

REVCIUNI

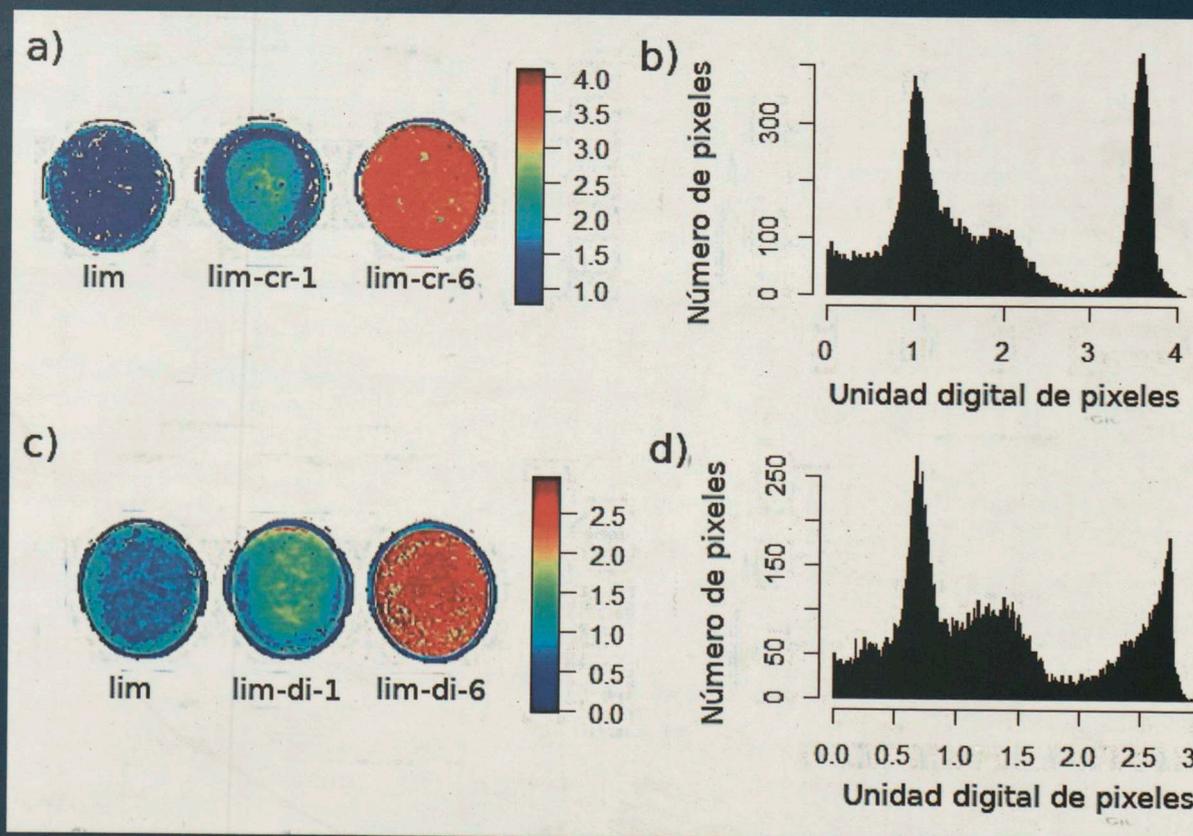
VOLUMEN 21

NÚMERO 1

ENERO-DICIEMBRE 2018

Revista de la Facultad de Ciencias de la UNI - REVCIUNI

Publicada por la Unidad de Investigación de la Facultad de Ciencias
de la Universidad Nacional de Ingeniería



Revista de la Facultad de Ciencias de la UNI – REVCUNI

Volumen 21, Número 1, enero-diciembre 2018

ISSN: 1813-3894

Publicada por la Unidad de Investigación de la Facultad de Ciencias
de la Universidad Nacional de Ingeniería

Director de la Unidad de Investigación:

Dr. Héctor Raúl Loro Ramírez

Comité Editorial:

- Dr. Héctor Loro (Universidad Nacional de Ingeniería, UNI - Perú)
- Dr. Juan Dávalos (Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, España)
- Dr. Jose Manuel Hernández Alcántara (IFUNAM, México)

Comité Científico:

- Dr. Roger Metzger (Universidad Nacional de Ingeniería, UNI - Perú)
- Dr. Andrés La Rosa (Portland State University, PSU - EE.UU.)
- Dr. Armando Bernui (Observatorio Nacional, ON - Brasil)

La revista se distribuye en la Facultad de Ciencias – UNI

Av. Túpac Amaru 210 - Rimac

Lima - Perú

Página web: <http://fc.uni.edu.pe/revciuni>

E-mail: investigacionfc@uni.edu.pe

Frecuencia de publicación: Anual

**HECHO EL DEPÓSITO LEGAL EN LA
BIBLIOTECA NACIONAL DEL PERÚ N° 1999 - 3597
Revista indexada en el LATINDEX**

Se terminó de imprimir en:

imprenta FABET e.i.r.l.

Jr. San Juan de Dios Mza. K Lote. 15, Urbanización: San Juan de Dios

correo: fabeteirl@yahoo.com / móvil: 938 397 237

EDITORIAL

La investigación es una actividad inherente al que hacer universitario y a través de los diversos laboratorios de investigación que posee, genera el conocimiento necesario que impulsa la actualización, modernización y búsqueda de nuevos horizontes que mantengan vigente esta necesidad de investigar. Dentro de las tareas que debe desarrollar una universidad esta la labor de investigación y a la vez difundir sus resultados. REVCIUNI, la revista de la Facultad de Ciencias de la UNI, tiene como objetivo ser un medio que de manera periódica muestre los resultados de investigaciones desarrolladas en la Facultad de Ciencias, producto de proyectos de investigación así como de las tesis desarrolladas en nuestra Facultad. REVCIUNI busca también motivar a los miembros de la Facultad a publicar artículos para incrementar su frecuencia y así poder alcanzar nuevos retos. Es por ello que a partir del Volumen Nro 22, REVCIUNI será publicada con una frecuencia de dos números por año.

Esperamos que los artículos publicados en la REVCIUNI sirvan de motivación para que nuevos autores aparezcan en nuestra revista y a la vez se incremente el número de trabajos de investigación en nuestra universidad.

Dr. Orlando Pereyra Ravinez
Decano
Facultad de Ciencias
Universidad Nacional de Ingeniería

El Movimiento Browniano con Reflexión como un Problema de Martingala

Herberth Paucar Romero, Gonzalo Panizo García [†]

IMCA, Instituto de Matemática y Ciencias Afines, Universidad Nacional de Ingeniería, Calle Los Biólogos 245 Urb. San Cesar, La Molina, Lima 12, Perú

[†]gonzalo.panizo@gmail.com

Recibido el 10 de Abril del 2018; aceptado el 10 de Mayo del 2018

Este trabajo aborda el problema de la construcción del Movimiento Browniano Reflejado (RBM) en $[0, 1]$, inicio de caminos aleatorios reflejados reescalados. Usando el método del problema de Martingala, se demuestra que tales procesos convergen débilmente a RBM.

Palabras claves: RBM, problema de Martingala, caminos aleatorios.

This work addresses the question of the construction of the Reflected Brownian Motion (RBM) in $[0, 1]$, begining of rescaled reflected random walks. Using the Martingale Problem method it is proved that such processes converge weakly to RBM.

Keywords: RBM, Martingala problem, random walks.

1 Preliminares.

El Movimiento Browniano (MB) es uno de los procesos estocásticos más conocidos y con más aplicaciones en la investigación técnica y científica [1][2][3]. Para dar una descripción de su naturaleza, comenzamos mencionando que el MB es un proceso de Markov y puede ser descrito tanto por un generador infinitesimal $\mathcal{L} : C^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow C^1(\mathbb{R}^d)$

$$\mathcal{L}(f) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}, \quad (1)$$

así como por un Kernel $(P_t)_{t \geq 0}$

$$E(f(X_t)|\Gamma_s) = P_{t-s}f(X_s) \quad t \geq s \geq 0. \quad (2)$$

Ambas funciones están relacionadas, y puede hallarse una a partir de la otra usando la ecuación

$$\mathcal{L}f = \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t} (P_t f - f).$$

Existen varias formas de estudiar el Movimiento Browniano, entre los que están

- **Método de ecuaciones diferenciales parciales [4].**

Como el proceso cuyo kernel es solución de la ecuación en derivadas parciales:

$$\frac{\partial}{\partial s} P(s, x) + \mathcal{L}P(s, x) = 0 \quad (3)$$

- **Método del problema de Martingala [5].**

Como el proceso que satisface que la siguiente

expresión es una martingala para todo $f \in C_0^2(\mathbb{R})$.

$$f(X_t) - \int_0^t \mathcal{L}f(X_s) ds \quad (4)$$

El Movimiento Browniano con Reflexión (MBR) presenta una dificultad adicional, que es el comportamiento en el borde de un conjunto acotado. Los métodos mencionados arriba no abordan esa posibilidad, por lo cual es necesario trabajar con una técnica más general. Para tal fin en el presente artículo se usará el método del Problema de Submartingala [6], que es propicio para estudiar procesos que se desarrollan en subconjuntos limitados, en cuyos bordes pueden haber absorciones o reflexiones.

En primer lugar se definirán los dos métodos que se usan en el presente trabajo:

Sea Ω es el espacio $C([0, \infty[, \mathbb{R}^d)$, $(\Gamma_t)_{t \geq 0}$ la filtración canónica.

Definición 1.0.1. Dadas las funciones medibles y acotadas $a : [0, \infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow S_d$ y $b : [0, \infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ y

$$L_t = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d a_{i,j}(t, x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^d b_i(t, x) \frac{\partial}{\partial x_i}$$

Dado $x \in \mathbb{R}^d$, una solución al **Problema de Martingala** para L_t (o para a y b) es una probabilidad P_x en (Ω, Γ) que satisface

1. $P_x(X_0 = x) = 1,$

2. $f(X_t) - \int_0^t L_s f(X_s) ds$ es una P_x -martingala para todo $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$.

La definición anterior es muy útil porque permite construir procesos de Markov y procesos de difusión, pero presenta algunos problemas al estudiar procesos en regiones acotadas, especialmente en los bordes, es por ello que se suele definir un método menos exigente, cuyo planteamiento es el siguiente:

Definición 1.0.2. Sea $\Omega = C([0, \infty[, \mathbb{R}^d)$, $(\Gamma_t)_{t \geq 0}$ la filtración canónica y G un subconjunto abierto no vacío de \mathbb{R}^d al que asociamos una función $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ de manera que

1. $\phi \in C_b^2(\mathbb{R}^d)$,
2. $G = \{x \in \mathbb{R}^d : \phi(x) > 0\}$ y $\partial G = \{x \in \mathbb{R}^d : \phi(x) = 0\}$,
3. $|\nabla\phi(x)| \geq 1$ en ∂G .

Sean también las funciones

1. $a : [0, \infty[\times G \rightarrow S_d^+$ continua y acotada,
2. $b : [0, \infty[\times G \rightarrow \mathbb{R}^d$ medible y acotada,
3. $\gamma : [0, \infty[\times \partial G \rightarrow \mathbb{R}^d$ continua, acotada y satisfice $\langle \gamma(t, x), \nabla\phi(x) \rangle \geq \beta > 0$ en todo su dominio,
4. $\rho : [0, \infty[\times \partial G \rightarrow [0, \infty[$ continua y acotada.

Definimos los operadores

$$L_u = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d a_{i,j}(u, x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^d b_i(u, x) \frac{\partial}{\partial x_i}$$

y

$$J_u = \sum_i \gamma_i(u, x) \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

Se dice que una probabilidad P en (Ω, Γ) resuelve el **Problema de submartingala** en G para los coeficientes a, b, γ y ρ si :

1. $P(X_t \in \overline{G}) = 1$ para $t \geq 0$,
2. $M_f(t) = f(t, X_t) - \int_0^t [\mathbb{1}_G(f_u + L_u f)(u, X_u)] du$ es una P -submartingala para cualquier $f \in C_0^{1,2}([0, \infty[\times \mathbb{R}^d)$ que satisfice $\rho f_t + J_t f \geq 0$ en $[0, \infty[\times \partial G$.

2 Fundamentación teórica.

Cuando el proceso se desarrolla en una región con frontera es conveniente empezar a analizar dicho proceso con el Problema de submartingala, ya que considera su comportamiento en el borde. Partiendo de la verificación del problema de submartingala, hay una forma de conseguir un resultado similar al Problema de martingala:

Theorem 2.1. Sea P la solución del problema de submartingala. Existe una única función $\xi_0 : [0, \infty[\times \Omega \rightarrow [0, \infty[$ continua, no decreciente y no anticipante tal que $\xi_0(0) = 0$, $E(\xi_0(t)) < \infty$,

$$\xi_0(t) = \int_0^t \mathbb{1}_{\partial G}(X_u) d\xi_0(u) \quad (5)$$

y

$$f(t, X_t) - \int_0^t [\mathbb{1}_G(Kf)(u, X_u)] du - \int_0^t (\rho f_u + J_u f)(u, X_u) d\xi_0(u) \quad (6)$$

es una P -martingala para todo $f \in F$. En particular si $f \in C_b^{1,2}([0, \infty[\times \mathbb{R}^d)$ y $\rho f_u + J_u f \geq 0$ en $[0, \infty[\times \partial G$ entonces

$$f(t, X_t) - \int_0^t [\mathbb{1}_G(f_u + L_u f)(u, X_u)] du - \int_0^t (\rho f_u + J_u f)(u, X_u) d\xi_0(u). \quad (7)$$

es una P -martingala.

Proof. Ver [6] □

El análisis de procesos de difusión suele iniciar construyendo procesos en tiempo discreto (con saltos de estado en múltiplos de un $h > 0$) a los que se asocia funciones que asemejen los coeficientes de arrastre y de difusión de un proceso en tiempo continuo.

Definición 2.0.1. Sea $(P^h)_{h>0}$ una familia de procesos con saltos en múltiplos de h , se definen los siguientes coeficientes (de error, difusión y arrastre.)

$$\Delta^h(jh, x) = \frac{1}{h} \int \|y - x\|^{2+\alpha} \Pi_j^h(x, dy) \quad \alpha > 0.$$

$$a^h(jh, x) = \frac{1}{h} \int (y - x) \otimes (y - x) \Pi_j^h(x, dy)$$

$$b^h(jh, x) = \frac{1}{h} \int (y - x) \Pi_j^h(x, dy).$$

Se extiende la definición anterior para cualquier tiempo $t \in [0, T]$

$$\Delta^h(t, x) = \frac{1}{h} \int \|y - x\|^{2+\alpha} \Pi_j^h(x, dy)$$

$$\text{para } jh \leq t < (j+1)h.$$

$$a^h(t, x) = \frac{1}{h} \int (y - x) \otimes (y - x) \Pi_j^h(x, dy)$$

$$\text{para } jh \leq t < (j+1)h.$$

$$b^h(jh, x) = \frac{1}{h} \int (y - x) \Pi_j^h(x, dy)$$

$$\text{para } jh \leq t < (j+1)h.$$

Si dichos coeficientes cumplen adecuadas condiciones, se prueba que existen subsucesiones de dichos procesos que convergen débilmente a algún proceso:

Theorem 2.2. Si se verifican las condiciones:

1. Sea $\sup_{0 \leq t \leq T} \sup_{x \in \overline{G}} \Delta^h(t, x) = \Delta(h)$. Si $h \rightarrow 0$ entonces $\Delta(h) \rightarrow 0$,
2. Existen constantes $M < \infty$ y $c > 0$ tal que $\|b^h(t, x)\| > M \rightarrow \langle \nabla\phi(x), b^h(t, x) \rangle \geq c \|b^h(t, x)\|$,

3. Para todo $\delta > 0$ existe una constante $M_\delta < \infty$ tal que $\|b^h(t, x)\| > M_\delta \rightarrow \phi(x) < \delta$,
4. Existe una constante $M < \infty$ tal que $\sup_{0 \leq t \leq T} \sup_{x \in \bar{G}} a^h(t, x) \leq M$.

Entonces para cualquier compacto $K \subset \bar{G}$ la colección $\{P_x^h, h > 0, x \in \bar{G}\}$ es relativamente compacta. Además cualquier límite débil está concentrado en $C([0, T], \bar{G}) \subset D([0, T], \bar{G})$.

Proof. Ver [6]. □

Si ya se tiene probada la existencia de un proceso límite, y las funciones a, b, γ y ρ (las dos últimas solo actúan en la frontera) se relacionan adecuadamente, entonces se obtiene el problema de submartingala.

Proposition 2.3. Si se cumplen las condiciones

1. $a^h \rightarrow a$ y $b^h \rightarrow b$ uniformemente en compactos de $[0, T] \times G$, con a y b coeficientes continuos de difusión y arrastre,
2. Existen una función continua acotada $\rho(t, x) \geq 0$ y una función vectorial continua $\gamma(t, x)$ en $[0, T] \times \partial G$ tal que $\langle \gamma(t, y), \nabla \phi(y) \rangle = 1$. Sean $J_0 = \{(t, y) : \rho(t, y) = 0\}$, $J_1 = \{(t, y) : \rho(t, y) > 0\}$, ρ y γ están relacionadas con a^h y b^h de la forma:

(a) Dado $(t, y) \in J_1$ y $\epsilon > 0$ existen $h_0, \delta_0 > 0$ tal que si $|x - y| < \delta_0$, $|s - t| < \delta_0$, $h < h_0$ y $\langle \nabla \phi(x), a^h(s, x) \nabla \phi(x) \rangle < \delta_0 \rightarrow \|a^h(s, x)\| < \epsilon$ y $\|b^h(s, x) - \frac{\gamma(t, y)}{\rho(t, y)}\| < \epsilon$,

(b) Dado $(t, y) \in J_1$ existen $\delta_0 > 0$ $M_0 < \infty$ tal que si $|x - y| < \delta_0$, $|s - t| < \delta_0 \rightarrow \|b^h(s, x)\| \leq M_0 \forall h$,

(c) Dados $(t, y) \in J_0$ y $M < \infty$ existen $h_0, \delta_0 > 0$ tal que si $|x - y| < \delta_0$, $|s - t| < \delta_0$, $h < h_0$ y $\langle \nabla \phi(x), a^h(s, x) \nabla \phi(x) \rangle < \delta_0 \rightarrow \|b^h(s, x)\| \geq M$,

(d) Dados $(t, y) \in J_0$ y $\epsilon > 0$ existen $h_0, \delta_0 > 0$ y $N_0 < \infty$ de tal manera que si $|x - y| < \delta_0$, $|s - t| < \delta_0$, $h < h_0$ y $\|b^h(s, x)\| > N_0 \rightarrow \|\frac{b^h(s, x)}{\langle b^h(s, x), \nabla \phi(x) \rangle} - \gamma(t, y)\| < \epsilon$

y si además $h_n \rightarrow 0$, $x_n \rightarrow x$ y $P_{x_n}^{h_n} \Rightarrow P$. Entonces P tiene las siguientes propiedades

1. $P(X_0 = x) = 1$

2. Para toda función f en $C_0^{1,2}([0, T] \times \bar{G})$ con $\rho \frac{\partial f}{\partial t} + \langle \gamma, \nabla f \rangle \geq 0$ en $[0, T] \times \partial G$, la expresión $f(t, X_t) - \int_0^t (f_s + L_s f)(s, X_s) \mathbb{1}_G(X_s) ds$ es una submartingala, donde $L_s f = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d a_{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial f}{\partial x_i}$.

Proof. Ver [6]. □

3 Construcción del MBR.

Sea un camino aleatorio η^n con transiciones en tiempos enteros y espacio de estados $\{0, 1, \dots, n\}$, definido de manera que si el camino está en un estado i del subespacio $\{1, 2, \dots, n - 1\}$ entonces podrá saltar a los estados $i - 1$ e $i + 1$ con probabilidad $\frac{1}{2}$ en ambos casos, si está en el estado 0 podrá saltar al estado 1 con probabilidad 1 y si se encuentra en n saltará al estado $n - 1$ también con probabilidad 1. A partir de este camino aleatorio se construye un proceso en tiempo continuo:

$$X^n : (\Omega, \Gamma, Q) \rightarrow D([0, T], \{0, 1, 2, \dots, n\}) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (8)$$

mediante la relación

$$X_t^n = \eta_k^n \text{ si } k \leq t < k + 1, \quad \forall k \geq 0,$$

con distribuciones

$$P^n = Q(X^n)^{-1} \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (9)$$

La matriz de transición de dicho proceso X^n es:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

y su generador L_n actúa en las funciones $f : \{0, 1, \dots, n\} \rightarrow \mathfrak{R}$ como:

$$(L_n f)(j) = \begin{cases} \frac{1}{2}(f(j+1) - f(j)) + \frac{1}{2}(f(j-1) - f(j)) \\ \text{si } j \in \{1, 2, \dots, n-1\}; \\ f(1) - f(0) \text{ si } j = 0; \\ f(n-1) - f(n) \text{ si } j = n. \end{cases}$$

Haciendo un reescalamiento espacial del proceso anterior se obtiene

$$Y_t^n = \frac{X_t^n}{n},$$

con espacio de estados $E_n = \{0, \frac{1}{n}, \dots, \frac{n-1}{n}, 1\}$.

