

## ARTICULOS ORIGINALES

### MATEMÁTICA Y FÍSICA

#### ANÁLISIS DE LAS FIRMAS ESPECTRALES DE ALGUNAS ESPECIES VEGETALES MEDIANTE SUS DERIVADAS, PROVINCIA DE HUAMANGA, 2019

Walter M. Solano Reynoso, Renato Soca Flores<sup>1</sup>, Noel Torres Huaripaucar<sup>1</sup>

Unidad de Investigación e Innovación de Ingeniería de Minas Geología y Civil

Programa: Física Aplicada - Área: Biofísica

E-mail:

#### RESUMEN

Se ha logrado implementar un protocolo metodológico para obtener las derivadas enteras y fraccionaria de datos experimentales, desde el pre tratamiento de datos, como el suavizamiento, para eliminar el ruido de las señales, aplicándose en nuestro caso a las reflectancias espectrales de algunas hojas como frejol, quinua y cabuya comparando, como una aplicación, con la reflectancia del suelo, eliminando la contribución del suelo respecto a la hoja mediante la primera derivada, y quedarse solamente con la información de las hojas. El borde rojo de las reflectancia de las hojas verdes es el punto de inflexión del mínimo rojo de la reflectancia y que sube abruptamente hacia el infrarrojo cercano, cuyo punto es detectable fácilmente mediante la primera derivada y es muy utilizado en cálculos de índices espectrales de vegetación y el contenido de clorofila. Si bien se han obtenido las derivadas fraccionarias, su análisis queda pendiente para trabajos futuros dependiendo de la aplicación específica que se quiera realizar. Siendo un primer trabajo de esta naturaleza, se propone posibles aplicaciones como la cuantificación del contenido de clorofila, carotenoides y antocianinas usando la derivada fraccionaria en el rango visible e infrarrojo cercano. Otras posibilidades se dan también en el análisis de suelos salinos, contaminados con metales pesados y contenido de material orgánico, como ya se viene reportando en la literatura científica de los últimos años.

Palabras clave: suavizamiento de datos, derivada fraccionaria, reflectancia espectral, borde rojo.

#### ANALYSIS OF THE SPECTRAL FIRMS OF SOME PLANT SPECIES THROUGH THEIR DERIVATIVES, PROVINCE OF HUAMANGA, 2019

#### ABSTRACT

It has been possible to implement a methodological protocol to obtain the integer and fractional derivatives of experimental data, from the pre-treatment of data, such as smoothing, to eliminate the noise of the signals, applying in our case to the spectral reflectances of some sheets such as beans, quinoa and cabuya comparing, as an application, with the reflectance of the soil, eliminating the contribution of the soil with respect to the leaf by means of the first derivative, and remaining only with the information of the leaves. The red edge of the reflectance of green leaves is the inflection point of the minimum red of the reflectance and which rises abruptly towards the near infrared, whose point is easily detectable by the first derivative and is widely used in calculations of spectral indices of vegetation and the chlorophyll content. Although fractional derivatives have been obtained, their analysis is pending for future work depending on the specific application you want to carry out. Being a first work of this nature, possible applications such as the quantification of the content of chlorophyll, carotenoids and anthocyanins using the fractional derivative in the visible and near infrared range are proposed. Other possibilities also exist in the analysis of saline soils, contaminated with heavy metals and organic material content, as has been reported in the scientific literature of recent years.

Keywords: data smoothing, fractional derivative, spectral reflectance, red edge.

#### INTRODUCCIÓN

La reflectancia espectral de las sustancias o materiales es la reflexión de la radiación electromagnética que llega al material y ofrece información sobre la naturaleza y características del material que se quiere explorar. En particular, la reflectancia espectral de las hojas de las plantas terrestres es muy utilizado para conocer el estado de salud de la

planta, dando a conocer parámetros importantes como el contenido de clorofila, incluso colorantes importantes como los carotenoides y antocianinas de las hojas en el rango visible. Hacia el infrarrojo medio se detecta el contenido de agua de las hojas por la fuerte absorción de la radiación producida por el agua. Una de las ventajas de utilizar la reflectancia espectral de las hojas y los suelos es que las tomas de datos pueden realizarse sin necesidad de ambientes especiales para la toma de datos, realizándose a plena luz solar, pues lo que se almacena es la reflexión de la luz que se produce en las hojas, suelos u otros materiales. Los instrumentos se han diseñado para tal fin y con buena resolución, de modo que pueden realizarse mediciones de campo o in situ, facilitando los protocolos de medición.

Para formarse una idea de la interacción de la radiación electromagnética con las hojas de las plantas se muestra en la Fig. 1 la reflectancia espectral típica de una hoja verde de 350 a 2500 nm de longitud de onda ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ metros}$ ), mostrando las regiones de absorción de las moléculas de agua. En el lado derecho de la Fig. 1 se ha separado la región visible e infrarrojo cercano muy utilizado en cuantificar parámetros de índices de vegetación.

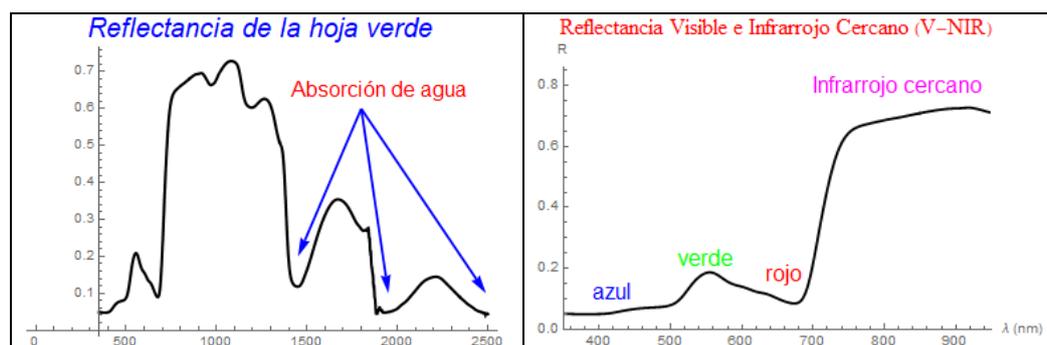


Fig. 1. Reflectancia de una hoja verde de frejol utilizada para ilustrar puntos importantes del espectro.

Para el análisis de los espectros de las sustancias se han desarrollado técnicas para poder extraer información de la estructura y composición microscópica tal como los componentes atómicos y moleculares y su posible ordenamiento en el cuerpo. Una de las técnicas efectivas para discernir aspectos finos de los espectros es utilizar las derivadas de los datos experimentales que de otro modo era muy difícil o imposible, tal como en espectros sobrepuestos donde uno puede ser más intenso que el otro (Morrey, 1968), de modo que, al tomar hasta la cuarta derivada, por ejemplo, el pico más intenso queda mejor resuelto y el menos intenso tendiendo a desaparecer. Butler y Hopkins (Butler y Hopkins, 1970) analizaron curvas gaussianas y lorentzianas hasta la cuarta derivada, obteniendo mejor resolución de ciertos espectros usando la cuarta derivada. En el texto de Talsky (1994) se hace un análisis detallado del uso de las derivadas en el análisis de curvas espectrales, donde se señalan entre otros que las derivadas ayudan a detectar más fácilmente los puntos de inflexión, siendo la deconvolución de los picos sobrepuestos como una de las primeras aplicaciones en investigaciones espectrales.

Cuando la radiación electromagnética incide sobre la hoja de una planta terrestre, ella es absorbida, transmitida y reflejada, cuya reflectancia espectral es típica especialmente por la fotosíntesis en la parte visible del espectro y el contenido de agua que se detecta en el infrarrojo medio, motivo por el cual se ha diseñado instrumentos para captar las reflectancias espectrales desde los 350 nm hasta 2500 nm. Estos mismos instrumentos son muy útiles en analizar los espectros de los suelos. Con la finalidad de obtener información de la reflectancia espectral de las hojas, se han propuesto técnicas como las razones entre dos bandas, por ejemplo, la absorción de clorofila que se produce en la banda roja, tiene un mínimo en la reflectancia, comparándose con la reflectancia muy alta que se produce en el infrarrojo cercano (NIR) (Aoki et al., 1986). Para mejorar estas razones se propusieron diferencias normalizadas entre las dos bandas como es el caso de la diferencia normalizada entre el rojo y el infrarrojo cercano, como el NDVI (Tucker, 1979). Los índices señalados son útiles para tener información sobre el nivel de clorofila requerida para discernir el estado de salud de las plantas, productividad en caso de cultivos y otros del cual se tienen numerosas publicaciones de las cuales citamos algunas (Richardson et al., 2002;). Estos estudios también estuvieron motivados por la posibilidad de obtener las mismas informaciones a partir de sensores satelitales, aviones y ahora drones, donde los sensores se diseñan para obtener las reflectancias en ciertas bandas específicas (Wessman et al., 1988; Demetriades-Shah et al., 1990; Kochubey y Kazantsev, 2012).

