo anterior implica que un pequeño número de componentes sea significativo dentro de un gran número de componentes cero o cercanos a él. En ocasiones, es posible encontrar señales dispersas por naturaleza, sin embargo, en la realidad, la mayoría de las señales no lo son; en estos casos, es posible encontrar una representación dispersa de la señal en otro dominio de representación. En general, una señal o una imagen espectral $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{N \times N \times L}$, o su representación en forma vectorial $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{N^2L}$, donde $N \times N \times L$ representa el tamaño de la señal espectral o cubo de datos, puede expresarse como $\mathbf{f} = \Psi\theta$ donde Ψ una base de representación, y θ es el vector de coeficientes de \mathbf{f} en esa base. Específicamente, θ es un vector cuyos elementos son en su mayoría ceros y unos pocos elementos diferentes de cero son los que contienen toda la información. En este caso, el nivel de dispersión está dado por el número de coeficientes de θ que son diferentes de cero. Específicamente, θ tiene un nivel de dispersión $S \ll N^2L$, si “ S ” de sus elementos son diferentes de cero.

Las imágenes espectrales pueden ser representadas empleando una base diferente para el eje espacial Ψ_{2D} y el eje espectral Ψ_{1D} . Comúnmente, la transformada Wavelet 2D es empleada para representar las imágenes en una longitud de onda específica [38]. El eje espectral se puede representar usando la transformación Wavelet 1D o la transformación Coseno discreta. Por lo tanto, la imagen espectral \mathbf{f} se puede expresar como $\mathbf{f} = (\Psi_{2D} \otimes \Psi_{1D})\theta$ donde \otimes es el producto Kronecker. Otras bases, como las generadas por la técnica de componentes principales o diccionarios pre-entrenados pueden ser usadas, sin embargo, estas representaciones requieren conocimiento previo de las señales a estudiar [38, 39].

Para ilustrar la representación de cada una de estas bases, la Figura 2.1(b-d) ilustra los coeficientes de representación dispersa usando las bases Wavelet 1D, Wavelet 2D y el producto Kronecker sobre una imagen de prueba (Figura 2.1(a)) respectivamente. La primera representación (Figura 2.1(b)) usa la transformada Wavelet 1D para representar la señal $f = \Psi_{1D}\theta$. En el segundo caso (Figura 2.1(c)), la transformada Wavelet 2D es usada, de modo que $f = \Psi_{2D}\theta$. El tercer enfoque emplea el producto Kronecker entre la transformada Wavelet 2D y la transformada Coseno (DCT). Se puede observar claramente, que la base Kronecker produce la representación más dispersa de f (Figura 2.1(d)).

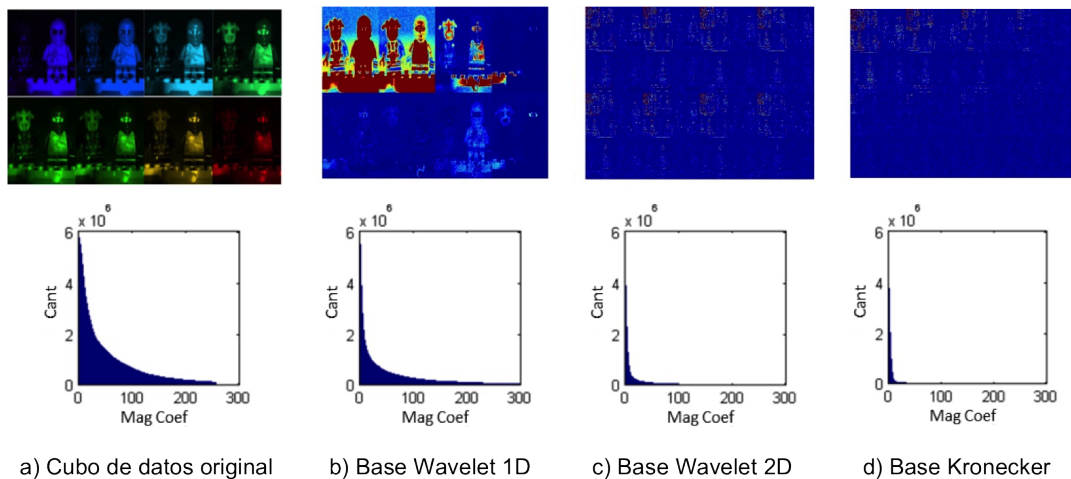


Figura 2.1: Comparación entre bases de representación. a) Imagen original. b) Wavelet 1D. c) Wavelet 2D. d) Kronecker (DCT-Wavelet 2D).

La Figura 2.2 realiza una comparación de las aproximaciones obtenidas a partir de una imagen original (Figura 2.2(a)) empleando las bases Wavelet 1D, Wavelet 2D y el producto Kronecker y conservando solo el 1%, 5% y 10% de las muestras de la señal estudiada. Estas aproximaciones son obtenidas expresando la señal en la base de representación correspondiente, posteriormente, los coeficientes estimados son ordenados según su magnitud; un porcentaje determinado de estos coeficientes ordenados se conserva mientras

que los demás se igualan a cero. Los coeficientes resultantes se transforman nuevamente al espacio original con el fin de generar la señal aproximada. Se puede observar como las imágenes aproximadas presentan gran similitud con la original usando un bajo porcentaje de muestras.

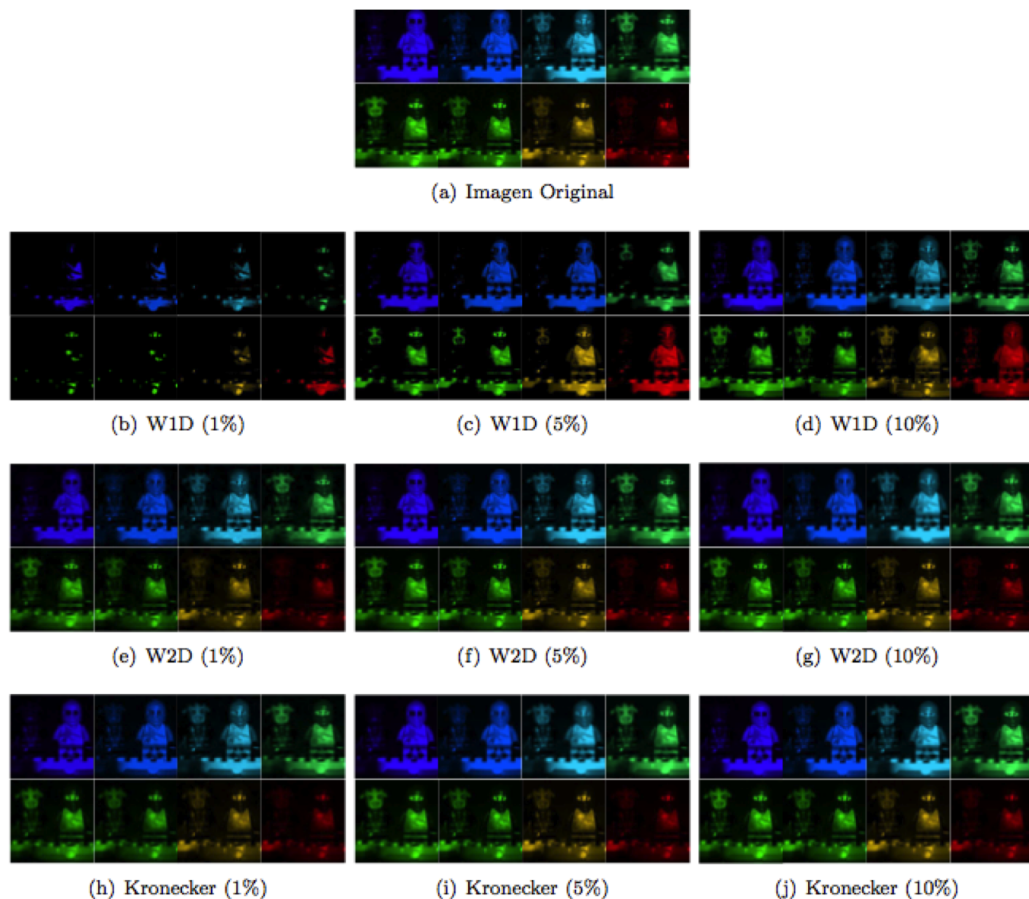


Figura 2.2: Comparación de la reconstrucción según la base de representación, usando solo el 1%, 5% y 10% de los coeficientes. (a) Imagen original. (b-d) Wavelet 1D. (e-g) Wavelet 2D. (h-j) Kronecker (DCT-Wavelet 2D).

2.2. Sensado Compresivo en Espectroscopia Raman

De manera general, los espectrómetros Raman están compuestos principalmente por una fuente de excitación o láser, un sistema de recolección de luz, un elemento dispersor y un detector como puede verse en la Figura 2.3 [28]. Los espectrómetros tradicionales son los espectrómetros de rendija cuyos componentes se muestran en la Figura 2.4; el láser es focalizado para iluminar la muestra, las dispersiones (producto de la interacción luz-muestra) son filtradas para eliminar la dispersión Rayleigh, la dispersión Raman entra a través de una rendija (slit) o en otros caso un agujero (pinhole) y llega al elemento dispersivo que separa la luz en sus longitudes de onda características y las proyecta a una matriz de detectores en dos dimensiones o CCD [40].

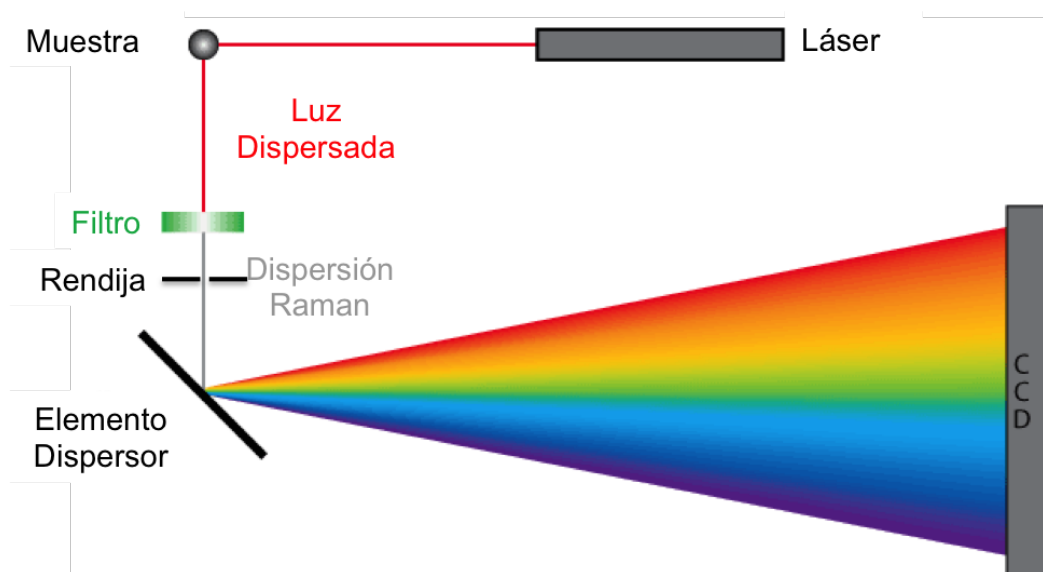


Figura 2.3: Componentes básicos de un espectrómetro Raman.

Con el fin de garantizar resoluciones espectrales útiles, los espectrómetros tradicionales emplean una apertura de 50-100 μm aproximadamente. Esta limitación en el tamaño da lugar a una de las principales desventajas de este tipo de sistemas: el compromiso existente entre el diseño óptico y la eficiencia

de la luz [40]. El ancho de un elemento espectral está directamente relacionado con el ancho de la rendija. Para lograr resoluciones espectrales razonables, el ancho de la rendija de entrada debe ser reducido. Sin embargo, debido a que la dispersión de la luz es generalmente mas ancha que el tamaño de la rendija, solo un pequeño porcentaje de la luz puede llegar al espectrómetro. Por lo tanto siempre existirá una dependencia de la resolución espectral y el rendimiento de la luz que están ligados al tamaño de la rendija de entrada al espectrómetro [21]. La figura 2.5 representa la relación entre la resolución espectral y el compromiso de la luz, al variar el ancho en la separación de la rendija. Como puede observarse, una pequeña separación tiene una buena resolución pero un bajo rendimiento de la luz (imagen de la izquierda), mientras que una amplia separación en la rendija presenta pobre resolución pero buen rendimiento de la luz (imagen de la derecha).

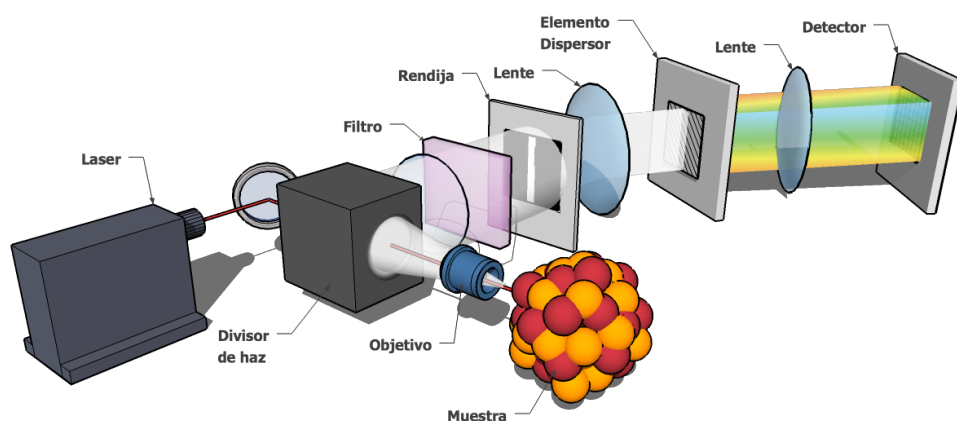


Figura 2.4: Espectrómetro Raman de rendija.

Teniendo en cuenta el compromiso existente entre el tamaño de la rendija y el rendimiento de la luz, el tamaño de iluminación de la muestra debe ser pequeño y se da generalmente en el orden de $1mm$. Focalizar el láser en regiones tan pequeñas de la muestra puede generar daños gracias a las altas

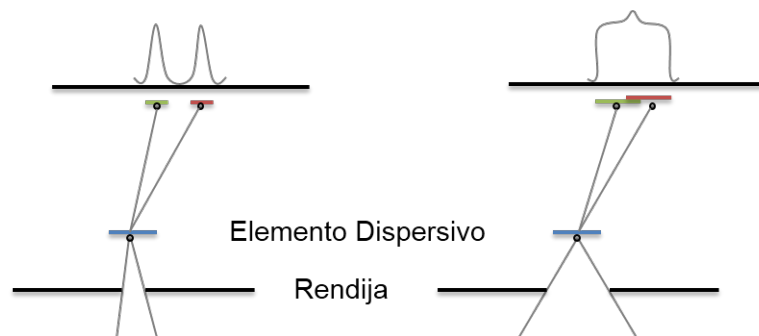


Figura 2.5: Compromiso entre la resolución y el rendimiento de la luz en espectrómetro de rendija.

potencias de la luz, y al mismo tiempo, genera un aumento en los tiempos de medición para la adquisición de un cubo de datos [22].

El empleo de aperturas codificadas aparece recientemente como solución a la dependencia existente en los espectrómetros tradicionales entre la resolución espectral y el rendimiento de la luz. La implementación de las aperturas codificadas en lugar de la rendija tradicional genera mediciones multiplexadas en el detector, y posteriormente, algoritmos computacionales son empleados para extraer la información espectral de las mediciones [21]. Por otro lado, la combinación de las aperturas codificadas con la aplicación de los conceptos de sensado compresivo generan una alternativa viable para la reducción de los tiempos de medición en Espectroscopia Raman, garantizando calidad espectral [26].