Si además se reescala el tiempo en el factor n^2 se tiene el proceso

$$Y_{tn^2}^n, \quad (10)$$

cuyo generador \mathcal{L}_n aplicado a las funciones $g : \{0, \frac{1}{n}, \dots, \frac{n-1}{n}, 1\} \rightarrow \mathfrak{R}$ da

$$(\mathcal{L}_n g)(x) = \begin{cases} n^2[\frac{1}{2}(g(x + \frac{1}{n}) - g(x)) + \frac{1}{2}(g(x - \frac{1}{n}) - g(x))] \text{ si } x \in \{\frac{1}{n}, \dots, \frac{n-1}{n}\}; \\ n^2[g(\frac{1}{n}) - g(0)] \text{ si } x = 0; \\ n^2[g(1 - \frac{1}{n}) - g(1)] \text{ si } x = 1. \end{cases}$$

De la colección de procesos $(Y^n)_{n \geq 0}$ seleccionamos la subcolección $(Y^{2^n})_{n \geq 0}$ debido a que nos permite construir una sucesión de procesos con espacios de estados crecientes y encajados

$$E_1 \subseteq E_2 \subseteq E_3 \subseteq \dots$$

Dados $G =]0, 1[$ y $\partial G = \{0, 1\}$, se verifica que la función

$$\begin{aligned} \phi :]0, 1[&\rightarrow \mathfrak{R} \\ x &\mapsto x(1-x) \end{aligned}$$

determina bien la región $[0, 1]$, en el sentido de que cumple:

$$]0, 1[= \phi^{-1}(]0, \infty[),$$

$$\{0, 1\} = \phi^{-1}(\{0\}),$$

$$|\phi'(0)| = |\phi'(1)| = 1.$$

Debido a que para el proceso Y^{2^n} el espacio fue reescalado en el factor 2^n , se debe reescalar el tiempo en el factor $\frac{1}{h_n} = 2^{2^n}$ y se define la función de transición como:

$$\Pi_j^{h_n}(x, x + \frac{1}{2^n}) = \Pi_j^{h_n}(x, x - \frac{1}{2^n}) = \frac{1}{2} \\ \text{si } x \in \{\frac{1}{2^n}, \dots, \frac{2^n - 1}{2^n}\},$$

$$\Pi_j^{h_n}(0, \frac{1}{2^n}) = 1,$$

$$\Pi_j^{h_n}(1, \frac{2^n - 1}{2^n}) = 1.$$

Luego se hallan los coeficientes de error, difusión y arrastre de los procesos en tiempo discreto (Definición 2.0.1):

$$\Delta^{h_n}(hj, x) = \begin{cases} \frac{1}{2^{\alpha n}} & \text{si } x \in \{\frac{1}{2^n}, \dots, \frac{2^n - 1}{2^n}\}; \\ \frac{1}{2^{\alpha n}} & \text{si } x = 0; \\ \frac{1}{2^{\alpha n}} & \text{si } x = 1. \end{cases}$$

$$a^{h_n}(jh, x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \{\frac{1}{2^n}, \dots, \frac{2^n - 1}{2^n}\}; \\ 1 & \text{si } x = 0; \\ 1 & \text{si } x = 1. \end{cases}$$

$$b^{h_n}(jh, x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in \{\frac{1}{2^n}, \dots, \frac{2^n - 1}{2^n}\}; \\ 2^n & \text{si } x = 0; \\ -2^n & \text{si } x = 1. \end{cases}$$

De ahora en adelante se simplificará la notación escribiendo $a^n(\cdot, \cdot)$ en lugar de $a^{h_n}(\cdot, \cdot)$ y de igual manera para b^{h_n} y Δ^{h_n} .

Se verifica que los coeficientes anteriores satisfacen las condiciones del Teorema 2.2:

1. $\Delta(n) = \sup_{0 \leq t \leq T} \sup_{x \in [0, 1]} \Delta^n(t, x) = \frac{1}{2^{\alpha n}}$ por lo tanto $\Delta(n) \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$,
2. Sean $c = M = 1$ tal que si $\|b^n(t, x)\| > 1$ (entonces $x \in \{0, 1\}$) y por ello para $x = 0$ tenemos $(1)(2^n) \geq (1)(2^n)$ y para $x = 1$ $(-1)(-2^n) \geq (1)(2^n)$,
3. Para cualquier δ elijamos $M_\delta = 1$ de manera que si $\|b^n(t, x)\| > 1$ entonces $x \in \{0, 1\}$ y $\phi(x) = 0 < \delta$,
4. Eligiendo $M = 1$ obtenemos $\sup_{0 \leq t \leq T} \sup_{x \in [0, 1]} a^n(t, x) \leq 1$.

Por lo tanto la colección de procesos $(Y^{2^n})_{n \geq 0}$ es relativamente compacta en $D([0, T], [0, 1])$ y cualquiera de sus límites débiles está concentrado en $C([0, T], [0, 1])$, es decir $\exists(k_n) \subseteq \mathbb{N}$ y $Y : (\Omega, \Gamma, Q) \rightarrow D([0, T], [0, 1])$ tal que

$$Y^{2^{k_n}} \Rightarrow Y$$

con la distribución $P = QY^{-1}$ concentrada en $C([0, T], [0, 1])$.

A continuación se comprueba que los coeficientes cumplen las condiciones de la Proposición 2.3:

1. Como $a^n = 1$ y $b^n = 0$ en $]0, 1[$ la primera condición se cumple,
2. Sean $\rho = 0$ y $\gamma(t, 0) = 1, \gamma(t, 1) = -1$ funciones en $[0, T] \times \{0, 1\}$ que cumplen la igualdad $\langle \gamma(t, y), \nabla \phi(y) \rangle = 1$. Los conjuntos J_0 y J_1 serían respectivamente $[0, T] \times \{0, 1\}$ y \emptyset
 - (a) Se cumple pues $J_1 = \emptyset$,
 - (b) Se cumple pues $J_1 = \emptyset$,
 - (c) Se sabe que $(\phi'(x))^2 = (1 - 2x)^2$, si elegimos $\delta_0 \leq \frac{1}{100}$ entonces los x para los que $|y - x| < \delta_0$ y $\langle \nabla \phi(x), a^h(s, x) \nabla \phi(x) \rangle < \delta_0$ deben estar a una distancia menor a $\frac{1}{100}$ de los bordes y pertenecer a $] \frac{9}{20}, \frac{11}{20} [$, cosa que no se cumple. Por lo tanto por defecto se verifica el item,
 - (d) Si $N_0 = 1$ con lo que $x \in \{0, 1\}$ y por ello $\| \frac{b^h(s, x)}{\langle b^h(s, x), \nabla \phi(x) \rangle} - \gamma(t, y) \| = 0$ cumpliéndose la condición.

Por lo tanto para todo f en $C_0^{1,2}([0, T] \times [0, 1])$ con $\frac{\partial f}{\partial x}(t, 0) \geq 0$ y $\frac{\partial f}{\partial x}(t, 1) \leq 0, t \geq 0$, la expresión

$$f(t, X_t) - \int_0^t (f_s + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2})(s, X_s) \mathbb{1}_{]0, 1[}(X_s) ds \quad (11)$$

es una P - submartingala.

Como P está concentrada en $C([0, T], [0, 1])$ la expresión (11) es una submartingala para $f \in C_0^{1,2}([0, T] \times \mathfrak{R})$. Además una función $f \in C_0^{1,2}([0, \infty[\times \mathfrak{R})$ restringida al dominio $[0, T] \times \mathfrak{R}$ pertenece a $C_0^{1,2}([0, T] \times \mathfrak{R})$, por lo que para $t \in [0, T]$ (11) es una submartingala para $f \in C_0^{1,2}([0, \infty[\times \mathfrak{R})$, y por ello P resuelve el problema de submartingala.

Observación. En el presente trabajo se eligió $\rho = 0$ y $\gamma(0) = 1, \gamma(1) = -1$, hecho que puede ser interpretado asegurando que el campo de velocidades en 0 es $+\infty$ y en 1 es $-\infty$, lo que explicaría el hecho de que en los bordes el proceso es reflejado inmediatamente. Si $\frac{\gamma}{\rho}$ fuera finito cabría la posibilidad que el proceso se quedara pegado un lapso en la frontera. Por ello, como los caminos o trayectorias son continuos, tocarán la frontera en tiempos aislados y por lo tanto una cantidad contable de veces hasta un tiempo finito T .

Debido al teorema 2.1 se puede hallar una función ξ_0 que solo aumenta cuando el proceso toca el borde $\{0, 1\}$, de manera que

$$f(t, X_t) - \int_0^t [\mathbb{1}_{]0,1[}(f_u + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2})(u, X_u)] du - \int_0^t J_u f(u, X_u) d\xi_0(u)$$

es una P -martingala para $f \in C_0^{1,2}([0, \infty[\times \mathfrak{R})$.

Observación. Nótese que ya no se requieren ni $\frac{\partial f}{\partial x}(t, 0) \geq 0$ ni $\frac{\partial f}{\partial x}(t, 1) \leq 0$, $t \geq 0$.

Fijando un $\omega \in C([0, \infty[\times]0, 1])$, como ξ_0 es continua, no decreciente y solo puede aumentar en un conjunto contable de tiempos aislados (ver Observaciones precedentes), $\xi_0(\cdot, \omega)$ es constante. Por ello, con f bajo las mismas condiciones que arriba se obtiene que

$$f(t, X_t) - \int_0^t [(f_u + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2})(u, X_u)] du$$

es una P -martingala.

Hasta ahora se ha usado la teoría general, pero como el proceso se construyó a partir de procesos en tiempo discreto homogéneos (sus matrices de transición no dependen del tiempo), los resultados se pueden adaptar de manera que se obtiene que

$$f(X_t) - \int_0^t [(\frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dx^2})(X_u)] du$$

es una P -martingala para $f \in C_0^2(\mathfrak{R})$.

Por lo tanto P es un proceso de Markov, mas aun es una difusión con generador $\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2}$, que corresponde a un Movimiento Browniano, y se mueve en el intervalo $[0, 1]$, reflejándose inmediatamente al tocar el borde $\{0, 1\}$.

-
1. A.S.Sznitman. *Papers of Brownian Motion and Stochastic Calculus(ETH)*. spring 2010.
 2. D.Revuz, M.Yor. *Continuous Martingales and Brownian Motion*. Springer Verlag, 1991.
 3. G.A.Pavliotis. *Applied Stochastic Processes*. Imperial College London Press, 2009.
 4. L.C.G.Rogers, D.Williams. *Diffusions, Markov Processes and Martingales*. John Wiley & Sons, 1994.
 5. D. W. Stroock, S. R. S. Varadhan. *Multidimensional Diffusion Processes*. Springer, 1979.
 6. D. W. Stroock, S. R. S. Varadhan. *Diffusion Processes with boundary conditions*. Communications on pure and applied mathematics, XXIV 147-225, 1971.

Revisión del método Híbrido de Alto Orden para un problema de difusión variable

Rommel Bustinza[†], Jonathan Munguia La Cotera[‡]

Departamento de Ingeniería Matemática & Centro de Investigación en Ingeniería Matemática (CPMA), Universidad de Concepción, Casilla 160-C, Concepción, Chile;
Escuela Profesional de Matemática, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Av. Túpac Amaru 210, Rímac, Lima, Perú;
e-mail: [†]rbustinz@ing-mat.udec.cl, [‡]munguia.la.cotera@gmail.com

Recibido 24 de Abril del 2018; aceptado 4 de Junio del 2018

En este trabajo, se aproxima la solución de un problema de difusión variable con condición de frontera Neumann (siendo posible otras condiciones de frontera) a través de una novedosa técnica numérica conocida como método Híbrido de Alto Orden con sus siglas en inglés (HHO), el cual posee las siguientes características: i) aproximación con polinomios de orden arbitrario sobre los elementos y bordes (o caras) de mallas poliédricas generales, ii) diseño de un operador discreto llamado gradiente reconstructivo local (elemento a elemento) y un término de estabilización local, que impone débilmente el salto entre el polinomio basado en el elemento y sus respectivos bordes, iii) costo computacional barato gracias a una condensación estática, que nos permite trabajar solo sobre el esqueleto de la malla. Probamos que el esquema numérico está bien planteado y es convergente, obteniéndose la estimación de error de la variable potencial y del flujo. Finalmente, se proporcionan algunos ejemplos numéricos, que están de acuerdo con nuestros resultados teóricos.

Palabras Claves: Problema elíptico de Neumann, mallas generales, orden arbitrario, gradiente reconstructivo.

In this work, we approximate the solution of an elliptic diffusion problem with Neumann boundary condition through a novel numerical technique known as Hybrid High-Order (HHO) method, which has the following characteristics: i) the support of arbitrary approximation order polynomial at mesh elements and faces (or edges) on general polyhedral meshes, ii) the design of a local (element-wise) discrete gradient reconstruction operator and a local stabilization term, which weakly enforces the matching between the polynomial based on the element and its respective faces, iii) cheap computational cost thanks to static condensation, which allows us to solve only on the skeleton of the mesh. We prove the well-posedness of the numerical scheme as well as its convergence, obtaining the error estimates of potential and flux variables. Finally, some numerical examples are provided, which are in agreement with our theoretical results.

Keywords: Neumann elliptic problem, generalized meshes, high order approximation, reconstructive gradient.

1 Introducción

En los últimos años, se ha dedicado un esfuerzo significativo a la concepción y análisis de métodos de discretización para Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP) elípticas en mallas generales, incluidas las interfaces no coincidentes y elementos politópicos. Estas mallas se encuentran, por ejemplo, en el contexto de simulaciones de flujo subsuperficial en acuíferos salinos y cuencas de petróleo, donde los elementos poliédricos y las interfaces no coincidentes aparecen como consecuencia de las capas y fracturas erosionadas. También pueden aparecer elementos politópicos en el modelado de yacimientos de petróleo, específicamente en las regiones cercanas al pozo, donde las mallas radiales se emplean generalmente para explicar las características (cualitativas) de la solución.

Paralelamente, los métodos de discretización de alto orden han recibido una atención significativa en los últimos años. Ya que aumentar el orden de aproximación puede acelerar significativamente la convergencia cuando la solución muestra una regularidad local sufi-

ciente. Cuando éste no es el caso, la convergencia de los métodos de alto orden se pueden recuperar utilizando la adaptación de malla (mediante refinamiento local o engrosamiento). Los métodos de discretización politópicos de alto orden pueden obtenerse mediante enfoques totalmente no conformes, como el método de Galerkin Discontinuo con sus siglas en inglés (DG); cf. [1]. Una clase interesante de estos últimos son los llamados métodos de Galerkin Discontinuos Hibridizables (HDG) [5], los cuales se diseñaron originalmente como versiones discretas de una caracterización de la solución exacta en términos de soluciones de problemas locales combinadas globalmente a través de condiciones de transmisión.

Nuestro enfoque está aquí en el método de alto orden híbrido (HHO) introducido en ([11],[9]). El término **híbrido** se refiere al hecho de que el método se formuló originalmente utilizando incógnitas discretas ligadas a las celdas y caras de la malla. Estas incógnitas discretas son funciones polinomiales, las ligadas a los elementos de malla pueden eliminarse localmente por condensación estática. El término de **alto orden** se refiere al hecho de que el orden de las funciones polinomiales puede ser

un entero arbitrario $k \geq 0$. La idea principal de los métodos HHO consiste en reconstruir localmente los operadores diferenciales de orden superior que actúan sobre las incógnitas ligadas al elemento y sus caras. Estas reconstrucciones se basan en la fórmula de integración por partes. También se introduce un término de penalización de alto orden a las contribuciones locales para obtener la estabilidad del método. Este término nos permite acoplar localmente las variables ligadas al elemento con el de sus caras. Las contribuciones locales se conciben de modo que las únicas incógnitas acopladas globalmente después de la condensación estática sean polinomios discontinuos en el esqueleto de malla.

Los métodos de HHO ofrecen varias ventajas. Además de trabajar con mallas generales, su construcción es independiente de las dimensiones, y son localmente conservativos [10]. Además, permiten un tratamiento natural de los parámetros físicos [8] y conducen a discretizaciones que son robustas en todo el rango de variación de los parámetros físicos en diversas situaciones, por ejemplo, difusión heterogénea / anisotrópica [8], elasticidad lineal casi incompresible [9].

El objetivo de este documento es proporcionar una revisión actualizada del método HHO para problemas elípticos con un tensor de difusión que puede ser heterogéneo/anisotrópico. Asumimos que existe una partición $\{\Gamma_D, \Gamma_N\}$ de la frontera $\Gamma := \partial\Omega$ tal que $\Gamma := \bar{\Gamma}_N \cup \bar{\Gamma}_D$, $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$ y con $|\Gamma_D| > 0$.

$$-\nabla \cdot (K\nabla u) = f \text{ en } \Omega, \quad (1a)$$

$$K\nabla u \cdot \mathbf{n} = g_N \text{ sobre } \Gamma_N, \quad (1b)$$

$$u = g_D \text{ sobre } \Gamma_D, \quad (1c)$$

donde $f \in L^2(\Omega)$, $g_N \in L^2(\Gamma_N)$, $g_D \in H^{1/2}(\Gamma_D)$ y \mathbf{n} la normal exterior unitaria.

El problema con condición de frontera Dirichlet puro ha sido analizado en [8], el de condiciones mixtas en [12] y recientemente se ha analizado el caso de condición de Neumann puro en [3]. Es importante destacar que el análisis de esto último no está contenido en [12].

Este trabajo se organiza de la siguiente manera. En la sección 2 se introduce el problema modelo para el caso particular de condición de frontera Neumann. Sección 3 se introduce las notaciones y definiciones generales, así también como el espacio discreto y el operador de reconstrucción. Sección 4 se introduce la formulación según la filosofía HHO. Sección 5 se presenta el análisis de error a priori y finalmente en la sección 6 se muestra algunos resultados numéricos.

2 Problema modelo

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{2, 3\}$, un dominio politópico abierto, acotado, con frontera Lipschitz continua $\Gamma := \partial\Omega$ y normal exterior unitaria \mathbf{n} . Para cada subconjunto conexo $X \subset \bar{\Omega}$ con medida de Lebesgue no nula, el producto interno y la norma del espacio $L^2(X)$ son denotados por $(\cdot, \cdot)_X$ y $\|\cdot\|_X$, respectivamente, y la misma notación se usa en $L^2(X)^d$. Sea $K \in [L^\infty(\Omega)]^{d \times d}$ una función tensorial (describe las propiedades del material) simétrica,

Lipschitz por partes sobre una partición politópica P_Ω de Ω , uniformemente elíptica, en el sentido que, existe 2 constantes positivas c_1 and c_2 , tal que en casi todo punto, $x \in \Omega$,

$$c_1|\xi|^2 \leq \xi^T K(x) \xi \leq c_2|\xi|^2 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d,$$

donde $|\cdot|$ representa la norma euclídeana usual en \mathbb{R}^d . Consideramos ahora el problema de Neumann, cuando $\Gamma_D = \emptyset$ y $\Gamma_N = \Gamma$. Además, sea $f \in L^2(\Omega)$ el término fuente y $g \in L^2(\Gamma)$ el flujo a través de la frontera. Este tipo de problema puede expresarse como:

$$-\nabla \cdot (K\nabla u) = f \text{ in } \Omega, \quad (2a)$$

$$K\nabla u \cdot \mathbf{n} = g \text{ on } \Gamma. \quad (2b)$$

Enfatizamos que el análisis variacional del problema de Neumann (2) es diferente del correspondiente al problema mixto (1), pues en este último se aprovecha el hecho que la frontera Dirichlet es de medida no nula. Por otro lado, para garantizar existencia de solución débil de (2), exigimos que los datos f y g cumplan la siguiente condición de compatibilidad

$$\int_{\Omega} f + \int_{\Gamma} g = 0. \quad (3)$$

Es bien sabido que la formulación primal de (2) se lee: *Encontrar $u \in U := \{v \in H^1(\Omega) : (v, 1)_{\Omega} = 0\}$ tal que*

$$(K\nabla u, \nabla v)_{\Omega} = (f, v)_{\Omega} + (g, v)_{\Gamma} \quad \forall v \in U, \quad (4)$$

donde se ha impuesto la condición de media nula en el espacio de búsqueda para obtener unicidad de solución débil. Se sigue de la desigualdad de Poincaré-Wirtinger y del lema de Lax-Milgram, que el problema (4) tiene solución débil, y ésta es única.

Para simplificar la exposición, también asumiremos que K es un polinomio por partes; de lo contrario, se debe tener en cuenta un error de cuadratura adicional. En aplicaciones de geociencia, K a menudo se puede tomar constantes por partes.

3 Marco discreto

Sea $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^+$ un conjunto contable de tamaño de mallas que tienen al cero como único punto de acumulación y $(\mathcal{T}_h)_{h \in \mathcal{H}}$ una familia de mallas admisibles de $\bar{\Omega}$ (véase Sección 1.4 en [7]). Cada \mathcal{T}_h es una colección de elementos politópicos abiertos T , no vacíos, disjuntos dos a dos, tal que $\bar{\Omega} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} \bar{T}$ y $h = \max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T$ (con h_T el diámetro de T), y existe una submalla de \mathcal{T}_h de simples de nodos coincidentes con tamaño de malla localmente equivalente y de forma regular en el sentido usual (γ es el parámetro de regularidad de la malla). Llamamos cara F a cualquier hiperplano cerrado y conexo de $\bar{\Omega}$ con medida positiva de dimensión $(d-1)$ y tal que (i) existen $T_1, T_2 \in \mathcal{T}_h$ tal que $F \subset \partial T_1 \cap \partial T_2$ (F es llamada cara interior) o (ii) existe $T \in \mathcal{T}_h$ tal que $F \subset \partial T \cap \partial\Omega$ (F es llamada cara frontera). Las caras interiores forman el conjunto \mathcal{F}_h^i , las de frontera forman el conjunto \mathcal{F}_h^∂ , y sea $\mathcal{F}_h := \mathcal{F}_h^i \cup \mathcal{F}_h^\partial$ el conjunto de caras inducido por \mathcal{T}_h . El diámetro de una cara $F \in \mathcal{F}_h$ se denota por h_F . Para cada $T \in \mathcal{T}_h$, $\mathcal{F}_T := \{F \in \mathcal{F}_h \mid F \subset \partial T\}$ denota el

conjunto de caras ligadas a la frontera de T y, para cada $F \in \mathcal{F}_T$, \mathbf{n}_{TF} denotará la normal unitaria a F apuntando hacia el exterior del elemento T . En sucesiones de mallas admisibles, para cada $T \in \mathcal{T}_h$, y cada $F \in \mathcal{F}_T$, h_F es uniformemente comparable a h_T en el sentido siguiente

$$\gamma^2 h_T \leq h_F \leq h_T. \quad (5)$$

Además el siguiente cardinal $\text{card}(\mathcal{F}_T)$ es uniformemente acotado. Las desigualdades de traza discreta y multiplicativa usuales se cumplen en las caras de los elementos. Los siguientes suposiciones y notaciones se utilizarán en este trabajo:

1. Existe una partición P_Ω de Ω tal que K es Lipschitz por partes, y la malla \mathcal{T}_h encaja en una partición (politépica) P_Ω asociada al tensor de difusión K en el siguiente sentido: existe un único elemento Ω_i de P_Ω que contiene a T . Para simplificar la exposición, asumiremos que K es polinomial por partes.
2. Denotamos por \underline{K}_T y \bar{K}_T los valores propios más pequeño y más grande de K en T . Introducimos la razón local de anisotropía $\rho_T := \bar{K}_T / \underline{K}_T \geq 1$.
3. Además, $A \lesssim B$ denota la desigualdad $A \leq CB$ con constante positiva C independiente del grado polinomial k , el tamaño de malla h y el tensor de difusión K .
4. Para evitar la proliferación de símbolos, asumimos que para todo $T \in \mathcal{T}_h$, la constante Lipschitz del tensor K sobre T , denotada por L_T^k , satisface $L_T^k \lesssim \bar{K}_T$.