Una de las aplicaciones importantes de la derivada de la reflectancia espectral en hojas verdes es el llamado borde rojo (RE, Red Edge), el cual es el punto de inflexión de la curva de reflectancia que va del mínimo rojo al máximo del NIR y puede obtenerse como el máximo de la primera derivada, cuya importancia ya se había señalado por ser

particularmente sensible al contenido de clorofila de la hoja (Horler, et al., 1983) y corroborado en investigaciones posteriores. Ya en 1990, Demetriades-Shah et al. (1990), señalaron que el uso de las derivadas en el espectro de reflectancia era muy efectivo para diferentes aplicaciones. Tsai y Philpot (1998) analizaron técnicas de suavizamiento de los datos antes de tomar las derivadas, llegando a determinar longitudes de onda convenientes para determinar índices espectrales mediante teledetección satelital. La conveniencia de utilizar índices deducidos de las derivadas de datos de las reflectancias espectrales en lugar de los índices directos ya se habían establecido años atrás, especialmente en percepción remota o teledetección satelital (Kochubey y Kazantsev, 2012), entre otras razones porque al derivar se elimina la influencia del suelo, obteniendo mejores resultados.

En las dos últimas décadas también se viene proponiendo y utilizando las derivadas de orden fraccionaria en diferentes ramas de las ciencias e ingeniería (Podlubny, 1999; Herrmann, 2011; Hortigueira, 2011; Li y Zeng, 2015;), a diferencia de las derivadas de orden entero tradicionales, con resultados sorprendentes como son los efectos no locales en el espacio y tiempo (Zhang et al., 2009), si bien todavía bajo discusión en su interpretación física. No obstante, se tienen propuestas de su uso en espectroscopia (Kharintsev y Salakhov, 2004) y métodos de derivadas fraccionarias en espectros de reflectancia (Schmitt, 1998). En estos últimos años se vienen utilizando en la interpretación de espectros de reflectancia de suelos salinos (Wang et al., 2018), donde ciertas derivadas fraccionarias tienen buena correlación con la salinidad del suelo; en evaluaciones de suelos con materia orgánica (Wang et al., 2017; Fu et al., 2019; Hong et al., 2019) con resultados muy prometedores. Asimismo, se tienen trabajos del uso de las derivadas fraccionarias relacionando la reflectancia espectral con la temperatura del suelo (Tian et al., 2019). Estas nuevas investigaciones prometen evaluaciones más precisas de los suelos en agricultura y conservación ambiental.

## MATERIAL Y MÉTODOS

Se han obtenido reflectancias de algunos cultivos como la quinua, frejol y maíz, como también de los suelos de cultivo del Instituto Nacional de Innovación Agraria (INIA) de Ayacucho mediante el espectrorradiómetro ASD Field Spec 4, que almacena las reflectancias entre 350 y 2500 nm, perteneciente al Laboratorio de Teledetección y Energías Renovables de la Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga (LABTELER-UNSH). En la adquisición de datos se han considerado 10 mediciones sucesivas para luego ser promediadas, que es parte del pretratamiento de datos que consiste en eliminar básicamente el ruido mediante técnicas como la media móvil, suavizamiento de Gauss y el filtro de Savitzky-Golay (Press et al, 1992), que se analizarán con datos simulados para decidir cuál técnica de suavizamiento es el conveniente. Ya con los datos pre tratados se procederá a determinar y analizar las derivadas enteras y luego las fraccionarias. Para los cálculos numéricos y gráficas se ha utilizado el software científico Mathematica Versión 12. Primeramente, se ha simulado un espectro compuesto para apreciar el uso de las derivadas en analizar los espectros. En segundo lugar, se han comparado las técnicas de suavizamiento de la media móvil, de Gauss y Savitzky\_Golay para ver cuán de ellas es conveniente en nuestro caso para el pre tratamiento de los datos. En tercer lugar, se han utilizado la primera derivada para observar el comportamiento del espectro y su utilidad en obtener parámetros adecuados para caracterizar el comportamiento de las hojas. Finalmente, se obtiene la derivada fraccionaria de la reflectancia espectral de la hoja de cabuya y quinua roja para comparar el comportamiento de ambas reflectancias.

### Derivadas espectrales

En espectroscopía se suele aproximar líneas espectrales a curvas de la forma gaussiana o lorentziana, expresadas como

$$G(\lambda) = Ae^{-\frac{(\lambda-\lambda_0)^2}{2\sigma^2}},$$

y

$$L(\lambda) = \frac{A}{\pi} \left[ \frac{\sigma}{(\lambda - \lambda_0)^2 + \sigma^2} \right],$$

respectivamente, donde  $A$  está relacionada a la intensidad del espectro,  $\sigma$  es el ancho mitad,  $\lambda_0$  el valor de la longitud para el cual se da el máximo del espectro y  $\lambda$  la longitud de onda. En la Fig. 2 se muestra la gráfica de ambas curvas para la misma altura y ancho de línea, estando  $\lambda$  en nanómetros (nm). Se observa que la curva gaussiana se aproxima más rápidamente a cero.

Comparando curvas lorentziana y gaussiana

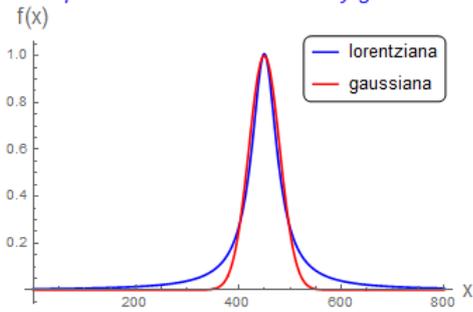


Fig. 2. Curva lorentziana y gaussiana de la misma altura y ancho de la curva.

Notar que ambas curvas tienen un cambio en la concavidad cuando se dirigen al máximo, los cuales tienen un punto de inflexión que se puede detectar usando la primera derivada y darán un máximo o mínimo, dependiendo de si la derivada es positiva o negativa, respectivamente.

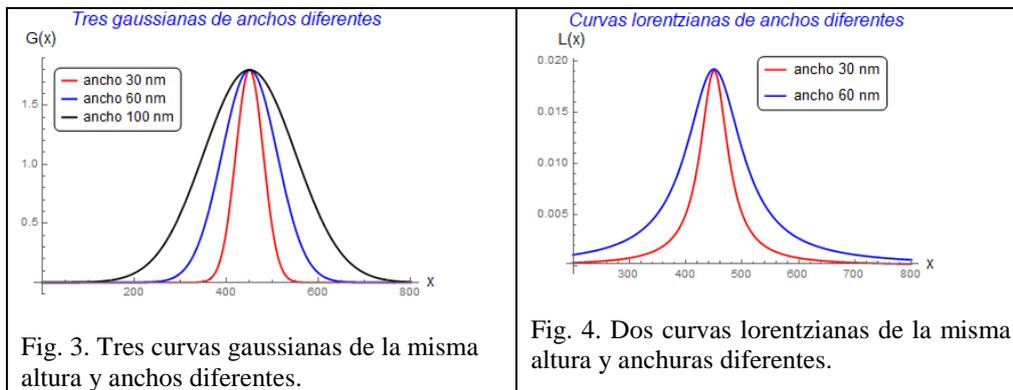
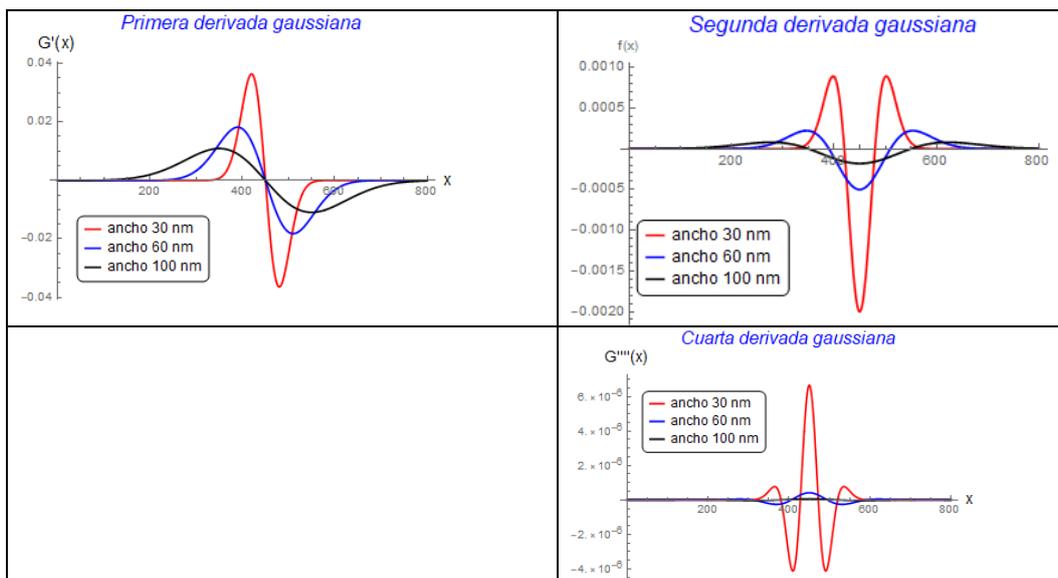


Fig. 3. Tres curvas gaussianas de la misma altura y anchos diferentes.