2.3. Aperturas codificadas

Un código de apertura es una matriz que modula la intensidad de una fuente antes de llegar al detector. Es decir, permite o bloquea el paso de la radiación electromagnética en determinados puntos del espacio. Los códigos de apertura han sido ampliamente usados para mejorar el rendimiento de los sensores [41]. La mayor cantidad de aplicaciones de los códigos de apertura incluyen

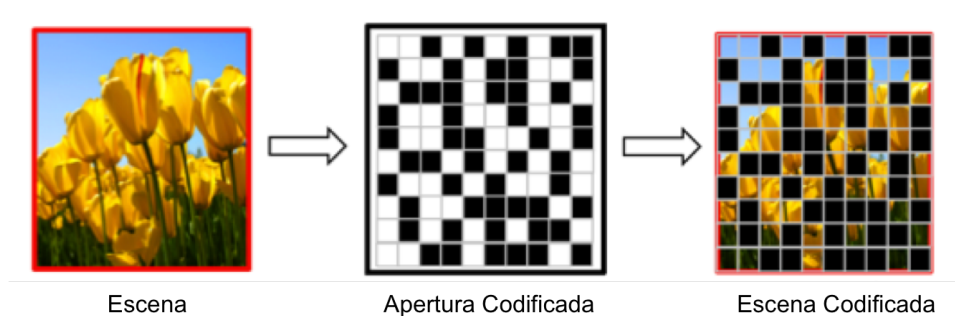


Figura 2.6: Efecto de la apertura codificada sobre la escena. En la apertura codificada, los elementos blancos son transmisivos, por el contrario, los negros bloquean la luz.

matrices uniformemente redundantes para formación de imágenes sin lentes [42], transformación de Hadamard en espectroscopia [43] y arquitecturas de compresión de imágenes hiperespectrales [24, 44, 45]. Además, pueden ser vistos como codificadores de campo de luz que permiten hacer medidas de radiancia usando detectores de irradiancia [46]. La Figura 2.6 muestra un ejemplo de un código de apertura y su efecto en una escena. En esta representación las características blancas permiten el paso de la información, mientras que las negras la bloquean, esta codificación de la luz inducida por el código de apertura logra la reducción de la cantidad de muestras.

2.4. Espectrómetros de Apertura Codificada

El empleo de un espectrómetro basado en apertura codificada hace que los instrumentos ópticos sean más flexibles y eficientes, dado que éstos superan el problema de compensación entre el rendimiento de la luz y la resolución espectral que existe en los espectrómetros tradicionales de rendija (slit) o agujero (pinhole) [20]. Para esto, una apertura codificada reemplaza la rendija tal como se muestra en la figura 2.7.

Un espectrómetro de apertura codificada es modelado como un sistema en el cual los espectros de un objeto o el cubo de datos $f(x, y, \lambda)$ es codificado por

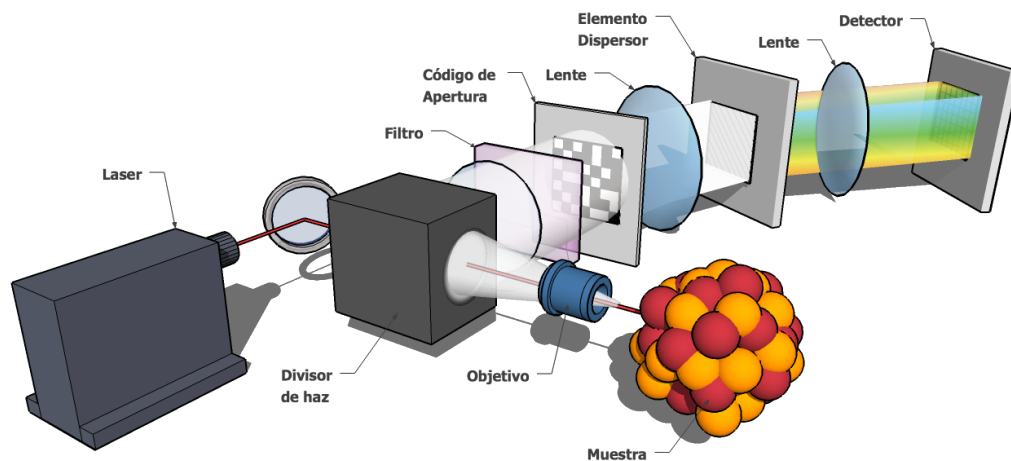


Figura 2.7: Espectrómetro Raman de apertura codificada.

una multiplicación elemento por elemento con una apertura codificada $T(x, y)$ (como la mostrada en la figura 2.6). Posteriormente, la señal es desplazada por el elemento dispersor y se hace incidir sobre una matriz de detectores 2D o CCD. Una vez se tienen los datos codificados y teniendo en cuenta la estructura de la apertura codificada empleada, se realiza el proceso de reconstrucción que permite obtener una representación con calidad del cubo de datos original. Una ventaja que ofrecen los espectrómetros de apertura codificada es que cada píxel del detector mide diferentes canales espectrales a la vez, mientras que los espectrómetros tradicionales miden los canales espectrales por separado, lo cual indica que cada píxel del detector solo puede contener una única longitud de onda [19]. Los efectos de los principales elementos del espectrómetro sobre el cubo de datos puede observarse en la figura 2.8.

Dentro de los espectrómetros de apertura codificada, se encuentra el “Sistema de adquisición de imágenes espectrales basado en una apertura codificada de única captura” o CASSI (Por sus siglas en inglés, Coded Aperture Snapshot Spectral Imaging) [24]. Este sistema es utilizado para la realización del presente proyecto de investigación. La motivación para utilizar esta arqui-

tectura es que los grupos de investigación participantes cuentan con la experiencia requerida para el diseño e implementación de este modelo. Específicamente, el Grupo de Investigación en Biomédica (GIIB) y el Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), pertenecientes a la Universidad Industrial de Santander (como entidad ejecutora del proyecto) y el Grupo de Investigación en Procesado de Señales Multidimensionales de la Universidad de Delaware en Estados Unidos (como entidad colaboradora en el desarrollo del proyecto). En el siguiente capítulo se realiza un análisis más detallado de esta arquitectura de sensado.

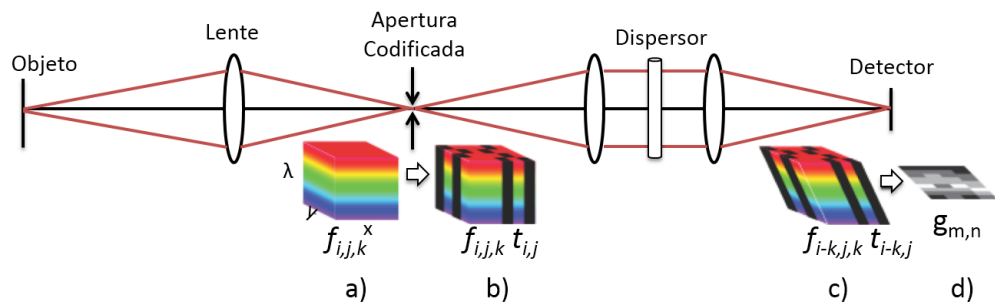


Figura 2.8: Modelo de Espectrómetro basado en aperturas codificadas: a) Cubo de datos de entrada, b) Resultado de la transmisión a través de la apertura codificada, c) Corrimiento del cubo por el elemento dispersivo y d) multiplexación de la información en el detector.

Capítulo 3

Sistema de Adquisición de Imágenes basado en aperturas Codificadas CASSI

El sistema CASSI es una arquitectura óptica diseñada para capturar información espacial y espectral de una escena en un conjunto de mediciones bidimensionales, explotando eficazmente los principios de la técnica de Sensado Compreso [24, 25, 44, 45, 47, 48]. La arquitectura CASSI realiza el sensado de una señal espectral $f_0(x, y, \lambda)$ mediante proyecciones codificadas y dispersadas en dos dimensiones, empleando una sola captura o disparo para sensar un cubo de datos espacio-espectral completo.

La Figura 1 ilustra los principales componentes del instrumento CASSI. De manera general, está compuesto por un lente objetivo que forma una imagen de la escena en el plano imagen de la apertura codificada. La apertura codificada modula la información espacial sobre todas las longitudes de onda en el cubo de datos con el mismo patrón inscrito en la apertura. Posteriormente, la escena codificada al pasar por el elemento dispersivo, se descompone en sus respectivas longitudes de onda, ocasionando que múltiples imágenes dependientes de la longitud de onda desplazadas espacialmente, incidan sobre el detector. De esta manera, la intensidad medida en el detector contiene

una mezcla codificada de información espacial y espectral de la escena. La Figura 3.1 muestra los tres pasos del proceso de sensado del cubo de datos: Codificación espacial, descomposición espectral e integración en el detector [49].

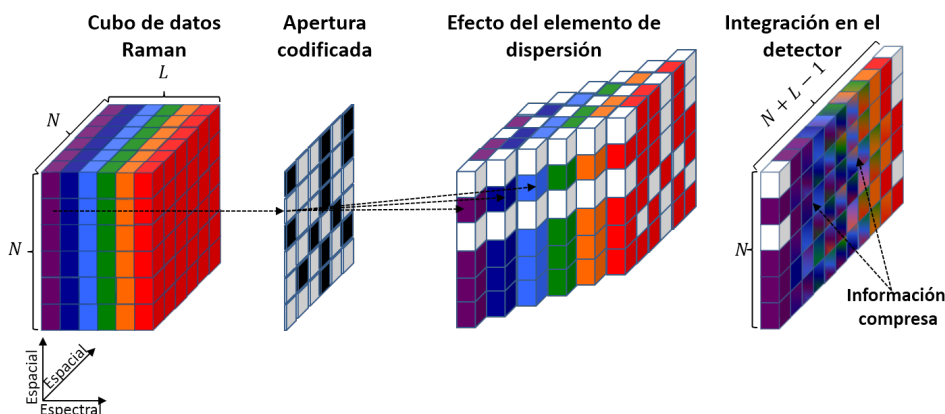


Figura 3.1: Proceso de captura de una imagen espectral en el sistema CASSI: Codificación espacial, descomposición espectral e integración en el detector.

3.1. Modelo Matemático del CASSI

El modelo matemático del sistema CASSI ha sido ampliamente estudiado en [24, 45]. La densidad de energía espectral de la escena que es capturada por el lente objetivo y transmitida hacia la apertura codificada se denota como $f_0(x, y, \lambda)$, donde (x, y) representan las coordenadas espaciales y λ el dominio espectral. Designando $T(x, y)$ como la función de transmisión de la apertura codificada, la imagen inmediatamente después de ser modulada espacialmente por la apertura codificada puede ser representada como:

$$f_1(x, y, \lambda) = T(x, y)f_0(x, y, \lambda). \quad (3.1)$$

El patrón impreso en $T(x, y)$ es diseñado como una matriz de píxeles de tamaño similar a los píxeles del detector Δ . Sea $t_{i,j}$ el valor binario en el elemento (i, j) de la apertura codificada, donde un elemento de transmisión se

representa con el número 1 y un elemento de bloqueo con 0. Entonces $T(x, y)$ puede ser descrita como:

$$T(x, y) = \sum_{i,j} t_{i,j} \tau(i, j; x, y), \quad (3.2)$$

donde $\tau(i, j; x, y)$ es una función que representa el patrón impreso en la apertura y que comúnmente está dado por $\tau(i, j; x, y) = \text{rect}\left(\frac{x}{\Delta} - i, \frac{y}{\Delta} - j\right)$ donde *rect* hace referencia a la función rectangular. Después de propagarse a través de la apertura codificada y el elemento dispersivo, la información justo en frente del detector está dada por:

$$f_2(x, y, \lambda) = \iint f_1(x', y', \lambda) h(x' - x - S(\lambda), y' - y) dx' dy', \quad (3.3)$$

donde $h(x' - x - S(\lambda), y' - y)$ representa la respuesta del lente de transmisión, así como del elemento dispersivo cuyo índice de dispersión es $S(\lambda)$. Finalmente, el detector mide la intensidad de la luz incidente en lugar de la firma espectral como lo hacen los espectrómetros tradicionales. Esto se realiza mediante la integración de la energía incidente en el detector de rango espectral Λ . De este modo, la medición en el detector está dada por:

$$y(x, y) = \int_{\Lambda} f_2(x, y, \lambda) d\lambda. \quad (3.4)$$

Por lo tanto:

$$y(x, y) = \int_{\Lambda} \iint T(x', y') f_0(x', y', \lambda) h(x' - S(\lambda) - x, y' - y) dx' dy' d\lambda. \quad (3.5)$$

Asumiendo que; (i) La función de dispersión de punto (PSF) del sistema $h(x' - x, y' - y)$ es invariante, (ii) la dispersión es lineal y (iii) que existe una relación uno a uno entre los elementos de la apertura codificada y los píxeles del detector, la captura del detector se representa finalmente como:

$$y(x, y) = \int_{\Lambda} T(x - S(\lambda), y) f_0(x - S(\lambda), y, \lambda) d\lambda. \quad (3.6)$$

En forma discreta, la medición del sensor en cada píxel (m, n) está dada por:

$$Y_{m,n} = \sum_{k=0}^{L-1} T_{m(n-k)} F_{m(n-k)k}, \quad (3.7)$$

donde L representa el número de bandas en el cubo de datos y F el cubo de datos espectral discretizado. Adicionalmente, la medición puede ser expresada en forma matricial como:

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{f}, \quad (3.8)$$

tal que \mathbf{H} es una matriz que representa el proceso de sensado del sistema CASSI, que incluye las operaciones de los elementos ópticos descritos anteriormente, sobre el cubo de datos \mathbf{f} , en representación vectorial. La figura 3.2 muestra un ejemplo de la matriz \mathbf{H} , en la cual los elementos diferentes de cero en las diagonales es determinado por la apertura codificada empleada para realizar la captura.

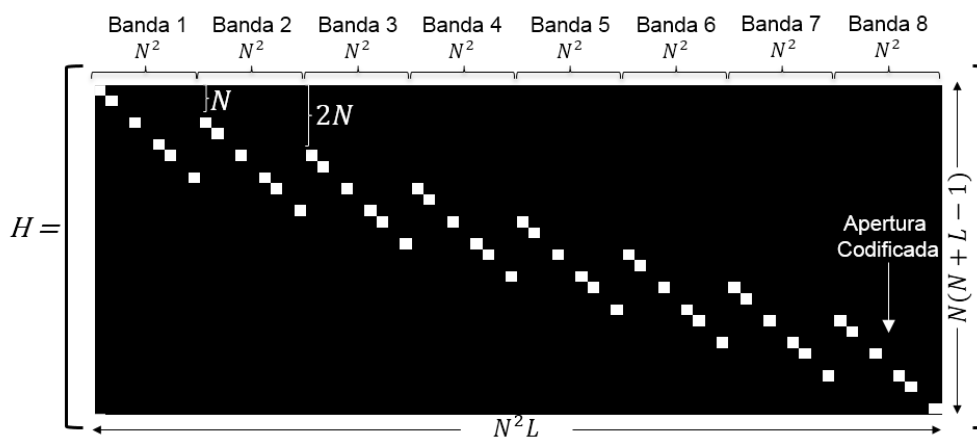


Figura 3.2: Matriz de sensado \mathbf{H} para $N = 3$, $L = 8$.

Para escenas espectralmente ricas o escenas espacialmente detalladas, una sola captura o shot del sistema CASSI no puede proporcionar un número suficiente de mediciones de compresión para realizar una óptima reconstrucción [50]. Recientes estudios han demostrado que el uso de múltiples capturas

CASSI, en lugar de una sola captura, proporciona mejores reconstrucciones del cubo de datos [47, 51]. En este caso, al incrementar el número de capturas y al realizar cada una de ellas con una apertura codificada diferente (dado que la apertura codificada es el único elemento que puede ser variado en el sistema CASSI) se aumenta rápida y significativamente la calidad de la reconstrucción. De manera matricial, el modelo matemático para el sistema CASSI de múltiples capturas es similar al mostrado en la ecuación (3.8) del CASSI tradicional,

$$\mathbf{y}^\ell = \mathbf{H}^\ell \mathbf{f}, \quad (3.9)$$

para $\ell = \{1, \dots, k\}$, donde k es el número de capturas o disparos. La ℓ -ésima apertura codificada $T^\ell(x, y)$ usada para sensar cada \mathbf{y}^ℓ , es diferente en cada proyección. El ejemplo ilustrado en la Fig. 3.3 representa el sistema CASSI realizando tres capturas lo cual genera tres diferentes mediciones compresas en el detector, usadas para realizar el posterior proceso de reconstrucción. La matriz de sensado \mathbf{H} para un sistema de 3 capturas ($k = 3$) a un cubo de tamaño $N = 3$ y $L = 8$ tendría la forma dada por la figura 3.4.

