

Supervisión in-situ y en tiempo real del color de una muestra líquida usando PCA 3D

G. Comina

Laboratorio de Películas Delgadas, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería

E-mail: gcomina@uni.edu.pe

Recibido el 06 de junio del 2006; aceptado el 16 de junio del 2006

En éste trabajo se presenta un sistema capaz de supervisar el color que toma una muestra líquida en un instante de tiempo. El sistema se basa en un sensor de color controlado por una computadora. Se diseñó un software que adquiere los datos y realiza el análisis por componentes principales PCA, presentando en tiempo real el diagrama de puntuaciones PCA en tres dimensiones.

Palabras Calve: PCA 3D tiempo real, in-situ PCA, colorimetría.

In this work a system that monitors the color of a liquid flow, using Principal Components Analysis (PCA) in real-time, has been achieved. The system is based on a commercial color sensor, which is controlled by a personal computer. Special designed software acquires the data, and makes the PCA analysis. The three dimensional PCA score plot is shown in real-time.

Keywords: real time PCA 3D, in-situ PCA, reflectance, liquid flow color.

1. Introducción

El color es un factor importante para muchas industrias [1], a partir del exceso o falta de color es posible determinar la calidad de un producto [2].

En muchos procesos industriales se usan técnicas espectroscópicas; las cuales analizan la luz reflejada o transmitida a través de la muestra.

El uso de la luz reflejada por la muestra permite el análisis de una muestra opaca, o que por razones experimentales de fabricación, es imposible medir la luz transmitida [3].

La reflectancia en el rango visible, se usa en la industria para el reconocimiento de colores, y existen espectrofotómetros comerciales que realizan dicha tarea.

Cada color tiene un espectro de reflexión (muestras opacas) o transmisión (muestras transparentes) único en el rango visible (400nm-800nm).

Técnicamente, supervisar el color de una muestra involucra obtener el espectro visible y compararlo con el espectro de un color de referencia. Sin embargo la comparación con un solo color solo da información acerca de si el color de la muestra se acerca o aleja del color de referencia.

El objetivo del presente trabajo es construir un sistema automatizado que permita supervisar en tiempo real el color de una muestra líquida; la cual pasa a través de una celda de flujo.

2. Análisis por Componentes Principales Dinámico

Para obtener el espectro de la luz reflejada por una celda de flujo; se utilizó el sensor de color Honeywell Mod.CRS301; el cual es un espectrofotómetro de reflexión, para el rango visible (400nm – 800nm). Utiliza una fuente de luz blanca la cual pasa a través de una fibra óptica hacia un cabezal móvil, el cual posee lentes de enfoque. La luz se que se refleja en la celda de líquido regresa a través de la

misma fibra óptica hacia el cuerpo del espectrofotómetro; se utiliza un prisma para dispersar la luz y la luz dispersada va hacia 256 sensores, obteniéndose un espectro de reflexión con 1.6nm de resolución.

Por tanto el espectro de la luz reflejada por la celda de flujo puede representarse por R_j ; donde j es un entero entre 0 y 255.

En el presente trabajo se analizan datos dinámicos, por tanto el número de muestras que se toma depende de la frecuencia de sensado del sistema, así para un tiempo t se pueden tomar i muestras, cada una de las cuales representa al color que tiene el líquido en la celda de flujo en cierto instante de tiempo. Dicha frecuencia de sensado debe ser por lo menos el doble que la frecuencia de cambio en el color del líquido y así evitar errores de medida como lo predice el Teorema de Nyquist.

Por tanto la forma del espectro cambia de acuerdo como cambie el color del líquido. Y éste color cambia con el tiempo.

En un trabajo anterior se analizó el espectro de absorción de muestras líquidas usando el Análisis de Componentes Principales (PCA) en dos componentes para discriminar a las muestras [5].

En el presente trabajo se utilizó como base el PCA pero con la diferencia, respecto al trabajo anterior, de que el número de muestras no es fijo sino que varía con el tiempo; por tanto la medición de j longitudes de onda (256 en éste caso) o "variables" y de i ($i=f(t)$) muestras u "objetos", pueden representarse por la matriz: R_{ij} .