Fig. 4. Dos curvas lorentzianas de la misma altura y anchuras diferentes.

Ya que interesa analizar qué ocurre con estas curvas que espectroscópicamente pueden representar líneas observadas experimentalmente, se toman tres gaussianas de la misma altura y diferentes anchos mostradas en la Fig. 3, mientras que en la Fig. 4 se tienen dos lorentzianas de la misma altura y anchos diferentes. Lo notable de tomar las derivadas de estas curvas es la minimización de las intensidades de las curvas de mayor anchura respecto a la de menor ancho, lo cual es una manera de discriminar entre dos líneas espectrales superpuestas, tal como observa para las gaussianas en la Fig. 5 y las lorentzianas en la Fig. 5.



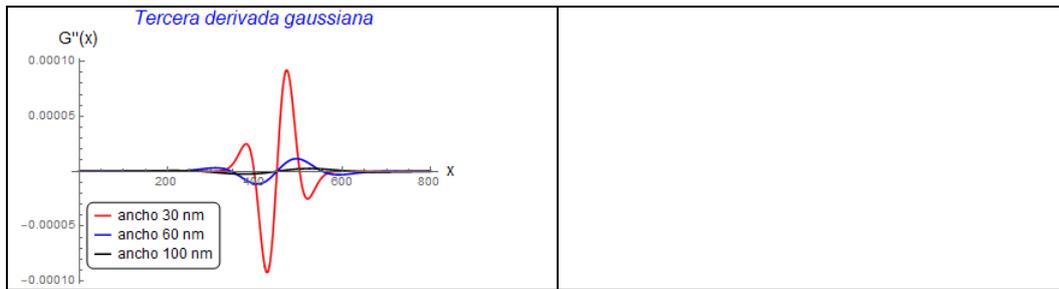


Fig. 5. Derivadas hasta el orden cuatro de tres gaussianas de anchos diferentes.

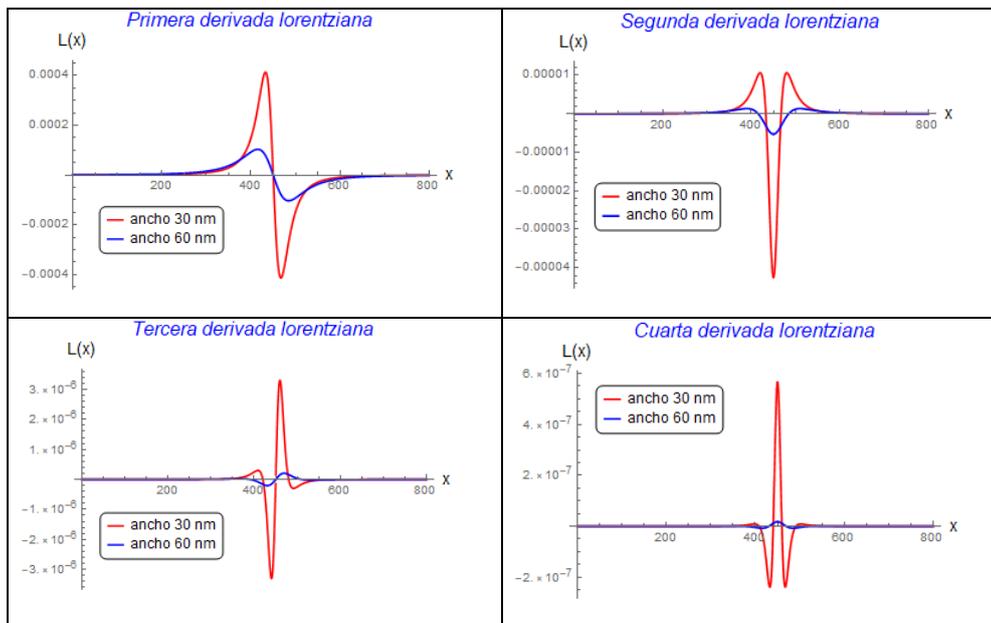


Fig. 6. Derivadas de orden cuatro de dos lorentzianas de la misma altura y anchos diferentes.

Si las intensidades de las son diferentes y una de ellas es más aguda respecto a la otra, el proceso de derivación nos lleva a disminuir la intensidad de la línea más ancha, aun siendo más intensa que la línea más aguda, como se ilustra en la Fig. 7. Si las líneas tienen el mismo ancho, las derivadas mantienen su intensidad, como se ilustra en la Fig. 8.

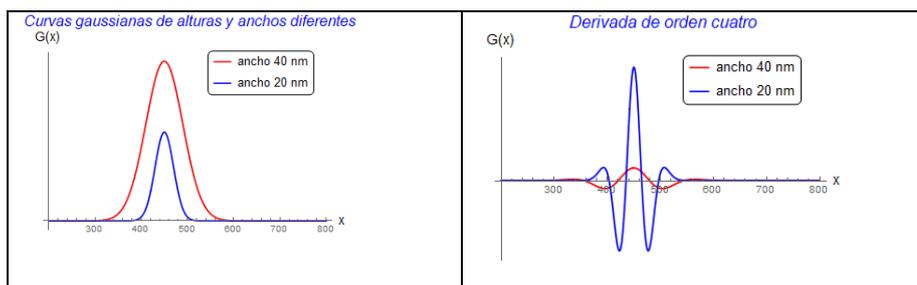


Fig. 7. Derivada de líneas gaussianas de alturas y anchuras diferentes.

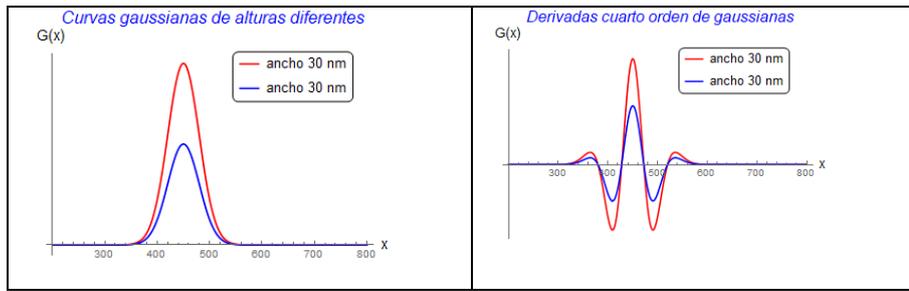


Fig. 8. Derivadas de líneas gaussianas del mismo ancho y diferente intensidad.

Estos comportamientos son cuantificables y detalles se pueden encontrar en el texto de Talsky (1994). Las aplicaciones de estas propiedades y otros se verán en el presente trabajo.

### Derivadas fraccionarias

El concepto de derivada fraccionaria ya había sido discutido desde los inicios de la creación del cálculo infinitesimal. En el siglo XIX se propuso la derivada fraccionaria como opuesto a la integración denominada hoy como la definición de Riemann-Liouville dada como.

$$D^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_b^x (x-t)^{\alpha-1} f(t) dt, \quad \alpha > 0, \quad t > 0, \quad (3)$$

donde  $D^\alpha$  denota la derivada de orden  $\alpha$ , siendo este un número real positivo, en tanto que  $\Gamma(\alpha)$  es la función Gamma definida como

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-1} dt = (\alpha - 1)! \quad (4)$$

En la notación habitual que se utiliza en la derivación de orden entero positivo se tiene la notación

$$\frac{df}{dx} = D^1 f(x), \quad \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = D^2 f(x), \quad \dots \dots, \quad \frac{d^n f(x)}{dx^n} = D^n f(x),$$

En el mismo siglo XIX, posterior a la definición de Riemann-Liouville, se dio la definición de derivada fraccionaria de Grünwald-Letnikov que parte de la definición de la derivada como el límite

$$\frac{df}{dx} = f'(x) = D^1 f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

donde  $h$  es el incremento de la variable independiente  $x$ . Así, la segunda derivada de la función  $f(x)$  se escribe como

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = f''(x) = D^2 f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}.$$

Si tenemos la derivada de orden  $\nu$ , se tendrá

$$\frac{d^\nu f(x)}{dx^\nu} = f^{(\nu)}(x) = D^\nu f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\nu} \sum_{m=0}^{\nu} (-1)^m \binom{\nu}{m} f(x - mh), \quad (5)$$

donde

$$\binom{\nu}{m} = \frac{\nu!}{(\nu-m)!m!} = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(m+1)\Gamma(\nu-m+1)} = \frac{1}{m!} \prod_{n=0}^{m-1} (\nu-n).$$

La expresión (5) vale para la  $\nu$ -ésima derivada de  $f(x)$ , siempre que  $\nu$  sea un entero positivo. Puesto que la función gamma definida por la Ec. (4) vale para cualquier  $\alpha > 0$ , en la expresión (5) se sustituye el factorial haciendo  $\alpha = \nu$  de modo que se escribe la derivada de orden  $\alpha$  como

$$D^\alpha f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{x-a}{h} \rfloor} (-1)^m \frac{\Gamma(\alpha+1)}{m! \Gamma(\alpha-m+1)} f(x-mh), \quad \alpha > 0, \quad (6)$$

donde  $h$  es la longitud de paso y  $\lfloor \frac{x-a}{h} \rfloor$  es la parte entera de  $(x-a)/h$ . El resultado define la derivada fraccionaria Grünwald-Letnikov de orden  $\alpha$  de la función  $f(x)$ , demostrándose que esta derivada se puede deducir de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville. Como puede observarse, la derivada de Grünwald-Letnikov es muy útil en el cálculo numérico de las derivadas fraccionarias para determinar derivadas fraccionarias de datos numéricos, que es lo que se usará en el presente trabajo.