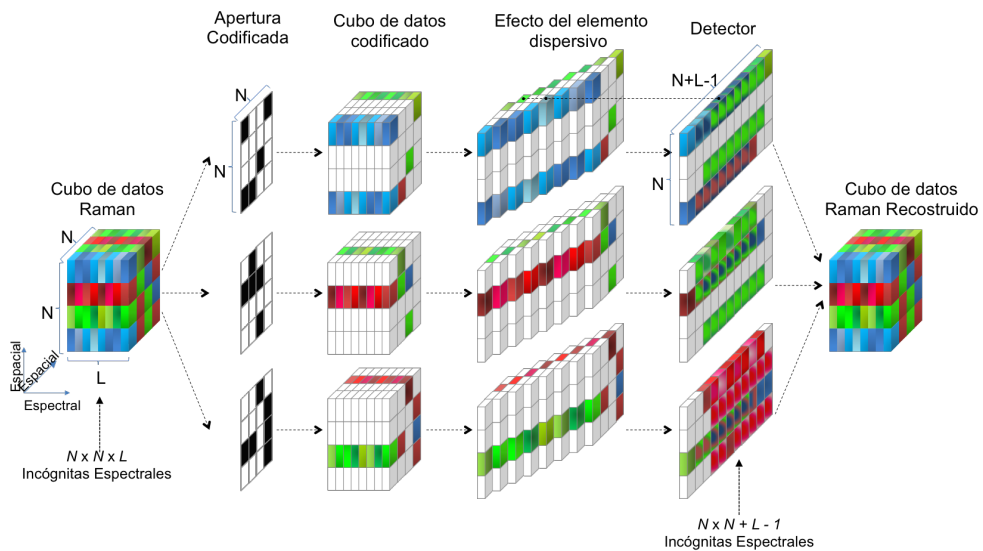


Figura 3.3: Sistema CASSI de múltiples capturas. Proceso del sistema CASSI con tres capturas, cada una con diferente apertura codificada.

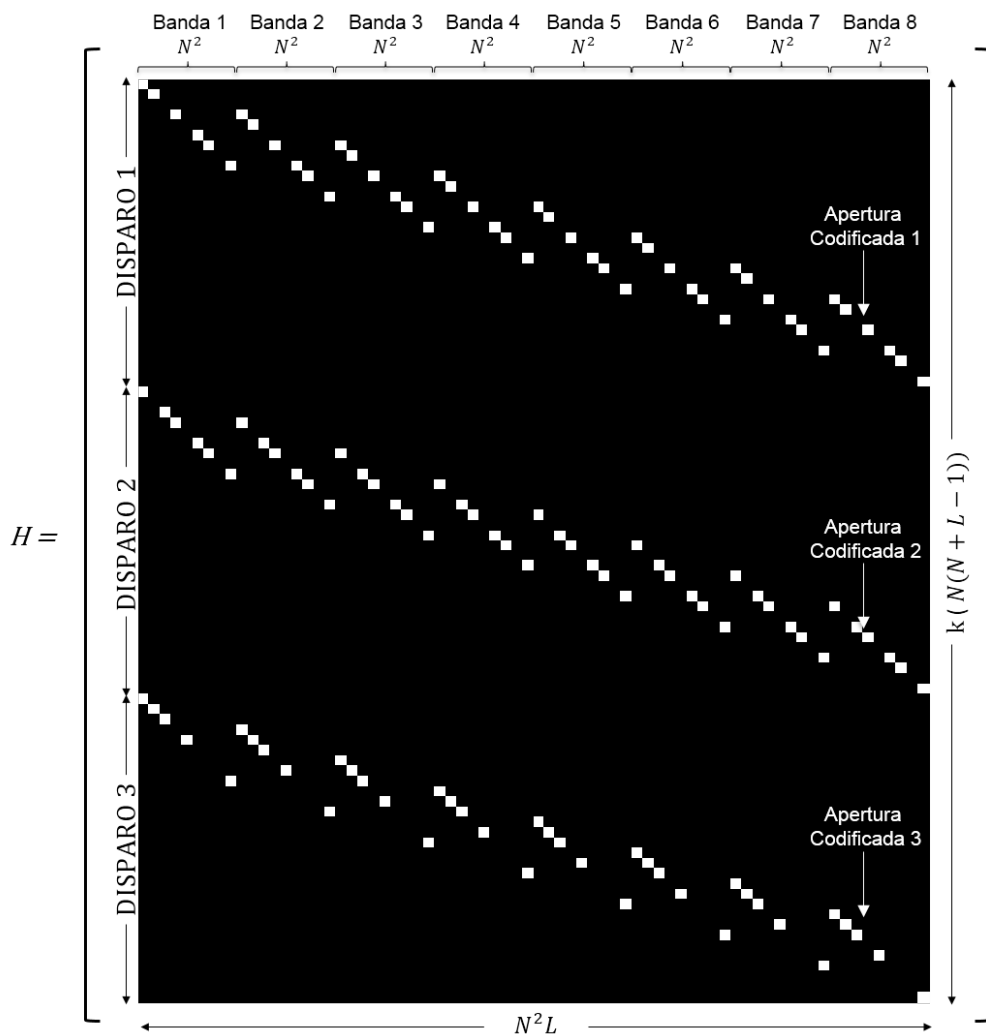


Figura 3.4: Matriz de sensado \mathbf{H} para $N = 3$, $L = 8$ y $k = 3$.

Asumiendo que el tamaño del cubo de datos es $N \times N \times L$, el elemento de dispersión desplaza cada banda horizontalmente un píxel, causando que la imagen espectral modulada y dispersada incida sobre $N \times (N + L - 1)$ píxeles en el detector [45]. Lo anterior indica que el número de píxeles del detector es menor que el número de vóxeles (píxeles tridimensionales) de la imagen hiperespectral discreta a estimar o que el número de ecuaciones es menor al número de incógnitas espectrales como se muestra en la Figura 3.3. Visto de otra manera, el sistema de ecuaciones representado por la matriz de sensado

del CASSI, \mathbf{H} , de tamaño $N \times (N + L - 1) \times N^2L$, es mal condicionado; por lo tanto una reconstrucción de un cubo de datos del sistema CASSI, se basa en la solución de un sistema indeterminado de ecuaciones.

3.2. Proceso de Reconstrucción

Una estimación del cubo de datos f puede obtenerse al intentar invertir el sistema de ecuaciones dado en la ecuación (3.8). De esta forma, la estimación f se obtiene a partir de las mediciones y de la forma $f = \mathbf{H}^{-1}y$. Sin embargo, esta solución conduce a resultados de baja calidad debido a que el sistema de ecuaciones representado por la matriz \mathbf{H} se encuentra mal condicionado. Este problema es originado porque el número de filas de la matriz \mathbf{H} es menor que el número de columnas (tal como puede observarse en el ejemplo de la matriz \mathbf{H} dada por la figura 3.2), o equivalentemente, el número de píxeles del detector es menor que el número de vóxeles del cubo de datos discreto a estimar. Si se intenta dar solución a este sistema de ecuaciones por medio de inversión lineal, este tiene un número infinito de soluciones. En consecuencia, la teoría de Sensado Compreso es empleada para estimar f . Esta teoría sugiere que un sistema sub-determinado de ecuaciones puede convertirse en bien condicionado, si la señal de interés es dispersa o compresible en alguna base Ψ .

Entonces, el cubo de datos Raman es representado por:

$$f = \Psi\theta \quad (3.10)$$

donde θ es el vector de coeficientes del cubo de datos f en la base Ψ . De esta forma las mediciones compresas del detector están dadas por:

$$y = \mathbf{H}\Psi\theta. \quad (3.11)$$

De esta manera, la construcción del cubo de datos espectrales a partir de una medición realizada con el CASSI, puede ser lograda al resolver un proble-

ma de optimización numérica, que busca los coeficientes θ y posteriormente realiza la transformación inversa Ψ^T de los coeficientes para obtener \mathbf{f} . Específicamente, se pretende resolver:

$$\mathbf{f} = \Psi^T \{ \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \| \mathbf{H}\Psi\theta - \mathbf{y} \|_2 + \tau \|\theta\|_1 \} \quad (3.12)$$

tal que $\|\cdot\|_2$ representa la norma euclideana y $\|\cdot\|_1$ la norma absoluta [51].

Existen diversos algoritmos numéricos que explotan propiedades o estructuras presentes en el cubo de datos para obtener una estimación de la imagen. Estos pueden ser clasificados en cinco enfoques computacionales, los algoritmos de búsqueda codiciosa, algoritmos que resuelven un problema de optimización convexa, algoritmos con enfoques bayesianos, los de optimización no convexa y por ultimo algoritmos de fuerza bruta [1]. Para el desarrollo del presente trabajo, se emplearon los algoritmos GPSR (Gradient Projection for Sparse Reconstrucción) [52] y TwIST (Two-Step Iterative Shrinkage/Thresholding) [53], los cuales hacen parte del enfoque de optimización convexa.

El algoritmo GPSR es un algoritmo empleado comúnmente para la estimación de imágenes espectrales partiendo de la asunción de que la señal de interés es dispersa o compresible en alguna base de representación Ψ tal como lo establece la teoría de Sensado Compreso. De esta manera, GPSR realiza la minimización dada por la ecuación (3.12), en la cual τ es un parámetro de regularización.

Por otro lado, el algoritmo TwIST, recupera las imágenes espectrales mediante la solución al problema de minimización dado por

$$\hat{\mathbf{f}}_{TwIST}(\Upsilon, \Phi) = \left[\underset{\mathbf{f}}{\operatorname{argmin}} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{g} - \mathbf{H}\mathbf{f}\|_2^2 + \Upsilon \Phi(\mathbf{f}) \right\} \right], \quad (3.13)$$

en donde la regularización $\Phi(\mathbf{f})$ incluye, pero no está completamente limitada por la norma ℓ_1 .

Tradicionalmente, TwIST emplea el operador conocido como Total Variation (TV) como parámetro de penalización o regularización $\Phi(\mathbf{f})$, dado por

$$\Phi(\mathbf{f}) = \sum_k \sum_{i,j} \sqrt{(f(i+1, j, k) - f(i, j, k))^2 + (f(i, j+1, k) - f(i, j, k))^2}. \quad (3.14)$$

El término TV penaliza las posibles soluciones que presentan mayores gradientes tanto horizontales como verticales. Con este parámetro de regularización, la estimación de un cubo de datos espectral con el algoritmo TwIST, corresponde a la búsqueda de un compromiso entre la falta de idoneidad entre una posible estimación y los datos medidos, con el grado de indeseabilidad dado por el término de penalización $\Phi(\mathbf{f})$.

El algoritmo TwIST mide el grado de variación de la imagen a través de los píxeles, de modo que una imagen con mucha textura o ruido tendrá un gran valor de TV, mientras que una imagen suave con variaciones constantes, tendrá un pequeño valor de TV. El parámetro Υ de la ecuación 3.13 representa un término de fidelidad de los datos.

Capítulo 4

Diseño del Sistema

4.1. Diseño de aperturas codificadas

Un componente crítico en el problema de optimización numérica dado por la ecuación 3.12 es la estructura de la matriz de sensado H , la cual es quien define la calidad de las reconstrucciones obtenidas por el sistema CASSI dependiendo del número de proyecciones o disparos empleados. La arquitectura óptica del CASSI impone de manera parcial una estructura dispersa bien definida a la matriz de sensado, sin embargo, las aperturas codificadas usadas en cada uno de los disparos son, en últimas, las que definen la estructura de la matriz H , cuyo diseño es necesario para garantizar calidad de las imágenes reconstruidas.

Las aperturas codificadas empleadas tradicionalmente en el sistema CASSI, incluyen los los códigos binarios, los códigos a escala de grises, los códigos Hadamard y los códigos booleanos [50]. Las aperturas codificadas diseñadas en base a códigos booleanos han presentado los mejores resultados de reconstrucción en imágenes multiespectrales, sin embargo, al trabajar con imágenes Raman, catalogadas como imágenes hiperespectrales estos códigos no presentan los mejores rendimientos. Por esto, el objetivo principal del presente proyecto de investigación, ha sido realizar el diseño de las aperturas codificadas empleadas en el sistema CASSI para la obtención de imáge-

nes Raman de modo que se garanticen altas calidades de reconstrucción empleando el menor número de proyecciones o disparos.

Para el desarrollo del presente trabajo, se emplearon aperturas codificadas aleatorias con distribución Bernoulli, cuyas entradas están definidas por $t_{i,j}^k$, donde k indica el número de la proyección o disparo y $t_{i,j}^k = 1$ representa un elemento de transmisión de la apertura codificada, mientras $t_{i,j}^k = 0$ representa un elemento de bloqueo de la apertura codificada.

4.1.1. Parámetros de diseño

Para realizar el diseño de las aperturas codificadas empleadas por el sistema CASSI para la obtención de imágenes Raman, se tuvieron en cuenta parámetros como la transmitancia, el radio de compresión y el análisis del porcentaje de dispersión de la imagen de entrada. Con base a los resultados obtenidos, se determinó la transmitancia mínima y la estructura de las aperturas codificadas para obtener reconstrucciones que garanticen una calidad espectral superior a los 30 dB.

Transmitancia

El porcentaje de elementos transmisivos de una apertura codificada se define como transmitancia y se expresa matemáticamente como:

$$Tr = \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{t_{ij}}{N^2}, \quad (4.1)$$

donde N^2 representa el tamaño de la apertura codificada.

La figura 4.1 muestra un ejemplo de tres aperturas codificadas con transmitancia de 0.1, 0.5 y 0.8 respectivamente. Una transmitancia de 0.1, por ejemplo, hace referencia a que el 10% de los elementos en la apertura codificada son transmisivos y los elementos restantes, elementos de bloqueo.

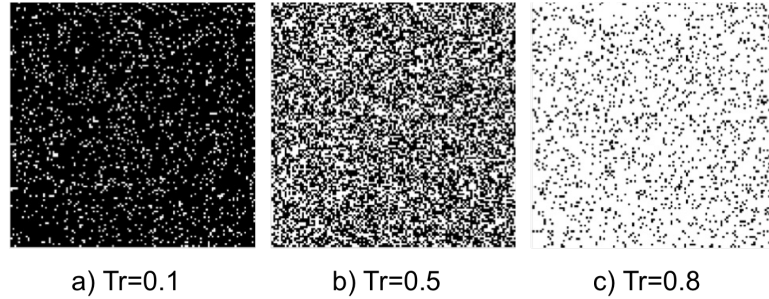


Figura 4.1: Transmitancia en aperturas codificadas. a) 10%, b) 50% y c) 80% de los elementos en la apertura codificada son transmisivos. Los elementos blancos corresponden a elementos de transmisión, mientras que los negros son elementos de bloqueo.

Para la creación de las aperturas codificadas, la transmitancia representa la probabilidad p de que cada una de las entradas i, j de la apertura codificada tenga un valor $t = 1$, mientras que la probabilidad de tener un valor $t = 0$, está dada por $q = 1 - p$ tal como lo establece una distribución Bernoulli.

El análisis de la transmitancia en las aperturas codificadas aleatorias se realizó mediante diversas simulaciones y los resultados son presentados y analizados en la sección 5.2.

Radio de Compresión

Adicional a la transmitancia, el número de proyecciones o disparos realizados afecta la calidad de las reconstrucciones del sistema CASSI. El número de disparos puede ser expresado en términos del radio de compresión, el cual se define como:

$$R_c = \frac{K \cdot (N \cdot (N + L - 1))}{N^2 L}, \quad (4.2)$$

donde K representa el número de disparos y N y L las dimensiones espaciales y espectrales del cubo de datos Raman respectivamente. La ecuación

4.2 puede ser vista como la relación entre el número de mediciones del sistema y el número de píxeles en el cubo de datos Raman reconstruido. Así, un radio de compresión de 0.5 representa una reducción del 50% de las mediciones requeridas si se realiza el proceso de sensado por medio del tradicional criterio de Nyquist.

Durante las simulaciones realizadas, se emplearon tres radios de compresión diferentes, 0.13, 0.25 y 0.51 con el fin de determinar la máxima compresión que garantice obtener reconstrucciones con PSNR superiores a los 30 dB, en cuyos casos se alcanza la calidad necesaria de los espectros para realizar un proceso de clasificación. Los resultados son presentados en el siguiente capítulo.