3.1 Espacio Discreto

Sea $k \geq 0$ el grado polinomial. Para todo $T \in \mathcal{T}_h$, definimos el espacio local de grados de libertad como $\underline{U}_T^k := \mathbb{P}_d^k(T) \times \prod_{F \in \mathcal{F}_T} \mathbb{P}_{d-1}^k(F)$, donde $\mathbb{P}_d^k(T)$ (resp., $\mathbb{P}_{d-1}^k(F)$) es el espacio de polinomios de d variables (resp., $(d-1)$ variables) de grado total a lo más k , definido en T (resp., F). El espacio global de grados de libertad sobre el dominio Ω , se define como.

$$\underline{U}_h^k := \prod_{T \in \mathcal{T}_h} \mathbb{P}_d^k(T) \times \prod_{F \in \mathcal{F}_h} \mathbb{P}_{d-1}^k(F).$$

Para cada $T \in \mathcal{T}_h$, se define el operador de reducción local $\mathbb{I}_T^k : H^1(T) \rightarrow \underline{U}_T^k$ tal que, para todo $v \in H^1(T)$,

$$\mathbb{I}_T^k v := (\pi_T^k v, (\pi_F^k v)_{F \in \mathcal{F}_T}), \quad (6)$$

donde π_T^k y π_F^k denotan las proyecciones ortogonales de L^2 sobre $\mathbb{P}_d^k(T)$ y $\mathbb{P}_{d-1}^k(F)$, respectivamente. El operador de interpolación global $\mathbb{I}_h^k : H^1(\Omega) \rightarrow \underline{U}_h^k$ se define tal que, para todo $v \in H^1(\Omega)$,

$$\mathbb{I}_h^k v := ((\pi_T^k v)_{T \in \mathcal{T}_h}, (\pi_F^k v)_{F \in \mathcal{F}_h}). \quad (7)$$

3.2 Operador gradiente reconstructivo

Para cada $T \in \mathcal{T}_h$, y $l \geq 1$, $\mathbb{P}_d^{l+1,0}(T)$ denota el espacio de polinomios de d variables de grado total $\leq l$, con media nula sobre T . De esta manera, se define el operador gradiente reconstructivo local $G_T^k : \underline{U}_T^k \rightarrow \nabla \mathbb{P}_d^{k+1,0}(T)$ tal que, para cada $\underline{v}_T := (v_T, (v_F)_{F \in \mathcal{F}_T}) \in \underline{U}_T^k$ y cada $w \in \mathbb{P}_d^{k+1,0}(T)$,

$$(KG_T^k \underline{v}_T, \nabla w)_T = (K \nabla v_T, \nabla w)_T + \sum_{F \in \mathcal{F}_T} (v_F - v_T, K \nabla w \cdot \mathbf{n}_{TF})_F. \quad (8)$$

Definimos también el operador potencial reconstructivo $p_T^k : \underline{U}_T^k \rightarrow \mathbb{P}_d^{k+1}(T)$ tal que, para todo $\underline{v}_T \in \underline{U}_T^k$,

$$\nabla p_T^k \underline{v}_T := G_T^k \underline{v}_T, \quad \int_T p_T^k \underline{v}_T := \int_T v_T. \quad (9)$$

El siguiente resultado muestra que $p_T^k \mathbb{I}_T^k$ es la proyección elíptica ponderada con respecto a K sobre $\mathbb{P}_d^{k+1}(T)$.

Lema 3.1 (Caracterización de $p_T^k \mathbb{I}_T^k$ y consistencia polinomial). *Para cada $v \in H^1(T)$ y $w \in \mathbb{P}_d^{k+1}(T)$, se cumple*

$$(K \nabla (v - p_T^k \mathbb{I}_T^k v), \nabla w)_T = ((K - \bar{K}_T), \nabla w)_T - \sum_{F \in \mathcal{F}_T} (\pi_F^k v - \pi_T^k v, (K - \bar{K}_T) \nabla w \cdot \mathbf{n}_{TF})_F, \quad (10)$$

donde \bar{K}_T denota el valor medio de K sobre T . Además, si K es constante por partes, se obtiene la siguiente propiedad de ortogonalidad:

$$(K \nabla (v - p_T^k \mathbb{I}_T^k v), \nabla w)_T = 0, \quad (11)$$

y la propiedad de consistencia:

$$p_T^k \mathbb{I}_T^k v = v \quad \forall v \in \mathbb{P}_d^{k+1}(T). \quad (12)$$

Demostración. Para la demostración de (10), referimos al Lema 2.1 en [8], al Lemma 3.1 en [12] para la propiedad de ortogonalidad y la consistencia polinomial. \square

Lema 3.2 (Propiedades de aproximación de $p_T^k \mathbb{I}_T^k$). *Existe un número real $C > 0$, que depende de γ y d , pero independiente del grado polinomial, el tamaño de malla, y el tensor de difusión. Así para todo $v \in H^s(T)$ se cumple:*

$$\begin{aligned} & \left\| v - p_T^k \mathbb{I}_T^k v \right\|_T + h_T^{1/2} \left\| v - p_T^k \mathbb{I}_T^k v \right\|_{\partial T} \\ & + h_T \left\| \nabla (v - p_T^k \mathbb{I}_T^k v) \right\|_T + h_T^{3/2} \left\| \nabla (v - p_T^k \mathbb{I}_T^k v) \right\|_{\partial T} \\ & \leq C \rho_T^\alpha h_T^s \|v\|_{H^s(T)}, \end{aligned} \quad (13)$$

para todo $s \in \{2, \dots, k+2\}$. Aquí, $\alpha = 1/2$ si K constante por partes, y $\alpha = 1$ en otro caso.

Demostración. Se utiliza ampliamente las propiedades de aproximación de las proyecciones ortogonales (ver 7.1), ver el Lemma 2.1 en [8] para la demostración. \square

4 Formulación discreta del problema

Ahora, definimos el espacio global discreto para la formulación HHO, como

$$\underline{U}_h^{k,0} := \left\{ \underline{v}_h \in \underline{U}_h^k : (v_h, 1)_\Omega = 0 \right\},$$

con $v_h := \{v_T\}_{T \in \mathcal{T}_h}$, y la siguiente seminorma discreta sobre \underline{U}_h^k ,

$$\|\underline{v}_h\|_{K,h}^2 := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \rho_T^{-1} \|\underline{v}_T\|_{K,T}^2, \quad \forall \underline{v}_h \in \underline{U}_h^k, \quad (14)$$

donde $\|\underline{v}_T\|_{K,T}^2 := \|K^{1/2} \nabla v_T\|_T^2 + |\underline{v}_T|_{K,\partial T}^2$ y $|\underline{v}_T|_{K,\partial T}^2 := \sum_{F \in \mathcal{F}_T} \frac{k_F}{h_F} \|v_F - v_T\|_F^2$, con $k_F := \|\mathbf{n}_{TF}^T K \mathbf{n}_{TF}\|_{L^\infty(F)}$, para cada $\underline{v}_T \in \underline{U}_T^k$.

Proposición 4.1 (Norma $\|\cdot\|_{K,h}$). . El mapa $\|\cdot\|_{K,h}$ define una norma sobre $\underline{U}_h^{k,0}$.

Demostración. Es suficiente probar que $\forall \underline{v}_h \in \underline{U}_h^{k,0}$: $\|\underline{v}_h\|_{K,h} = 0 \Rightarrow \underline{v}_h = \underline{0}_h$. La prueba se sigue de [3]. \square

Para discretizar (4), introducimos las siguientes formas bilineales sobre $\underline{U}_h^k \times \underline{U}_h^k$:

$$\begin{aligned} a_h(\underline{u}_h, \underline{v}_h) &= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} a_T(\underline{u}_T, \underline{v}_T), \\ s_h(\underline{u}_h, \underline{v}_h) &= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} s_T(\underline{u}_T, \underline{v}_T), \end{aligned} \quad (15)$$

donde, para cada $T \in \mathcal{T}_h$, las formas bilineales locales a_T y s_T definidas sobre $\underline{U}_T^k \times \underline{U}_T^k$, son dadas por

$$a_T(\underline{u}_T, \underline{v}_T) := (K G_T^k \underline{u}_T, G_T^k \underline{v}_T)_T + s_T(\underline{u}_T, \underline{v}_T), \quad (16a)$$

$$s_T(\underline{u}_T, \underline{v}_T) := \sum_{F \in \mathcal{F}_T} \frac{k_F}{h_F} (\pi_F^k(u_F - P_T^k \underline{u}_T), \pi_F^k(v_F - P_T^k \underline{v}_T))_F. \quad (16b)$$

donde $P_T^k : \underline{U}_T^k \rightarrow \mathbb{P}_d^{k+1}(T)$ es definido tal que, para todo $\underline{v}_T \in \underline{U}_T^k$,

$$P_T^k \underline{v}_T := v_T + (p_T^k \underline{v}_T - \pi_T^k p_T^k \underline{v}_T). \quad (17)$$

La funcional lineal del lado derecho en (4) es discretizada de la siguiente ma

APÉNDICE A

En el siguiente lema, se muestra que la proyección ortogonal L^2 sobre el espacio de polinomios de grado total menor o igual a l , $\mathbb{P}_d^l(T)$, tiene propiedades de aproximación sobre cada elemento de la malla.

Lema 4.1 (Propiedades de aproximación del proyector ortogonal). Dado un entero $l \geq 0$, y $T \in \mathcal{T}_h$, denotamos π_T^l el proyector L^2 sobre $\mathbb{P}_d^l(T)$. Entonces,

para cada par $s, t \in \mathbb{R}$ con $0 \leq s \leq t \leq l + 1$ existe $C_{app} = C_{app}(\gamma, l) > 0$, tal que

$$|v - \pi_T^l v|_{H^s(T)} \leq C_{app} h_T^{t-s} |v|_{H^t(T)}, \quad \forall v \in H^t(T). \quad (18)$$

Además, existe $C'_{app} > 0$ tal que, para todo t , $1/2 < t \leq l + 1$, se cumple

$$\|v - \pi_T^l v\|_{\partial T} \leq C'_{app} h_T^{t-1/2} |v|_{H^t(T)}, \quad \forall v \in H^t(T), \quad (19)$$

donde $|\cdot|_{H^t(T)}$ y $|\cdot|_{H^s(T)}$ denota la seminorma sobre sus respectivos espacio de Sobolev.

Demostración. Para ver una prueba de este lema, referimos a los Teoremas 3.2 y 3.3 en [13]. \square nera

$$b_h(\underline{v}_h) := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} (f, v_T)_T + \sum_{F \in \mathcal{F}_h^\partial} (g, v_F)_F. \quad (20)$$

Luego, el problema discreto se formula como: Encontrar $\underline{u}_h \in \underline{U}_h^{k,0}$ tal que,

$$a_h(\underline{u}_h, \underline{v}_h) = b_h(\underline{v}_h) \quad \forall \underline{v}_h \in \underline{U}_h^{k,0}. \quad (21)$$

Introduciendo el operador gradiente reconstructivo global $G_h^k : \underline{U}_h^k \rightarrow \prod_{T \in \mathcal{T}_h} \nabla \mathbb{P}_d^{k+1}(T)$ tal que, para cada $\underline{v}_h \in \underline{U}_h^k$,

$$(G_h^k \underline{v}_h)|_T := G_T^k \underline{v}_T \quad \forall T \in \mathcal{T}_h, \quad (22)$$

podemos reformular la forma bilineal a_h definida en (15) como

$$a_h(\underline{u}_h, \underline{v}_h) = (K G_h^k \underline{u}_h, G_h^k \underline{v}_h) + s_h(\underline{u}_h, \underline{v}_h). \quad (23)$$

Para analizar la estabilidad del problema discreto, presentamos las semi-normas de energía local y global de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \|\underline{v}_h\|_{a,h}^2 &:= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|\underline{v}_T\|_{a,T}^2 \quad \text{where,} \\ \|\underline{v}_T\|_{a,T}^2 &:= a_T(\underline{v}_T, \underline{v}_T), \end{aligned} \quad (24)$$

El siguiente resultado establece una relación importante entre $\|\cdot\|_{a,T}$ and $\|\cdot\|_{K,T}$.

Lema 4.2 (Propiedad de estabilidad). Para todo $\underline{v}_T \in \underline{U}_T^k$, se cumple:

$$\rho_T^{-1} \|\underline{v}_T\|_{K,T}^2 \lesssim \|\underline{v}_T\|_{a,T}^2 \lesssim \rho_T \|\underline{v}_T\|_{K,T}^2. \quad (25)$$

Consecuentemente, para todo $\underline{v}_h \in \underline{U}_h^k$, $\|\underline{v}_h\|_{K,h} \lesssim \|\underline{v}_h\|_{a,h}$, y así se concluye que el problema (21) esta bien planteado.

Demostración. La demostración recae en el Lema 3.1 en [8], donde se utiliza las propiedades de aproximación del operador $p_T^k \mathbb{1}_T^k$. \square

5 Análisis de Error

En esta sección probamos estimaciones de error del potencial usando la norma de la energía y la norma del espacio L^2 , bajo suposiciones de regularidad adicionales.

Teorema 5.1 (Estimación con la norma de energía). *Sea $u \in U$ la solución exacta de (4) y sea $\underline{u}_h \in \underline{U}_h^{k,0}$ la solución discreta de (21). Asumimos que $u \in H^{k+2}(\mathcal{T}_h)$. Definimos el error de consistencia como $\mathcal{E}_h(\underline{v}_h) := a_h(\underline{I}_h^k u, \underline{v}_h) - b_h(\underline{v}_h)$. Luego, recordando la definición de α (dada en el Lema 3.2), se cumple*

$$\begin{aligned} \|\underline{I}_h^k u - \underline{u}_h\|_{a,h} &\leq \sup_{\underline{v}_h \in \underline{U}_h^{k,0}, \|\underline{v}_h\|_{a,h}=1} \mathcal{E}_h(\underline{v}_h) \\ &\lesssim \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \bar{K}_T \rho_T^{2\alpha+1} h_T^{2(k+1)} \|u\|_{H^{k+2}(T)}^2 \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (26)$$

Además, aplicando el Lema 3.2, se cumple

$$\begin{aligned} \|K^{1/2}(\nabla u - G_h^k \underline{u}_h)\|_{\Omega} \\ \lesssim \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \bar{K}_T \rho_T^{2\alpha+1} h_T^{2(k+1)} \|u\|_{H^{k+2}(T)}^2 \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (27)$$

Demostración. Se sigue de [3], donde gracias a la propiedad de estabilidad (25) se puede expresar la norma del error en función del error de consistencia y luego acotarlo por las propiedades de aproximación de los proyectores y del operador elíptico, las funciones dato y la continuidad del flujo a través de las caras, obteniendo así (26), a su vez de la desigualdad triangular y (26) se obtiene la estimación (27) para el error del flujo. \square

A continuación, probamos una estimación del error entre u_h y $I_h^k u$ con la norma L^2 , tal que

$$u_h|_T := u_T \quad \text{and} \quad I_h^k u|_T := \pi_T^k u \quad \forall T \in \mathcal{T}_h. \quad (28)$$

Para este fin, necesitamos un supuesto adicional de regularidad elíptica en la siguiente forma: Dado $w \in L_0^2(\Omega) := \{q \in L^2(\Omega) / (q, 1)_{\Omega} = 0\}$, sea $z \in U$ la función tal que

$$(K \nabla z, \nabla v)_{\Omega} = (w, v)_{\Omega} \quad \forall v \in U, \quad (29)$$

la cual satisface la estimación a priori:

$$\|z\|_{H^2(\Omega)} \lesssim \underline{K}^{-1} \|w\|_{\Omega}, \quad \underline{K} := \min_{T \in \mathcal{T}_h} \bar{K}_T. \quad (30)$$

En el siguiente teorema suponemos que el tensor de difusión es constante por partes.

Teorema 5.2 (Estimación con la norma L^2). *Bajo las suposiciones del Teorema 5.1, la regularidad elíptica (30) y que $f \in H^k(\mathcal{T}_h)$, $g \in H^{k+1/2}(\mathcal{F}_h^{\partial})$, luego se cumple:*

$$\begin{aligned} \|I_h^k u - u_h\|_{\Omega} &\lesssim \frac{\bar{K}^{1/2}}{\underline{K}} \rho h \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \bar{K}_T \rho_T^2 h_T^{2(k+1)} \|u\|_{H^{k+2}(T)}^2 \right\}^{1/2} \\ &\quad + \underline{K}^{-1} h^{k+2} \left\{ \|f\|_{H^k(\mathcal{T}_h)} + \|g\|_{H^{k+1/2}(\mathcal{F}_h^{\partial})} \right\}, \end{aligned} \quad (31)$$

donde, $\bar{K} := \max_{T \in \mathcal{T}_h} \bar{K}_T$, $\rho := \bar{K}/\underline{K}$, y $h := \max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T$.

Demostración. La demostración se sigue de [3], donde se usa técnicas similares al Teorema 5.1 y la propiedad de regularidad elíptica (30). \square

6 Resultados numéricos

En esta sección presentamos tres ejemplos numéricos para evaluar las propiedades de nuestro método. Utilizamos diferentes mallas para las pruebas numéricas.

Basamos nuestro código en el desarrollado por Di Pietro en ([11], [9]), donde, la implementación del operador gradiente reconstructivo (8), los proyectores ortogonales π_T^k y π_F^k , esta basado en las facilidades de algebra lineal (factorización de Cholesky robusta) proporcionado por la librería Eigen3 [15]. El sistema reducido obtenido después de la condensación estática sobre el esqueleto de la malla es resuelto usando SuperLU [6] a través de la interface PETSc 3.4 [2]. Además, calculamos el orden experimental de convergencia (r) como

$$r = \log(e_{\mathcal{T}_1}/e_{\mathcal{T}_2}) / \log(h_{\mathcal{T}_1}/h_{\mathcal{T}_2}),$$

donde $e_{\mathcal{T}_1}$ y $e_{\mathcal{T}_2}$ son los errores asociados a las variables correspondientes considerando dos tamaño de malla consecutivos $h_{\mathcal{T}_1}$ y $h_{\mathcal{T}_2}$, respectivamente.

6.1 Problema con condiciones mixtas

Consideremos el problema de difusión con condiciones de frontera mixta sobre el dominio $\Omega = (-1, 1)^2 / (0, 1) \times (-1, 0)$ y función potencial en coordenadas polares:

$$u(r, \theta) = r^{2/3} \sin(2\theta/3),$$

donde $u \in H^{1+\frac{2}{3}-s}$, para todo $s > 0$ (véase [14]) y tensor de difusión isotrópico homogéneo igual a la identidad.

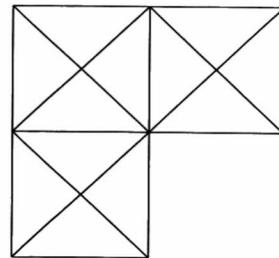
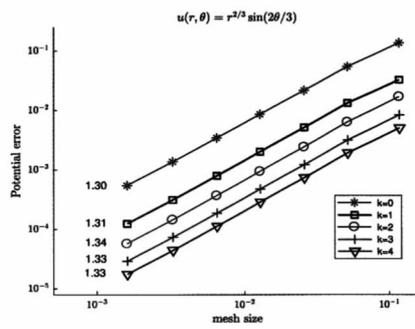


Figura 1. Mesh L .

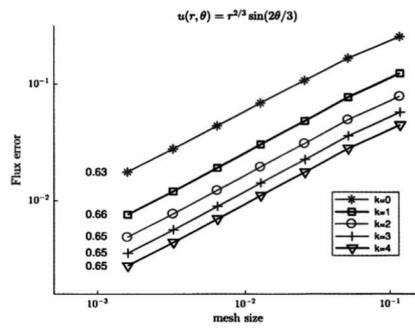
Consideramos las siguientes fronteras:

$$\Gamma_d = \{(0, 1) \times 0\} \cup \{0 \times (-1, 0)\} \quad \text{y} \quad \Gamma_d = \Gamma \setminus \Gamma_d.$$

A continuación mostramos las tasas de convergencia.



(a) Error del potencial



(b) Error del flujo

Figura 2. Tasas de convergencia de los errores potencial y del flujo.

De la Figura 2 se observa que el esquema HHO converge siempre con orden $4/3$ para el potencial y $2/3$ para el flujo, respectivamente, independiente del grado de aproximación considerado. Esto concuerda con lo predicho por la teoría, debido a la poca regularidad de la solución u en este caso.

6.2 Problema con condiciones Dirichlet

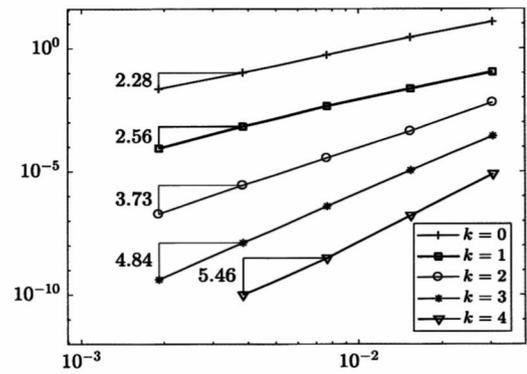
Consideremos el problema de Dirichlet sobre el cuadrado unitario $\Omega = (0, 1)^2$ con la siguiente función potencial suave:

$$u(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{sen}(\pi y) \tag{32}$$

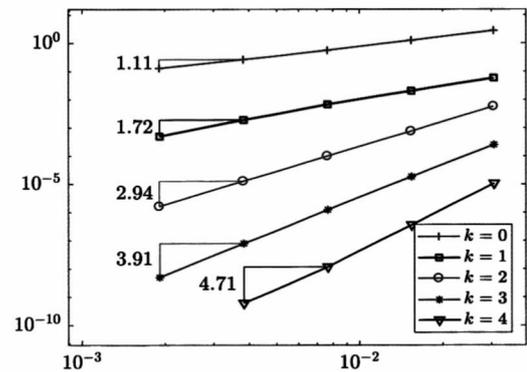
y tensor de difusión anisotrópico heterogéneo:

$$K(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}, \tag{33}$$

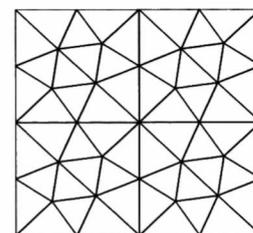
con $\epsilon = 10^{-3}$. A continuación testeamos el problema con dos familias de mallas, una triangular y otra hexagonal. Los resultados vistos en las Figuras 3 y 4 muestran la convergencia del esquema HHO, con los órdenes óptimos predichos por el análisis de error correspondiente (pues en este caso la solución es regular). Esto no depende de la forma geométrica de la familia de mallas consideradas.