### Simulación de espectros compuestos

En la Fig. 9 se muestra un espectro aparentemente no gaussiano ni lorentziano. Para intentar conocer la naturaleza de la línea espectral, podemos ayudarnos de las derivadas que se muestran en la misma Fig. 9, donde la primera derivada muestra una ligera distorsión del comportamiento gaussiano y lorentziano, siendo la segunda derivada una confirmación que efectivamente el espectro al no ser gaussianas o lorentzianas puras, podría considerarse como una combinación lineal de dichas curvas. Estas posibilidades se analizarán en la siguiente sección.

### Pre tratamiento de datos y comparación de las técnicas de suavizamiento

Existen muchas técnicas de suavizamiento de datos, algunas de ellas diseñadas para aplicaciones específicas. Una de las razones más importantes es la eliminación del llamado ruido en la obtención de datos espectroscópicos que tiene que ver con variaciones aleatorias en las condiciones de obtención de datos de la medición. En nuestro caso, ya que se realizan mediciones de campo de las reflexiones de la luz solar en hojas de plantas y suelos de cultivo, la aleatoriedad está influida por las variaciones en cada instante de las condiciones ambientales en que se realiza la medición, como el viento, la intensidad de la radiación solar por variaciones ligeras como la concentración de moléculas y partículas de aerosoles en las inmediaciones de la atmósfera, agregando a ello las pequeñas variaciones aleatorias de la corriente eléctrica en los circuitos eléctricos que componen el instrumento de medición, denominado genéricamente de ruido electrónico que es inevitable aun realizando las mediciones en ambientes estrictamente estables. Debido a estas condiciones aleatorias en el proceso de adquisición de datos, el aparato y el software de control de las mediciones se ha diseñado de modo que se realicen varias mediciones por minuto o segundo para ellas ser promediadas y tener datos mejor representativos del proceso de medición. A los datos promediados se aplican los procedimientos de suavización o también llamado filtraje de datos, como parte del pre tratamiento básico de datos.

En el suavizamiento o filtrado de media medio, se toma cierto número de datos en torno del dato considerado, por ejemplo 10, y se promedia, continuando con el siguiente dato y su entorno de 10 datos hasta completar todos los datos. En el filtro gaussiano los datos que se toman se ajustan a un curvan de Gauss. Para el caso del filtro de Savinzy-Golay los datos que se toman se ajustan a un polinomio de cierto grado mediante un ajuste de mínimos cuadrados, siendo este uno de los más recomendados. Cada tipo de filtro es utilizado a las características de los datos y el tipo de información que se quiera obtener. En los resultados veremos cómo estos tipos de filtrados funcionan. En el software Mathematica versión 12 se tienen los tipos de filtros de media móvil y de Gauss que se pueden usar directamente en el pre tratamiento de datos, mientras que para el filtro de Savinzy-Golay se dan las matrices del ajuste polinomial para ser utilizado de acuerdo al tamaño de ventana.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### Resultados de la simulación de la composición espectral

En la Fig. 10 se muestra el espectro compuesto simulado y las derivadas del mismo, donde se aprecia claramente en las derivadas segunda y cuarta que no corresponde a una gaussiana o lorentziana. Se observa en la segunda derivada que el primer máximo es mayor que el segundo, indicando que posiblemente se trate de dos curvas de anchos diferentes, el primero más agudo que el segundo. En la cuarta derivada se evidencia aún más dicha diferencia. Se conjetura que podría tratarse de la suma de dos gaussianas o suma de una gaussiana y lorentziana o de dos lorentzianas. No obstante, el hecho de que a la izquierda se aproxime más rápido a cero que a la derecha, podría sugerir que se trate de una gaussiana seguida de una curva lorentziana, como la siguiente expresión

$$f(\lambda) = Ae^{-\frac{(\lambda-\lambda_1)^2}{2a^2}} + \frac{B}{\pi} \left[ \frac{b}{(\lambda-\lambda_2)^2 + b^2} \right]$$

Se trata ahora de ajustar los datos a esta suma, tratando de ubicar los máximos para las longitudes de onda  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  y sus respectivos anchos mitad  $a$  y  $b$ .

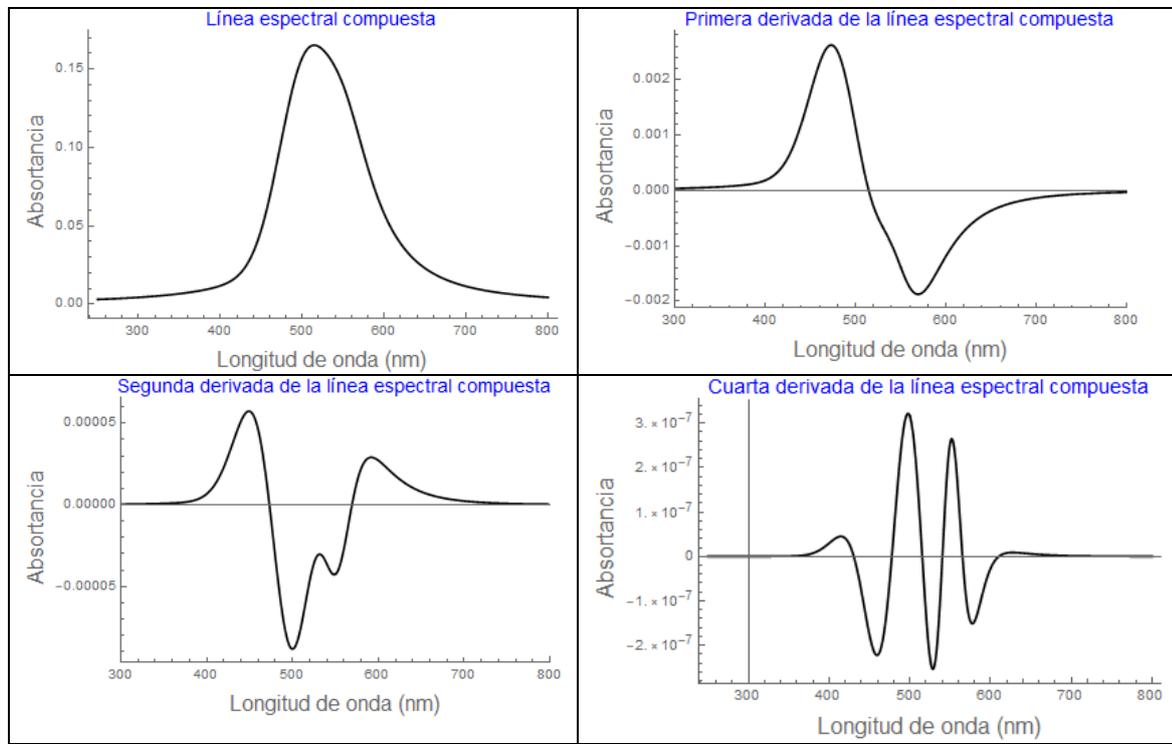


Fig. 9. Espectro compuesto simulado.

En la Fig. 10 se observa la superposición de una gaussiana y lorentziana que reproduce la curva simulada, donde la lorentziana es un poco más intensa pero su ancho es mayor que la gaussiana, motivo por el cual en las derivadas tiende a ser más pequeña.

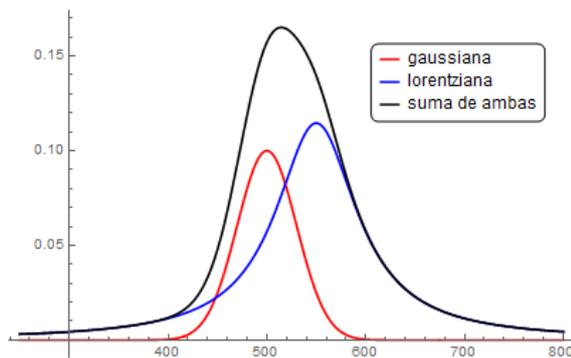


Fig. 10. Superposición de una curva gaussiana y lorentziana.