La figura 4.2 muestra 8 aperturas codificadas con una transmitancia de 0.125 para un radio de compresión de 0.25 en una imagen de dimensiones espaciales de 32×32 . Estas aperturas codificadas representan un ejemplo para una simulación, dado que las aperturas son aleatorias, cada simulación puede presentar una organización diferente. Al realizar la suma de las aperturas codificadas, tal como se muestra en la figura 4.3, se puede observar la cantidad de veces cada píxel de la imagen ha sido sensado durante la simulación. Como puede observarse, un píxel de la imagen puede ser sensado de 0 a 4 veces. Los píxeles que no han sido sensados son reconstruidos aprovechando los conceptos de Sensado Compresivo y las características de dispersión de la imagen; por otro lado, el hecho que un píxel sea sensado más de una vez, representa la toma de más información de la necesaria, lo cual indica que la distribución proporcionada de los elementos transmisivos de las aperturas codificadas no es óptima.

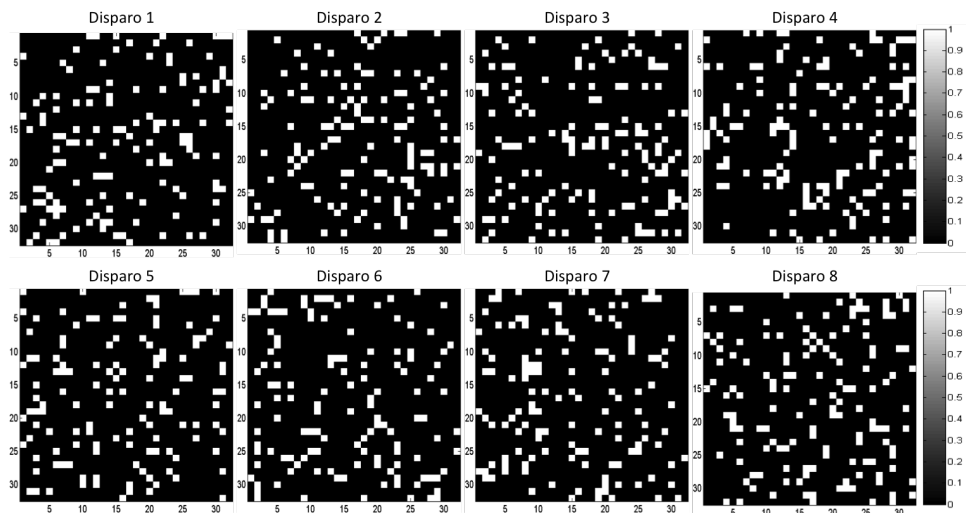


Figura 4.2: Aperturas codificadas para un imagen de dimensiones espaciales de 32×32 con transmitancia de 0.125 para un radio de compresión de 0.25 (8 disparos).

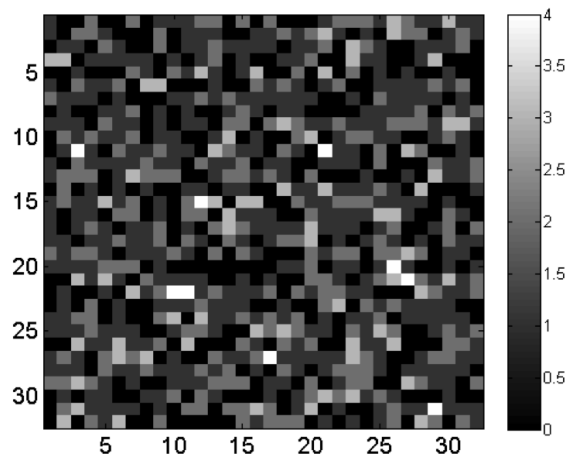


Figura 4.3: Frecuencia de sensado por píxel para una imagen de dimensiones espaciales de 32×32 empleando aperturas codificadas de transmitancia 0.125 y un radio de compresión de 0.25.

Porcentaje de dispersión de la imagen de entrada

Las características de los espectros Raman que conforman el cubo de datos hiperespectral, hacen del cubo de datos Raman una imagen con un grado de dispersión significativo. La figura 4.4, muestra tres espectros Raman sintéticos de la aspirina, la cafeína y el paracetamol (componentes farmacéuticos que hacen parte del cubo de datos que será analizado durante las pruebas de simulación). Tal como puede observarse, la mayor parte de la energía de dichos espectros está concentrada en un número reducido de componentes, mientras que los componentes cero o cercanos a cero son significativos.

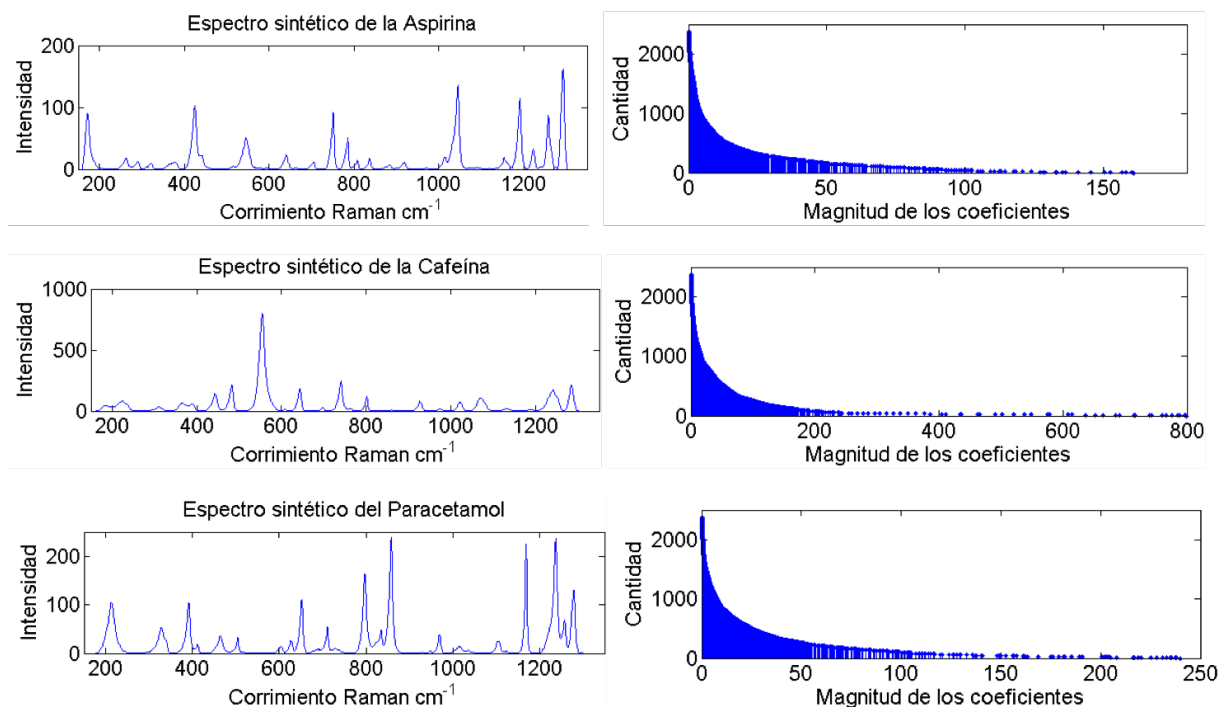


Figura 4.4: Análisis de dispersión de los espectros Raman sintéticos de la Aspirina, Cafeína y Paracetamol.

Realizando un análisis del porcentaje de coeficientes significativos de los espectros de las imágenes Raman sobre las cuales se realizan las simulaciones computacionales, se encontró que con sólo el 25 % de los coeficientes con mayor magnitud, el espectro mantiene sus características, tal como pue-

de observarse en la figura 4.5 en la cual se muestran los espectros sintéticos de tres componentes empleando el 100% de los coeficientes (2377) y sólo el 25% de los coeficientes significativos (594). De esta manera, se establece que la dispersión de la imagen de entrada puede ser representada por $S = \frac{1}{4}$, alcanzando PSNR superiores a 37 dB.

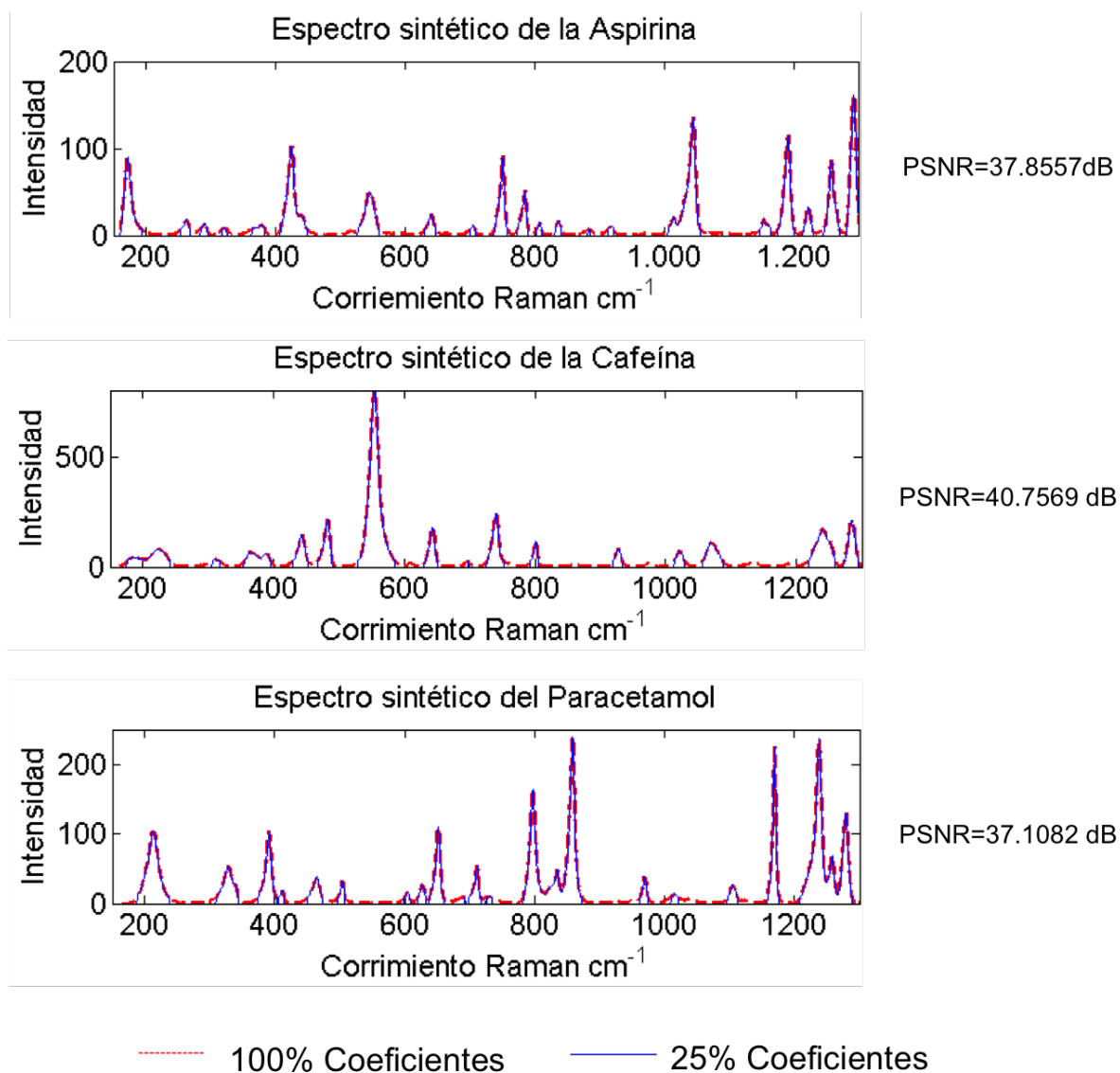


Figura 4.5: Comparación espectros con el 100% y el 25% de los coeficientes.

4.1.2. Diseño de aperturas codificadas

La literatura reporta que las aperturas codificadas más empleadas en el sistema CASSI son las aperturas aleatorias basadas en códigos booleanos, en cuyo caso, la transmitancia está determinada por $\frac{1}{K}$, para $K > 1$, donde K representa el número de proyecciones o disparos empleados por el sistema. Sin embargo, este tipo de aperturas codificadas sólo ha sido empleada en el caso en que la dimensiones espaciales son mayores que las dimensiones espectrales del cubo de datos, casos en los cuales, se tienen aproximadamente 24 bandas espectrales. Para el caso de estudio, donde la información espectral corresponde a corrimientos o espectros Raman, el número de bandas supera las dimensiones espaciales y las aperturas codificadas booleanas no presentan buenos rendimientos.

Considerando los resultados obtenidos en las simulaciones computacionales donde se analizaron la transmitancia de las aperturas codificadas y el radio de compresión y considerando el grado de dispersión del tipo de imágenes tratadas en el desarrollo del presente trabajo de investigación, se plantea, que para el sensado y la reconstrucción de imágenes Raman, se requiere un radio de compresión mínimo de 0.25 en cuyo caso la transmitancia mínima de las aperturas codificadas para que el sistema pueda realizar las reconstrucciones se establece en $\frac{1}{N}$, donde N es la dimensión espacial de la imagen a sensar.

En términos de las variables analizadas, la transmitancia en las aperturas codificadas empleadas para obtener imágenes Raman empleando aperturas codificadas y aplicando los conceptos de Sensado Compresivo, debe satisfacer:

$$Tr = \text{máx} \left(\frac{1}{K \left(\frac{1}{S} \right)}, \frac{1}{N} \right) \quad (4.3)$$

donde S , representa el grado de dispersión de la imagen de entrada, K el número de disparos y N la dimensión espacial de la imagen.

La función $m_{\text{máx}}$, garantiza que la mínima transmitancia de los códigos de apertura sea $\frac{1}{N}$. El término $\frac{1}{K \left(\frac{1}{S} \right)}$ indica que la transmitancia óptima es inversamente proporcional al número de disparos K y directamente proporcional a la dispersión de la imagen. Es importante señalar que los códigos óptimos encontrados difieren de los óptimos establecidos en la literatura, para los cuales se establece la transmitancia de $\frac{1}{K}$. La diferencia se debe al alto grado de dispersión que presentan, de manera general, los espectros raman que forman las imágenes, tanto en el dominio directo como en el dominio transformado.

Adicional al criterio de la transmitancia mínima, se proponen para el diseño de las aperturas codificadas dos condiciones adicionales:

1. Garantizar que un píxel de la imagen no sea sensado más de una vez, para lo cual, al realizar la suma de las aperturas codificadas empleadas por el sistema según el número de disparos, la frecuencia de sensado no puede ser superior a 1.
2. Garantizar que en cada disparo, sea sensado un píxel por fila, garantizando la transmitancia mínima de $\frac{1}{N}$. Lo anterior con el fin de garantizar que los píxeles sensados no se concentren una sola región de la imagen, si no que se distribuyan aleatoriamente sobre toda la dimensión de la misma.

La figura 4.6, muestra las aperturas codificadas diseñadas para una imagen de dimensiones espaciales de 32×32 para un radio de compresión de 0.25 o 8 disparos, caso para el cual, la transmitancia es $\frac{1}{32}$. Por otro lado, la figura 4.7 muestra la frecuencia de sensado por píxel al emplear las aperturas codificadas diseñadas y se puede observar claramente como se satisfacen ambas condiciones establecidas.

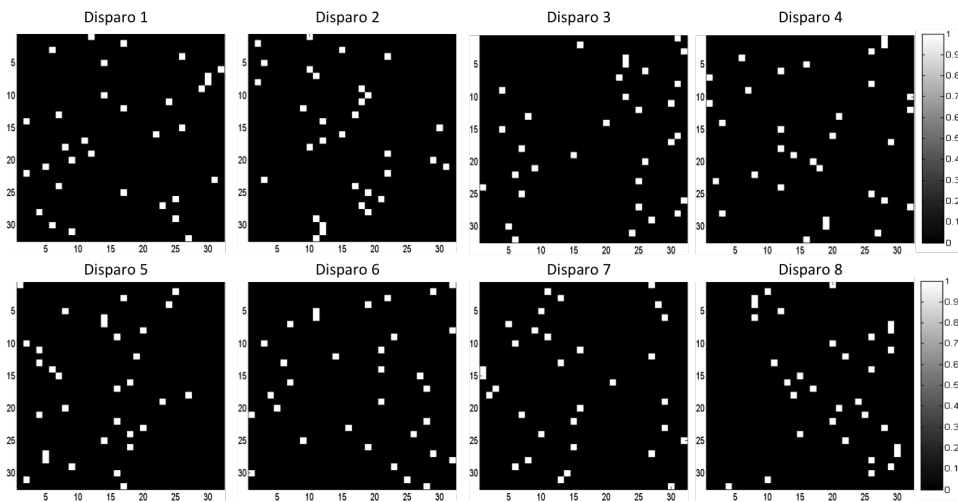


Figura 4.6: Aperturas codificadas diseñadas para una imagen de dimensiones espaciales de 32×32 empleando aperturas codificadas de transmitancia $\frac{1}{32}$ y un radio de compresión de 0.25 (8 disparos).