(a) Error del potencial

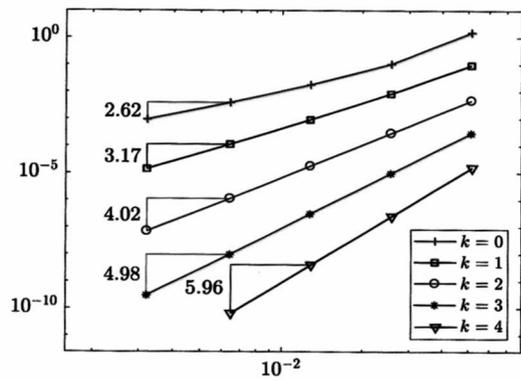


(b) Error del flujo

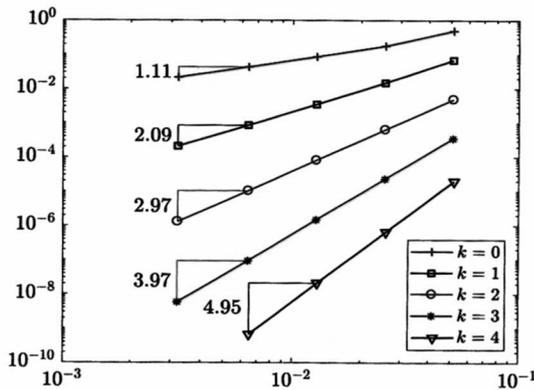


(c) Malla triangular

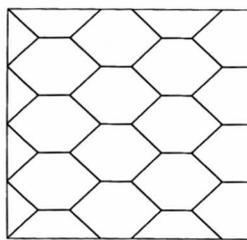
Figura 3. Tasas de convergencia de los errores potencial y del flujo, considerando la malla triangular.



(a) Error del potencial



(b) Error del flujo



(c) Malla hexagonal

Figura 4. Tasas de convergencia de los errores potencial y del flujo, considerando la malla hexagonal.

6.3 Problema con condiciones Neumann

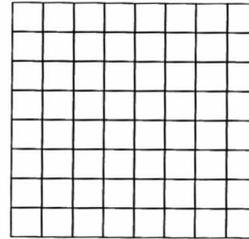
Consideremos el problema de Neumann sobre el cuadrado unitario $\Omega = (0, 1)^2$ con la siguiente función potencial:

$$u(x, y) = \cos(\pi x) \cos(\pi y), \quad (34)$$

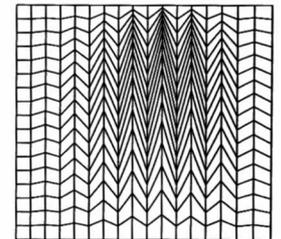
y tensor de difusión isotrópico homogéneo igual a la identidad.

Ahora resolvemos el problema de Neumann sobre dos familias de mallas, una cartesiana uniforme y otra cartesiana distorsionada llamada Kershaw (Figura 5). Es importante notar que los diámetros de la familia de mallas cartesianas varían en un factor de 2, mientras que la proporción de los diámetros de la familia de mallas Kershaw varían así: 1.75, 1.44, 1.31 y 1.24. Esto último nos indica que la teoría aquí descrita no está cubierta para

esta sucesión de mallas. No obstante, el método HHO presenta cierta robustez pues resuelve bastante bien con estas mallas. La tendencia de las velocidades de convergencia de los errores para el potencial y el flujo en estas familias de mallas se muestran en las Figuras 6 y 7, respectivamente.

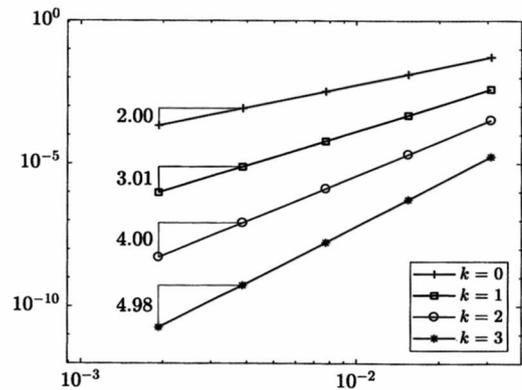


(a) Malla cartesiana

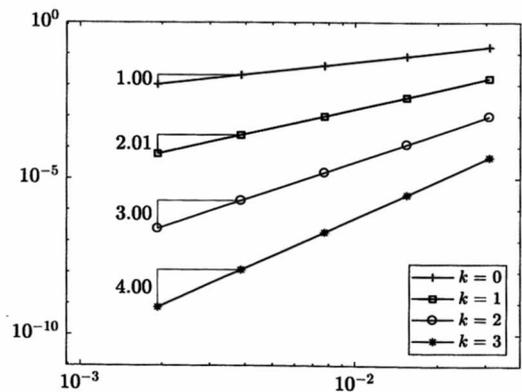


(b) Malla tipo Kershaw

Figura 5. Familia de mallas.

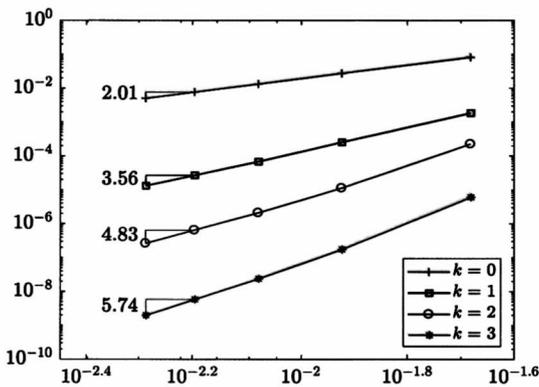


(a) Error del potencial

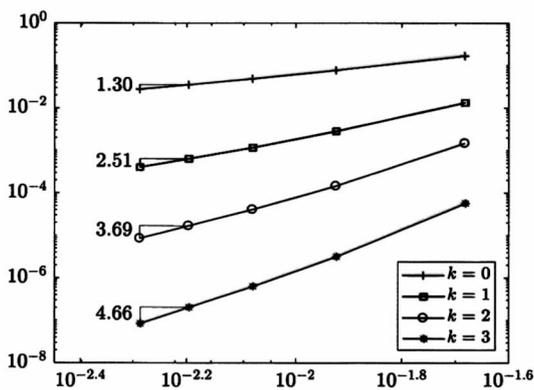


(b) Error del flujo

Figura 6. Tasas de convergencia de los errores potencial y del flujo, considerando la sucesión de mallas cartesianas uniforme.



(a) Error del potencial



(b) Error del flujo

Figura 7. Tasas de convergencia de los errores potencial y del flujo, considerando la sucesión de mallas tipo Kershaw.

7 Conclusiones

En el caso mixto, hemos testado una función no regular, cuyo gradiente posee una singularidad en el origen. Por ello, en la Figura 2 se aprecia que las tasas de convergencia no cambian con el grado polinomial. La tasa del error potencial es un poco menor a $1 + 2/3$, que es la regularidad de la función potencial del ejemplo 1. Esto está en concordancia con el Teorema 3.2 en [12], pues en ella la función g no posee la suficientemente regularidad ya que no está definida en la singularidad. De manera similar, del Teorema 3.1 en [12], y de lo anterior, se observa una tasa de convergencia de $2/3$ para el error del flujo.

En el caso Dirichlet puro se ha utilizado un tensor con una alta razón de anisotropía $\rho = 10^{-3}$, donde domina la dirección de las ordenadas. Así también se ha verificado los valores de convergencia de orden $k + 2$ y $k + 1$, para los errores del potencial y del flujo predichos en [8], observando además mejor convergencia para el caso de la familia de mallas hexagonal y superconvergencia con el grado $k = 0$.

En el ejemplo 3 hemos considerado como tensor la identidad, y los experimentos se han realizado sobre una familia de mallas cartesiana uniforme, obteniendo tasas de convergencia que verifican los valores teóricos deduci-

dos en los Teoremas 5.1 y 5.2. Se consideró también una segunda familia de mallas cartesiana distorsionadas (tipo Kershaw), que escapa de los supuestos geométricos sobre la malla, la cual exhibe una aparente super convergencia (véase [11] para el caso Dirichlet).

Los ejemplos descritos aquí refuerzan el uso de polinomios de alto orden y el uso de mallas generales, como la triangular, cartesiana uniforme y distorsionada y la hexagonal (véase [16] para consultar las mallas utilizadas y otros tipos). Además es posible trabajar con ejemplos en 3D, para lo cual referimos a consultar la librería, llamada DiSk++, la cual esta disponible de manera libre bajo la licencia MPL en la dirección electrónica <https://github.com/dataf14sh/diskpp> y encontrar una explicación detallada en [4]. Es posible incluir condiciones Neumann en otras formulaciones, como las mixtas y otros problemas como los de transmisión.

Agradecimientos

R. Bustinza ha sido parcialmente apoyado por CONICYT-Chile a través del Proyecto AFB170001 del Programa PIA: Concurso Apoyo a Centros Científicos y Tecnológicos de Excelencia con Financiamiento Basal; a la Vicerrectoría de Investigación y Desarrollo, Universidad de Concepción (Chile), a través del proyecto VRID-Enlace No. 218.013.044-1.0; y al Centro de Investigación en Ingeniería Matemática (CI²MA), Universidad de Concepción (Chile). J. Munguia desea expresar su gratitud por el apoyo económico a CONCYTEC-Perú a través del Proyecto FONDECYT “Programas de Doctorado en Universidades Peruanas” CG-176-2015, al Instituto de Matemática y Ciencias Afines (IMCA) y a la Universidad Nacional de Ingeniería (Lima-Perú).

APÉNDICE A

En el siguiente lema, se muestra que la proyección ortogonal L^2 sobre el espacio de polinomios de grado total menor o igual a l , $\mathbb{P}_d^l(T)$, tiene propiedades de aproximación sobre cada elemento de la malla.

Lema 7.1 (Propiedades de aproximación del proyector ortogonal). *Dado un entero $l \geq 0$, y $T \in \mathcal{T}_h$, denotamos π_T^l el proyector L^2 sobre $\mathbb{P}_d^l(T)$. Entonces, para cada par $s, t \in \mathbb{R}$ con $0 \leq s \leq t \leq l + 1$ existe $C_{app} = C_{app}(\gamma, l) > 0$, tal que*

$$|v - \pi_T^l v|_{H^s(T)} \leq C_{app} h_T^{t-s} |v|_{H^t(T)}, \quad \forall v \in H^t(T). \quad (35)$$

Además, existe $C'_{app} > 0$ tal que, para todo t , $1/2 < t \leq l + 1$, se cumple

$$\|v - \pi_T^l v\|_{\partial T} \leq C'_{app} h_T^{t-1/2} |v|_{H^t(T)}, \quad \forall v \in H^t(T), \quad (36)$$

donde $|\cdot|_{H^t(T)}$ y $|\cdot|_{H^s(T)}$ denota la seminorma sobre sus respectivos espacio de Sobolev.

Demostración. Para ver una prueba de este lema, referimos a los Teoremas 3.2 y 3.3 en [13]. \square

1. D. N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn, and L. D. Marini: *Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems*, SIAM J. Numer. Anal., 39(5): 1749-1779, 2002.
2. S. Balay, J. Brown, K. Buschelman, W. D. Gropp, D. Kaushik, M. G. Knepley, L. Curfman McInnes, B. F. Smith, and H. Zhang. PETSc Web page. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>, 2011.
3. R. Bustinza, and J. Munguia: *An HHO formulation for a Neumann problem on general meshes*, Pre-print, Centro de Investigación en Ingeniería Matemática, Universidad de Concepción, Chile, 2018.
4. M. Cicuttin, D. A. Di Pietro, and A. Ern: *Implementation of Discontinuous Skeletal methods on arbitrary-dimensional, polytopal meshes using generic programming*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 344, 852-874, 2018.
5. B. Cockburn, J. Gopalakrishnan, and R. Lazarov: *Unified hybridization of discontinuous Galerkin, mixed, and continuous Galerkin methods for second-order elliptic problems*, SIAM J. Numer. Anal., 47(2):1319- 1365, 2009.
6. J. W. Demmel, S. C. Eisenstat, J. R. Gilbert, X. S. Li, and J. W. H. Liu: *A supernodal approach to sparse partial pivoting*, SIAM J. Matrix Analysis and Applications, 20 (3):720-755, 1999.
7. D. A. Di Pietro, and A. Ern: *Mathematical aspects of discontinuous Galerkin methods*, volume 69 of *Mathématiques & Applications*. Springer-Verlag, Berlin, 2012.
8. D. A. Di Pietro, and A. Ern: *Hybrid High-Order methods for variable-diffusion problems on general meshes*, Comptes Rendus Mathématique. Académie des Sciences. Paris, 353 (1), 31-34, 2015.
9. D. A. Di Pietro, and A. Ern: *A hybrid high-order locking-free method for linear elasticity on general meshes*, Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg., 283, 1-21, 2015.
10. D. A. Di Pietro and A. Ern: *Equilibrated tractions for the Hybrid High-Order method*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, 353, 279-282, 2015.
11. D. A. Di Pietro, A. Ern, and S. Lemaire: *An arbitrary-order and compact-stencil discretization of diffusion on general meshes based on local reconstruction operators*, Computer Methods in Applied Mathematics, 14 (4), 461-472, 2014.
12. D. A. Di Pietro, A. Ern, and S. Lemaire: *A review of Hybrid High-Order methods: formulations, computational aspects, comparison with other methods*, In G. R. Barrenechea, F. Brezzi, A. Cangiani, and E. H. Georgoulis, editors, *Building Bridges: Connections and Challenges in Modern Approaches to Numerical Partial Differential Equations*, volume 114 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 205-236, Switzerland, 2016. Springer.
13. G.N. Gatica, and F.J. Sayas: *A note on the local approximation properties of piecewise polynomials with applications to LDG methods*, Complex Variables and Elliptic Equations, vol. 51, (2), 109-117, (2006).
14. P. Grisvard: *Problèmes aux limites dans les polygones Mode d'emploi*, EDF Bulletin de la direction des études et recherches, Serie C, Mathématiques Informatique N° 1. 1986, 21-59.
15. G. Guennebaud and B. Jacob. Eigen v3. <http://eigen.tuxfamily.org>, 2010.
16. R. Herbin, and F. Hubert: *Benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids*, In R. Eymard and J.-M. Hérard, editors, *Finite Volumes for Complex Applications V*, 659-692. John Wiley & Sons, 2008.

Densidad de puntos no transitivos asociados a semiflujos

Andrés Vicente Chulluncuy Centeno
Instituto de Matemática y Ciencias Afines - IMCA
Universidad Nacional de ingeniería
andresch@imca.edu.pe

Recibido 2 de Mayo del 2018; aceptado 29 de Junio del 2018

En el presente trabajo mostramos que un teorema análogo al Teorema 2 de [1] vale para el caso de acciones de los números reales no negativos sobre un espacio métrico compacto. Esto es, la existencia de puntos no transitivos asociados a un semiflujo, implica la densidad de estos. Además construiremos una acción de un semigrupo sobre un espacio métrico compacto, tal que el conjunto de puntos no transitivos asociado es no vacío, pero no es denso.

Palabras Claves: densidad de puntos no transitivos, semiflujos, acciones de semigrupos.

In this work we show that an analogous result to Theorem 2 of [1] still work for cases of actions of non-negative real numbers on a compact metric space. Indeed, the existence of non transitive points of a semi-flow implies the density of them. Moreover, we will also construct an action of a semigroup on a compact metric space, such that the associated set of non transitive points is non-empty, but not dense.

Keywords: density of non transitive points, semi-flows, action of semi-groups.

1 Introducción

Dado un espacio métrico compacto (X, d) , y una función continua $f : X \rightarrow X$, un punto a de X es *transitivo* respecto de f , si su semiórbita positiva, $O_+(a, f) = \{f^n(a); n \in \mathbb{N}\}$, es densa en X . Denotaremos por $P_+(f)$ al conjunto de puntos transitivos de f , y por $Q_+(f)$ al conjunto de puntos no transitivos. En caso que f fuese un homeomorfismo, a cada punto $a \in X$ está asociado también su semiórbita negativa, $O_-(a, f) = O_+(a, f^{-1})$; y la órbita de a , $O(a, f) = \{f^n(a); n \in \mathbb{Z}\}$. En este caso, $P_-(f)$ denotará a $P_+(f^{-1})$. En lo que sigue, diremos que un homeomorfismo $f : X \rightarrow X$, definido sobre un espacio métrico, es *minimal* si para cada $x \in X$, $x \in P_-(f) \cap P_+(f)$.

Sean (X, d) un espacio métrico, $\mathbb{R}_+ = [0, +\infty)$ el conjunto de los números reales no negativos, dotado con la topología de subespacio de \mathbb{R} (con la topología usual). Sea \mathbb{N} el conjunto de los números naturales, y $\mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}$, ambos con la topología de subespacio de \mathbb{R} . Una función $\phi : \mathbb{R}_+ \times X \rightarrow X$ es un *semiflujo*, esto es, una *acción de \mathbb{R}_+* sobre X , si ϕ es una función continua tal que

- Para cada $x \in X$, $\phi(0, x) = x$;
- Para cada $t, s \in \mathbb{R}_+$, y para cada $x \in X$, $\phi(t, \phi(s, x)) = \phi(t + s, x)$.

Usualmente, denotaremos a un semiflujo ϕ por $\{\phi_t\}_{t \in \mathbb{R}_+}$, donde $\phi_t : X \rightarrow X$ es la función dada por $\phi_t(x) = \phi(t, x)$, para cada $x \in X$ y cada $t \in \mathbb{R}_+$. Así, $\phi_0 = \text{Id}$ y $\phi_t \circ \phi_s = \phi_{t+s}$, para cada $t, s \geq 0$. La *semiórbita positiva* de $x \in X$, asociada al semiflujo ϕ , es $O_+(x, \phi) = \{\phi_t(x) \in X; t \geq 0\}$. Decimos que $x \in X$ es un *punto*

transitivo de ϕ , si su semiórbita positiva es densa en X , esto es, si $\overline{O_+(x, \phi)} = X$. Denotaremos por $P_+(\phi)$ al conjunto de puntos transitivos de ϕ , y por $Q_+(\phi)$ al conjunto de puntos no transitivos de ϕ . Si cambiamos el semigrupo \mathbb{R}_+ , por el grupo aditivo \mathbb{R} obtenemos un *flujo* sobre X .

Análogamente, para un semigrupo $\mathcal{G} \in \{\mathbb{N}_0, \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0\}$, una *acción* de \mathcal{G} en X es una función $\Psi : \mathcal{G} \times X \rightarrow X$ que satisface

- (α) Para todo $x \in X$, $\psi(e, x) = x$;
- (β) Para cada $t, s \in \mathcal{G}$, y para cada $x \in X$, $\psi(t, \psi(s, x)) = \psi(t + s, x)$.

donde e es el elemento neutro de \mathcal{G} . Dado $p \in X$, la *semiórbita* de p , asociada a la acción ψ , es el conjunto $O(p, \psi) = \{\Psi(x, p) \in X; x \in \mathcal{G}\}$. Decimos que un punto p de X es *transitivo* si su semiórbita es densa en X . Denotaremos por $P(\psi)$ al conjunto de puntos transitivos de ψ . Y por $Q(\psi)$ al conjunto de puntos no transitivos de ψ . Observe que para el caso $\mathcal{G} = \mathbb{N}_0$, tenemos que una acción ψ de \mathbb{N}_0 sobre X está completamente definida por la función $\psi(1, \cdot) : X \rightarrow X$, ya que $\Psi(m, \cdot) = [\psi(1, \cdot)]^m$ para cada $m \in \mathbb{N}$. Análogamente, para el caso $\mathcal{G} = \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$, tenemos que una acción ψ de $\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$ sobre X está completamente definida por las funciones $\psi((1, 0), \cdot) : X \rightarrow X$ y $\psi((0, 1), \cdot) : X \rightarrow X$, ya que $\Psi((m, n), \cdot) = [\psi((1, 0), \cdot)]^m \circ [\psi((0, 1), \cdot)]^n$ para cada $m, n \in \mathbb{N}_0$. Además, de (ii) tenemos que

$$[\psi((1, 0), \cdot)] \circ [\psi((0, 1), \cdot)] = [\psi((0, 1), \cdot)] \circ [\psi((1, 0), \cdot)].$$

Del Teorema 2, de [1], tenemos que dada una función continua $f : X \rightarrow X$ sobre un espacio métrico compacto

(X, d) , si el conjunto de puntos no transitivos $Q_+(f)$ es un conjunto no vacío, entonces este es denso en X . En términos de acciones, la función f da lugar a una acción $\phi : \mathbb{N}_0 \times X \rightarrow X$, de \mathbb{N}_0 sobre X , dada por $\phi(n, x) = f^n(x)$, para cada $n \in \mathbb{N}_0$ y $x \in X$. Una pregunta surge naturalmente, dada una acción $\phi : \mathbb{R}_+ \times X \rightarrow X$, de \mathbb{R}_+ sobre X : ¿ $Q_+(\phi)$ no vacío, implica que $Q_+(\phi)$ es denso en X ?

Observemos que para un semiflujo $\phi : \mathbb{R}_+ \times X \rightarrow X$, donde X es un espacio métrico, puede ocurrir que exista un punto transitivo $p \in X$, tal que $\phi(t, p)$ es un punto no transitivo para algún $t > 0$. Por ejemplo, considere $X = \mathbb{R}_+$, y $\phi(t, x) = x + t$ para cada $t, x \in \mathbb{R}_+$. Tenemos que $x = 0$ es un punto transitivo, pero $\phi(t, 0)$ no es transitivo para cada $t > 0$. El Teorema 1, en [1], nos invita a hacer la siguiente hipótesis: si $x \in P_+(\phi)$, entonces $\phi(t, x) \in P_+(\phi)$ para cada $t \geq 0$. Bajo esta hipótesis obtendremos el siguiente resultado.

Teorema 1. *Sea X un espacio métrico compacto, y sea $\Phi : \mathbb{R}_+ \times X \rightarrow X$ un semiflujo. Supongamos que para cada $t > 0$,*

$$\text{si } x \in P_+(\Phi), \text{ entonces } \Phi(t, x) \in P_+(\Phi). \quad (1)$$

Entonces, si el conjunto de puntos no transitivos no es vacío, entonces es denso en X .

Por otro lado, en la sección 3, construimos, como en [2], un homeomorfismo $S : Y \rightarrow Y$ con un único punto fijo $p \in Y$, tal que cada punto diferente de p , tenga órbita densa en Y . Entonces obtendremos el segundo resultado.

Teorema 2. *Existe una acción ψ de $\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$ sobre un espacio métrico compacto Y tal que $Q(\psi)$ es no vacío, y no es denso en Y .*

2 Acciones de \mathbb{R}_+ y densidad de puntos no transitivos

Demostración del teorema 1. Dado un conjunto abierto B , no vacío, en el espacio métrico X , considere un conjunto abierto A , no vacío, con $\bar{A} \subseteq B$. Considere la colección de subconjuntos de X , $\{B_s\}_{s \in \mathbb{R}_+}$, donde $B_s = \Phi([0, s] \times \bar{A})$, para cada $s \geq 0$. Tenemos dos posibilidades:

- (i) Existen $t, t' \in \mathbb{R}_+$, con $t' > t$, tal que $B_{t'} \subseteq B_t$.
- (ii) Para cada $t', t \in \mathbb{R}_+$, con $t' > t$, se tiene que $B_{t'} \not\subseteq B_t$.

