

VALIDACION DE UNA METODOLOGIA NEURONAL PARA CUANTIFICACION DE FIRMAS ESPECTRALES

R.M. Pérez Utrero y P. Martínez Cobo
Departamento de Informática. Universidad de Extremadura
Carretera de Trujillo s/n, 10071 CACERES.
Tfno: 927-257254; Fax: 927-257203
E_mail: rosapere@cc.unex.es pablomar@cc.unex.es

RESUMEN.- El presente trabajo esta relacionado con el desarrollo de un método robusto para la cuantificación de los componentes de una mezcla a partir de la firma espectral de dicha mezcla, suponiendo que las firmas espectrales de los componentes son conocidas de antemano. El método de solución propuesto está basado en un algoritmo de red neuronal, resultando adecuado para obtener una aproximación robusta, eficiente y flexible.

ABSTRACT.- The present work is related with the development of a robust method for the cuantification of the components in a mixture, given the spectral signature of this mixture, assuming that the patterns of the individual spectral signature are known in advance. The solution method proposed is based on a neural network algorithm, resulting a robust, efficient and flexible approach.

1.- INTRODUCCION

El problema de la mezcla ha sido estudiado con anterioridad (Adams et al. 1983), y se han propuesto algoritmos digitales para su solución (Lawton y Martin, 1985). Estos métodos no admiten una paralelización y consumen mucho tiempo.

Barnard y Casasent en 1989 analizan la posibilidad de utilizar una red neuronal óptica para resolver este problema. Para encontrar la solución óptima minimizan una función de coste cuadrática. El principal inconveniente de esta aproximación se debe a la ausencia de unicidad de la solución propuesta.

La posibilidad de utilizar teoría de regresión múltiple, garantizando la solución óptima en términos de unicidad ha sido desarrollada por Díaz (Díaz et al. 1992) que propone una solución de cálculo de la pseudo-inversa basada en el algoritmo de Pyle.

2.- METODOLOGIA

En este trabajo nos proponemos validar un algoritmo neuronal que permita resolver de forma robusta y eficiente el problema de la mezcla.

Para describir el algoritmo hemos de tener en cuenta que una firma espectral puede ser considerada como un vector N-dimensional cuyos elementos se corresponden con los niveles digitales (nd) asociados con las N bandas del sensor

$$y = [nd_1, nd_2, \dots, nd_N]^t \quad (1)$$

Para cuantificar una composición partiremos de las firmas espectrales de K elementos que pueden estar presentes en dicha composición (conjunto de referencia), la firma espectral del elemento de referencia k -ésimo vendrá dada por el vector r_k .

Para conseguir una notación mas compacta podremos formar una matriz de referencia R con todos los vectores columna del conjunto de referencia $R = [r_1, r_2, \dots, r_K]$.

La firma espectral de la composición vendrá determinada por un vector y . El problema de la mezcla intenta determinar un vector de contribuciones c de K elementos en el que el elemento k -ésimo indica la contribución del elemento de referencia k -ésimo en la composición.

$$c = [c_1, c_2, \dots, c_K]^t$$

De acuerdo con el modelo de formación utilizado el vector y y correspondiente a la firma espectral de la mezcla puede ser expresado como:

$$y = \sum_{j=1}^K c_j r_j = Rc \tag{2}$$

Nuestro objetivo es la estimación del vector de contribuciones a partir de la matriz de referencia y de la firma espectral de la mezcla.

2.1.- Red Neuronal

Para resolver el problema de la mezcla, proponemos una red neuronal recurrente, lineal, basada en el método de Hopfield que permite asegurar la convergencia del problema mediante la utilización del algoritmo de minimización de descenso del gradiente.

La elección de dicho modelo está basada en el hecho de que partimos de un modelo de composición lineal, para modelos no lineales se puede utilizar otro tipo de red neuronal (back-propagation) o someter las firmas espectrales a transformaciones no lineales. Además hay que tener en cuenta la facilidad de implementación VLSI de la red de Hopfield.

La red propuesta viene caracterizada por la función de energía:

$$E = \|y - Rc\|^2 \tag{3}$$

Esta función de energía nos indica la distancia euclídea entre el vector y que contiene la firma espectral de la composición y el vector Rc obtenido por la combinación lineal indicada por el vector de coeficientes c de las firmas espectrales de los componentes contenida en la matriz R .