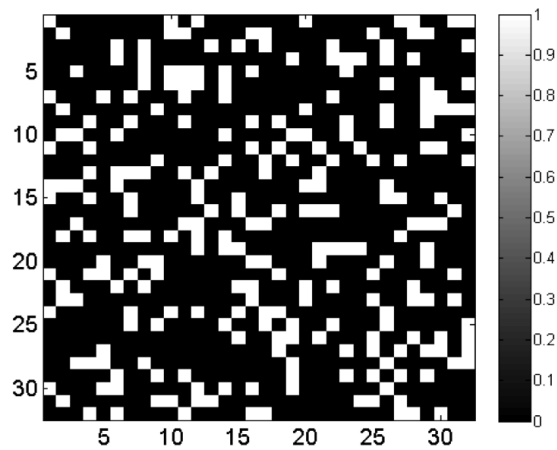


Figura 4.7: Frecuencia de sensado por píxel con las aperturas codificadas diseñadas, para una imagen de dimensiones espaciales de 32×32 empleando aperturas codificadas de transmitancia $\frac{1}{32}$ y un radio de compresión de 0.25.

4.2. Espectrómetro Raman compresivo

Los componentes principales del sistema simulado como espectrómetro Raman que emplea los conceptos de sensado compresivo mediante el uso de aperturas codificadas son la fuente de excitación, la apertura codificada, el elemento de dispersión y el detector. El sistema se basa en arquitecturas diseñadas por el Grupo de Investigación en Procesado de Señales multidimensionales de la Universidad de Delaware [54, 55], realizando modificaciones a los componentes teniendo en cuenta la aplicación a la Espectroscopia Raman.

La figura 4.8 muestra un dibujo esquemático del diseño propuesto para el sistema compresivo de imágenes Raman, basado en aperturas codificadas. A continuación se resumen las características de sus componentes.

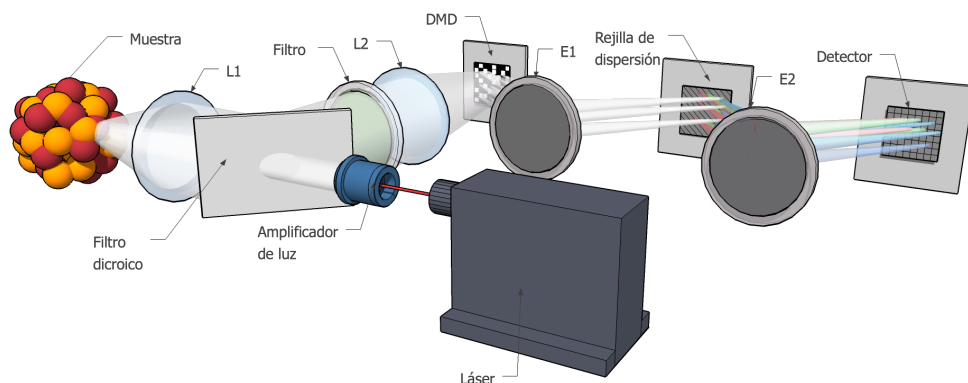


Figura 4.8: Dibujo esquemático del sistema compresivo de imágenes Raman, basado en aperturas codificadas

4.2.1. Fuente de excitación

Una apropiada selección de la fuente de excitación es necesaria para evitar los problemas de fluorescencia presentados durante el fenómeno Raman. De

manera general, la fluorescencia disminuye al moverse del ultravioleta o visible al infrarrojo cercano [28]. La fuente de excitación propuesta para el sistema es un láser diodo de 758 nm con una potencia de excitación de 100 mW y control de potencia de 100 %, 50 %, 25 % y 1 % y cuyo tamaño del haz es aumentado con un amplificador de luz que modula el tamaño del haz de excitación alcanzando hasta 25 mm .

4.2.2. Aperturas Codificadas - DMD

El sistema CASSI convencional emplea fotomáscaras para implementar las aperturas codificadas, sin embargo, el proceso de reemplazar las fotomáscaras en un sistema de múltiples capturas consume tiempo, dado que después de cada instalación el sistema necesita ser re-alineado. Con el fin de eliminar el proceso de re-alineación, el sistema propuesto emplea un sistema de micro-espejos (DMD, por sus siglas en inglés de Digital Micromirror Device), el cual es un modulador espacial de luz que permite implementar un número ilimitado de aperturas codificadas sin necesidad de realizar modificaciones ópticas en el sistema.

El DMD es un equipo óptico que contiene miles de espejos microscópicos ubicados en una matriz rectangular, los cuales pueden tener estados de activado/desactivado. En el estado activado (12°), el DMD refleja la luz en la dirección del sensor de captura, mientras que, en el estado desactivado (-12°) se refleja la luz en una dirección fuera de la ruta de sensado. De esta manera, el DMD permite modular la intensidad, simulando las aperturas codificadas mediante la programación de sus micro-espejos. Este dispositivo puede emplear diferentes recubrimientos para proteger los micro-espejos y optimizar el espectro de reflectancia para diferentes longitudes de onda, las cuales incluyen, visible, infrarrojo y ultravioleta. La figura 4.9 muestra dos imágenes del DMD, en las cuales pueden observarse los micro-espejos y el sistema mecánico de su funcionamiento.

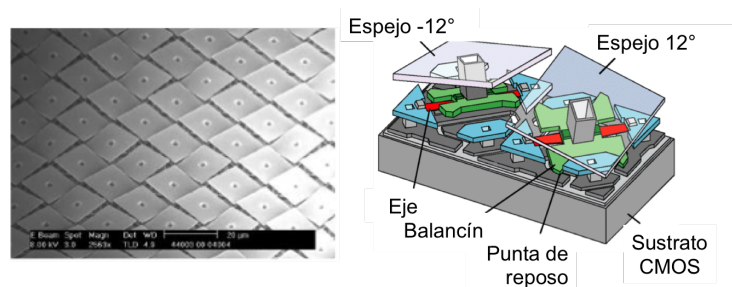


Figura 4.9: Imágenes del DMD. Izquierda: Imagen SEM de la superficie del DMD. Derecha: Dibujo esquemático del sistema mecánico de los micro-espejos del DMD [54].

El DMD propuesto para el sistema es un dispositivo de Texas Instrument, DiscoveryTM 1100 0.7 XGA (Extender Graphics Array). La parte central del mismo es una matriz (1024(horizontal) × 768 (vertical)) de microespejos de aluminio de $13.68 \mu m$. Cada espejo puede ser desviado de forma individual en un ángulo alrededor de un eje diagonal con bisagras. La condición de deflexión de cada espejo es controlada por un circuito de direccionamiento CMOS y el ángulo de deflexión máximo es de $\pm 12^\circ$.

4.2.3. Elemento de dispersión

En el sistema CASSI tradicional, el elemento de dispersión empleado para separar las frecuencias espacialmente es un prisma, sin embargo, teniendo en cuenta que mediante la Espectroscopia Raman se esperan obtener información espectral detallada, es necesario reemplazar el prisma por una red o rejilla de reflexión la cual permite obtener una mayor dispersión de la luz incidente. Se propone el uso de una rendija de dispersión de 600 gr/mm con un “blaze” o longitud de onda de radiación de 750 nm , THORLABS GR 50-0608, el cual tiene mayores porcentajes de eficiencia para rango espectral deseado (830 a 930 nm) tal como puede observarse en la figura 4.10.

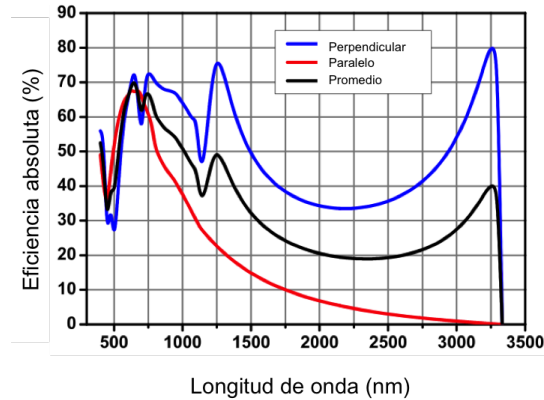


Figura 4.10: Gráfica de la eficiencia absoluta de la rejilla de 600 gr/mm y "blaze wavelength" de 750 nm .

4.2.4. Detector

El detector seleccionado es el empleado en el Espectrómetro Raman del Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular de la Universidad Industrial de Santander. Es un detector CCD - Synapse 1024×256 de HORIBA con un tamaño de píxel es de $26 \mu\text{m}$ y respuesta espectral efectiva en el rango de 200 a 930 nm , tal como puede observarse en la figura 4.11. Teniendo en cuenta que el tamaño de cada píxel del DMD es de $13.68 \mu\text{m}$ y el tamaño del píxel del detector de $26 \mu\text{m}$, se pueden emplear 2×2 píxeles del DMD ($27,36 \times 27,36 \mu\text{m}^2$) para representar un píxel en el detector, por lo tanto se debe configurar la magnificación de los espejos para cubrir la diferencia y garantizar la alineación en los tamaños de los píxeles.

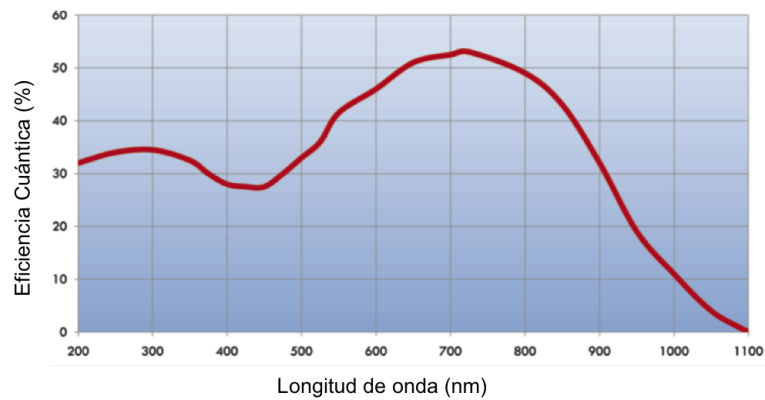


Figura 4.11: Respuesta espectral del detector Synapse 1024 × 256 píxeles.

4.2.5. Óptica en general

La óptica del sistema debe ser diseñada para suministrar, transmitir y proyectar luz a partir de un objetivo de 25 mm . Los lentes de transmisión L1 y L2 (ver figura 4.8) tienen dos funciones, entregar la luz de láser de excitación a la muestra y re-transmitir la luz dispersada desde la muestra al plano del DMD que modela las aperturas codificadas. El filtro dicroico es el encargado de permitir un cambio bidireccional de excitación/colección a la muestra. La fuente de excitación pasa a través del filtro dicroico rectangular (cuya banda de transmisión es de 400 a 790 nm , la cual garantiza que la longitud del láser de 785 nm es transmitida y con bandas de reflexión de 830 a 1300 nm , realizando el bloqueo de la dispersión elástica o Rayleigh de la muestra y limitando el rango espectral a partir de los 830 nm) y es focalizada sobre la muestra por el lente L1. La luz dispersada por la muestra es colimada por el mismo lente L1 y reflejada por el filtro dicroico y proyectada hacia el DMD por medio del lente L2. Un filtro pasa banda de 830 a 1000 nm filtra la luz colimada eliminando la dispersión Rayleigh de la luz. Para el diseño basado en la configuración Czerny-Tuener, un par de espejos idénticos colimadores y re-formadores de imágenes deben ser empleados. El espejo esférico E1 actúa como colimador, capturando los haces reflejados por el DMD y reflejándolos hacia la rejilla de dispersión. Esta última, los difracta en función de su longitud de onda y el

espejo E2 actúa como condensador situando la radiación difractada sobre el plano focal del detector. Toda la óptica debe contar con recubrimientos anti-reflexión para el rango espectral estipulado. Para el diseño mas detallado del sistema, se propone el uso de la herramienta óptica Zemax.

Resumiendo, el sistema consiste en una fuente de excitación o láser de 785 nm , cuyo haz pasa por un amplificador que permite modular el tamaño del haz de excitación sobre la muestra, alcanzando 25 mm que corresponde al tamaño de la óptica del sistema. El tipo de espectrómetro propuesto sigue la configuración Czerny-Turner, la cual es la configuración más frecuente en los espectrómetros, gracias a que permite acomodar los elementos ópticos en un espacio reducido. El rango espectral a manejar es de 830 a 930 nm ($690.36 - 1986.17\text{ cm}^{-1}$) limitados por las características del filtro dicróico y el rango espectral efectivo del detector. Dados los 1024 píxeles del detector, la resolución espectral teórica es de 0.09 nm/pixel .

Capítulo 5

Simulaciones y Resultados

Con el fin de estudiar el desempeño del sistema CASSI para la adquisición de espectros Raman que permitan realizar imágenes de clasificación se realizaron diferentes simulaciones. Para esto, se emplearon dos cubos de datos sintéticos y dos cubos de datos reales f , con resolución espacial de 16×16 y 32×32 respectivamente y $L = 1024$ bandas espectrales. Los cubos de datos sintéticos hacen parte de una imagen de una tableta farmacéutica cuya información espacial contiene tres diferentes compuestos, aspirina (en rojo), cafeína (en verde) y paracetamol (en azul) como se muestra en la Figura 5.1. La información espectral de este cubo de datos contiene los espectros Raman de cada uno de estos tres compuestos, aspirina, cafeína y paracetamol en el rango espectral de 500 cm^{-1} a 993 cm^{-1} , los cuales pueden ser vistos en las figuras 5.2, 5.3 y 5.4 respectivamente. Por otro lado, los cubos de datos reales fueron tomados con el equipo LabRAM HR Evolution del Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular de la Universidad Industrial de Santander de una pastilla conocida comercialmente como sevedol y cuyos tres componentes principales son los mismos de los cubos de datos sintéticos. El rango espectral de los cubos reales es de 417.01 cm^{-1} a 1159.87 cm^{-1} . Las 256 o 1024 firmas espectrales de cada cubo real pueden ser espectros puros o combinaciones de dos o tres espectros de sus correspondientes compuestos.

El proceso de sensado fue simulado empleando tanto las aperturas tradicionales (definiendo el valor de transmitancia óptima) como las aperturas codificadas óptimas expuestas en el Capítulo 4. En ambos casos, las entradas de

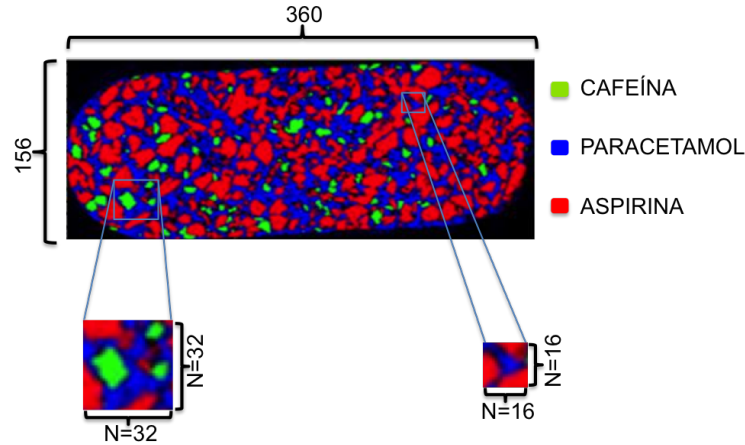


Figura 5.1: Cubo de datos Raman Sintético. Tres componentes espaciales, aspirina en rojo, cafeína en verde y paracetamol en azul.

las aperturas son valores booleanos, $T_{ij}^\ell \in \{0, 1\}$. Para el proceso de reconstrucción se realizó la comparación del desempeño de los algoritmos TwIST y GPSR cuyas funciones de minimización siguen la forma dada por las ecuaciones (3.12) y (3.13) expuestas en capítulo 3. En ambos casos, el parámetro de regularización fue seleccionado de manera que cada simulación utiliza el valor que resulta en la mejor reconstrucción posible. Teniendo en cuenta que la generación de los códigos de apertura se realiza mediante un proceso aleatorio, los resultados que se presentan en esta sección son promedios obtenidos al realizar varias repeticiones de cada experimento. Por otro lado, se empleó una base de representación 3D, $\Psi = \Psi_{2D} \otimes \Psi_C$, donde Ψ_C es la base Coseno y Ψ_{2D} es una base Wavelet Symmplet 8 en 2D. Los resultados de las simulaciones son analizados en términos de la relación señal a ruido (PSNR). Se presenta principalmente el análisis de la información espectral de las reconstrucciones, dado que esta representa la información relevante para realizar una clasificación química. Todas las simulaciones fueron realizadas empleando un equipo de computo con un procesador Intel Core i7 3960X de 3.30 GHz, 12 núcleos y 32 GB de memoria RAM.