Supongamos que acontece (i). Sea $\delta = t' - t > 0$. En este caso se cumple la siguiente afirmación,
Afirmación 1. Tenemos que $B_{t'+\delta} \subseteq B_t$, y por lo tanto $B_s \subseteq B_t$ para cada $s \geq t$.

Demostración de la Afirmación 1. Sea $x \in B_{t'+\delta} = \Phi([0, t'+\delta] \times \bar{A})$, entonces $x = \Phi(s, a)$ donde $s \in [0, t'+\delta]$ y $a \in \bar{A}$. Si $s \in [0, t']$ entonces $x = \Phi(s, a) \in B_{t'} \subseteq B_t$,

por lo tanto, $x \in B_t$. Supongamos entonces que $s \in (t', t'+\delta]$. Entonces

$$x = \Phi(s, a) = \Phi(s - t', \Phi(t', a)).$$

Donde $\Phi(t', a) \in B_{t'} \subseteq B_t = \Phi([0, t] \times \bar{A})$. Así, existen $s_1 \in [0, t]$ y $a_1 \in \bar{A}$, tales que $\Phi(t', a) = \Phi(s_1, a_1)$. Por lo tanto,

$$x = \Phi(s, a) = \Phi(s - t', \Phi(s_1, a_1)) = \Phi(s - t' + s_1, a_1).$$

Como $0 < s - t' \leq \delta$ y $0 \leq s_1 \leq t$, entonces $s - t' + s_1 \in [0, t + \delta] = [0, t']$. Por lo tanto, $x \in B_{t'}$. Como, por hipótesis, $B_{t'} \subseteq B_t$, entonces $x \in B_t$. Así, $B_{t'+\delta} \subseteq B_t$. Análogamente, mostramos que $B_{t'+k\delta} \subseteq B_t$, y en general, $B_{t'+k\delta} \subseteq B_t$ para cada $k \geq 0$, entero. Por lo tanto, $B_s \subseteq B_t$ para cada $s \geq t$. \square

Tenemos dos posibilidades: $B_t = X$ o $B_t \neq X$.

- (a) Suponga que $B_t = X$. Entonces como $Q_+(\Phi) \neq \emptyset$, existe $x \in Q_+(\Phi)$. Así, $x \in X = B_t$, por lo tanto $x = \Phi(s, a)$, para algunos $s \in [0, t]$ y $a \in \bar{A}$. Si $a \in P_+(\Phi)$ entonces, de (1), $x = \Phi(s, a) \in P_+(\Phi)$. Pero, como $x \in Q_+(\Phi)$, entonces $a \in Q_+(\Phi)$. Así $a \in Q_+(\Phi) \cap \bar{A}$.

- (b) Suponga que $B_t \neq X$. Entonces $\Phi([0, s] \times \bar{A}) \subseteq B_t$ para cada $s \geq t$. Entonces, para cada $a \in \bar{A}$ tenemos que $O_+(a, \Phi) \subseteq B_t$. Entonces

$$\overline{O_+(a, \Phi)} \subseteq \bar{B}_t = B_t \subsetneq X.$$

Así, $a \in Q_+(\Phi)$. Por lo tanto $\bar{A} \subseteq Q_+(\Phi)$.

En cualquier caso, (a) o (b), $\bar{A} \cap Q_+(\Phi) \neq \emptyset$, y por lo tanto $B \cap Q_+(\Phi) \neq \emptyset$.

Supongamos que acontece (ii). Esto es, para cada $t', t \in \mathbb{R}_+$, con $t' > t$, se tiene que $B_{t'} \not\subseteq B_t$. En particular, para cada $n \in \mathbb{N}$, $B_n \not\subseteq B_{n-1}$. Entonces, para cada $n \in \mathbb{N}$, existe $\omega_n \in B_n$ y $\omega_n \notin B_{n-1}$. Así, $\omega_n = \Phi(t_n, x_n)$ para algunos $x_n \in \bar{A}$ y $t_n \in (n-1, n]$. En efecto, si $t_n \in [0, n-1]$ se tendría que $\omega_n \in B_{n-1}$. Como $\omega_n = \Phi(s, \Phi(t_n - s, x_n))$ para cada $s \in [0, t_n]$, y $\omega_n \notin B_{n-1} = \Phi([0, n-1] \times \bar{A})$, entonces $\Phi(t_n - s, x_n) \notin \bar{A}$, para cada $s \in [0, n-1]$. Por lo tanto,

$$\Phi(r, x_n) \notin \bar{A}, \text{ para cada } r \in [\delta_n, t_n], \quad (2)$$

donde $t_n \in (n-1, n]$, y $\delta_n = t_n - (n-1) \in (0, 1]$. Por la compacidad de X , podemos suponer, sin pérdida de generalidad, que existe $x_0 \in \bar{A}$ tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x_0.$$

Se cumple la siguiente afirmación.

Afirmación 2. Si $t \geq 1$, entonces $\Phi(t, x_0) \in A^c$.

Demostración de la Afirmación 2. Sea $t \geq 1$. Por la continuidad de Φ ,

$$\Phi(t, x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi(t, x_n).$$

Como $t_n \in (n - 1, n]$ para cada $n \in \mathbb{N}$, existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que si $n \geq n_0$ entonces $t_n \geq t$. Así, $t \in [\delta_n, t_n]$ para cada $n \geq n_0$. Por lo tanto, de (2), $\Phi(t, x_n) \in X \setminus \bar{A} \subseteq X \setminus A$, para cada $n \geq n_0$. Así,

$$\Phi(t, x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi(t, x_n) = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ n \geq n_0}} \Phi(t, x_n) \in X \setminus A.$$

Por lo tanto, $\Phi(t, x_0) \in X \setminus A$ para cada $t \geq 1$. \square

Como $\Phi(t, x_0) \in X \setminus A$ para cada $t \geq 1$, entonces $\Phi(t - 1, \Phi(1, x_0)) = \Phi(t, x_0) \in X \setminus A$, para cada $t \geq 1$. Esto es, $\Phi(s, \Phi(1, x_0)) \in X \setminus A$, para cada $s \geq 0$. Por lo tanto, $O_+(\Phi(1, x_0), \Phi) \subseteq X \setminus A$. Entonces, como $X \setminus A$ es cerrado, $\overline{O_+(\Phi(1, x_0), \Phi)} \subseteq \overline{X \setminus A} = X \setminus A$. Así, $\Phi(1, x_0) \in Q_+(\Phi)$. Si $x_0 \in P_+(\Phi)$ entonces, de (1), se tendría que $\Phi(1, x_0) \in P_+(\Phi)$. Por lo tanto $x_0 \in Q_+(\Phi)$, y como $x_0 \in \bar{A}$, entonces $\bar{A} \cap Q_+(\Phi) \neq \emptyset$.

Así, sea en el caso (i) o en el caso (ii), concluimos que $B \cap Q_+(\Phi) \neq \emptyset$, para cada conjunto abierto, no vacío, B en X . Por lo tanto, $Q_+(\Phi)$ es denso en X . \square

3 Construcción de una $(\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0)$ -acción con puntos no transitivos no densos

A continuación construiremos un homeomorfismo $S : Y \rightarrow Y$, el cual posee un único punto fijo, y tal que todos los demás puntos de Y tienen órbita densa, todo esto siguiendo la prueba del teorema 1 de [2]. A partir de ello, construimos una $(\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0)$ -acción con puntos no transitivos que no son densos.

Sea $T : X \rightarrow X$ un homeomorfismo minimal, sin puntos periódicos, y donde X es un espacio métrico compacto, totalmente desconexo, y sin puntos aislados. Para cada $x \in X$ asociamos $\hat{x} = (\hat{x}_n)_{n \in \mathbb{Z}} \in X^{\mathbb{Z}}$, donde $\hat{x}_n = T^n(x)$, para cada $n \in \mathbb{Z}$. Consideremos el conjunto de sucesiones bilaterales $\hat{X} = \{\hat{x} \in X^{\mathbb{Z}}; x \in X\}$ [3][4][5].

Como X es un espacio métrico totalmente desconexo, cada punto x de X constituye una componente conexa de X . Así, $\{x\} = \bigcap_{A \in \mathcal{C}_x} A$, donde

$$\mathcal{C}_x = \{A \subseteq X; A \text{ es abierto y cerrado, y } x \in A\},$$

para cada $x \in X$, ya que X es un espacio de Hausdorff (más aún, es un espacio métrico) y compacto.

Proposición 1. *Dado $x' \in X$ tal que $x' \in P_-(T) \cap P_+(T)$, existe $\{U_k\}_{k \in \mathbb{N}}$, colección numerable de conjuntos abiertos y cerrados a la vez, tal que*

$$\{x'\} = \bigcap_{k \in \mathbb{N}} U_k, \text{ donde } U_1 \supseteq U_2 \supseteq U_3 \supseteq \dots, \quad (3)$$

Demostración. Tenemos que $\{x'\} = \bigcap_{n \in \mathbb{N}} B(x', 1/n)$. Sea $n \in \mathbb{N}$. Como cada A en $\mathcal{C}_{x'}$ es cerrado, como X es compacto y $\bigcap_{A \in \mathcal{C}_{x'}} A = \{x'\} \subseteq B(x', 1/n)$, entonces existen $m_n \in \mathbb{N}$, y $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \dots, \tilde{A}_{m_n} \in \mathcal{C}_{x'}$ tales

que $\bigcap_{i=1}^{m_n} \tilde{A}_i \subseteq B(x', 1/n)$. Definiendo $A_n = \bigcap_{i=1}^{m_n} \tilde{A}_i$, tenemos que $A_n \in \mathcal{C}_{x'}$ y $A_n \subseteq B(x', 1/n)$. Por lo tanto $\{x'\} = \bigcap_{n \in \mathbb{N}} A_n$. Más aún, podemos suponer que

$$A_1 \supseteq A_2 \supseteq A_3 \supseteq \dots$$

Basta definir $\tilde{U}_1 = A_1$, y $\tilde{U}_n = \tilde{U}_{n-1} \cap A_n$ para cada $n \in \mathbb{N}$. \square

Como $x' \in P_+(T) \cap P_-(T)$, entonces para cada $k \in \mathbb{N}$ existen infinitos $j \in \mathbb{Z}_+$ e infinitos $j \in \mathbb{Z}_-$ tales que $T^j(x') \in U_k$. Sea $(n_i)_{i \in \mathbb{Z}} \subseteq \mathbb{Z}$ la sucesión bilateral estrictamente creciente definida por

$$T^{n_i}(x') \in U_1, \text{ para cada } i \in \mathbb{Z}, \text{ y}$$

$$\text{si } n \in \mathbb{Z} \text{ y } T^n(x') \in U_1, \text{ entonces } n \in \{n_i\}_{i \in \mathbb{Z}}.$$

donde $n_0 = \min\{n \geq 0; T^n(x') \in U_1\}$. Ahora, sea $(k_i)_{i \in \mathbb{Z}} \subseteq \mathbb{N} \cup \{\infty\}$, la sucesión definida por

$$k_i = \max\{k \geq 1; T^{n_i}(x') \in U_k\}.$$

Observe que $n_0 = 0$ puesto que $x' \in U_1$. Así, $k_0 = +\infty$ ya que $T^{n_0}(x') = x' \in U_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$, de (3). Como x' no es un punto periódico, para cada $i \neq 0$, $T^{n_i}(x') \neq x'$, y de (3) tenemos que existe $k' \in \mathbb{N}$ tal que $T^{n_i}(x') \notin U_k$ para cada $k \geq k'$. Así, $k_i \in \mathbb{N}$ es caracterizado, para cada $i \neq 0$, por

$$T^{n_i}(x') \in U_{k_i} \text{ e } T^{n_i}(x') \notin U_{k_i+1}.$$

Sea $X_c = X \cup \{c\}$, donde c es un punto fuera de X tal que c es un punto aislado de X_c , esto es, $\{c\}$ es un conjunto abierto de X_c . Sea

$$y' = \dots, c, c, \hat{x}'[n_0, n_1]c^{k_1}\hat{x}'[n_1, n_2]c^{k_2}\hat{x}'[n_2, n_3] \dots \quad (4)$$

un elemento de $X_c^{\mathbb{Z}}$, con infinitos c a izquierda, donde c^k denota a un bloque de c 's de longitud k , esto es, c, c, \dots, c, c , (k veces); y donde $\hat{x}'[m, n]$ denota al bloque $T^m(x'), T^{m+1}(x'), \dots, T^{n-2}(x'), T^{n-1}(x')$, para $m < n$. En particular,

$$\hat{x}'[n_0, n_1] = \underline{T^{n_0}(x')}, T^{n_0+1}(x'), \dots, T^{n_1-2}(x'), T^{n_1-1}(x'),$$

donde el término sublineado $\underline{T^{n_0}(x')}$ está en la posición cero, esto es, $(y')_0 = T^{n_0}(x')$.

Sea $Y = \overline{\{S^n(y') \in X_c^{\mathbb{Z}}; n \in \mathbb{Z}\}}$, la cerradura de $\{S^n(y')\}_{n \in \mathbb{Z}}$ en la topología producto de $X_c^{\mathbb{Z}}$, y donde $S : X_c^{\mathbb{Z}} \rightarrow X_c^{\mathbb{Z}}$ es la función desplazamiento, definida por

$$S((x_n)_{n \in \mathbb{Z}}) = (x_{n+1})_{n \in \mathbb{Z}}, \text{ para cada } (x_n)_{n \in \mathbb{Z}} \in X_c^{\mathbb{Z}}.$$

Observación 1. Observe que $S(Y) \subseteq Y$, y que por lo tanto la restricción de S a Y , $S|_Y : Y \rightarrow Y$, está bien definido. En efecto, sea $w \in S(Y)$. Así, $w = S(y)$ para algún $y \in Y$. Para cada abierto $W \subseteq X_c^{\mathbb{Z}}$ conteniendo $S(y)$, tenemos que $S^{-1}(W)$ es un abierto conteniendo y , y entonces, como $y \in Y$, existe $n_W \in \mathbb{Z}$ tal que $S^{n_W}(y') \in S^{-1}(W)$. Así, $S^{n_W+1}(y') \in W$. Por lo tanto, $W \cap \{S^n(y'); n \in \mathbb{Z}\} \neq \emptyset$. Entonces, $S(y) \in \{S^n(y'); n \in \mathbb{Z}\} = Y$. Análogamente, dado que S es un homeomorfismo, $S^{-1}(Y) \subseteq Y$. Por lo tanto, considerando Y con la topología de subespacio heredada de la topología producto de $X_c^{\mathbb{Z}}$, tenemos que $S|_Y : Y \rightarrow Y$ es un homeomorfismo. Por simplicidad, denotaremos por $S : Y \rightarrow Y$ a dicha restricción.

De la prueba del teorema 1 de [2], extraemos la siguiente proposición

Proposición 2. Si $y \in Y \setminus \{\bar{c}\}$ entonces $\overline{O(y, S)} = Y$, donde $O(y, S) = \{S^n(y) \in X_c^Z; n \in \mathbb{Z}\}$

Demostración del teorema 2. Dado que S y S^{-1} conmutan, podemos considerar la acción $\Phi : (\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0) \times Y \rightarrow Y$, del semigrupo $\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$ sobre Y , definida por $\Phi((1, 0), \cdot) = S$ y $\Phi((0, 1), \cdot) = S^{-1}$. Tenemos que la semiórbita de x asociada a Φ es,

$$\begin{aligned} O(x, \Phi) &= \{\Phi((m, n), x) \in Y; (m, n) \in \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0\} \\ &= \{S^{m-n}(x) \in Y; m, n \in \mathbb{N}_0\} \\ &= \{S^\ell(x); \ell \in \mathbb{Z}\} = O(x, S). \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\overline{O(\omega, \Phi)} = \begin{cases} \{\bar{c}\}, & \text{si } \omega = \bar{c}, \\ Y, & \text{si } \omega \in X \setminus \{\bar{c}\}. \end{cases}$$

Así, $Q(\Phi) \neq \emptyset$ y $\overline{Q(\Phi)} \neq X$, puesto que $Q(\Phi) = \{\bar{c}\}$. Por lo tanto, en este caso, que el conjunto de puntos no transitivos asociado a Φ sea no vacío, no implica que este

conjunto sea denso. Todo esto, a pesar de que sea válida la hipótesis: si $p \in Y$ es transitivo, entonces $\Phi((m, n), p)$ es transitivo, para cada $(m, n) \in \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$; ya que el punto fijo \bar{c} es el único punto no transitivo de Φ . \square

4 Conclusiones

El teorema 2 en [1], en términos de acciones de \mathbb{N}_0 sobre un espacio métrico compacto, nos dice que la existencia de algún punto no transitivo implica la densidad de estos.

Bajo una hipótesis motivada por el teorema 1 de [1], probamos también que, para el caso acciones de \mathbb{R}_+ sobre espacios métricos compactos, la existencia de puntos no transitivos implica la densidad de estos.

Finalmente, para el caso de acciones de \mathbb{N}_0^2 sobre espacios métricos compactos, no necesariamente la existencia de puntos no transitivos, implica la densidad de estos, aún si se cumpliera el análogo de la hipótesis hecha para semiflujos.

1. S. Kinoshita, *On orbits of homeomorphisms*, Colloquium Mathematicum Vol VI (1958).
2. Tomasz Downarowicz, Xiangdong Ye, *When every point is either transitive or periodic*, Colloquium Mathematicum Vol. 93 (2002).
3. C. Robinson, *Dynamical Systems. Stability. Symbolic Dy-*

namics, and Chaos, CRC Press (1995)

4. A. Katok & B. Hasselblatt, *Introduction to the Modern Theory of Smooth Dynamical Systems*, Cambridge University Press (1995).
5. M. Brin & G. Stuck, *Introduction to Dynamical System*, Cambridge University Press (2002).

Comparación del rendimiento de clústeres de computadoras construidos con fines académicos en la UNI

César Martín Cruz Salazar[†], Yuri Nuñez Medrano
Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, Perú.
[†]*ce.cruz@gmail.com*

Recibido el 5 de Junio del 2018; aceptado el 3 de Agosto del 2018

Este trabajo compara los tiempos de ejecución de algunos programas en diferentes clústeres. Uno de los programas usados realiza el cálculo del valor de PI, otro programa realiza el cálculo del valor de PI interactivo con intervención del usuario y encuentra la cantidad de números primos e identifica el primo mayor que hay en un intervalo de 0 a 1000 millones. Se describe también las especificaciones y construcción del clúster el cual usa mini-computadoras *Raspberry Pi3* llamado "*Súper PI 2*" que viene a ser una mejora del clúster "*Súper PI*" anteriormente construido[1].

Palabras Claves: Programación Paralela, Clúster de computadoras, raspberry pi3, HPC, Procesador ARM

This work compares the time it takes to run some programs in different clusters. One of the programs calculate the PI value, another program calculate the PI value interactively with user intervention and find the amount of primes numbers and the largest prime in the interval of 0 to 1000. It also describes the specifications and the construction of a cluster with minicomputers *Raspberry Pi3* called "*Super PI 2*" which is an improvement of the *Super PI* cluster previously constructed [1].

Keywords: Parallel programming, Cluster computing, raspberry Pi3, HPC, Processor ARM.

1 Introducción

Con la construcción del clúster *Super PI 2* se consigue aumentar la potencia de computo de los clústeres construidos anteriormente con placas *Raspberry Pi 3*(RPI3).

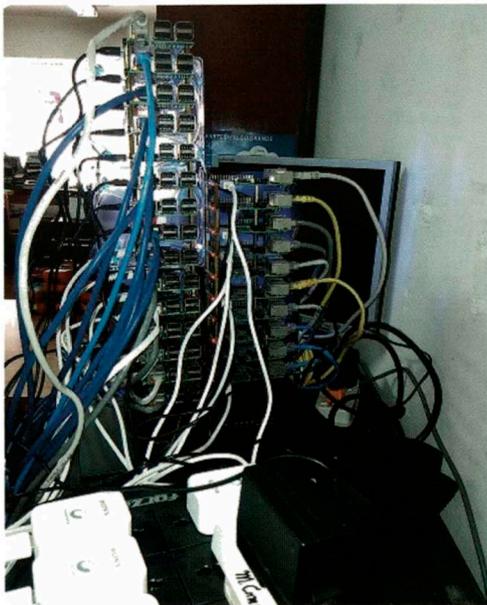


Figura 1. Clúster *Super PI 2* de 132 núcleos con RPI3.

Este aumento de potencia se logra incrementando el número de nodos a la versión del clúster construido en [1] siguiendo la experiencia conseguida en [2]. La meta era que este clúster (figura 1) debía superar en potencia de computo al clúster CTIC (figura 2) construida con

máquinas PCs recicladas [3]. Al mismo tiempo que se construía el *Súper PI 2* otro grupo construía en CTIC un clúster usando 20 placas Odroid XU4 [4]. El clúster *Super PI 2* consta de 33 nodos (cada nodo es una placa RPI3 modelo B) equivalente a 132 núcleos, de los cuales un nodo (4 núcleos) es el maestro y 32 son los esclavos.



Figura 2. Clúster CTIC con máquinas PCs recicladas.

2 Descripción del clúster Súper PI 2

2.1 Hardware

El clúster se construyó de acuerdo a la configuración maestro/esclavo como se muestra en la figura 3.

Clúster "Super PI 2" de 33 nodos (132 núcleos)

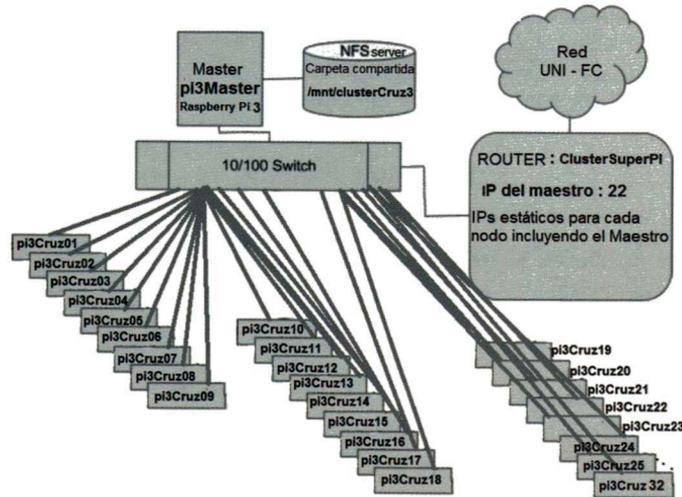


Figura 3. Arquitectura del clúster Súper PI 2.

Cada nodo consta de placas RPI3 que han sido "overclockeados" (se ha aumentado la frecuencia del procesador en cada nodo) con excepción del nodo maestro. El RPI3 tiene una arquitectura de 64 bits y 4 puertos USB 2.0. En la tabla 1 se muestra un resumen de las especificaciones del RPI3 modelo B.