Cada medición de una muestra i , se expresa como un vector en el espacio j -dimensional. El PCA permite reducir las dimensiones de dicho espacio.

Usando PCA los datos del espacio j -dimensional, se proyectan en el plano formado por la componente principal 1 (PC1, es la dirección en el espacio j -dimensional, donde está la mayor variancia de \bar{R}), la componente principal 2 (PC2, es la segunda dirección en importancia donde esta la variancia de \bar{R}); y la componente principal 3 (PC3, es la

tercera dirección en importancia donde esta la variancia de \overline{R}).

El primer paso es centrar cada objeto de la matriz respecto de la media \overline{R}_j como se observa en la ecuación:

$$R_{ij} = R_{ij} - \overline{R}_j \quad (1)$$

Luego se crea un modelo lineal, el cual consta de un término llamado de estructura, formado por el producto de dos matrices (TP^T), y el término de error residual, E , o la parte de la matriz que no pudo ajustarse al término de estructura, como se observa en la ecuación:

$$R = TP^T + E \quad (2)$$

O en forma equivalente:

$$R = \sum_{w=1}^A t_w p_w^T + E \quad (3)$$

donde A , es el número de componentes principales del modelo, t_w es el vector de puntuación (score) para la componente w y p_w es el vector de carga (loading) para la componente w . El algoritmo calcula sucesivamente cada t_w , p_w y cada E_w que es la matriz de error para cada componente principal w . Los gráficos que se utilizan en el presente trabajo son los gráficos de puntuación con tres componentes principales PC1, PC2, y PC3, los cuales cambian en forma dinámica cuando el color del líquido en la celda de flujo cambia.

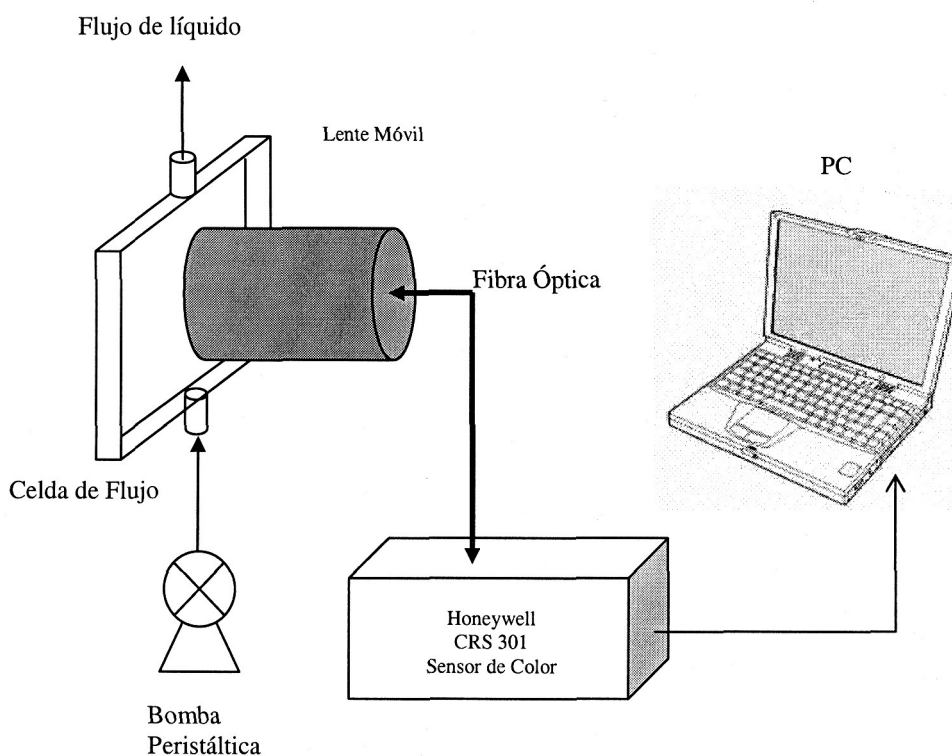


Figura 1. Esquema de la configuración experimental.