### Pre tratamiento y suavizamiento de datos

Para tener la idea cualitativa de los procesos de suavizamiento de datos, en las Fig. 11 se muestra la gráfica de 10 datos de reflectancia espectral sucesivos obtenidos en una hoja de alfalfa, donde cada una se obtiene en menos de un segundo, mostrándose la media de los 10 conjuntos de datos. El pico agudo próximo a los 1500 nm en los datos crudos corresponde a la absorción de las moléculas de agua contenidas en la hoja verde y es característico de todas las hojas frescas y suelos, notándose el ruido pronunciado en los datos crudos. Se observa en la media que el ruido fue minimizado por la media, pero quedando de alguna manera señales del ruido en el promediamiento de la señal.

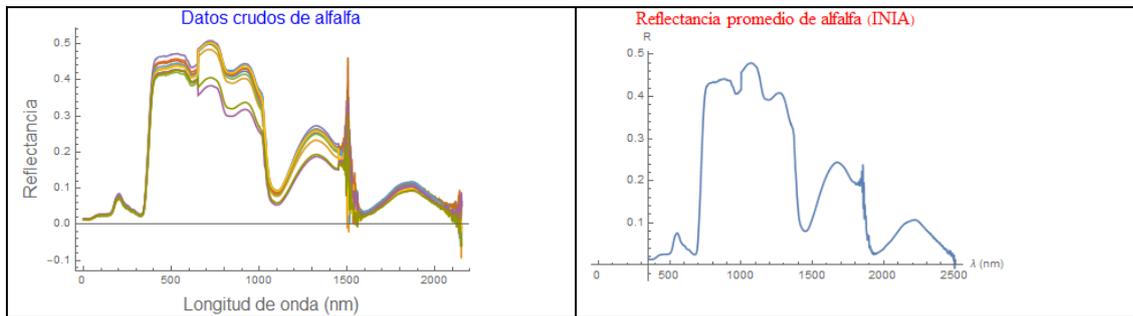


Fig. 11. Datos obtenidos en la medición (datos crudos) y curva del promedio de los diez datos.

La reflectancia promediada es la utilizada para el proceso de suavizamiento, en nuestro caso el Espectrorradiómetro tiene una resolución espectral de 3 nm hasta los 1000 nm y resolución de 30 nm hasta los 2500 nm. Como un ensayo para comprender cualitativamente que tipo de filtro es conveniente utilizar en el pretratamiento de los datos, se ha simulado un espectro con ruido aleatorio mostrado en la Fig. 12, el cual consta de un pico ancho y cuatro picos agudos de diferentes anchuras. En la Fig. 13 se muestra el suavizamiento con el filtro de la media para diferentes números de datos próximos, notándose que, al tomar una ventana de solamente dos datos, ajusta bien los datos excepto que no cubre totalmente los picos agudos. El otro rasgo es que el ruido en el pico ancho no es completamente eliminado. Cuando la ventana aumenta a 5 datos vecinos, mejora el suavizamiento del pico ancho pero el ajuste de los picos empeora, repitiéndose los mismo con una ventana de 10 datos vecinos, empeorando aún más el ajuste de los picos agudos.

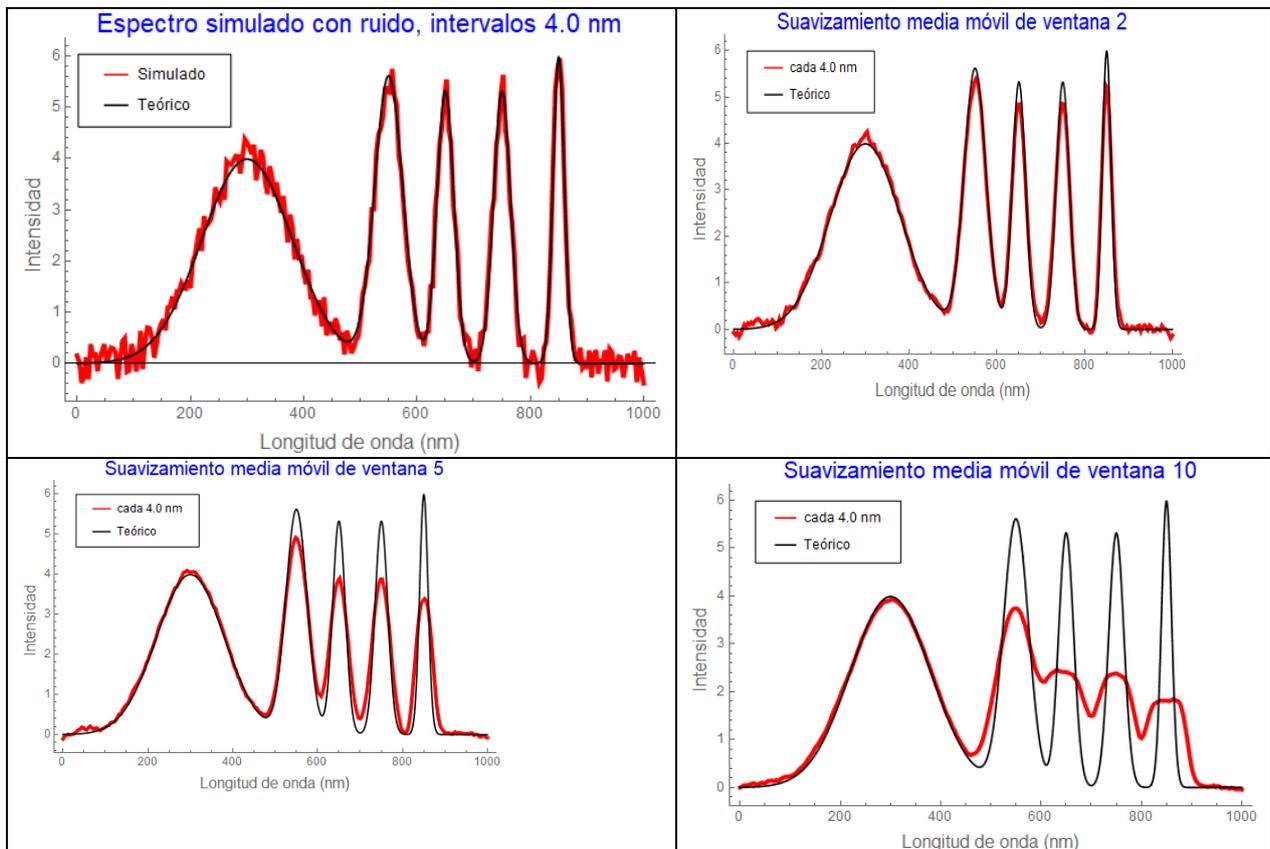


Fig. 12. Espectro simulado con ruido superpuesto y filtros de media móvil.

En el caso del filtro gaussiano mostrado en la Fig. 13, se observa que para la ventana de 2 datos ajusta muy bien los picos agudos y el ruido en el pico ancho no queda bien resuelto. Cuando la ventana aumenta a 5 y 10 datos empeora el ajuste de los picos agudos y mejora en el pico ancho, con un comportamiento similar al del filtro de media móvil.

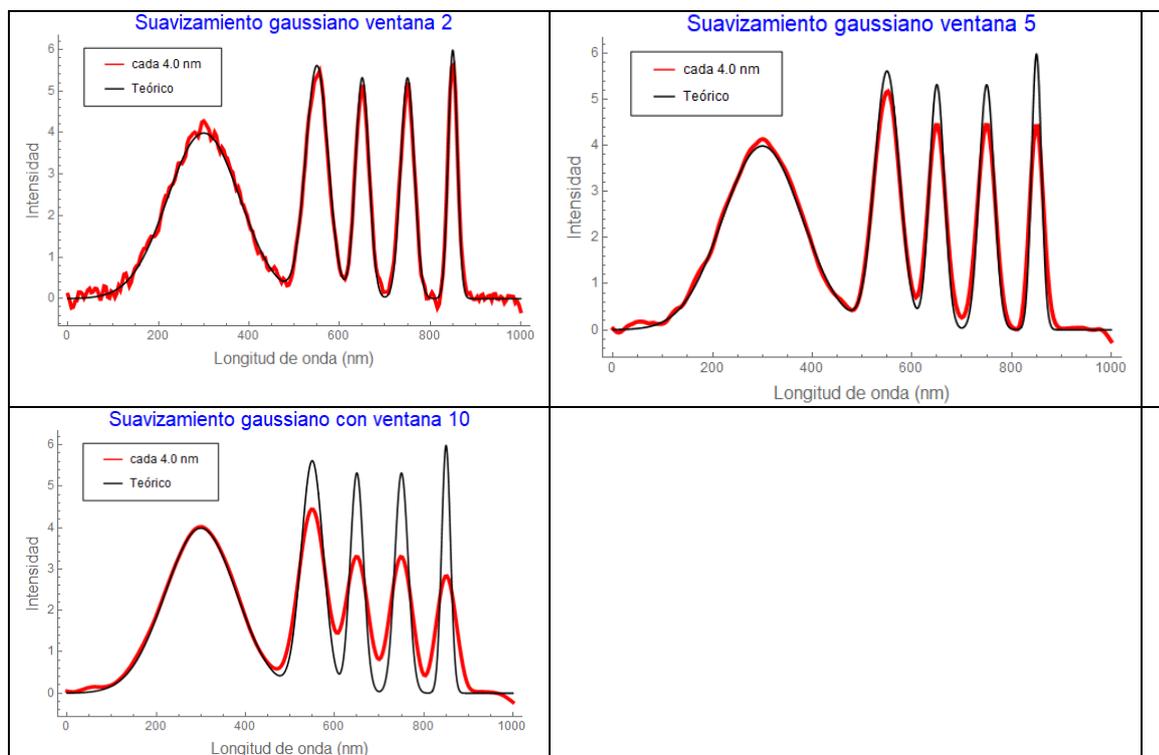
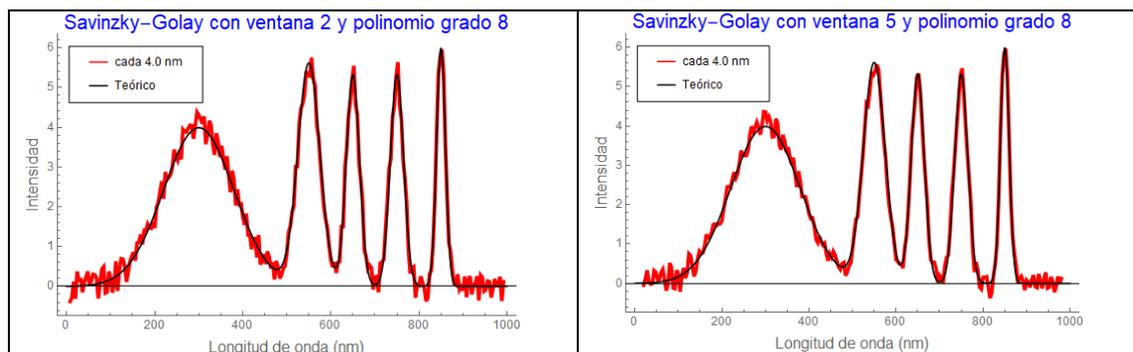