Tabla 1. Especificaciones del Raspberry PI 3 B.

SoC	Broadcom BCM2837
CPU	1.2GHz quad-core ARM Cortex-A53
GPU	Dual Core VideoCore
RAM	1GB LPDDR2 SDRAM
Ethernet	Un jack 10/100 RJ45
USB	Cuatro conectores USB 2.0
Memoria	Micro SD card slot

Fue necesario utilizar ventiladores para enfriar el clúster, debido a que el clúster tiene como fuente de calentamiento los procesadores overclockeados. El ventilador que se utilizó es plano de 120mm de lado, con un nivel bajo de ruido de marca DEPP COOL.

Sin los ventiladores la temperatura medida fue de 45°C de cada nodo en estado standby. Con los ventiladores la temperatura bajó a 39°C en estado standby y 76°C durante el procesamiento.

2.2 Software

Se instaló el sistema operativo Raspbian Jessie Lite descargada del sitio oficial raspberrypi.org, en una tarjeta de memoria microSD de 32 Gigabytes clase 10 (velocidad de lectura hasta de 48MB/s, velocidad de video C10 y un peso de 4.54 g, de marca SanDisk) que luego se colocó en una ranura acondicionada a la placa. Se trata de una versión derivada y optimizada de la distribución Debian GNU/Linux para la Raspberry pi. La configuración del sistema para que se comporte como clúster se realizó igual que en [1].

Como se usó overclok se vió necesario utilizar fuentes de alimentación apropiadas de 5V a 3 Amperios para cada nodo.

Para obtener el overclok se cambia el archivo en /boot/config.txt de cada nodo [5] ingresando las líneas: arm_freq = 1350 over_voltage=5 sdram_freq=500 gpu_freq=500

3 Resultados y comparación de los tiempos de ejecución de los programas

3.1 Especificaciones Técnicas

Las Especificaciones técnicas de los distintos clusters usados se detallan en la tabla 2.

Tabla 2. Especificaciones técnicas de las máquinas usadas.

Clúster	Núcleos	Procesador	RAM
PC	8	i7-4770 3.4GHz	8GB
DELL	8	XEON 2.4Ghz	16GB
CHESS	64	I7-4790 3.4GHz	64GB
CTIC	54	Core2 duo 2.3GHz	27GB
Odroid	80	ARM 2GHz	40GB
Súper PI 2	128	ARM 1.35GHz	33GB
PINE64	128	ARM 1.2GHz	64GB

Se ejecutaron en el clúster Súper PI 2 los siguientes programas: cpi3.c, calcula el valor de pi para 800 millones de intervalos ver código fuente en [1]. icpi.c, solicita el ingreso del número de intervalos en este caso 800 millones de intervalos ver código fuente en [1]. Mpiprime1000m.c, calcula la cantidad de primos y el número primo más grande encontrados en el intervalo de 0 a 1000 millones. Ver figuras 4, 5 y 6.

```

pi@pi3Master:~$ mpiexec -f machinefile32 -n 128 /mnt/clusterCruz3/cpi3
.....
Process 60 of 128 is on pi3Cruz29
Process 126 of 128 is on pi3Cruz31
Process 105 of 128 is on pi3Cruz10
Process 77 of 128 is on pi3Cruz14
Process 125 of 128 is on pi3Cruz30
Process 115 of 128 is on pi3Cruz20
Process 71 of 128 is on pi3Cruz08
Process 78 of 128 is on pi3Cruz15
Process 104 of 128 is on pi3Cruz09
Process 92 of 128 is on pi3Cruz29
Process 62 of 128 is on pi3Cruz31
Process 109 of 128 is on pi3Cruz14
Process 61 of 128 is on pi3Cruz30
Process 19 of 128 is on pi3Cruz20
Process 103 of 128 is on pi3Cruz08
Process 110 of 128 is on pi3Cruz15
Process 124 of 128 is on pi3Cruz29
Process 45 of 128 is on pi3Cruz14
Process 7 of 128 is on pi3Cruz08
pi is approximately 3.1415926535898060, Error is 0.00000000000000000000
129
wall clock time = 0.433867
    
```

Figura 4. Se muestra la ejecución del programa (cpi3.c) de cálculo de pi en el clúster Súper PI 2.

```

pi@pi3Master:~$ mpiexec -f machinefile32 -n 128 /mnt/clusterCruz3/icpi
Enter the number of intervals: (0 quits) 800000000
pi is approximately 3.1415926535898060, Error is 0.00000000000000000000
129
wall clock time = 0.357846
Enter the number of intervals: (0 quits) 0
    
```

Figura 5. Se muestra la ejecución del programa (icpi.c) de cálculo de pi interactivo en el clúster Súper PI 2.

```

pi@pi3Master:~$ mpiexec -f machinefile32 -n 128 /mnt/clusterCruz3/mpi_prime1000m
Using 128 tasks to scan 1000000000 numbers
Done. Largest prime is 999999937 Total primes 50847534
Wallclock time elapsed: 327.71 seconds
    
```

Figura 6. Se muestra la ejecución del programa (mpiprime1000m.c) de cálculo de números primos que se encuentran en el intervalo de 0 a 1000 millones en el clúster Súper PI 2.

Tabla 3. Tiempos de ejecución de los programas en cada Clúster.

Clúster	Programa	Tiempo (en segundos)
Una PC	cpi3	0,774
Una PC	cpi3	0,763
Una PC	mpiprime1000m	357,54
CTIC	cpi3	0,563
CHESS	cpi3	0,245
CHESS	icpi	0,184
CHESS	mpiprime1000m	44,64
DELL	cpi3	0,675
DELL	icpi	0,655
DELL	mpiprime1000m	284,41
PINE64	cpi3	0,471
PINE64	icpi	0,244
PINE6	mpiprime1000m	101,38
Super PI 2	cpi3	0,434
Súper PI 2	icpi	0,358
Súper PI 2	mpiprime1000m	327,71
Odroid	cpi3	0,255
Odroid	icpi	0,248
Odroid	Mpiprime1000m	473,61

Se comparó el desempeño de los diferentes procesadores arriba indicados, ejecutando los programas cpi3,

mpiprime1000 y icpi. Se consideran procesadores de escritorio y de servidor de la marca Intel, y procesadores ARM usados en equipos móviles. En los diversos clústeres usados tenemos diferentes procesadores y memoria con diferentes capacidades, con ellos el nivel de performance depende de la ventilación, de la red cableada y del conmutador.

La tabla 3 muestra los tiempos de ejecución de los diferentes programas usados en los diferentes clústeres que se observan en segundos, los tiempos varían dependiendo de la naturaleza del programa utilizado y de las capacidades de hardware y de comunicación.

La figura 7 muestra una comparación entre los tiempos de ejecución del programa cpi3.c en diferentes máquinas.

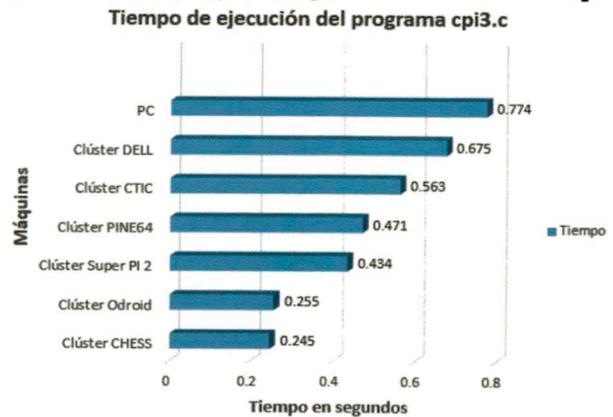


Figura 7. Gráfica de tiempos de ejecución del programa cpi3.c (menor tiempo es mejor rendimiento).

Se observa que el menor tiempo de ejecución es el obtenido para el clúster CHESS, cuyos procesadores son de 3.4 GHz como mínimo y 64 núcleos. El mayor tiempo de ejecución observado fue el del clúster de una sola PC que a 3.4GHz como mínimo y 8 nucleos.



Figura 8. Gráfica de tiempos de ejecución del programa icpi.c (menor tiempo es mejor rendimiento).

La figura 8 muestra una comparación entre los tiempos de ejecución del programa icpi.c en las diferentes máquinas usadas. El menor tiempo de ejecución registrado fué en el clúster PINE64, cuyo desempeño fue mejor de lo es-

perado. Este clúster tiene 1.2GHz de procesador como mínimo y 128 núcleos.

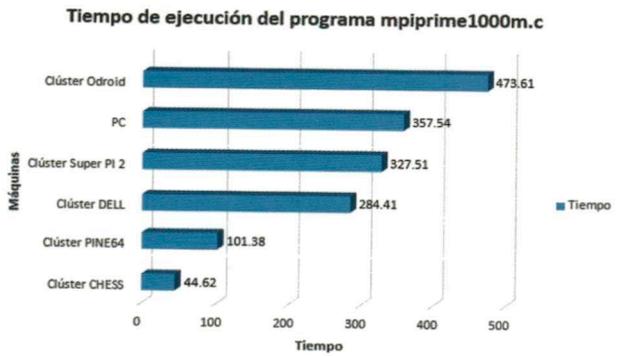


Figura 9. Gráfica de tiempos de ejecución del programa *mpiprime1000m.c* (menor tiempo es mejor rendimiento).

La figura 9 muestra una comparación entre los tiempos de ejecución del programa *mpiprime1000m.c* en las diferentes máquinas usadas. Debe mencionarse que los desempeños de las máquinas fueron algo diferentes debido a la naturaleza del algoritmo. La máquina que registró el menor tiempo de ejecución fue el clúster CHESS que tienen 3.4 GHz de procesador como mínimo y 64 núcleos. La máquina que ejecutó el programa en la mayor cantidad de tiempo fue el clúster Odroid que tienen 2.0 GHz de procesador como mínimo y 80 núcleos, muy similar al

clúster de una PC.

4 Conclusiones

Al analizar los resultados vemos que el clúster *Súper PI 2* no se encuentra mal posicionado en cuanto a potencia de cómputo se refiere. Como se puede ver supera en potencia de cómputo al Clúster CTIC que tiene gran consumo energético por lo que consideramos que puede considerarse como una opción educativa válida para un clúster de uso frecuente.

El clúster *Súper PI 2*, dependiendo del programa y algoritmo que se use, supera al clúster ODROID, al clúster de una sola PC de escritorio, al clúster DELL y al clúster PINE64.

Dentro de las ventajas del clúster *Súper PI2*, se debe mencionar también su bajo consumo de energía y el espacio que ocupa comparado con el clúster CTIC, el clúster DELL y el clúster CHESS.

Agradecimientos

Agradecemos al Instituto de Investigación de la Facultad de Ciencias de la UNI por el apoyo brindado. Este trabajo fue desarrollado en la Facultad de Ciencias de la UNI.

1. César Martín Cruz Salazar y Yuri Nuñez Medrano, REVCUNI,19(1):12-20,5, 2016.
2. César Martín Cruz Salazar, REVCUNI,17(1):9-16, 8, 2014.
3. César Martín Cruz Salazar, REVCUNI,17(1):50-57, 10, 2014.
4. ODROID XU4. <https://www.hardkernel.com/main/products/prdtinfo.php?gcode=G143452239825>, 2016.
5. Jon L. Aasenden <https://jonlennartaasenden.wordpress.com/2016/11/17/overclocking-the-raspberry-pi-3/>, 2016.

Nanotermómetro por espectroscopia resuelta en el tiempo con longitudes de onda de emisión en 543, 655 y 1 550 nm

David W. Puma¹, Rubén Puga¹, José Manuel Hernández², Héctor Loro¹ †

¹Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Perú

²Instituto de Física, UNAM, Mexico

†hloro@uni.edu.pe

Recibido el 02 de Julio del 2018; aceptado el 17 de Setiembre del 2018

Actualmente las nanopartículas de $NaYF_4 : Er, Yb$ tienen un gran interés científico debido a sus potenciales aplicaciones como materiales multifuncionales. En este trabajo se presenta la metodología seguida para la síntesis de estas nanopartículas así como su caracterización usando espectros de absorción, emisión, DRX y SEM. A partir de los espectros de emisión por upconversion a 543 nm, 655 nm y por Downconversion a 1 550 nm de estas nanopartículas se ha estimado el tiempo de vida de fluorescencia de estas emisiones en función de la temperatura de la muestra. Los resultados obtenidos para temperaturas entre 40°C y 80°C muestran una dependencia lineal del tiempo de vida media con la temperatura.

Palabras claves: Nanopartícula, solvothermal, upconversion, downconversion.

Currently $NaYF_4 : Er, Yb$ nanoparticles have a great scientific interest due to their potential applications as multifunctional materials. In this work we present the methodology followed to synthesis these nanoparticles as well as their characterization using absorption, emission, DRX and SEM spectroscopy. From the emission spectrums by upconversion at 543 nm, 655 nm and Downconversion at 1 550 nm of these nanoparticles the fluorescence half life time has been estimated as a function of sample temperature. Results obtained for temperatures between 40°C and 80°C show a linear dependence of half life time with temperature.

Keywords: Nanoparticles, solvothermal, upconversion, downconversion.

1 Introducción

Actualmente existe un creciente interés en los nanocompuestos inorgánicos dopados con iones de tierras raras por sus múltiples aplicaciones tecnológicas, por ejemplo como bio-sensores para imágenes biológicas, sensores de temperatura entre otras aplicaciones. Como sensores de temperatura se han reportado trabajos que relacionan la temperatura de la muestra con la relación de intensidades entre dos bandas de emisión. Dentro de los nanocristales que se usan como host para las tierras raras emisoras de luz, aquellos que usan como host al $NaYF_4$ es de los materiales que presentan una mayor emisión de radiación luminiscente la cual se ha usado para mediciones de temperatura en el rango de 293 y 318 K [1] [2]. Estos materiales tienen la capacidad de absorber y convertir excitaciones de baja energía con longitud de onda en el infrarrojo cercano en emisiones de alta energía con longitudes más cortas, fenómeno conocido como upconversion [3] [4]. La importancia de medir una temperatura de manera remota radica en sus potenciales aplicaciones en la industria, medicina, entre otros. La posibilidad de medir temperaturas a nivel nanométrico de manera eficiente usando el tiempo de vida media de la radiación luminiscente emitida ya sea por upconversion o downconversion abre nuevos campos de aplicaciones, de ahí la importancia de conseguir materiales que respondan eficientemente en distintas longitudes de onda.

En este trabajo se analiza la posibilidad de usar el $NaYF_4 : Er, Yb$ para medir temperaturas en el rango de 40°C y 80°C usando longitudes de onda de emisión por upconversion de 543 nm y 655 nm y por downconversion de 1 550 nm excitando con una longitud de onda de 980 nm.

2 Nanotermómetros

La temperatura de regiones a escala nanométrica es un parámetro muy importante en el estudio de diferentes procesos como por ejemplo en biología, el estudio del metabolismo de las células, la división celular, el desarrollo de organismos simples como nematodos y la tasa de reproducción celular al variar la temperatura, [5]. En otros campos como en la industria la determinación de la temperatura de pequeñas regiones en tiempo real puede ayudar a prevenir daños en componentes mecánicos o eléctricos [6].

Actualmente existe un fuerte interés en el estudio de la dependencia de la luminiscencia de nanopartículas basados en lantánidos con la temperatura. Esto tiene mucho atractivo porque estas nanopartículas pueden actuar como biosensores para registrar bioimágenes o para medir la temperatura en procesos de terapia térmica, con lo cual

se disponen de materiales menos tóxicos que los puntos cuánticos y tintes orgánicos usados anteriormente [1][7].

Recientemente se han reportado trabajos donde se muestra la dependencia de las emisiones ${}^2H_{11/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ y ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ con la temperatura para el $NaYF_4 : Er, Yb$ [6].

3 Nanotermómetros por espectroscopia resuelta en el tiempo

Los sensores basados en fluorescencia se usan ampliamente para medir diversos parámetros debido a su relativa independencia de las condiciones ambientales [7][8][9]. Este enfoque es ampliamente utilizado para la temperatura. El sensor que se desarrolla en este trabajo se basa en la espectroscopia resuelta en el tiempo con el fin de medir la dependencia del tiempo de vida de fluorescencia de la radiación emitida por el ion Er^{3+} con la temperatura.

La espectroscopia resuelta en el tiempo es el estudio de procesos dinámicos que transcurren en tiempos generalmente muy cortos, en materiales o compuestos químicos. Muy a menudo, los procesos se estudian después de que se produce el fenómeno de luminiscencia de un material, pero en principio, la técnica se puede aplicar a cualquier proceso que conduzca a un cambio en las propiedades de un material. En esta técnica la radiación de excitación es emitida en un corto periodo de tiempo, ya sea usando un laser pulsado o un mecanismo que emita pulsos controlados de luz, después de lo cual es posible estudiar procesos que ocurren en tiempos cortos luego de apagada la radiación de excitación como por ejemplo observar la fluorescencia resultante en función del tiempo [10].

La curva de decaimiento sigue la cinética de primer orden y puede ser descrita por la siguiente ecuación:

$$I(t) = I(0) \times e^{-t/\tau} \quad (1)$$

donde $I(0)$ y $I(t)$ son las intensidades de la radiación emitida en los instantes 0 y t . El tiempo de vida media de fluorescencia τ es el tiempo necesario para que $I(t)$ se reduzca a $1/e$ de $I(0)$. Tomando logaritmos a la ecuación 1, se obtiene:

$$\ln I(t) = \ln I(0) - t/\tau \quad (2)$$

La gráfica de $\ln I(t)$ en función del tiempo es una línea recta con pendiente $1/\tau$ [11].

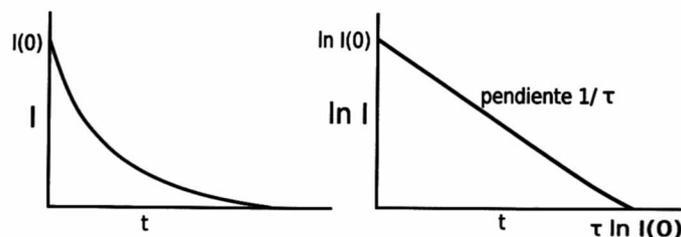


Figura 1: Decaimiento de la fluorescencia en función del tiempo luego de apagado el pulso de excitación [8].

4 El $NaYF_4 : Er, Yb$

Entre las nanopartículas emisoras de luz por up-conversion con mayor eficiencia se encuentran las nanopartículas de $NaYF_4 : Er, Yb$ donde los iones Er e Yb ingresan como dopantes. El $NaYF_4$ actúa como host, Los iones Er e Yb actúan como activador y sensibilizador respectivamente en el proceso de up-conversion.

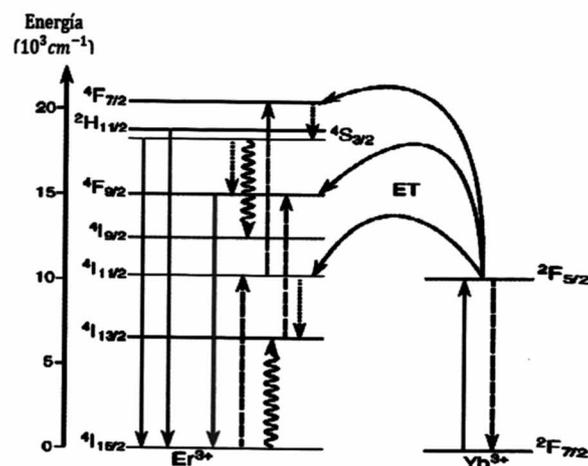


Figura 2: Diagrama de niveles de energía con los procesos de transferencia de energía y emisión por up-conversion en un nanocrystal con dopantes Yb^{3+} , Er^{3+} , después de excitar los iones fotosensibilizadores Yb^{3+} con radiación infraroja de 980nm [1].

El fenómeno de up-conversion que se estudia se produce bajo radiación de 980 nm sobre los nanocristales lo que produce una emisión característica de relativa buena intensidad en el rojo y en el verde. En la figura 2 se muestra esquemáticamente la excitación del ion Yb el cual luego de ser excitado emite radiación que es transferida al ion Er . Esta radiación sirve para que los electrones excitados en el Er alcancen estados que pueden emitir en el rojo o en el verde como también se muestra en la figura 2.

El $NaYF_4$ cristaliza en dos diferentes fases, la fase hexagonal y la fase cúbica (fase β y α respectivamente). Estas fases dopadas con iones de tierras raras han sido extensamente estudiadas [2][3][6] y en la literatura se ha reportado su síntesis usando diferentes técnicas como por ejemplo el método solvotermal, el cual fue usado en

este trabajo para sintetizar los nanocristales estudiados. Este método se usa para preparar diversos materiales como semiconductores, cerámicos, metales, polímeros entre otros.

5 Síntesis de las nanopartículas

Se sintetizaron nanopartículas de NaYF_4 usando el método solvotermal [3]. Para la preparación de los nanopartículas [3] se usó 10,8 mmol de NaCl (Sigma Aldrich), 4,32 mmol de $\text{YCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (Sigma Aldrich), 7,2 mmol NH_4F (Sigma Aldrich), 0,108 mmol de $\text{ErCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (Sigma Aldrich) y 0,972 mmol de $\text{YbCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (Sigma Aldrich) todos con 99.9% de pureza. Estos productos fueron colocados en un vaso de precipitado al cual se le agregó 1,378 g de polyethylenimine ramificada (Sigma Aldrich) y se usó como solvente 27 ml de ethylene glicol. Luego se colocó el vaso en un agitador magnético por 60 minutos hasta que los componentes se disolvieron completamente. En otro vaso se colocó 30 ml de ethylene glicol con 0,81 g de fluoruro de amonio (Sigma Aldrich) y se agitó hasta disolverlo. Terminada la agitación del segundo vaso se vertió su contenido al primer vaso. La mezcla final se agitó por 30 minutos, hasta que los compuestos del recipiente se disolvieron completamente. El producto final se depositó en un recipiente de teflón el cual se colocó dentro de un autoclave que luego de sellarse se calentó en una mufla a 200°C por 8 horas. Finalmente se procedió a centrifugar el contenido por 20 minutos a 10 000 RPM. A continuación se lavo el producto por 4 veces usando una mezcla de agua y etanol, precipitando el producto usando una centrifugadora a 10 000 RPM por 20 minutos. La muestra final obtenida se secó en un horno a 50°C por 10 horas. Posteriormente se procedió a realizar un tratamiento térmico a la muestra obtenida a 500°C por 5 horas.

6 Caracterización por DRX y microscopía electrónica

Después de realizar la síntesis se procedió a determinar la estructura cristalina y la morfología de nuestro material. En primer lugar se obtuvo el espectro de DRX de las nanopartículas tal como fueron obtenidas. también se obtuvo el espectro de DRX de la muestra luego que se le realizó un tratamiento térmico.