Para minimizar la función de energía se utiliza el método del descenso del gradiente según el cual la actividad de una neurona en la iteración $n+1$ puede obtenerse a partir de la actividad de dicha neurona en la iteración anterior y del gradiente de la función de energía respecto al vector de pesos multiplicado por un factor de paso que controla la velocidad de la convergencia.

$$c_j(n+1) = c_j(n) + \lambda \frac{\partial E}{\partial c_j} \tag{4}$$

Derivando la función energía obtendremos:

$$\frac{\partial E}{\partial c_j} = -2R^t(y - Rc) = -2R^t y + 2R^t Rc \tag{5}$$

Sustituyendo en la expresión (4) obtenemos la expresión:

$$c(n+1) = [I - \lambda R^t R]c(n) + \lambda R^t y \tag{6}$$

donde λ es un factor de paso que acelera la convergencia. En la expresión (6) si llamamos:

$$P = [I - \lambda R'R]; \quad q = R'y \quad (7)$$

obtenemos la expresión:

$$c(n+1) = Pc(n) + \lambda q \quad (8)$$

El algoritmo del proceso iterativo aparece descrito en la Figura 1, donde vemos como partiendo de la firma espectral a descomponer y de la matriz de referencias se obtienen el vector q y la matriz P . Utilizando esta matriz y la estimación inicial del vector de contribuciones c comienza el proceso iterativo que produce en cada iteración una estimación del vector de contribuciones, finalizando cuando la diferencia entre dos estimaciones consecutivas de c es menor que un cierto valor de error.

El proceso descrito corresponde a la iteración de la red de Hopfield que aparece en la Figura 2 donde la matriz de pesos viene dada por:

$$w_{ij} = -\lambda \sum_{p=1}^N r_{pi} r_{pj} \quad \text{para } i \neq j; \quad w_{ii} = 1 - \lambda \sum_{p=1}^K r_{pi} r_{pi} \quad (9)$$

La red calcula a partir de la estimación t del vector de contribuciones la estimación $t+1$, iterando hasta que las diferencias entre dos estimaciones consecutivas sean muy pequeñas.

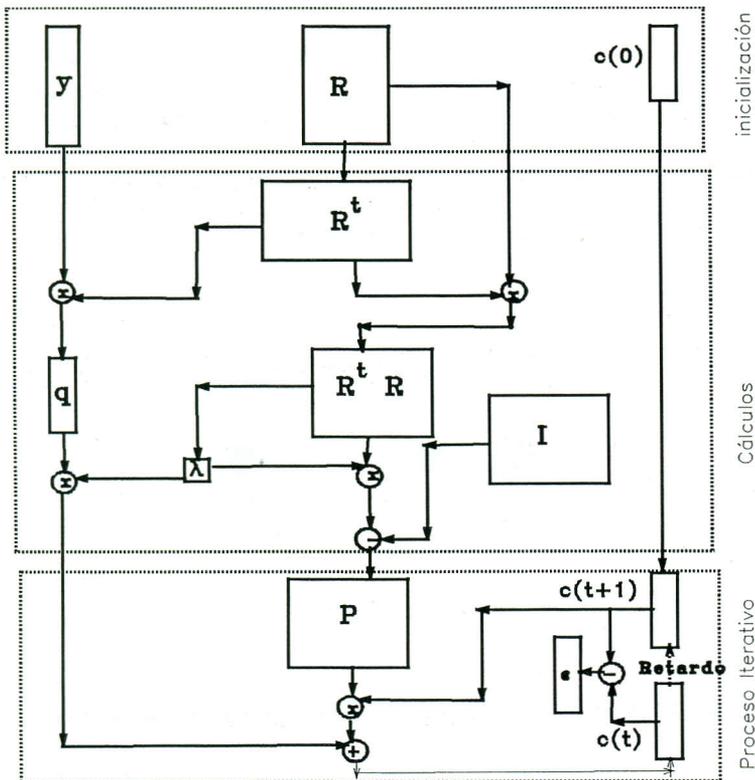


Figura 1.- Algoritmo propuesto

3.- DISCUSION DE RESULTADOS

El algoritmo neuronal ha sido probado generando mediante simulación firmas espectrales compuestas a partir de las firmas espectrales de referencia.

Se han realizado diversos experimentos en los que hemos analizado el comportamiento del algoritmo frente a los siguientes factores:

- Grado de correlación entre las referencias que forman la mezcla.
- Proporciones de los componentes en la composición.
- Numero de referencias superfluas del conjunto de referencias.
- Presencia de ruido aleatorio en la composición.
- Parámetros de convergencia de la red.