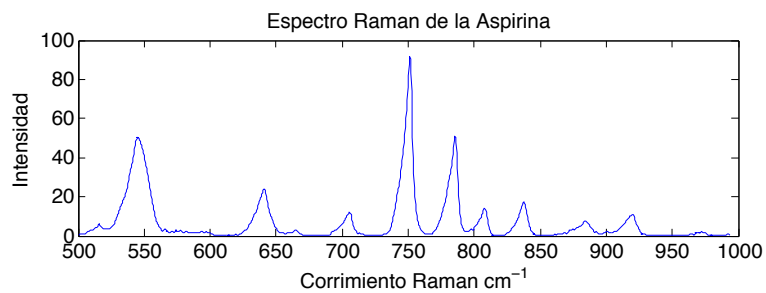


Figura 5.2: Espectro Raman de la Aspirina.

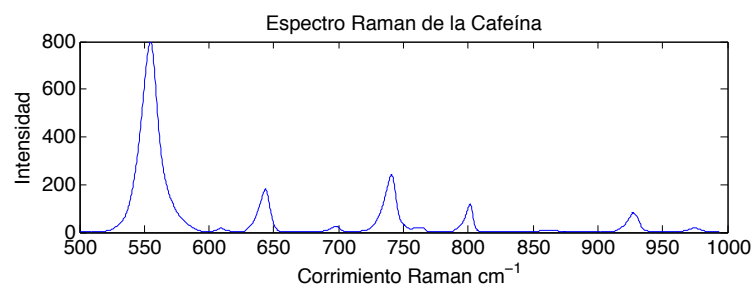


Figura 5.3: Espectro Raman de la Cafeína.

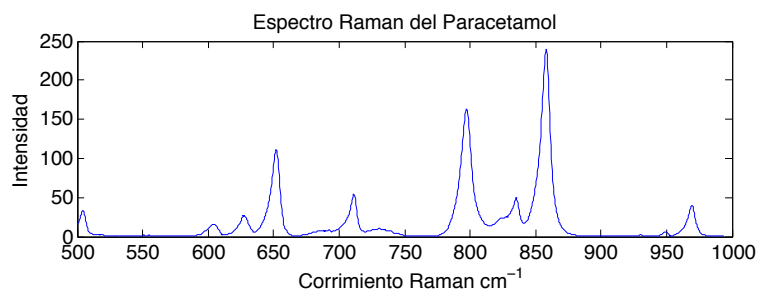


Figura 5.4: Espectro Raman del Paracetamol.

5.1. Determinación del algoritmo de reconstrucción

Con el fin de evaluar el desempeño de los algoritmos TwIST y GPSR propuestos para realizar el proceso de reconstrucción, se trabajó inicialmente con el cubo de datos sintético de $32 \times 32 \times 1024$, empleando aperturas codificadas aleatorias y variando el radio de compresión dado por la ecuación 4.2. La figura 5.5 representa el PSNR obtenido al analizar la información espectral del cubo de datos reconstruido como función del radio de compresión.

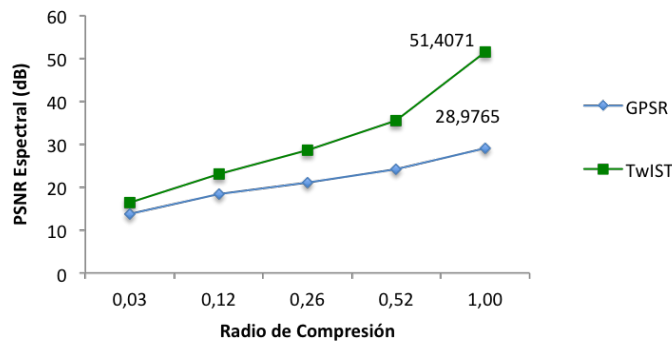


Figura 5.5: Comparación entre los algoritmos GPSR Y TwIST.

Las tablas 5.1 y 5.2 resumen los resultados del análisis espectral de las reconstrucciones mostrados en la figura 5.5 empleando los algoritmos GPSR y TwIST respectivamente. El valor óptimo los parámetros de regularización τ y $\Phi_{(TV)}$ de las ecuaciones (3.12) y (3.14) para los algoritmos GPSR y TwIST respectivamente y el valor de la transmitancia óptima de las aperturas codificadas fueron determinados para los diferentes radios de compresión.

Los resultados muestran que el algoritmo TwIST supera de manera significativa los PSNR obtenidos por el algoritmo GPSR, por esta razón, las demás simulaciones se realizan empleando el TwIST como algoritmo de reconstrucción.

Radio de compresión	Transmitancia óptima	τ	PSNR (dB)
0.03	0.225	$4.00E^{-6}$	13.7632
0.13	0.125	$4.00E^{-4}$	18.2857
0.25	0.125	$4.00E^{-4}$	21.1111
0.51	0.125	$1.00E^{-4}$	24.1257
1	0.125	$4.00E^{-4}$	28.9765

Cuadro 5.1: GPSR- Análisis de resultados de reconstrucción a nivel espectral.

Radio de compresión	Transmitancia óptima	$\Phi_{(TV)}$	PSNR (dB)
0.03	0.3	15	16.3821
0.13	0.1	8	23.0679
0.25	0.125	8	28.5752
0.51	0.225	8	36.9214
1	0.1	1	51.4071

Cuadro 5.2: TwIST- Análisis de resultados de reconstrucción a nivel espectral.

5.2. Análisis de la transmitancia en aperturas codificadas aleatorias

Una vez establecido TwIST como el algoritmo a emplear en los procesos de reconstrucción, se realizó el análisis de la transmitancia óptima de las aperturas codificadas tradicionales o aleatorias (dada por la ecuación 4.1) empleando ambos cubos de datos sintéticos, $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$, y teniendo en cuenta el radio de compresión o número de capturas establecido en cada simulación. Lo anterior con el fin de establecer un marco de referencia para realizar la comparación de los resultados obtenidos con las aperturas codificadas diseñadas expuestas en el capítulo 4.

Los resultados numéricos de los análisis de las reconstrucciones a nivel espectral se encuentran resumidos en la tabla 5.3. Los resultados permiten establecer valores óptimos de transmitancia de 0.1 y 0.125. Los PSNR aumentan al incrementar el radio de compresión cuyo máximo valor analizado fue de 0.51 es decir, realizando una reducción aproximada del 50 % en el número de muestras establecido por el criterio de Nyquist para realizar el proceso de reconstrucción.

Cubo de Datos	Radio de Compresión	Transmitancia óptima	PSNR (dB)
$16 \times 16 \times 1024$	0.13	0.1	19.9357
	0.25	0.1	27.5535
	0.51	0.1	38.0908
$32 \times 32 \times 1024$	0.13	0.1	23.0679
	0.25	0.125	28.5752
	0.51	0.125	35.5224

Cuadro 5.3: Análisis de la información espectral de las reconstrucciones de los cubos de datos sintéticos empleando aperturas codificadas aleatorias.

El análisis gráfico de la información de las reconstrucciones empleando los parámetros resumidos en la tabla 5.3 puede observarse en la figura 5.6. La calidad de los espectros de los cubos de datos reconstruidos fueron analizados. Para esto, un píxel o punto espacial de cada cubo de datos sintético fue seleccionado de manera aleatoria y se graficó su correspondiente espectro. La figura 5.6 muestra la comparación de las firmas espectrales del cubo de datos original (en rojo) y de las reconstrucciones (en azul). Las columnas a) y b) muestran los espectros correspondientes a los píxeles espaciales (4, 8) y (8, 13) para los cubos de datos sintéticos de $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente. En la figura 5.6, puede notarse claramente un aumento en la calidad de las reconstrucciones espectrales con el aumento del radio de compresión. Es importante resaltar que los espectros obtenidos del cubo de datos una vez realizada la reconstrucción son muy cercanos a los originales, lo cual

permitiría realizar una correcta clasificación química tal como se muestra en la sección 5.5.

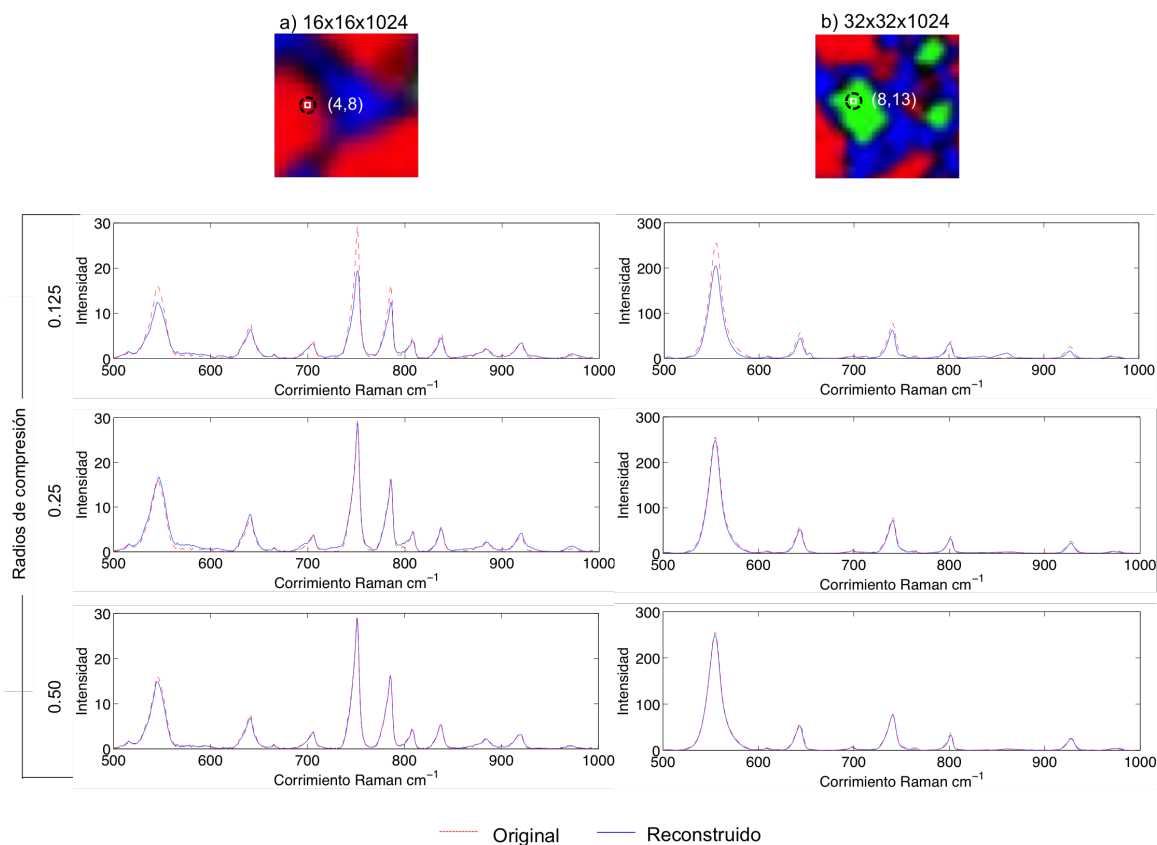


Figura 5.6: Información espectral de las reconstrucciones del cubo sintético con aperturas codificadas aleatorias. Radios de compresión de 0.125, 0.25 y 0.5. Puntos espaciales a) (4, 8) y b) (8, 13) para los cubos de datos sintéticos de tamaño $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente.

5.3. Reconstrucciones del cubo de datos sintético con las aperturas codificadas diseñadas

Empleando las aperturas codificadas diseñadas en el capítulo 4, se realizó el proceso de sensado y reconstrucción. Los resultados numéricos de los análisis a nivel espectral de las reconstrucciones obtenidas se encuentran resu-

midos en la tabla 5.4. Por otro lado, la figura 5.7 representa la comparación de los PSNR obtenidos al emplear aperturas codificadas aleatorias (resultados mostrados en la sección 5.2) y las aperturas codificadas diseñadas. Como puede observarse, al aumento en los PSNR obtenidos al realizar la optimización de las aperturas codificadas va desde los 5 dB hasta los 19 dB. Lo anterior demuestra la superioridad de las aperturas codificadas diseñadas frente las aperturas codificadas aleatorias o tradicionales empleadas por el sistema CASSI.

Cubo de Datos	Radio de Compresión	PSNR (dB)
16 × 16 × 1024	0.13	25.2613
	0.25	40.6218
	0.51	53.3794
32 × 32 × 1024	0.13	27.8650
	0.25	38.2761
	0.51	52.9698

Cuadro 5.4: Análisis de la información espectral de las reconstrucciones de los cubos de datos sintéticos empleando las aperturas codificadas diseñadas.

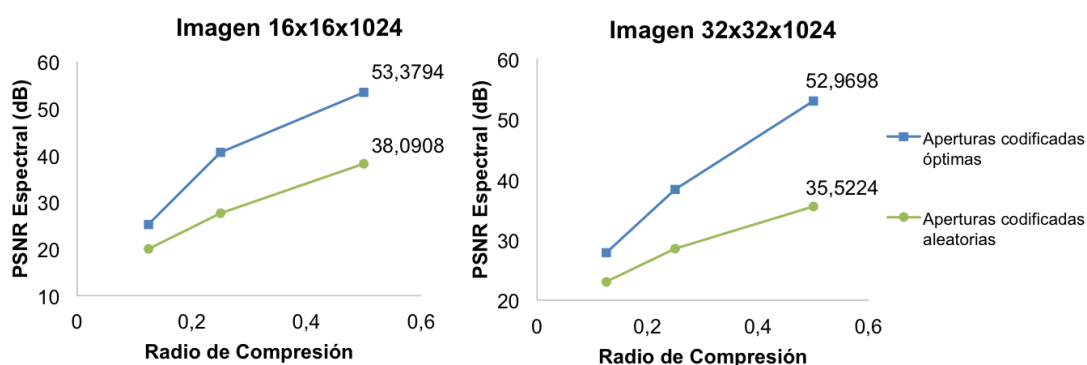


Figura 5.7: Comparación de PSNR obtenidos con las aperturas codificadas aleatorias y las aperturas codificadas diseñadas.

La figura 5.8 muestra la comparación de las firmas espectrales del cubo de datos original (en rojo) y del cubo de datos reconstruido (en azul). Las columnas a) y b) muestran los espectros correspondientes a dos píxeles o puntos espaciales (4, 8) y (8, 13) para los cubos de datos sintéticos de $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente; por filas se muestran los espectros obtenidos con diferentes radios de compresión. En este caso, se graficaron los espectros de los mismos píxeles que fueron seleccionados de manera aleatoria para el caso de las aperturas codificadas aleatorias, con el fin de facilitar la comparación visual de los resultados obtenidos en ambos casos.