Fig. 13. Suavizamiento con filtro gaussiano.

En tercer filtro considerado es el de Savitzky-Golay bastante utilizado en espectroscopía, notándose en la Fig. 14 el excelente ajuste para la ventana de 2 y 5 datos. Incluso para una ventana de 21 datos se nota el buen ajuste de los picos agudos, a diferencia del filtro gaussiano y de media móvil. Sin embargo, se observa que el suavizamiento del pico ancho aun es pobre, mejorando para la ventana de 31 datos, pero desmejorando el ajuste de los picos agudos.



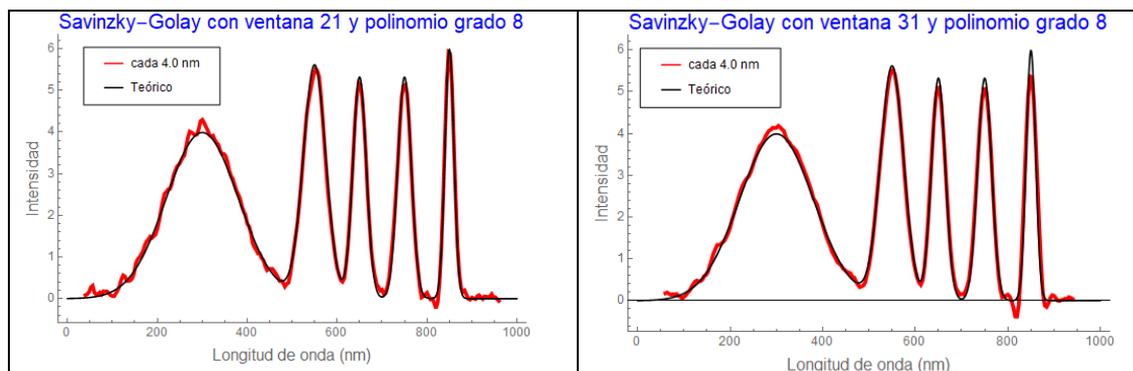


Fig. 14. Filtro de Savitzky-Golay para varias ventanas y polinomio de grado 8.

Con la finalidad de apreciar la versatilidad del filtro de Savitzky-Golay, se muestra en la Fig. 15 dos ajustes del mismo tamaño de ventana y grado del polinomio utilizado que es de grado 2. Sin embargo, en el primer caso el ajuste se hizo tomando datos en intervalos de 4.0 nm, donde el suavizamiento del pico ancho se bueno a expensas de los picos agudos donde se pierde información de la altura de los picos, en contraste con el suavizamiento en intervalos de 1.0 nm, ganándose en la resolución de los picos agudos y perdiendo en el pico ancho.

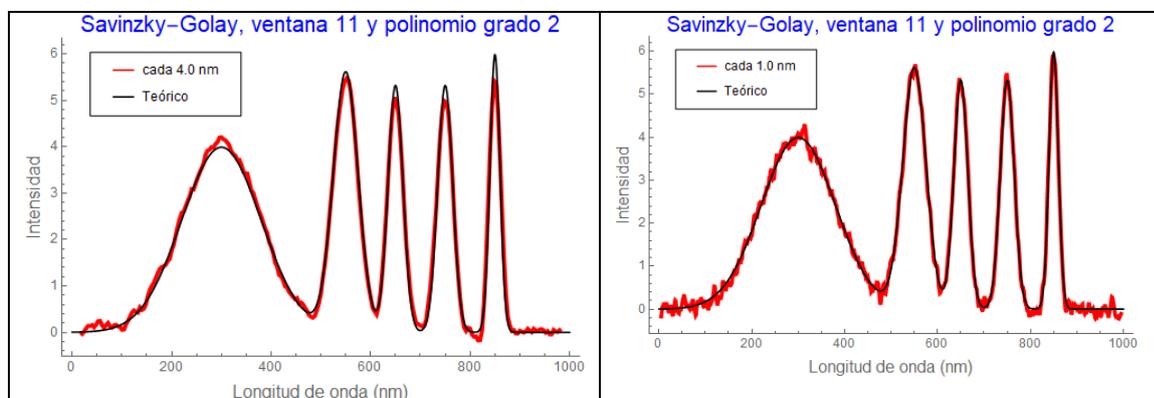


Fig. 15. Filtro de Savitzky-Golay de la misma ventana de datos y polinomio de grado 2, donde se han utilizado para el ajuste intervalos de 4.0 nm de 1.0 nm.

En términos generales, la conveniencia de utilizar uno de los filtros depende de la naturaleza de la información que se quiera obtener. Los filtros medios pierden información de los picos agudos que podría haber en el espectro con comportamiento similar, aunque un poco mejor con el filtro gaussiano. En este sentido el filtro de Savitzky-Golay es más versátil si se trata de no perder información de picos agudos, aun siendo computacionalmente más costoso que el filtro medio o de gauss.

Veamos en el caso de la reflectancia de las hojas verdes de plantas terrestres, mostrándose en la Fig. 16 la reflectancia espectral promediada de la alfalfa y el ajuste del filtro medio, observándose el excelente ajuste y la no necesidad de utilizar el filtro de Savitzky-Golay, puesto que el filtro medio es computacionalmente más rápido y ya se tiene incorporado en el software Mathematica. En el presente trabajo se utilizaron el filtro de media móvil para el pre tratamiento de los datos de reflectancia espectral.

### Reflectancia promedio y filtro de media móvil de alfalfa

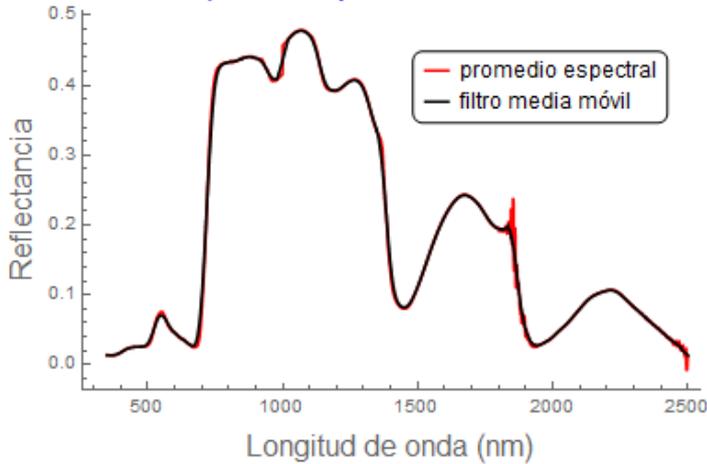
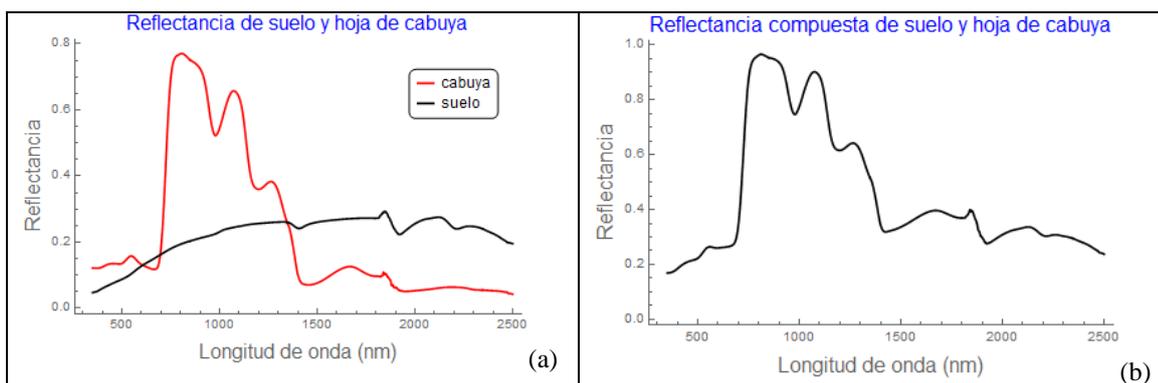


Fig. 16. Suavizamiento del filtro de media móvil sobre la curva espectral promediada.