3. Procedimiento Experimental y Resultados

Se construyó una celda de flujo con dos ventanas transparentes, fuera del vidrio de la ventana posterior se colocó una pantalla blanca. De tal manera que la lente móvil del sensor de color se colocó frente a la ventana transparente. Ver figura 1.

Se desarrolló un software en LabView para adquirir los datos del sensor de color conectado a través del puerto RS-232 a la PC, ver figura 2. Los datos del espectro obtenido se normalizaron y se guardaron en un archivo.

Posteriormente cuando el número de espectros sea mayor a 4; el software realiza el análisis PCA. El software da como resultado el gráfico de puntuación con 3 componentes. Se prepararon 5 soluciones con diferentes colores: Amarillo (E104, E120), Verde (E104, E131), Rojo (Acid Fuchsine, Merck 7629), Naranja (Orange G, Merck 6878), Azul (Aniline Blue, Merck 1275) y además el solvente (agua destilada) el cual es transparente.

Usando la bomba peristáltica se succionaron en forma continua las muestras; en el siguiente orden: solvente, amarillo, verde, rojo, naranja, azul, y nuevamente el

solvente; cuidando que no se generen burbujas en la celda de flujo.

En la figura 3; se observa el gráfico de todos los espectros tomados durante el proceso. Se puede observar la existencia de varias familias de curvas; cada una de las cuales corresponde al color del líquido; por ejemplo desde el inicio del experimento $t=0$ hasta $t=40$ muestras corresponden al solvente; luego la siguiente familia al amarillo; luego verde, luego rojo, luego naranja, después azul y por último el solvente. De tal manera que se puede distinguir a partir de la forma del espectro cual es el color del líquido que pasa por

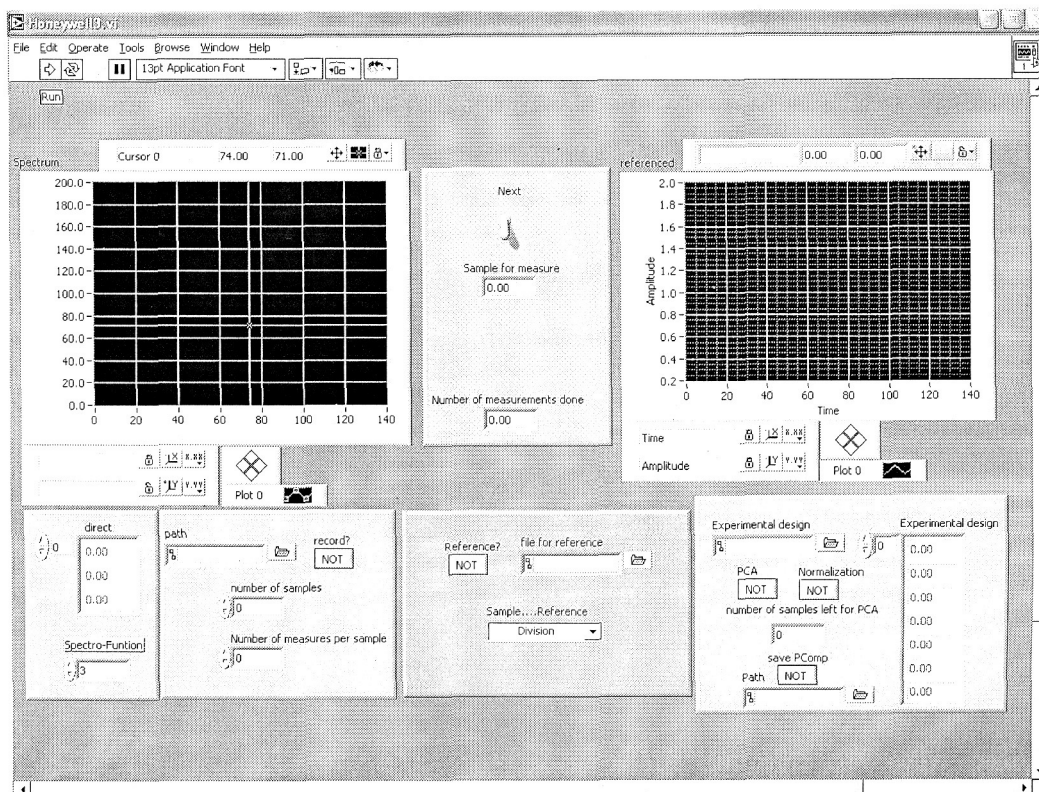


Figura 2. Panel de control del software desarrollado para el sistema. Toma datos del sensor de color y los analiza usando PCA y grafica el PCA-3D in-situ.

la celda de flujo. Este proceso resulta tedioso y poco práctico para un operario, e inclusive es poco práctico en el momento de implementar un algoritmo de computadora.