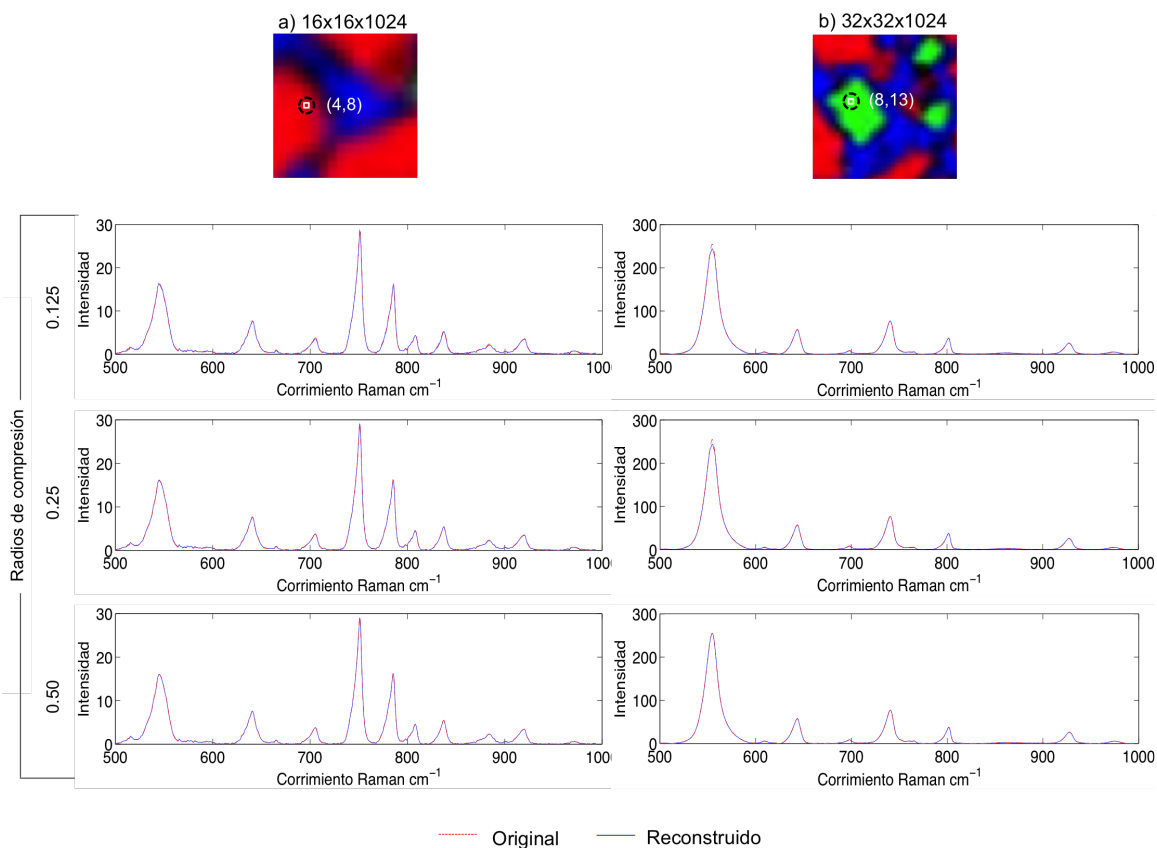


Figura 5.8: Información espectral de las reconstrucciones del cubo sintético con las aperturas codificadas diseñadas. Radios de compresión de 0.125, 0.25 y 0.5. Puntos espaciales a) (4, 8) y b) (8, 13) para los cubos de datos sintéticos de tamaño $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente.

5.4. Reconstrucciones del cubo de datos real

Con el fin de verificar los resultados presentados en las secciones 5.2 y 5.3, se realizó el proceso de sensado y reconstrucción de dos cubos de datos reales con las aperturas codificadas aleatorias (una vez determinada su transmitancia óptima) y las aperturas codificadas diseñadas. En este caso, las 256 y 1024 firmas espectrales contenidas en los cubos de datos reales de $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente, pueden ser completamente diferentes lo cual representa un mayor reto y una simulación más cercana al proceso de sensado real. Los resultados numéricos de los análisis a nivel espectral de las reconstrucciones obtenidas se encuentran resumidos en la tabla 5.5. Como puede observarse, los PSNR alcanzados con las aperturas codificadas diseñadas superan hasta en 19 dB los PSNR obtenidos con las aperturas codificadas aleatorias para un radio de compresión de aproximadamente el 50 %. Valores de PSNR superiores a los 25 dB permiten garantizar la calidad de los espectros necesaria para realizar un posterior proceso de clasificación de la muestra bajo análisis. La figura 5.9 representa nuevamente la comparación de las firmas espectrales de dos píxeles elegidos de manera aleatoria de los cubos de datos reales y los cubo de datos reconstruidos. La alta calidad de las firmas espectrales obtenidas se hace notoria ante su completo solapamiento con las firmas espectrales del cubo real.

Cubo de datos	Radio de Compresión	PSNR (dB)	
		Aperturas aleatorias	Aperturas diseñadas
$16 \times 16 \times 1024$	0.13	30.3612	26.5854
	0.25	36.6887	40.1103
	0.51	39.8073	53.6494
$32 \times 32 \times 1024$	0.13	31.8260	32.82478
	0.25	33.8085	39.0721
	0.51	35.8969	50.9346

Cuadro 5.5: Análisis de la información espectral de las reconstrucciones de los cubos de datos reales empleando las aperturas codificadas aleatorias y diseñadas.

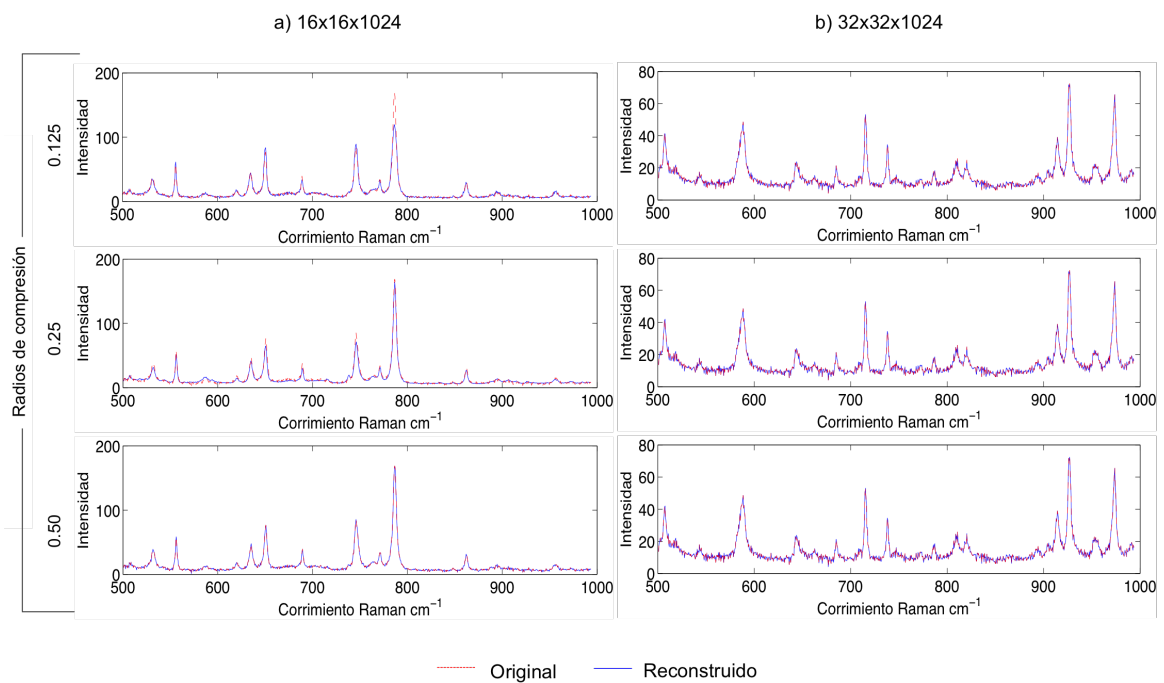


Figura 5.9: Información espectral de las reconstrucciones del cubo real con las aperturas codificadas diseñadas. Radios de compresión de 0.125, 0.25 y 0.5. Puntos espaciales a) (8,3) y b) (16,9) para los cubos de datos reales de tamaño $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente.

5.5. Análisis de tiempos de adquisición

El tiempo de adquisición de un cubo de datos mediante un sistema Raman de barrido por punto o por línea, está determinado por el tamaño del área de escaneo (o número de píxeles) y el tiempo de integración del detector. Por otro lado, para el sistema propuesto en el presente proyecto de investigación, los tiempos de adquisición dependen del número de capturas o shots necesarios para realizar el proceso de sensado y reconstrucción y también del tiempo de integración del detector.

Según los resultados mostrados en las secciones 5.3 y 5.4, los espectros de las reconstrucciones cuyos PSNR son superiores a 30 dB presentan gran

similitud con los espectros originales, casos obtenidos con los radios de compresión de 0.25 y 0.51 para ambas imágenes, o en términos de shots, 4 y 8, y 16 y 32 para las imágenes de 16×16 y 32×32 respectivamente.

La tabla 5.6 resume los tiempos dependientes de T , donde T representa el tiempo de integración del detector, para los diferentes sistemas de adquisición de cubos de espectros Raman. Como puede observarse, los tiempos de adquisición mediante el sistema propuesto supera de manera significativa los tiempos de los sistemas tradicionales. Aún con un radio de compresión de 0.50 y comparando con un sistema de adquisición por línea, el tiempo se reduce a la mitad. La ganancia mencionada se hace cada vez mas representativa al aumentar el tamaño de la imagen.

Cubo de Datos	Escaneo por punto	Escaneo por línea	CASSI 0.25 Rc	CASSI 0.51 Rc
$16 \times 16 \times 1024$	$256T$	$16T$	$4T$	$8T$
$32 \times 32 \times 1024$	$1024T$	$32T$	$8T$	$16T$

Cuadro 5.6: Resumen de los tiempos de adquisición de un cubo de espectros Raman por los métodos tradicionales y por el sistema CASSI propuesto.

5.6. Simulación del proceso de clasificación basada en espectroscopia Raman

Un proceso de clasificación química a partir de espectros Raman se realiza, de manera general, por comparación entre el espectro desconocido y una serie de espectros conocidos, llamados patrones. Con el fin de corroborar que los espectros reconstruidos mediante el uso del sistema CASSI, permiten realizar una clasificación química eficiente, se tomaron los espectros puros de los tres componentes presentes en los cubos de datos, aspirina, cafeína y paracetamol, empleando el equipo LabRAM HR Evolution, y estos espectros se emplearon como patrones en el proceso de clasificación. En cada espectro

patrón se definieron dos picos característicos con sus respectivas longitudes de onda, de manera que en los espectros restantes no existen picos representativos a esas mismas longitudes. Los picos característicos seleccionados se presentan en longitudes de onda de 427 cm^{-1} y 1041 cm^{-1} para la aspirina, 444 cm^{-1} y 482 cm^{-1} para la cafeína y 501 cm^{-1} y 848 cm^{-1} para el paracetamol, tal como puede observarse en las figuras 5.10, 5.11 y 5.12 respectivamente.

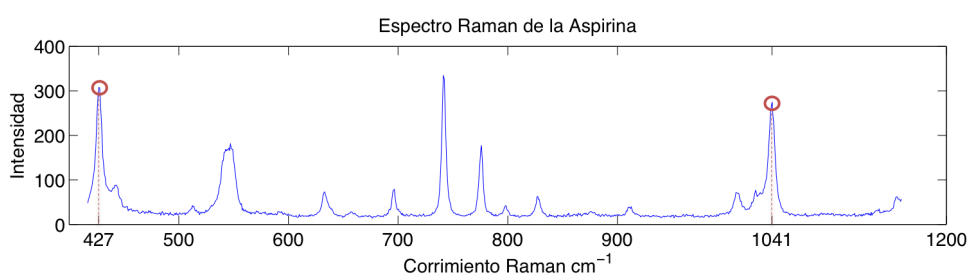


Figura 5.10: Espectro Raman real de la Aspirina.

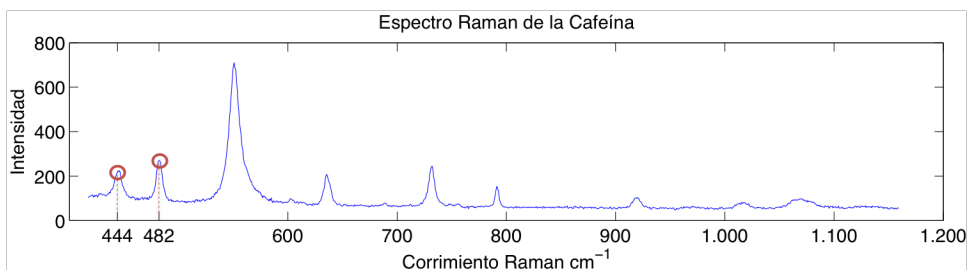


Figura 5.11: Espectro Raman real de la Cafeína.

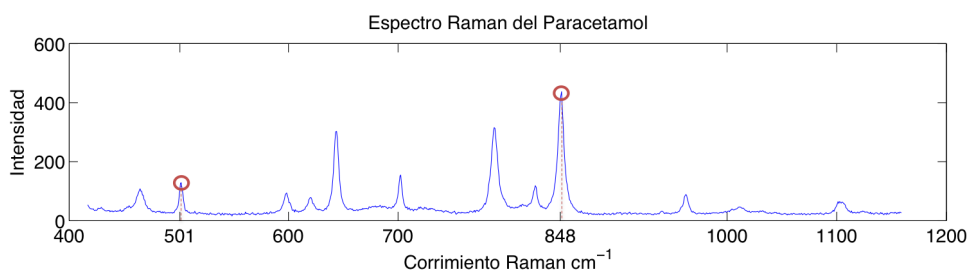


Figura 5.12: Espectro Raman real del Paracetamol.

Una vez definidos los picos de referencia, cada uno de los píxeles de los cubos de datos de $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$, reales y reconstruidos, son analizados. El análisis se basó en la comparación de los picos característicos para cada uno de los espectros de cada píxel, en búsqueda de los picos característicos establecidos para cada uno de los diferentes compuestos puros. De acuerdo a los picos encontrados, a cada píxel (x, y) se le asignó un valor de intensidad. Teniendo en cuenta que hay 3 posibles componentes, se definieron 7 valores de intensidad asociados a la presencia de uno de los componentes, parejas de componentes o los tres componentes en el mismo punto. Los valores de intensidad según los componentes presentes son definidos a continuación:

1. Aspirina
2. Paracetamol
3. Cafeína
4. Aspirina - Paracetamol
5. Aspirina - Cafeína
6. Paracetamol - Cafeína
7. Aspirina - Paracetamol - Cafeína

La figura 5.13 muestra los resultados obtenidos al realizar el proceso mencionado. Como puede observarse, con el aumento del radio de compresión, la imagen de clasificación obtenida presenta mayor semejanza con la imagen original, lo cual puede corroborarse con los valores de PSNR también mostrados en la figura. El porcentaje de clasificación, definido como la relación entre el número de píxeles clasificados correctamente y el número de píxeles totales de la imagen, también es analizado y los resultados mostrados en la figura 5.13. Lo anterior demuestra que los espectros Raman obtenidos mediante el proceso de sensado y reconstrucción propuesto mediante el uso del

sistema CASSI pueden ser empleados para realizar clasificaciones químicas de manera eficiente.

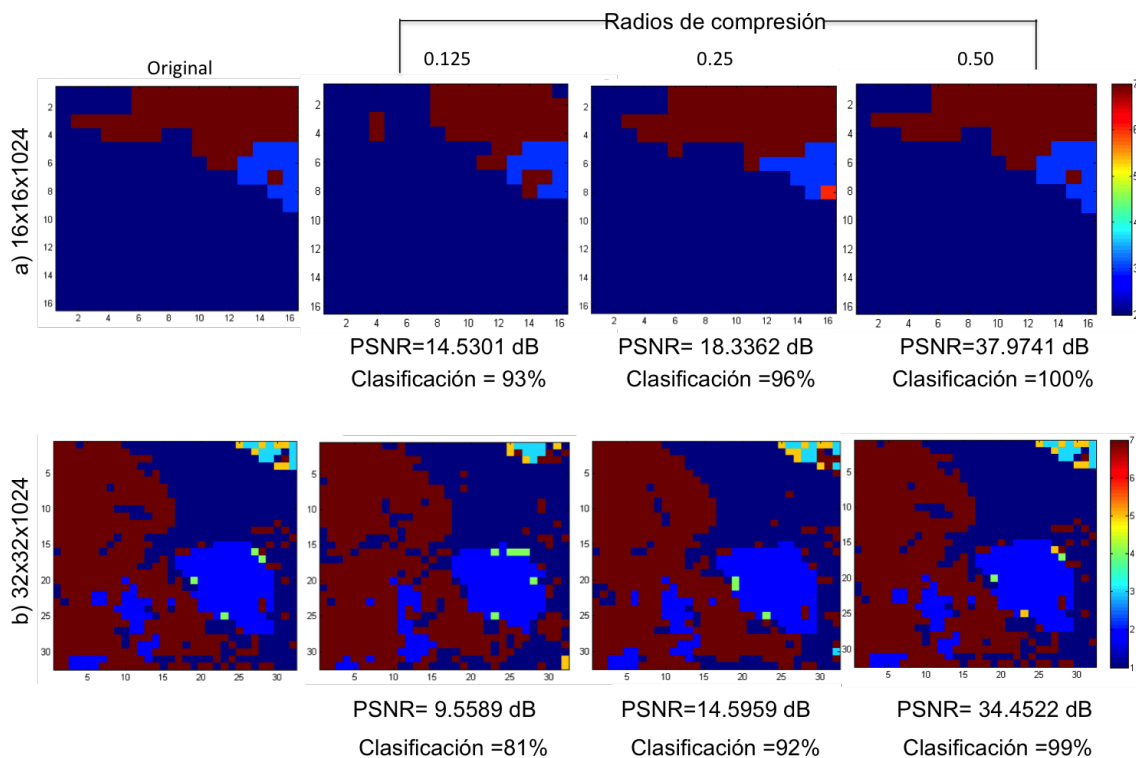


Figura 5.13: Imagen de clasificación química. Radios de compresión de 0.125, 0.25 y 0.5 para los cubos de datos de tamaño a) $16 \times 16 \times 1024$ y b) $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente.