### El uso de la derivada en la reflectancia espectral compuesta de hojas y de suelos.

En la Fig. 17 se muestra la reflectancia de una hoja verde típica, en este caso de la hoja de frejol, ilustrando tres bandas de absorción importantes de la hoja en la etapa joven de la planta, que corresponde a la banda de absorción fuerte por parte de las moléculas de agua en las longitudes de onda aproximadas de 1400 nm, 1900 nm y 2500 nm. En la parte visible e infrarrojo cercano se aprecia la absorción del azul y rojo por parte de la hoja, siendo el verde poco absorbido con un pico de reflectancia apreciable a aproximadamente 550 nm. Hay que también resaltar la fuerte reflectancia que se da en el infrarrojo cercano, los cuales son muy utilizados para cuantificar parámetros como los índices de vegetación.

En la Fig. 18 se tiene la reflectancia de la hoja o penca de cabuya junto con la de un suelo agrícola cercano. Debido a que el suelo se encontraba bastante seco, no se aprecia bien la absorción del agua (Fig. 18 (a)), notándose ligeras absorciones por el agua en las bandas de absorción señaladas más arriba. En la parte (b) de la Fig. 18 se tiene el espectro compuesto de las reflectancias espectrales del suelo y cabuya. Para apreciar la utilidad de la derivada espectral, en la parte (c) de la Fig. 18 se comparan la primera derivada de la reflectancia espectral de la hoja con la primera derivada de la reflectancia del suelo, notándose la poca influencia del suelo respecto a la de la hoja. En la Fig. 18 (d) se tiene la derivada del espectro compuesto de la Fig. 18 (b) comprándose con la derivada de sólo la cabuya, observándose la casi completa similitud. Al tomar la segunda derivada prácticamente desaparece la influencia del suelo, que no muestra en la figura. Esta comparación ilustra la importancia de tomar la derivada espectral para separar o eliminar la señal del suelo. Esta técnica es muy útil en percepción remota cuando se quiere monitorear la vegetación eliminando la influencia del suelo.



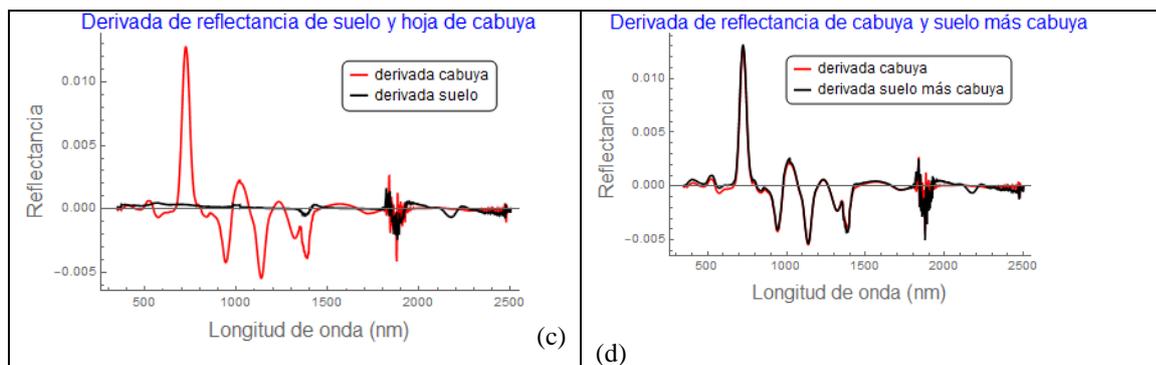


Fig. 18. Reflectancia espectral compuesta de hojas y suelo y su derivada primera.

Otra aplicación importante de la derivada en las reflectancias espectrales de las hojas verdes es la detección del borde rojo, que se define como el punto de inflexión entre el rojo y el infrarrojo cercano (NIR) debido al cambio de la curvatura que se produce en esa transición. Por cálculo se sabe que en el punto de inflexión se produce un máximo en su primera derivada, anulándose en la segunda derivada. Las investigaciones realizadas del borde rojo son concluyentes en la influencia que tiene con el contenido de clorofila de las hojas, un parámetro esencial en el monitoreo de la salud de las plantas. Al tomar la primera derivada es fácil detectar la longitud de onda a la que se produce el máximo. En la Fig. 18 (c) el borde rojo corresponde al máximo pronunciado que ocurre aproximadamente a los 750 nm. El borde rojo va cambiando de acuerdo al contenido de clorofila de la hoja.

### Derivada fraccionaria de hojas

Para la determinación de las derivadas fraccionarias se ha utilizado el algoritmo de Grünwald-Letnikov dada por la Ec. (6) con  $h = 1$ . Como un paso previo a su utilización, se ha realizado un ensayo discretizando una curva gaussiana y calculando numéricamente la derivada fraccionaria para valores  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{3}{4}$  y la primera derivada con el algoritmo fraccionario que coincide con la derivada entera estándar. Los resultados se muestran en la Fig. 19, donde el primer corte de las derivadas fraccionarias menores a uno se dan más allá del corte de la longitud de onda que se da con la primera derivada entera. Observar también que el pico debido al punto de inflexión al derivar la función es mayor para el ala izquierda de la gaussiana que para la derecha, disminuyendo a medida que el orden fraccionario menor que uno se acerca a la unidad. El análisis de este comportamiento de la derivada fraccionaria puede servir para discernir la naturaleza de la línea espectral, siendo imposible con las derivadas normales.

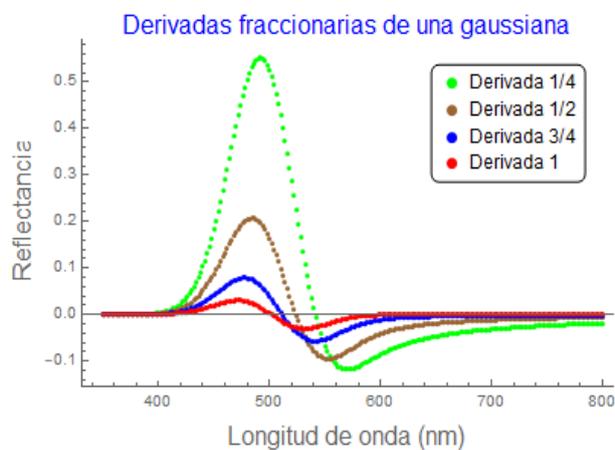


Fig. 19. Derivada fraccionaria de datos discretos de una curva gaussiana.

En la Fig. 20 se muestra derivadas del algoritmo fraccionario para la parte visible e infrarrojo cercano de la reflectancia espectral de la hoja de cabuya, hasta la longitud de onda de aproximadamente 1800 nm, evitando el fuerte ruido producido por la señal del agua, ya que se trata de ver el comportamiento de la parte visible y el infrarrojo cercano muy útiles en el análisis de parámetros como los índices de vegetación.