Para evaluar el funcionamiento del algoritmo hemos considerado dos medidas:

- El número de iteraciones que tiene que realizar.
- Error cuadrático relativo de los coeficientes definido en la ecuación (10) y que mide la capacidad del algoritmo para discriminar trazas de un elemento en mezclas formadas mayoritariamente por otros componentes.

$$\epsilon = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^K (c_i - c_i^*)^2}}{\min_i |c_i|} \quad (10)$$

Todas las medidas se han realizado con firmas espectrales de 1024 bandas obtenidas mediante superposición de gaussianas a las que en algunos casos se les ha superpuesto una señal de ruido aleatorio. En todos los casos la firma espectral a descomponer se ha generado por superposición de algunas de las firmas espectrales del conjunto de referencia, conociendo por tanto por adelantado el vector de contribuciones de la composición.

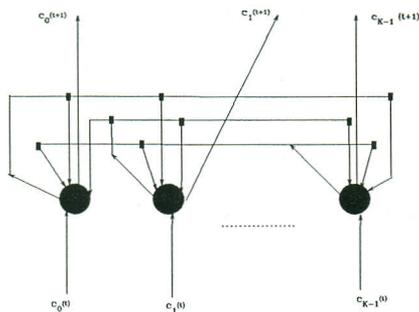


Figura 2.- Estructura de la red neuronal propuesta.

3.1.- Influencia del grado de correlación entre las referencias que forman la mezcla

Para evaluar la influencia del grado de correlación se han realizado diversas determinaciones de composiciones binarias en proporción 2:3, sin ruido, manteniendo el mismo conjunto de referencia y el mismo valor de λ .

En la figura 3 puede observarse que el grado de correlación no influye significativamente en el funcionamiento del algoritmo.

3.2.- Proporciones de los componentes en la composición

Para evaluar la influencia de las proporciones de los componentes se han realizado determinaciones de composiciones binarias en proporciones 1/10, 1/100, 1/1000, manteniendo el conjunto de referencia y el valor de λ .

En la Figura 4. puede observarse que el error cuadrático relativo sigue proporcionando unos valores aceptables en proporciones 1/1000, ofreciendo un buen funcionamiento independientemente del grado de correlación de los componentes.

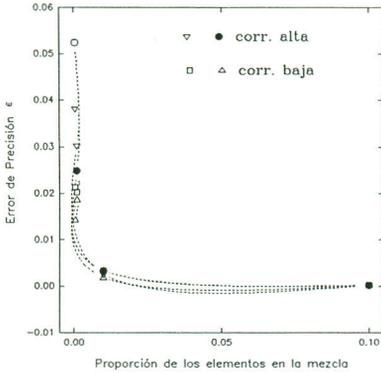


Figura 3.- Influencia de las proporciones entre componentes en la mezcla en los resultados obtenidos.

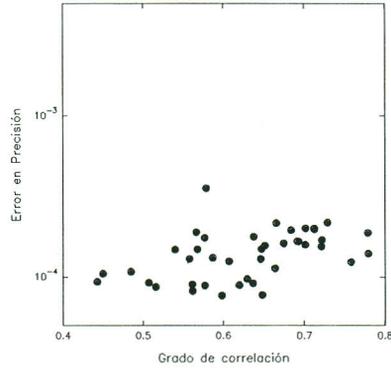


Figura 4.- Influencia del grado de correlación entre los componentes en la mezcla, en los resultados obtenidos

3.3.- Número de referencias superfluas del conjunto de referencia

La existencia de elementos en el conjunto de referencia que no están presentes en la composición es una fuente de error considerable en cualquier intento de resolución del problema de la mezcla, que puede fracasar estrepitosamente al asignar contribuciones a elementos no presentes.

Para evaluar la influencia de las referencias no presentes se han realizado determinaciones para un conjunto de referencia de 8 elementos y composiciones en las que el número de referencias no presentes variaba entre 0 y 7.

La Figura 5. muestra que el número de referencias no presentes no influye significativamente en el error de la determinación.

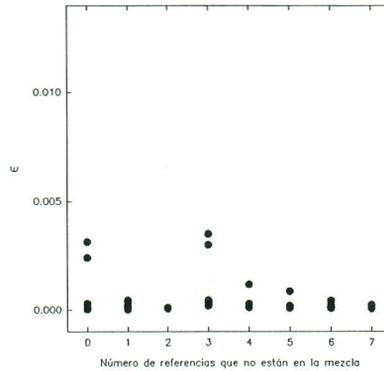


Figura 5.- Influencia del número de elementos de la matriz de referencia no presentes en la mezcla, en los resultados obtenidos.

3.4.- Presencia de ruido aleatorio en la composición

El ruido está siempre presente en cualquier proceso de medida, contaminando la información original y dando lugar a errores en las determinaciones cuantitativas.