Capítulo 6

Conclusiones, Contribuciones y Trabajo futuro

6.1. Conclusiones

El sistema CASSI fue empleado de manera satisfactoria para realizar el sentido y reconstrucción de diversas imágenes o cubos de datos obtenidos por Espectroscopia Raman. Las simulaciones realizadas, demuestran que es posible emplear un espectrómetro de aperturas codificadas que opere bajo los conceptos de la técnica de sentido compresivo con el fin de obtener información espectral de una escena sin necesidad de realizar un barrido punto por punto o línea por línea, tal como lo hacen los espectrómetros Raman tradicionales.

El diseño de las aperturas codificadas empleadas en el sistema CASSI, se basó en el análisis de variables tales como la transmitancia, el número de disparos realizados por el sistema y el grado de dispersión de la imagen de entrada. Con base al análisis realizado, se pudo establecer que la mínima transmitancia de las aperturas codificadas (las cuales deben seguir una distribución aleatoria o Bernoulli para el presente caso), está dado por la relación $\frac{1}{N}$ donde N , representa la dimensión espacial de la imagen que será procesada.

El análisis de las simulaciones realizadas muestran que es posible obtener imágenes raman con PSNR por encima de los 30 dB con radios de compresión iguales o superiores a 0.25, lo cual representa una reducción del 75 % en las medidas que se tomarían al realizar el sensado con el tradicional criterio de Nyquist. Así mismo, las firmas espectrales obtenidas una vez realizada la reconstrucción de la imagen Raman, son muy cercanas a las firmas de la imagen original, lo cual permite realizar de manera satisfactoria un posterior proceso de clasificación química.

Por último, los tiempos de adquisición mediante el sistema propuesto, superan de manera significativa los tiempos de los sistemas tradicionales. Aún con un radio de compresión de 0.50 (mayor radio de compresión recomendado) el sistema propuesto se hace 32 y 64 veces más rápido que los espectrómetros por punto para realizar el sensado de imágenes de $16 \times 16 \times 1024$ y $32 \times 32 \times 1024$ respectivamente. Lo anterior demuestra que es posible y se justifica realizar la aplicación de la técnica de Sensado Compresivo en Espectroscopia Raman de Imágenes, pues posibilita la aplicación de esta técnica espectroscópica en diversas escenas cuyas características estáticas no puedan mantenerse por tiempos prolongados.

6.2. Contribuciones

- **Artículo en Revista Dyna (Categoría A):** Diana Galvis, Yuri Mejía, and Henry Arguello. Efficient reconstruction of Compressive Raman Imaging Spectroscopy based on Compressive Sensing (Aceptado). Revista Dyna, 80(183), 2014.
- **Participación en Evento:** Diana Galvis and Henry Arguello. Transmittance Analysis in Coded Aperture Compressive Raman Spectroscopy Imaging. XVIII Simposio Internacional de Tratamiento de Señales, Imágenes y Visión Artificial (STSIVA), Bogota-Colombia, Septiembre de 2013.

-
- **Publicación de Conferencia:** Diana Galvis and Henry Arguello. Transmittance Analysis in Coded Aperture Compressive Raman Spectroscopy Imaging. In Image, Signal Processing, and Artificial Vision (STSIVA), number 1, pages 1–5. IEEE, 2013.

6.3. Trabajo Futuro

El desarrollo del presente proyecto de investigación representa una primera etapa de simulaciones computacionales de un sistema propuesto para la adquisición de imágenes hiperespectrales Raman basados en la técnica de Sensado Compresivo mediante el empleo de aperturas codificadas. Los resultados demuestran que se justifica realizar la implementación de esta técnica en la Espectroscopia Raman de Imágenes. El trabajo futuro consiste en la implementación del sistema real para lo cual se planea realizar una propuesta de investigación que permita la adquisición de los equipos necesarios o realizar un convenio con el Grupo de Investigación en Procesado de Señales Multidimensionales de la Universidad de Delaware, Estados Unidos.

Se espera que el presente trabajo de investigación sirva como base para futuros proyectos de pregrado, maestría y doctorado que busquen realizar diferentes diseños de la arquitectura óptica y su implementación real para la comparación de los resultados obtenidos mediante las simulaciones numéricas.

Bibliografía

- [1] C. Correa. Procesamiento por bloques de señales espectrales mediante la técnica de Compressive Sensing. Master's thesis, Escuela de Ingeniería de Sistemas e Informática, Universidad Industrial de Santander, 2013.
- [2] J. Qin, K. Chao, M. S. Kim, R. Lu, and T. F. Burks. Hyperspectral and multispectral imaging for evaluating food safety and quality. *Journal of Food Engineering*, 118(2):157–171, 2013.
- [3] Y. Lin, G. Shi, D. Gao, and D. Liu. High-resolution spectral imaging based on coded dispersion. *Applied Optics*, 52(25):1041–1049, 2013.
- [4] G. Shaw and H. Burke. Spectral Imaging for Remote Sensing. *Lincoln Laboratory Journal*, 14(1):3–28, 2003.
- [5] C. Fischer and I. Kakoulli. Multispectral and hyperspectral imaging technologies in conservation: current research and potential applications. *Reviews in Conservation*, 7(1):3–16, 2006.
- [6] D. Lau, C. Villis, S. Furman, and M. Livett. Multispectral and hyperspectral image analysis of elemental and micro-Raman maps of cross-sections from a 16th century painting. *Analytica Chimica Acta*, 616(1):15–24, 2008.
- [7] X. Fu, M. Kim, K. Chao, J. Qin, J. Lim, H. Lee, A. Garrido, D. Pérez, and Y. Ying. Detection of melamine in milk powders based on NIR hyperspectral imaging and spectral similarity analyses. *Journal of Food Engineering*, 124:97–104, 2014.

-
- [8] K. Majzner, A. Kaczor, N. Kachamakova-Trojanowska, A. Fedorowicz, S. Chlopicki, and M. Baranska. 3d confocal Raman imaging of endothelial cells and vascular wall: perspectives in analytical spectroscopy of biomedical research. *Analyst*, 128(2):603–610, 2013.
- [9] H. Abramczyk and B. Brozek-Pluska. Raman Imaging in Biochemical and Biomedical Applications. diagnosis and treatment of breast cancer. *Chemical Reviews*, 113(8):5766–5781, 2013.
- [10] S. McCain, M. Gehm, Y. Wang, N. Pitsianis, and D. Brady. Multimodal multiplex Raman Spectroscopy optimized for in vivo chemometrics. *Proc. SPIE 6093, Biomedical Vibrational Spectroscopy III: Advances in Research and Industry*, 60930P:1–8, 2006.
- [11] B. Davis, A. Hemphill, D. Maltaş, M. Zipper, P. Wang, and D. Ben-Amotz. Multivariate Hyperspectral Raman Imaging using Compressive Detection. *Analytical Chemistry*, 83(12):5086–5092, 2011.
- [12] L. Sage. Raman Microscopes. *Analytical Chemistry*, 81(9):3222–3226, 2009.
- [13] S. Schlücker, M. Schaeberle, S. Huffman, and I. Levin. Raman Microspectroscopy: A comparison of Point, Line and Wide Field imaging methodologies. *Analytical Chemistry*, 75(16):4312–4318, 2003.
- [14] J. Romberg. Imaging via Compressed Sensing [Introduction to compressive sampling and recovery via convex programming]. *IEEE Signal Processing Magazine*, 25(2):14–20, 2008.
- [15] E. Candès and M. Wakin. An introduction to Compressive Sampling. *IEEE Signal Processing Magazine*, 25(2):21–30, 2008.
- [16] Z. Wang and G. R. Arce. Variable density Compressed Image Sampling. *IEEE Transactions on Image Processing*, 19(1):264–270, 2010.
- [17] D. Donoho. Compressed Sensing. *IEEE Transactions on Information Theory*, 52(4):1289–1306, 2006.

-
- [18] E. Candes, J. Romberg, and T. Tao. Robust uncertainty principles: Exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information. *IEEE Transactions on Information Theory*, 52(2):489:509, 2006.
- [19] S. McCain, M. Gehm, Y. Wang, N. Pitsianis, and D. Brady. Coded Aperture Raman Spectroscopy for quantitative measurements of ethanol in tissue phantom. *Applied Spectroscopy*, 60(6):663–671, 2006.
- [20] N. Hagen and D. Brady. Coded Aperture DUV spectrometer for standoff Raman Spectroscopy. *Proc. SPIE 7319, Next Generation Spectroscopic Technologies II*, 7319:7319OD 1–10, 2009.
- [21] E. Cull, M. Gehm, S. McCain, B. Guenther, and D. Brady. Multimodal optical spectrometer for remote chemical detection. *Proc. SPIE 5778, Sensors, and C3I Technologies for Homeland Security and Homeland Defense*, 5778:376–382, 2005.
- [22] E. Cull, M. Gehm, B. Guenther, and D. Brady. Standoff Raman Spectroscopy system for remote chemical detection. *Proc. SPIE 5994, Chemical and Biological Sensors and Environmental Security*, 5994:59940H 1–9, 2005.
- [23] R. Willet, R. Marcia, and J. Nichols. Compressed Sensing for practical optical imaging system: a tutorial. *Optical Engineering*, 50(7):072601 1–13, 2011.
- [24] A. Wagadarikar, R. John, R. Willet, and D. Brady. Single disperser desing for Coded Aperture Snapshot Spectral Imaging. *Applied Optics*, 47(10):44–51, 2008.
- [25] A. Wagadarikar, N. Pitsianis, X. Sun, and D. Brady. Spectral Image Estimation for Coded Aperture Snapshot Spectral Imager. *Proc. SPIE 7076, Image Reconstruction from incomplete Data*, 7076:707602 1–15, 2008.
- [26] S. McCain, B. Guenther, D. Brady, K. Krishnamurthy, and R. Willet. Coded-aperture Raman imaging for standoff explosive detection. *Proc.*

SPIE 8358, Chemical, Biological, Radiological, Nuclear and Explosives Sensing XII, 8358:8358OQ 1–9, 2012.

- [27] P. Bernath. *Spectra of Atoms and Molecules*. New York, United States of America.
- [28] X. Zhu, T. Xu, Q. Lin, and Y. Duan. Technical development of Raman Spectroscopy: from instrumental to advanced combined technologies. *Applied Spectroscopy Reviews*, 49(1):64–82, 2013.
- [29] H. Telle, R. Denovan, and A. González. *Laser Chemistry: Spectroscopy, Dynamics and Applications*. Englad, 2007.
- [30] J. Qin, K. Chao, and M. S. Kim. Raman Chemical Imaging System for food safety and quality inspection. *Transactions of the American Society of Agricultural and Biological Engineers*, 53(6):1873–1882, 2010.
- [31] J. Qin, K. Chao, M. S. Kim, H. Lee, and Y. Peng. Development of a Raman Chemical Imaging detection method for authenticating skim milk powder. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 8(2):122–131, 2014.
- [32] N. Hagen, R. T. Kester, L. Gao, and T. S. Tkaczyk. Snapshot advantage: a review of the light collections improvement for parallel high-dimensional measurement system. *Optical Engineering*, 51(11):111702 1–5, 2012.
- [33] J. Ling, S. D. Weitman, M. A. Miller, R. V. Moore, and A. C. Bovik. Direct Raman imaging techniques for study of the subcellular distribution of a drug. *Applied Optics*, 41(28):6006–6017, 2002.
- [34] A. Palonpon, M. Sodeoka, and K. Fujita. Molecular imaging of live cells by raman microscopy. *Current Opinion in Chemical Biology*, 17(4):708–715, 2013.
- [35] P. Vaidyanathan. Generalizations of the sampling theorem: Seven decades after Nyquist. *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Fundamental Theory and Applications*, 48(9):1094–1109, 2001.

-
- [36] R. Baraniuk. Compressive sensing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 24:118–121, 2007.
- [37] E. Candes and T. Tao. Near-optimal signal recovery from random projections and universal encoding strategies. *IEEE Information Theory Society*, 52:5406–5425, 2006.
- [38] M. Duarte and R. Baraniuk. Kronecker compressive sensing. *IEEE Transactions on Image Processing*, 21(2):494–504, 2012.
- [39] Y. Chen, N. Nasser, and T. Trac. Hyperspectral image classification using dictionary-based sparse representation. *IEEE Geoscience and Remote Sensing*, 49(10):3971–3985, 2011.
- [40] M. Fuller, P. Portuluri, and M. Sullivan. Multimodal Multiplex Raman Spectroscopy. *Spectroscopy, Solutions for Materials Analysis: Raman Technology For Today's Spectroscopists*, Special Issues June 2006:38–43, 2006.
- [41] D. J. Brady. *Optical Imaging and Spectroscopy*. United States of America.
- [42] S. Gottesman and E. Fenimore. New family of binary arrays for coded aperture imaging. *Applied Optics*, 28(20):4344–4352, 1989.
- [43] N. J. Sloane and M. Harwit. *Hadamard Transform Optics*. United States of America.
- [44] G.R Arce, D. J Brady, L. Carin, H. Arguello, and D. S. Kittle. An introduction to compressive coded aperture spectral imaging. *IEEE Signal Processing Magazine*, 31(1):105–115, 2014.
- [45] H. Arguello and G. R. Arce. Rank minimization code aperture design for spectrally selective compressive imaging. *IEEE Transactions on Image Processing*, 22(3):941–954, 2013.
- [46] A. Veeraraghavan, R. Raskar, Agrawal A, A. Mohan, and J. Tumblin. Dappled photography: Mask enhanced cameras for heterodyned light fields and coded aperture refocusing. *ACM Transactions on Graphics*, 26(3):69–1–69–12, 2007.

-
- [47] H. Arguello and G. R. Arce. Code aperture optimization for spectrally agile compressive imaging. *Journal of the Optical Society of America A*, 23:2400–2413, 2011.
- [48] H. Arguello, H. Rueda, Y. Wu, D. Prather, and G. R. Arce. Higher-order computational model for coded aperture spectral imaging. *Applied Optics*, 52(10):D12–D21, 2013.
- [49] H. Rueda. Super-Resolution Algorithm applied to Spectral Images acquired via Compressive Sensing. Master’s thesis, School of Systems and Informatics Engineering, Universidad Industrial de Santander, 2012.
- [50] H. Arguello and G. R. Arce. Restricted isometry property in coded aperture compressive spectral imaging. *IEEE Statistical Signal Processing Workshop*, Ann Arbor, MI, USA, 2012.
- [51] H. Rueda and H. Arguello. Spatial super-resolution in coded aperture based optical compressive hyperspectral imaging systems. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, 67:7–18, 2013.
- [52] M. Figueiredo, R. D. Nowak, and S. J. Wright. Gradient Projection for Sparse Reconstruction: Application to Compressed Sensing and other inverse problems. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, 1:586–597, 2007.
- [53] J. Bioucas-Dias and M. Figueiredo. A new TwIST: Two-step iterative shrinkng/thresholding algorithm for image restoration. *IEEE Transactions Image Processing*, 16:2992–3004, 2007.
- [54] Y. Wu. Compressive Imaging and its applications. Master’s thesis, Faculty on Science in Electrical and Computer Engineering of the University of Delaware, 2008.
- [55] Y. Wu. *Compressive Optical Imaging System*. PhD thesis, Faculty on Electrical and Computer Engineering of the University of Delaware, 2012.