En la figura 4 se observa el gráfico de puntuación PCA en 3 dimensiones, hecho in-situ y en tiempo real; a través de él se puede observar con claridad el cambio de color, además, como es característico del PCA, cada espectro que posee 256 pares ordenados (Longitud de onda, Reflexión); se reduce a un solo punto, en este caso de tres dimensiones en el espacio

de componentes principales, facilitando la comparación entre colores y la formulación de algoritmos especializados para la determinación de posibles causas en la línea de producción que estén motivando el cambio de color en el producto final, y su corrección.

Usando el gráfico de puntuación fue posible determinar si el color del líquido cambia, in-situ y en tiempo real. Además con el gráfico se pudo determinar hacia que color estaba cambiando.

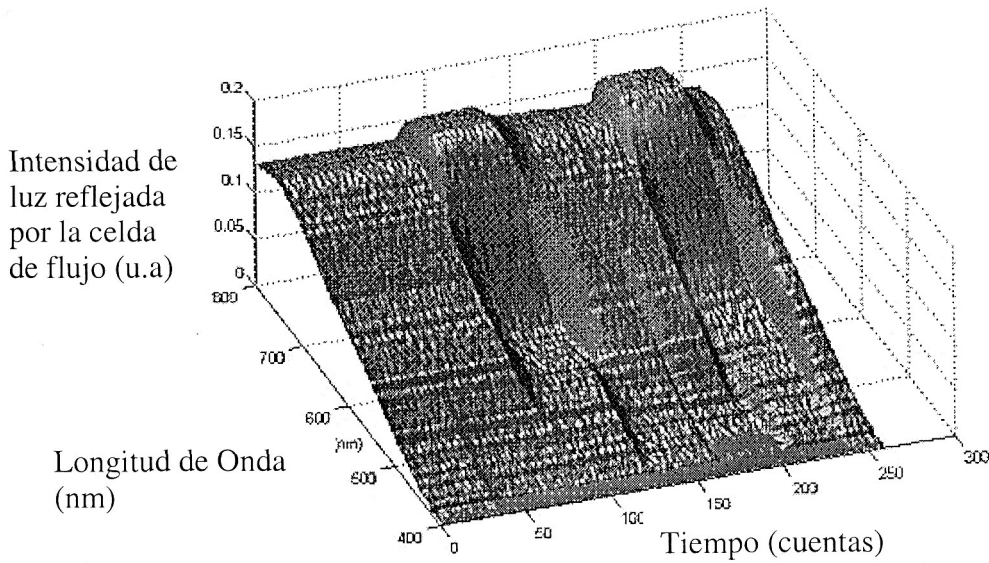


Figura 3. Gráfico de todos los espectros de reflexión que corresponden a la variación temporal del color del líquido que pasa por la celda de flujo.