Para evaluar la influencia del ruido aleatorio presente en la composición se han realizado determinaciones para composiciones de las mismas referencias en contribuciones que varían entre 1 y 10.

La Figura 6. muestra que el porcentaje de ruido añadido a la composición no influye ni en el error cuadrático relativo ni en el número de iteraciones.

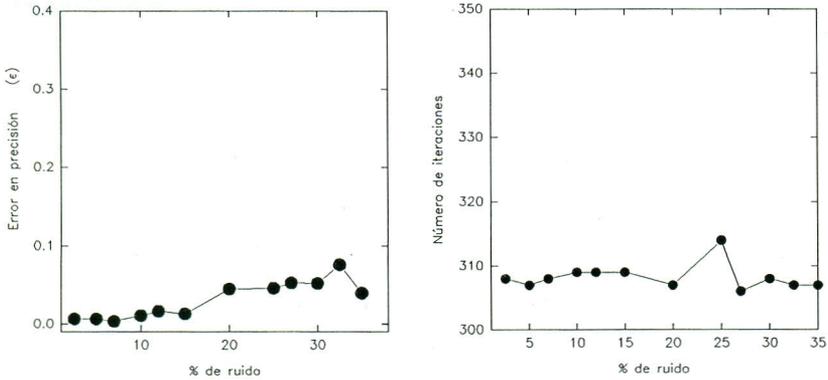


Figura 6.- Influencia del porcentaje de ruido añadido en los resultados obtenidos.

3.5.- Parámetros de convergencia de la red

En este apartado se analizó la influencia del parámetro λ en la convergencia del algoritmo utilizando composiciones con la misma matriz de referencia, sin ruido añadido, grado de correlación inferior a 0.8 y contribuciones inferiores a 10.

La Figura 7. muestra que el valor de λ no influye ni en el error cuadrático relativo ni en el número de iteraciones.

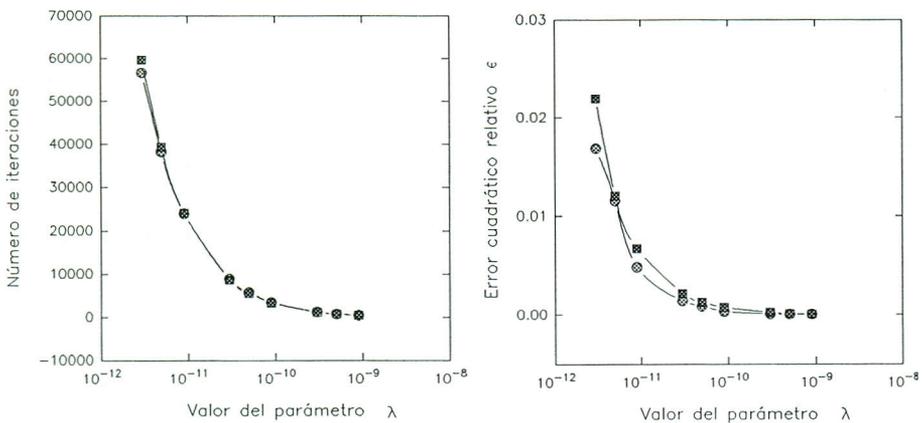


Figura 7.- Influencia del parámetro λ en los resultados obtenidos.

4.- CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos muestran que la metodología utilizada es capaz de resolver combinaciones de firmas espectrales con un coste computacional razonable.

El método es mas robusto que los sistemas tradicionales basados en análisis de picos, presentando un buen comportamiento en presencia de altas proporciones de ruido.

El método propuesto mantiene su funcionamiento en el caso de mezclas muy desproporcionadas.

El método neuronal puede ser aplicado a problemas de descomposición en distintas zonas del espectro y en particular en las zonas visible e infrarroja, pudiendo ser utilizado en teledetección (mineralogía, medio ambiente, ordenación del territorio etc).

5.- REFERENCIAS

- J. Adams, P. Johnson, y S. Taylor-George, 1983. A semi-empirical method for analysis of the reflectance spectra of binary mineral mixtures. *Journal of Geophysic Res.* **88**: 3557-3571
- W. Lawton, y M. Martin, 1985. The advanced mixture-problems principles and algorithms. Technical Report **IOM384**.
- E. Barnard and P. Cassasent 1989. Optical neural net for classifying imaging spectrometer. *Applied Optics* **18**: 3129-3133
- J.C. Díaz, P. Aguayo, P. Gómez, V. Rodellar, y P.J.C. Olmos, 1992. An associative memory to solve the mixture problem in composite spectra. En *Proc. of the 35th Midwest Symposium on Circuits and Systems*: 891-894.