Para esto se usó un Difractómetro de Rayos X marca Bruker modelo D8 Discover, usando como fuente de radiación $\text{Cu-K}\alpha$ de 0,154nm de longitud de onda. Los espectros obtenidos se muestran en la figura 3 donde se observa el cambio en la estructura cristalina de la muestra.

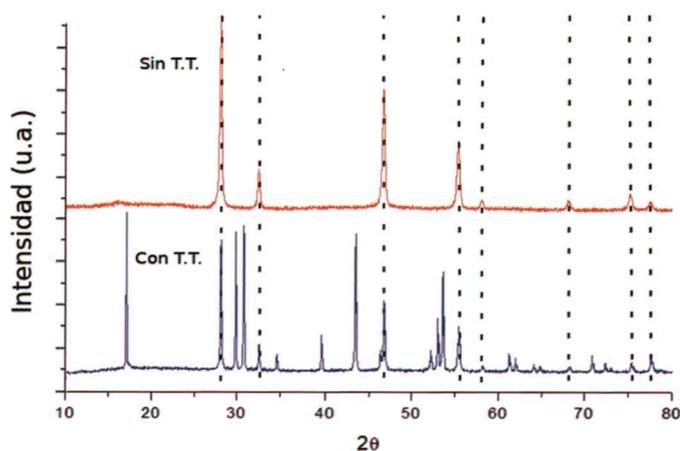


Figura 3: Difractogramas con la comparación entre la muestra de nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ sin tratamiento térmico y con tratamiento térmico de 500°C por 5 horas.

Se observa que antes del tratamiento térmico se tiene una fase α y luego del tratamiento térmico a 500°C se tiene una combinación de las fases α y β , con una mayor presencia de la fase β , tomando como referencia los espectros de DRX reportados en la literatura [2][12][21].

La segunda técnica usada para caracterizar la muestra obtenida fue microscopía electrónica de barrido (SEM). El equipo utilizado fue un SEM JSM-7800F y se analizaron las imágenes obtenidas usando el software ImageJ donde se vio la morfología y el tamaño de las muestras.

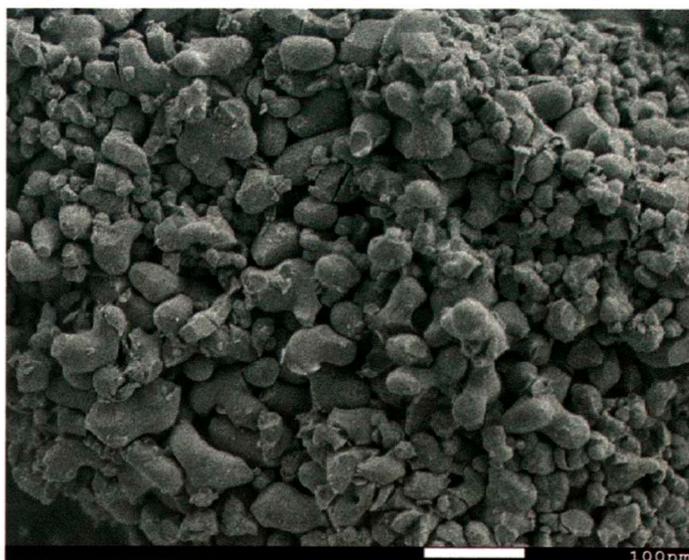


Figura 4: Imagen SEM de nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ con tratamiento térmico.

En la figura 4 muestra una imagen de microscopía electrónica SEM de nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}, \text{Yb}$ con un tratamiento térmico de 500°C por 5 horas. Se observa que estas nanopartículas se presentan aglomeradas y muestran algunas aristas asociadas a una estructura hexagonal de la fase beta del NaYF_4 . El tamaño promedio de estas nanopartículas es de 80 nm.

7 Espectroscopía óptica

Espectroscopía de absorción

Con el fin de caracterizar las emisiones de las nanopartículas sintetizadas en primer lugar se obtuvieron los espectros de absorción UV-Visible de las muestras sintetizadas. El Espectrofotómetro usado fue un Cary 5000 UV-VIS-NIR.

La figura 5 muestra el espectro de absorción de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}, \text{Yb}$ en el rango de 370 nm a 470 nm para una muestra sin tratamiento térmico y otra con tratamiento térmico de 500 °C por 5 horas. En ambos espectros se observa la formación de tres bandas, correspondientes a las transiciones en Er^{3+} [13][14][15], $^4I_{15/2} \rightarrow ^4G_{11/2}$; $^4I_{15/2} \rightarrow ^2H_{9/2}$ y $^4I_{15/2} \rightarrow ^4F_{5/2}$, con longitudes de onda centradas en 378 nm, 407 nm y 445 nm. Las bandas de la muestra con tratamiento térmico presentan una mejor definición en comparación con las bandas de la muestra sin tratamiento térmico.

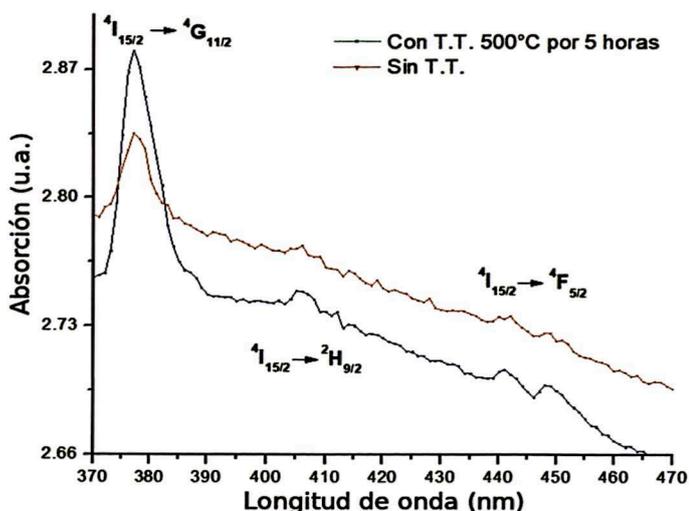


Figura 5: Espectro de absorción en rango 370 nm a 470 nm de las nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ sin tratamiento térmico y con tratamiento térmico de 500 °C por 5 horas.

La figura 6 muestra el espectro de absorción de nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}, \text{Yb}$ en el rango de 470 nm a 590 nm. En este espectro se observan tres bandas asociadas a las transiciones $^4I_{15/2} \rightarrow ^4F_{7/2}$; $^4I_{15/2} \rightarrow ^2H_{11/2}$ y $^4I_{15/2} \rightarrow ^4S_{3/2}$ con longitudes de onda centradas en 487, 521 y 543 nm respectivamente. Nuevamente se tiene que las bandas de absorción de la muestra con tratamiento térmico presenta una mejor definición en comparación con las bandas de la muestra sin tratamiento térmico. La transición desde el estado fundamental $^4I_{15/2}$ al nivel $^2H_{11/2}$ del Er^{3+} presenta una alta intensidad de absorción con respecto a las otras dos bandas.

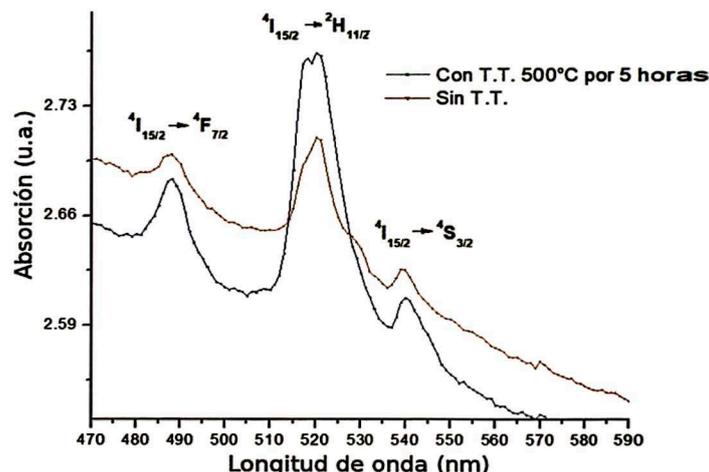


Figura 6: Espectro de absorción entre 470 nm y 590 nm de nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ sin tratamiento térmico y con un tratamiento térmico de 500 °C por 5 horas.

También se registró el espectro de absorción de las nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ en rango 590 nm a 840 nm. El espectro obtenido se muestra en la figura 7 donde se observan las bandas asociadas a las transiciones $^4I_{15/2} \rightarrow ^4F_{9/2}$ y $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$, las cuales se encuentran centradas en 655 nm y 798 nm respectivamente. Se observa que el pico con absorción en el rojo visible del nivel $^4F_{9/2}$ ofrece una intensidad mayor (más del doble) que el pico formado en la región infrarroja en el nivel $^4I_{9/2}$ del Er^{3+} , indicando así una mayor probabilidad de absorción al poblar el nivel $^4F_{9/2}$. Alrededor de 725 nm se observa un pico de absorción no identificado.

En general al comparar los espectros se ve que existe mayor absorción después del tratamiento térmico.

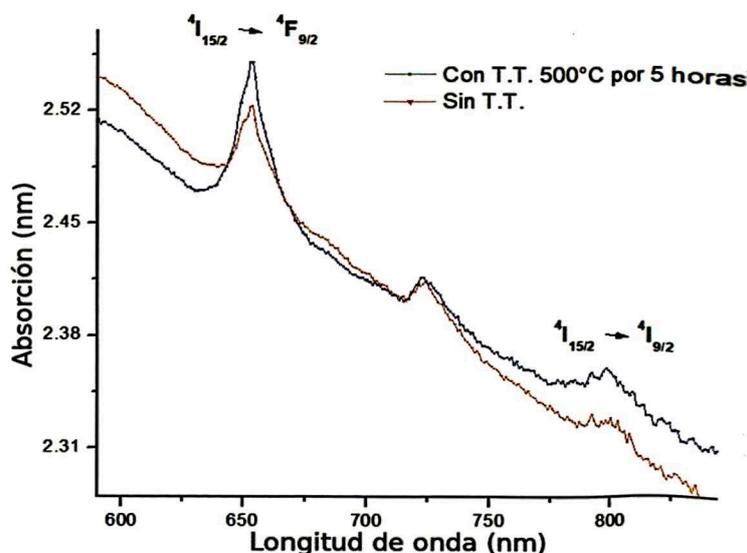


Figura 7: Espectro de absorción en rango 590 nm a 840 nm de las nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ sin tratamiento térmico y con tratamiento térmico de 500 °C por 5 horas.

Espectroscopia de emisión

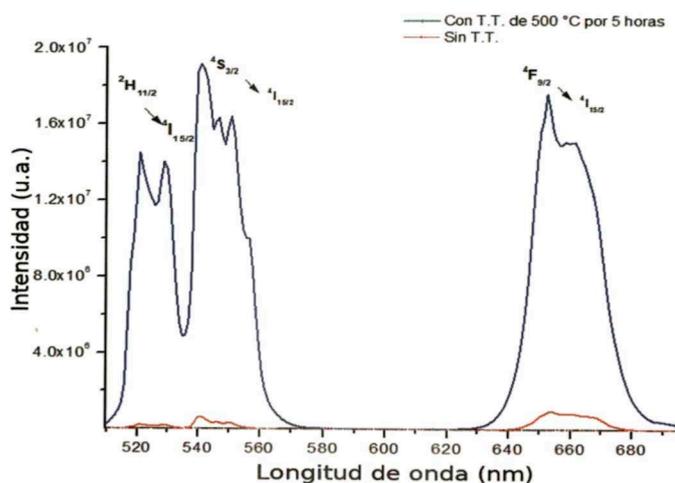


Figura 8: Espectro de emisión por upconversion de nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ excitando con un láser 980 nm y 0,3 W.

Con el fin de caracterizar las emisiones por upconversion en el rango de 500 nm a 700 nm se obtuvo el espectro de emisión de las nanopartículas de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ usando un espectrofluorímetro marca Horiba, modelo FluoroMaxP excitando la muestra con un láser de 980 nm y 0,3 W.

La figura 8 muestra el espectro de emisión por upconversion de las muestras sin y con tratamiento térmico. Se observa un notable aumento de las emisiones de las muestras tratadas térmicamente por 5 horas a 500 °C.

Las emisiones se asocian a las transiciones $^2H_{11/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$, $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ con longitudes de onda de 525 nm y 550 nm respectivamente, se distinguen también la formación de un pico correspondiente a las transiciones de los multipletes $^4F_{9/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$, centrada en 655 nm [10][16][17][9].

8 Espectroscopia resuelta en el tiempo y la temperatura

El arreglo experimental [18][8] para tomar los espectros de emisión resueltos en el tiempo a diferentes temperaturas se muestra en la figura 9.

Para realizar este experimento la muestra en polvo de $\text{NaYF}_4 : \text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ fue empastillada con el fin de tener una muestra compacta. Esta muestra se colocó sobre un cilindro de cobre el cual fue calentado usando un voltaje continuo variable. Una termocupla registró la temperatura sobre un borde de la muestra empastillada. Sobre la muestra se hizo incidir un láser de 980 nm y 0,4 W, cuya radiación fue modulada usando un Arduino UNO, el cual puede generar pulsos de ancho controlado.

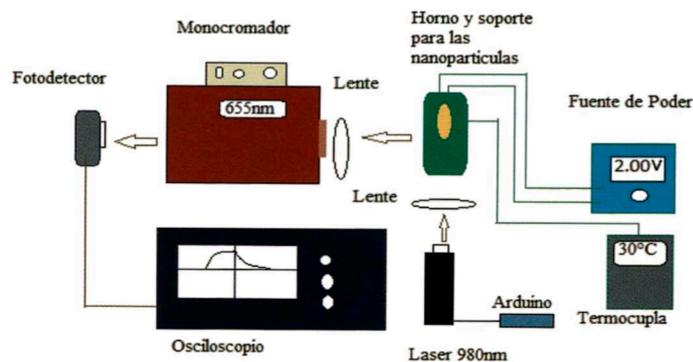


Figura 9: Arreglo experimental para estudiar la dependencia del tiempo de vida media de Fluorescencia con longitudes de onda de emisión en 543 nm, 655 nm y 1 550 nm en función de la Temperatura.

La emisión de la muestra justo después de apagado el láser fué detectada usando un fotodetector marca Thorlabs, modelo DET10D, el cual envía la señal detectada a un osciloscopio que permite registrar los datos obtenidos. Las curvas que muestran la disminución de la intensidad de decaimiento en función del tiempo se muestra en la figura 10.

Para encontrar el tiempo de vida media de estados excitados se usaran las curvas de decaimiento que se observan en la figura 10. La zona de decaimiento se ajustó a una función exponencial de la forma:

$$I = Ae^{-t/\tau} + B$$

donde I es proporcional a la intensidad de la radiación registrada, t es el tiempo, τ es el tiempo de vida media y A, B son constantes.

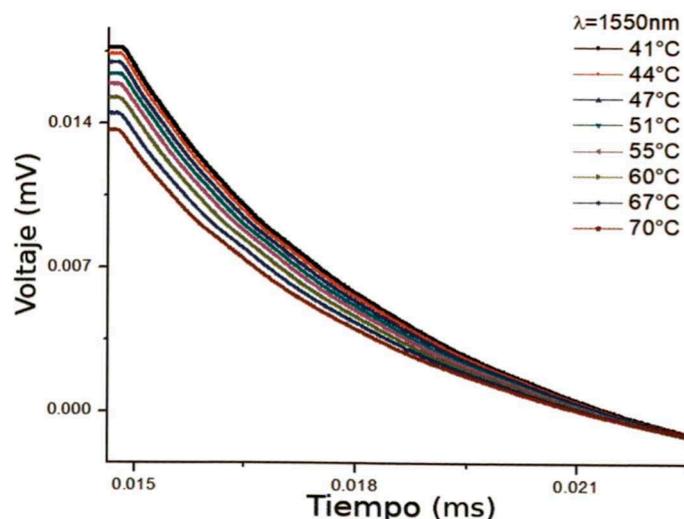


Figura 10: Gráfico donde se muestra el comportamiento de la señal de emisión de la transición en 1 550 nm al aumentar temperatura.

Las emisiones corresponden a las longitudes de onda de 543 nm, 655 nm y 1 550 nm. Las dos primeras se producen debido al fenómeno de upconversion y la última debido al fenómeno de downconversion.

Las vidas medias registradas para las longitudes de onda de 543 y 655 nm están en el orden de los μs mientras que los tiempos de vida media medidos para la longitud de onda de 1550 nm están en el orden de los ms .

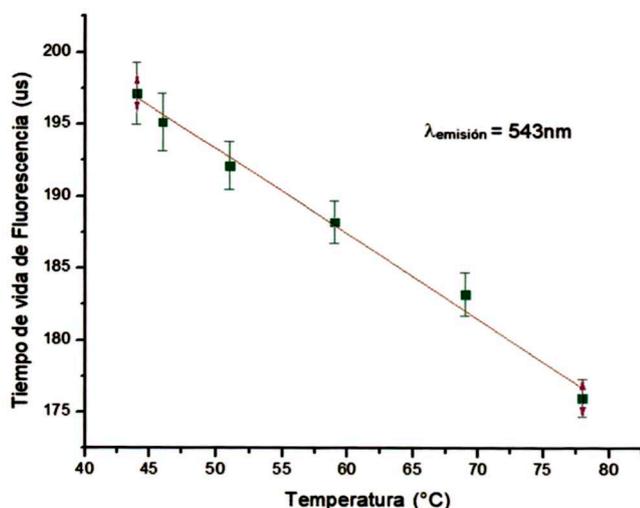


Figura 11: Dependencia del tiempo de vida media de fluorescencia con la temperatura para la banda de emisión $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ centrada en 543 nm.

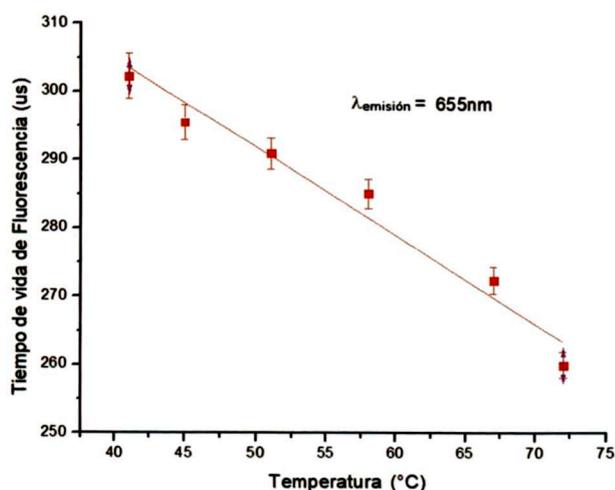


Figura 12: Dependencia del tiempo de vida media de fluorescencia con la temperatura para la banda de emisión $^4F_{9/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ centrada en 655 nm.

Asimismo se registraron los tiempos de vida media de las emisiones observadas, variando la temperatura de la muestra en el rango de 40°C a 80°C. Las medidas registradas en este rango de temperatura cambian manteniéndose el orden de magnitud.

Los valores de los tiempos de vida media medidos en función de la temperatura para estas tres longitudes de onda de 543 nm, 655 nm y 1550 nm se muestran en las figuras 11, 12 y 13 respectivamente observándose un comportamiento lineal en todos los casos [7].

Para la emisión a 543 nm se observa que cuando la temperatura aumenta en un 80%, el tiempo de vida media de decae en un 12%. Para la emisión a 655 nm se observa que cuando la temperatura aumenta en un 70%, el tiempo de vida media decae en un 13% mientras que para la emisión a 1550 nm, cuando la temperatura aumenta en un 75%, el tiempo de vida media de decae en un 5%.

Es importante hacer notar que aún para variaciones de temperatura relativamente pequeñas se observan cambios significativos en los tiempos de vida media de las emisiones registradas por lo que estas curvas sirven como curvas de calibración si se desea conocer la temperatura a partir del tiempo de vida media de emisión. Los coeficientes de determinación lineal de los ajustes para las emisiones de 543, 655 y 1550 nm fueron de 0,9884, 0,9532 y 0,9947 respectivamente.

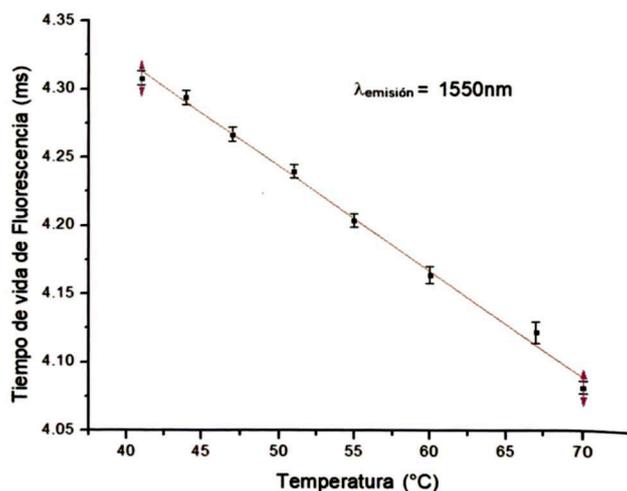


Figura 13: Dependencia del tiempo de vida media de fluorescencia con la temperatura para la banda de emisión $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ centrada en 1550 nm.

9 Conclusiones

Se sintetizó e identificó las bandas de absorción del Er^{3+} en $NaYF_4$ y se identificó sus emisiones por upconversion al hacer incidir radiación de un diodo laser de 980 nm, lograndose una mayor eficiencia luminiscente por upconversion con las muestras tratadas térmicamente a 500°C por 5 horas. La fase que predomina en la muestra con tratamiento térmico es la fase beta del $NaYF_4$. Las imágenes SEM muestran un tamaño promedio de 80 nm para las nanopartículas sintetizadas. Los tiempos de vida media medidos para las emisiones por upconversion de 543 nm y 655 nm están en el orden de los μs mientras que para la emisión por downconversion de 1550 nm, usando también un laser de 980 nm, estan en el orden de los ms . Los tiempos de vida media registran variaciones significa-

tivas al variar la temperatura de la muestra entre 40°C y 80°C observándose una dependencia lineal del tiempo de vida media con la temperatura, es decir que los tiempos de vida media de las emisiones registradas pueden usarse para determinar la temperatura de las muestras.

10 Agradecimientos

David Puma agradece por la beca Maestria dentro del convenio Nro 167 FONDECYT-UNI gracias a lo cual se realizó este trabajo. Los espectros de absorción y las imágenes SEM se obtuvieron gracias a la colaboración con el IFUNAM de México. Algunos espectros de emisión se obtuvieron gracias a la colaboración con el CINVESTAV, México.