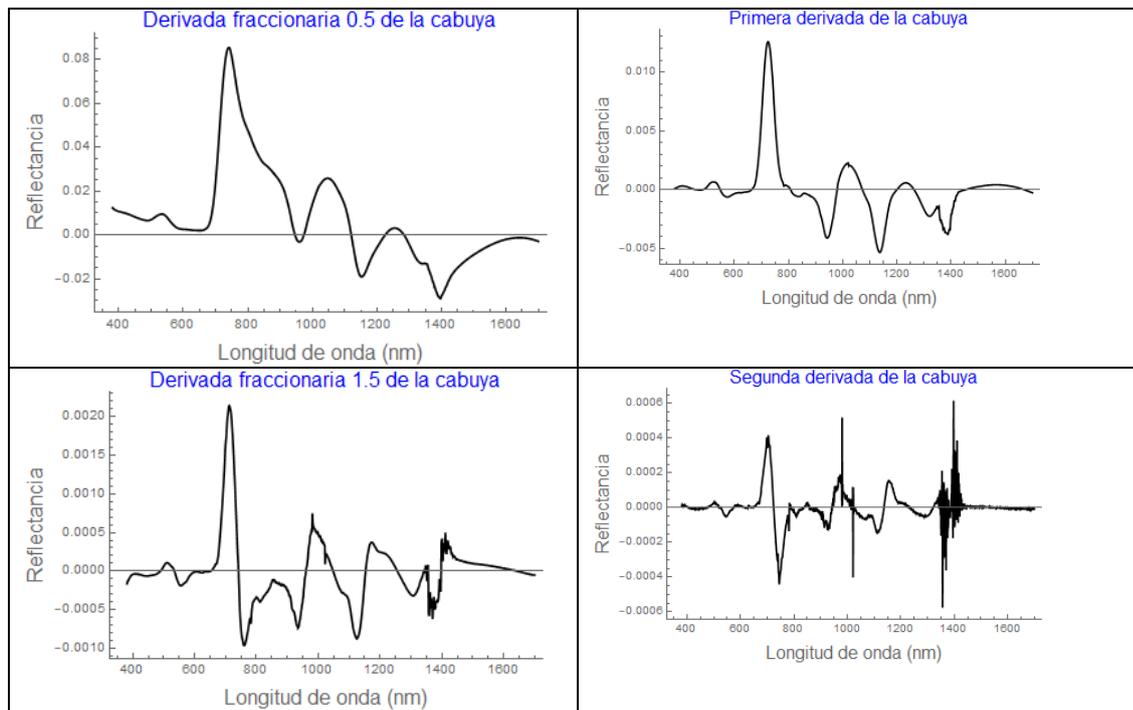


Fig. 20. Derivadas fraccionarias de la reflectancia espectral de la hoja de cabuya.

Para la derivada fraccionaria  $\frac{1}{2}=0.5$  de la reflectancia espectral mostrada en la Fig. 20, el primer pico más alto está relacionado al borde rojo que da información del contenido de clorofila de la hoja, mientras que los picos pequeños de la izquierda se relacionan a la reflectancia del verde y la absorción de otros pigmentos como los carotenoides y antocianinas. Los picos y valles a la derecha del borde rojo se relacionan a la estructura interna de las hojas y algunas moléculas al producirse absorción por esparcimiento interno de la radiación infrarroja. Estos resultados necesitan ser explorados a futuro.

## CONCLUSIONES

Básicamente se ha cumplido con el objetivo de la investigación de utilizar las derivadas para el análisis de las reflectancias espectrales de las hojas y sus posibles aplicaciones como en teledetección satelital.

Si bien las derivadas de las líneas espectrales son muy utilizadas desde hace más de cuatro décadas, ellas no se utilizan en nuestro medio para el análisis de las reflectancias espectrales de especies vegetales, especialmente cultivos andinos.

Siendo un trabajo inicial de esta naturaleza en nuestro medio, es importante resaltar que los protocolos y métodos utilizados servirán para posteriores trabajos de investigación en aplicaciones más específicas.

También hay que resaltar la utilización por primera vez de las derivadas fraccionarias para analizar reflectancias espectrales de las hojas. En la actualidad hay una tendencia en la comunidad científica internacional de utilizar las reflectancias espectrales de las hojas para extraer información sobre el contenido de clorofila sin necesidad de extracción de la misma, simplificando los procedimientos experimentales. Las mediciones de las reflectancias espectrales son técnicas no destructivas, lo cual ya es una ventaja, puesto que se puede tomar los datos en la misma planta y sin necesidad de trasladar a un laboratorio, por supuesto previa validación del método.

También hay que mencionar la posibilidad de usar las derivadas fraccionarias en el análisis de suelos, como cuantificar el contenido de metales pesados, contenido de material orgánico y otros, que en los últimos años se viene trabajando en los países desarrollados.

## RECOMENDACIONES

Por ser un trabajo inicial del uso de derivadas, especialmente derivadas fraccionarias, para el análisis de datos de reflectancia espectral, hay muchas perspectivas diversas de sus aplicaciones para fines específicos, de los cuales se recomienda los siguientes:

Investigar la posibilidad de cuantificar el contenido de clorofila de las hojas a partir de solamente la reflectancia espectral, requiriendo para ello comparar mediciones de cantidad de clorofila mediante la extracción de clorofila y la consiguiente medición de la absorbancia por los espectrofotómetros con la información que podría extraerse de la reflectancia espectral.

Utilizar los protocolos encontrados para también cuantificar otros pigmentos de las hojas como los carotenoides y antocianinas, aplicando especialmente a cultivos altoandinos esperando que puedan ofrecernos altos porcentajes relativos de los pigmentos mencionados.

De acuerdo a la literatura científica de los últimos años, las derivadas fraccionarias están ofreciendo resultados prometedores en análisis de suelos salinos, contenido de material orgánico y algunos tipos de metales pesados. Los protocolos desembocan en la implementación de programas de procesamiento de datos para tal fin.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aoki, M., Yabuki, K. y Totsuka, T. (1981). An evaluation of chlorophyll content of leaves based on the spectral reflectivity in several plants. Research Report of the National Institute of Environmental Studies of Japan, 66, 125-130.

Butler, W. L., & Hopkins, D. W. (1970). *Higher Derivative Analysis of Complex Absorption Spectra*. *Photochemistry and Photobiology*, 12(6), 439-450.

Collins, W. (1978). Remote sensing of crop type and maturity, *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing*, 44, 43-55.

Fu, C.-B., Xiong, H.-G., & Tian, A.-H. (2019). *Study on the Effect of Fractional Derivative on the Hyperspectral Data of Soil Organic Matter Content in Arid Region*. *Journal of Spectroscopy*, 2019, 1-11. doi:10.1155/2019/7159317.

Herrmann, R. (2011). *Fractional Calculus, An Introduction for Physicists*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.

Hong, Y., Liu, Y., Chen, Y., Liu, Y., Yu, L., Liu, Y., & Cheng, H. (2019). *Application of fractional-order derivative in the quantitative estimation of soil organic matter content through visible and near-infrared spectroscopy*. *Geoderma*, 337, 758-769. doi: 10.1016/j.geoderma.2018.10.025.

Horler, D. N. H., Dockray, M. y Barber, J. (1983). *The red edge of plant leaf reflectance*. *International Journal of Remote Sensing*, 4(2), 273-288. doi:10.1080/01431168308948546.

Kharintsev, S.S. and Salakhov, M.Kh. (2004). A simple method to extract spectral parameters using fractional derivative spectrometry, *Spectrochimica Acta Part A* 60, 2125-2133.

Li, C. y Zeng, F. (2015). *Numerical Methods for Fractional Calculus*. CRC Press Taylor & Francis Group.

Morrey, J.R. (1968). On Determining Spectral Peak Positions from Composite Spectra with a Digital Computer, *Analytical Chemistry*, 40, 905-014.

Ortigueira, D.M. (2011). *Fractional Calculus for Scientists and Engineers*. Springer, Heidelberg.

Podlubny, I. (1999). *Fractional Differential Equations, An Introduction*. Academic Press.

- Richardson, A. D., Duigan, S. P. y Berlyn, G. (2002). An evaluation of noninvasive methods to estimate foliar chlorophyll content. *New Phytologist*, 153, 185–194. <https://doi.org/10.1046/j.0028-646X.2001.00289.x>.
- Schmitt, J. M. (1998). *Fractional Derivative Analysis of Diffuse Reflectance Spectra*. *Applied Spectroscopy*, 52(6), 840–846. doi:10.1366/0003702981944580.
- Talsky, G. (1994). *Derivative Spectrophotometry, Low and Higher Order*. VCH Publishers, Inc., New York.
- Tian, A.H., Zhao, J.S, Li, Z.B., Xiong, H.G. and Fu, C.B. (2019). Land Surface Temperature vs. Soil Spectral Reflectance Fractional Approach and Fractional Differential Algorithm, *Thermal Science*, 23, 2389-2395.
- Tucker, C. J. (1979). *Red and photographic infrared linear combinations for monitoring vegetation*. *Remote Sensing of Environment*, 8(2), 127–150. doi:10.1016/0034-4257(79)90013-0.
- Wang, J., Tiyip, T., Ding, J., Zhang, D., Liu, W., & Wang, F. (2017). *Quantitative Estimation of Organic Matter Content in Arid Soil Using Vis-NIR Spectroscopy Preprocessed by Fractional Derivative*. *Journal of Spectroscopy*, 2017, 1–9. doi:10.1155/2017/1375158.
- Wang, J., Ding, J., Abulimiti, A., & Cai, L. (2018). *Quantitative estimation of soil salinity by means of different modeling methods and visible-near infrared (VIS-NIR) spectroscopy, Ebinur Lake Wetland, Northwest China*. *PeerJ*, 6, e4703. doi:10.7717/peerj.4703.
- Wessman, C. A., Aber, J. D., Peterson, D. L. y Melillo, J. M. (1988). *Remote sensing of canopy chemistry and nitrogen cycling in temperate forest ecosystems*. *Nature*, 335(6186), 154–156. doi:10.1038/335154a0.
- Zhang, Y., Benson, D. A., & Reeves, D. M. (2009). *Time and space nonlocalities underlying fractional-derivative models: Distinction and literature review of field applications*. *Advances in Water Resources*, 32(4), 561–581. doi:10.1016/j.advwatres. 2009.01.008.