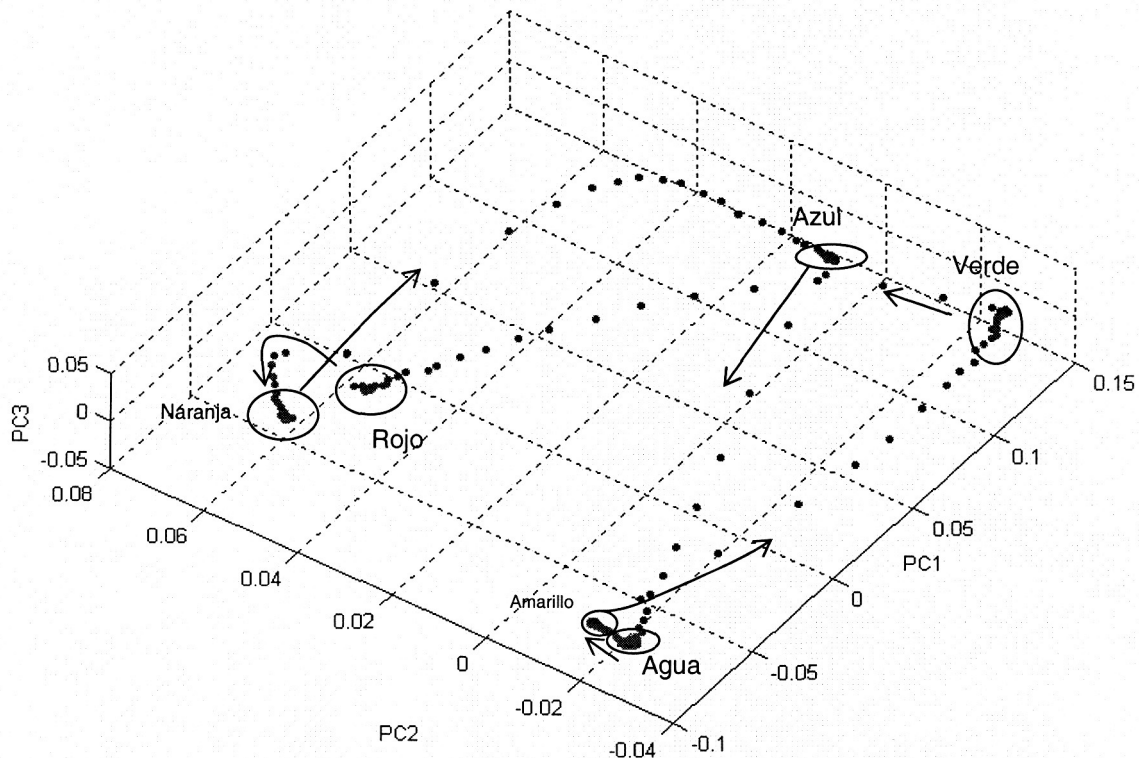


Figura 4. Gráfico PCA-3D dinámico observado en tiempo real, el cual indica cómo cambió el color del líquido en la celda.

3. Conclusiones.

Se desarrolló un sistema que grafica el PCA con tres componentes in-situ y en tiempo real; el cual da información acerca del color de un líquido que pasa a través de una celda de flujo.

Usando el gráfico de puntuaciones, dado por el sistema, es posible distinguir que color tiene el líquido en la celda y la trayectoria del cambio de color del líquido.

El uso de éste sistema posibilita la supervisión automatizada del color de una muestra así como la posibilidad de tomar medidas correctivas en una línea de producción para garantizar el color del producto.

Agradecimientos

Al Departamento de Física Aplicada (IFM) de la Universidad de Linköping, por los equipos y facilidades necesarias para la realización del presente trabajo.

Así mismo, a la Facultad de Ciencias de la Universidad Nacional de Ingeniería y al Internacional Science Programme de la Universidad de Uppsala.

1. T.N.McCaig, Extending the use of visible/near-infrared reflectance spectrophotometers to measure colour of food and agricultural products, *Food Research International*, **35** (2002) 731-736.
2. Yongliang Liu, Xuotong Fan, Yud-Ren Chen and Donald W. Thayer, Changes in structure and color characteristics of irradiated chicken breasts as a function of dosage and storage time. *Meat Science*, **63** (2003) 301-307.
3. G.Comina, J.Rodriguez, J.Solís, W.Estrada; In situ laser reflectometry measurements of pyrolytic ZnO film growth. *Meas.Sci.Technol*, **16** (2005) 685-690.
4. D.Filippini, G.Comina, I.Lundström; Computer Screen photo-assisted reflectance fingerprint. *Sensors and Actuators B*, **107** (2005) 580-586.
5. G.Comina, J.Solís, W.Estrada; Uso del análisis multivariado de datos y espectrometría de absorción uv-visble para la determinación simultanea de la concentración de Co, Cu y Ni en una solución. *TECNIA* **14** (2) 2004 57-62.