1. Zengliang Shi1, Yue Duan, Xingjun Zhu, Qiwei Wang, DongDong Li, Ke Hu, Wei Feng, Fuyou Li and Chunxiang Xu, *Nanotechnology*, Vol. 29, 9, 2018.
2. D.T. Klier and M. U. Kumke, *Journal of Materials Chemistry C*,3(42), 2015.
3. Rubén Puga, Elius Palacios, Marielena Velasco, José Manuel Hernández, Héctor Loro, *REVCUNI*-17(1), 2014.
4. Stefan Schietinger , Thomas Aichele , Hai-Qiao Wang , Thomas Nann, Oliver Benson, *Nano Letters*, 10(1), 2010.
5. P. Haro-Gonzales, B. del Rosal, L-Maestro, J. A. Capobianco, K, Dholakia, J . Garcia Sole and D. Jaque, *Nanoscale*, 5(24), 2013.
6. Diana Vasquez Mazzotti, Walter Acosta Quiroz, Ruben Puga, Luis Alvarado, Carmen Eyzaquirre, Jose Manuel Hernández, Héctor Loro, *REVCUNI*, 19(1), 2016.
7. Mikhail Y. Berezin and Samuel Achilefu, *Chem. Rev.*, 110(5), 2010.
8. Frank Antony Huamán Pio, Hector Raul Loro Ramírez (2017). "Espectroscopía resuelta en el tiempo para el estudio de vidas medias de estados excitados de iones de tierras raras en función de la temperatura", Facultad de Ciencias-Escuela de Física-Universidad Nacional de Ingeniería, 2017.
9. Fan Zhang, *Photon Upconversion Nanomaterials*, Department of Chemistry Fudan, University Shanghai China (2015), ISBN 978-3- 662-45596-8, Edit. Springer.
10. J. Garcia Sole, L.E. Bausa and D. Jaque. *An introduction to the optical spectroscopy of inorganic solids*. Universidad Autonoma de Madrid , Madrid-España, Edit. Wiley and Sons Ltd (2005)
11. Diamandis, E. P. . *Immunoassays with time-resolved fluorescence spectroscopy: Principles and applications*. *Clinical Biochemistry*, 21(3), 1988.
12. Min Wook Pin, Eun Jim Park, Suji Choi, Yong Kim, Chang Hoon Jean, Toi Hwan Hi, Young Hean Kim, *Scientific Reports* Vol 2199, 2018.
13. W.Demtroder, *Laser spectroscopy*, 3rd Ed. Springer, 2003.
14. B. Whualkuer lozano, D. Araujo Cid B. , Ledemi Yannick, Messeddiq Jounes, *Journal of Applied Physics*, 113(8), 2013
15. Ruisen Zhou and Xia Li, *Optical Materials Express*.Vol. 6,pp. 1313-1320, 2016.
16. Bloembergen, N. *Phys. Rev. Lett.*, 2(3), 1959.
17. Parthiban Ramasamy, Palanisamy Manivasakan,Jinkwon Kim, *RSC Advances*, 4(66), 2014.
18. Crouch, Stanley; Skoog, Douglas A, *Principles of instrumental analysis*. Australia: Thomson Brooks/Cole, 2007.

Estudio comparativo a partir de cálculos de primeros principios de la estructura electrónica del BiFeO_3 y YCrO_3

Shigueru Nagata, Hector Loro[†]

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, Perú

[†]hloro@uni.edu.pe

Recibido el 22 de Junio del 2018; aceptado el 28 de Agosto del 2018

Presentamos los cálculos de primeros principios de la estructura electrónica del BiFeO_3 con fase hexagonal (R3c) y del YCrO_3 con fase ortorrómbica (Pnma). Se usaron arreglos antiferromagnéticos de tipo A, C y G para el YCrO_3 y de tipo A y G para el BiFeO_3 . Los cálculos se realizaron según la teoría del funcional de la densidad. Se usó el método de aproximación de densidad local más el parámetro de hubbard (LDA+U) y pseudopotenciales ultra suaves. El parámetro de hubbard se calculó con el método de respuesta lineal y los valores de 2,43 eV y 1,13 eV se obtuvieron para el hierro y el cromo respectivamente. Los gaps de energía del BiFeO_3 fueron 1,4 eV y 1,8 eV para los arreglos antiferromagnéticos de tipo A y G respectivamente. En cambio, los gaps de energía del YCrO_3 fueron 1,3 eV, 1,32 eV y 1,6 eV para los arreglos antiferromagnéticos de tipo A, C y G respectivamente.

Palabras Claves: Estructura electrónica, teoría del funcional de densidad, perovskita, Quantum ESPRESSO.

We present the first principles calculations of the electronic structure of BiFeO_3 with hexagonal phase (R3c) and of YCrO_3 with orthorhombic phase (Pnma). Antiferromagnetic arrangements of type A, C, and G were used for YCrO_3 and type A and G for BiFeO_3 . The calculations were made according to the density functional theory. The local density approximation method plus the Hubbard parameter (LDA + U) and ultra-soft pseudopotentials were used. The Hubbard parameter was calculated with the linear response method and the values of 2.43 eV and 1.13 eV were obtained for iron and chromium respectively. The energy gaps of BiFeO_3 were 1.4 eV and 1.8 eV for the antiferromagnetic arrangements of type A and G respectively. In contrast, the energy gaps of YCrO_3 were 1.3 eV, 1.32 eV and 1.6 eV for the antiferromagnetic arrangements of type A, C, and G respectively.

Keywords: Electronic structure, Density Functional Theory, perovskita, Quantum ESPRESSO.

1 Introducción

Los multiferroicos son materiales que exhiben dos o más propiedades ferroicas en la misma fase. Los cuales tienen aplicaciones en piezoelectrónica, memorias magnetoeléctricas, espintrónica entre otras [1–3]. Debido a esto, el estudio de los multiferroicos ha generado gran interés recientemente. Además, varios de los multiferroicos estudiados son óxidos de la forma ABO_3 con una estructura de tipo perovskita. Así mismo, existen por lo menos tres tipos de multiferroicos [4]. Óxidos basados en bismuto, por ejemplo, BiCrO_3 o BiFeO_3 . Manganatos de tierras raras como InMnO_3 o LaMnO_3 . Cromitas de tierras raras, tales como YbCrO_3 o YCrO_3 .

La ferrita de bismuto (BiFeO_3) tiene una estructura hexagonal que pertenece al espacio de grupo R3c [5]. La cual es estudiada por exhibir a temperatura ambiente, propiedades ferromagnéticas y ferroeléctricas [6, 7]. En contraste, la cromita de itrio (YCrO_3) tiene una estructura ortorrómbica que pertenece al espacio de grupo Pnma [8]. La cual es considerada como un material biferroico. Además tiene un ferromagnetismo débil por debajo de su temperatura de Neel (140 K) [9].

En este trabajo, se estudian las propiedades electrónicas de ambos materiales con distintos arreglos antiferromagnéticos. Con el objetivo de determinar cual es el más estable, además se comparan los gap de energía obtenidos en ambos materiales, para determinar el

material más conveniente para una posible aplicación.

2 Método computacional

Los cálculos se realizaron según la teoría del funcional de la densidad implementada en el paquete de simulación Quantum ESPRESSO. Se usó el método de aproximación de densidad local más el parámetro de Hubbard (LDA+U) y pseudopotenciales ultra suaves. El parámetro de Hubbard fue incluido porque ambos materiales tienen electrones localizados en el orbital d debido a los metales de transición en su estructura. El parámetro de Hubbard se calculó con el método de respuesta lineal [10] y los valores de 2,43 eV y 1,13 eV se obtuvieron para el hierro y el cromo respectivamente.

Se utilizó una grilla en la primera zona de Brillouin de $3 \times 3 \times 3$ puntos K para el BiFeO_3 y de $5 \times 4 \times 5$ puntos K para el YCrO_3 . Además se definió que la energía de corte para la expansión de las ondas planas sea 540 eV.

Antes de iniciar los cálculos de estructura electrónica se realizó una relajación de ambas estructuras cristalinas. Para lo cual se usó el algoritmo de minimización Broyden-Fletcher-Golbfarb-Shanno (BFGS) [11] implementado en Quantum Espresso. Además los límites de convergencia para la minimización se definieron como 10^{-5} eV para la variación máxima de energía, $0,03 \text{ eV \AA}^{-1}$ para la fuerza y $0,05 \text{ Gp}$ para la presión.

Se usaron arreglos antiferromagnéticos de tipo A, C y

G para el $YCrO_3$ y de tipo A y G para el $BiFeO_3$. Para poder representar estas configuraciones magnéticas, los espines del hierro y del cromo se orientaron de la forma mostrada en las figuras 1 y 2.

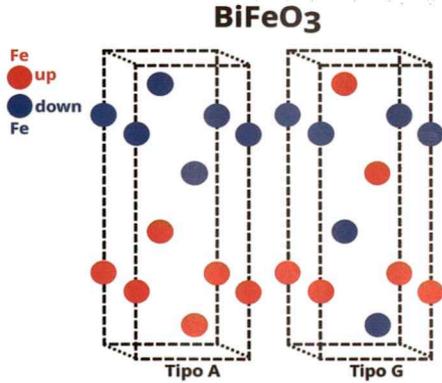


Figura 1: Arreglos antiferromagnéticos para el $BiFeO_3$. Se muestran solo los átomos de hierro por claridad.

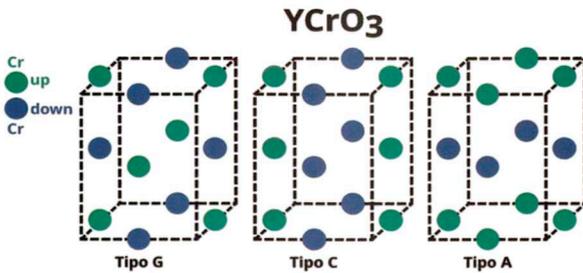


Figura 2: Arreglos antiferromagnéticos para el $YCrO_3$. Se muestran solo los átomos de cromo por claridad.

3 Resultados

3.1 Parámetros cristalinicos y bandas de energía para el $BiFeO_3$

Los parámetros cristalinicos obtenidos luego de la relación (tabla 1) son cercanos a los valores obtenidos experimentalmente (a : 5.58 Å, c : 13.86 Å) [12] y (a : 5.61 Å, c : 13.98 Å) [13]. Además, muestran que el arreglo antiferromagnético de tipo G tiene la energía más baja, por lo tanto es el más estable.

Tabla 1: Parámetros cristalinicos y energía total de los arreglos antiferromagnéticos de tipo A y G del $BiFeO_3$.

Tipo	a (Å)	c (Å)	E. Total (Ry)
AF-A	5.65	14.16	-3013.003
AF-G	5.64	14.07	-3013.092

La estructura de bandas de energía para ambos arreglos antiferromagnéticos se calculó a lo largo de los puntos de alta simetría en la primera zona de brillouin $\Gamma - M - K - \Gamma$.

La figura 3 muestra la estructura de bandas de energía del arreglo antiferromagnético de tipo A, donde se observa un gap de energía indirecto de 1.4 eV que es próximo al gap de 1.3 eV calculado de forma experimental por Gujar et al [14]. El gap se encuentra definido entre el nivel más

alto de energía de la banda de valencia cerca del punto Γ y el nivel más bajo de energía de la banda de conducción ubicado entre los puntos $K - \Gamma$.

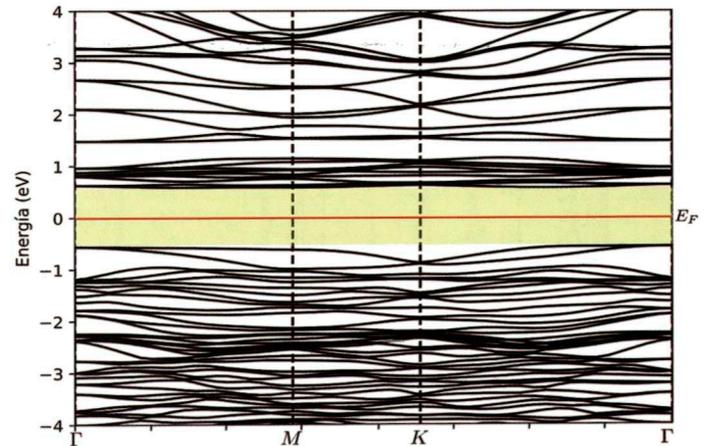


Figura 3: Estructura de bandas de energía del arreglo antiferromagnético de tipo A del $BiFeO_3$. La línea roja marca el nivel de fermi y la franja amarilla señala el gap de energía.

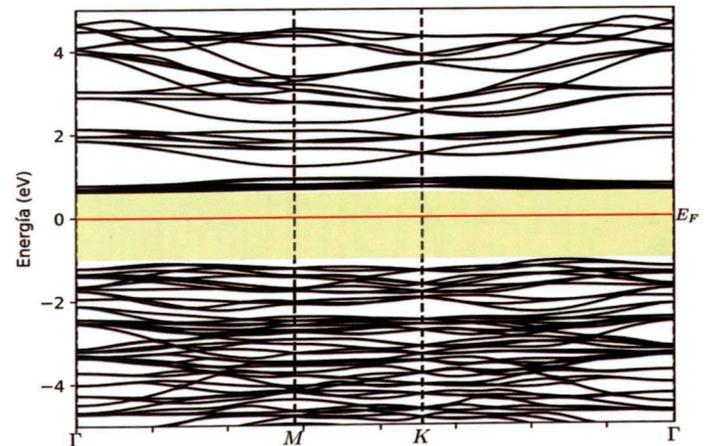


Figura 4: Estructura de bandas de energía del arreglo antiferromagnético de tipo G del $BiFeO_3$. La línea roja marca el nivel de fermi y la franja amarilla señala el gap de energía.

La figura 4 muestra la estructura de bandas de energía del arreglo antiferromagnético de tipo G, donde se observa un gap de energía indirecto de 1.8 eV que es próximo al gap de 1.9 eV calculado de forma experimental por Lee et al [13]. El gap se encuentra definido entre el nivel más alto de energía de la banda de valencia ubicado entre los puntos $K - \Gamma$ y el nivel más bajo de energía de la banda de conducción ubicado entre los puntos $K - \Gamma$.

En las figuras 5 y 6 se observan las densidades totales y parciales para los arreglos antiferromagnéticos de tipo A y G respectivamente. Ambos arreglos antiferromagnéticos presentan simetría entre los espines up y down. Además en ambos casos cerca del nivel de fermi en la banda de conducción el hierro posee la mayor densidad de estados. En contraste, en la banda de valencia el oxígeno posee la mayor densidad de estados. Ambos casos también presentan un pequeño gap por sobre la banda de conducción, aproximadamente en el nivel de energía de 1 eV, lo cual concuerda con lo observado en sus respectivas estructuras de bandas de energía, donde se tiene un

grupo de bandas por sobre el nivel de Fermi separadas de las demás. También se observa que los estados de los distintos elementos se encuentran mezclados en todo el rango de energía.

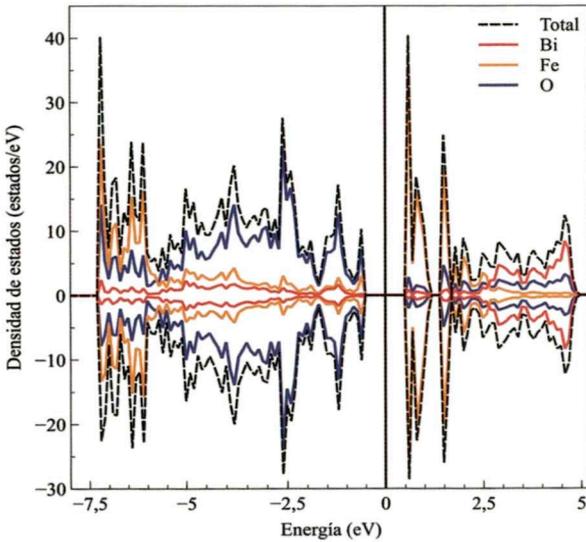


Figura 5: Densidad de estados total y parcial por cada elemento para el $BiFeO_3$ del arreglo antiferromagnético tipo A.

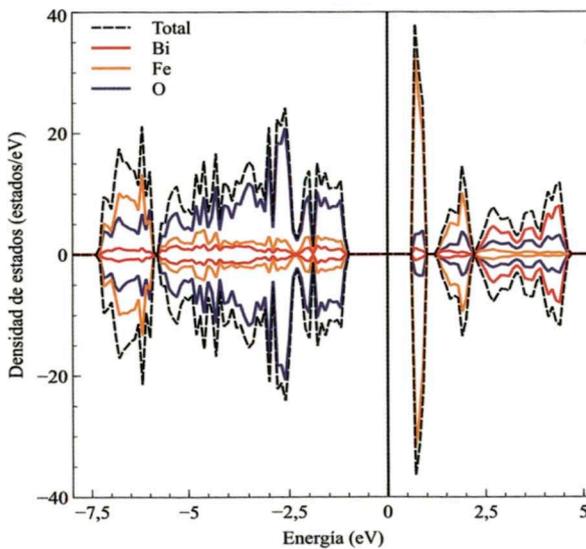


Figura 6: Densidad de estados total y parcial por cada elemento para el $BiFeO_3$ del arreglo antiferromagnético tipo G.

La figura 7 muestra la densidad de estados parcial del hierro para los arreglos antiferromagnéticos de tipo A y G, donde se observa que los estados del orbital d tienen la mayor densidad tanto en la banda de conducción como en la banda de valencia. En contraste los orbitales s y p presentan una densidad de estados casi nula en ambas bandas. Para los elementos oxígeno y bismuto la mayor densidad le pertenece al orbital p .

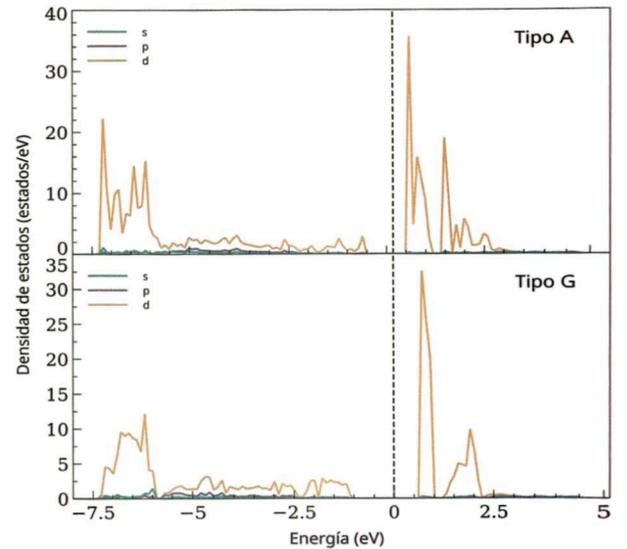


Figura 7: Densidad de estados parcial del hierro para el $BiFeO_3$ del arreglo antiferromagnético tipo A.

3.2 Parámetros cristalinicos y bandas de energía para el $YCrO_3$

Los parámetros cristalinicos obtenidos luego de la relación (tabla 2) son cercanos a los valores obtenidos experimentalmente (a : 5,23 Å, b : 5,52 Å, c : 7,54 Å) [15] y (a : 5,51 Å, b : 5,23 Å, c : 7,52 Å) [9]. Además, muestran que el arreglo antiferromagnético de tipo G tiene la energía más baja, por lo tanto es el más estable.

Tabla 2: Parámetros cristalinicos y energía total de los arreglos antiferromagnéticos de Tipo A, C y G del $YCrO_3$

Tipo	a (Å)	b (Å)	c (Å)	E. total (Ry)
AF-A	4.99	5.35	7.22	-1462.845
AF-C	5.0	5.33	7.23	-1462.851
AF-G	5.0	5.34	7.22	-1462.856

La estructura de bandas de energía para los tres arreglos antiferromagnéticos se calculó a lo largo de los puntos de alta simetría $\Gamma - X - S - Y - \Gamma$.

La figura 8 muestra la estructura de bandas de energía del arreglo antiferromagnético de tipo A, donde se observa un gap de energía directo de 1.3 eV. El gap se encuentra definido entre el punto más alto de la banda de valencia y el punto más bajo de la banda de conducción, ambos ubicados en el punto de alta simetría Γ .

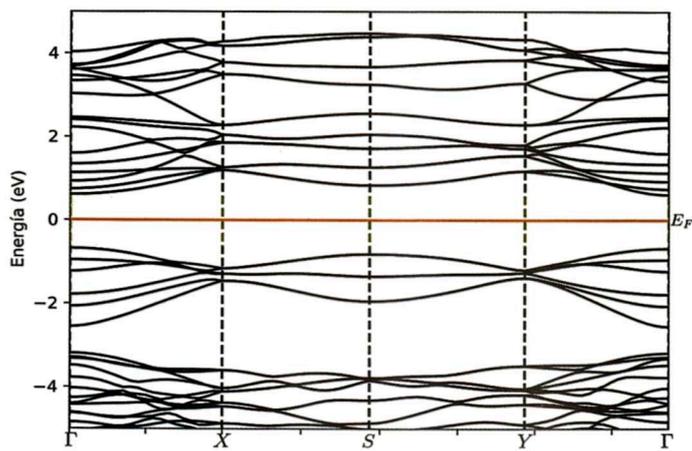


Figura 8: Estructura de bandas de energía del $YCrO_3$ con arreglo antiferromagnético de tipo A. La línea roja marca el nivel de fermi y la franja amarilla señala el gap de energía.

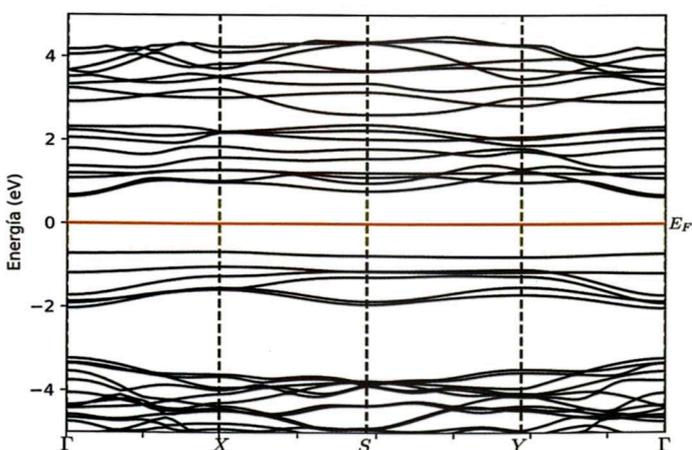


Figura 9: Estructura de bandas de energía del $YCrO_3$ con arreglo antiferromagnético de tipo C. La línea roja marca el nivel de fermi y la franja amarilla señala el gap de energía.

La figura 9 muestra la estructura de bandas de energía del arreglo antiferromagnético de tipo C, donde se observa un gap de energía indirecto de 1.32 eV. El gap se encuentra definido entre el punto más alto de la banda de valencia ubicado en el punto X y el punto más bajo de la banda de conducción ubicado en el punto Γ .

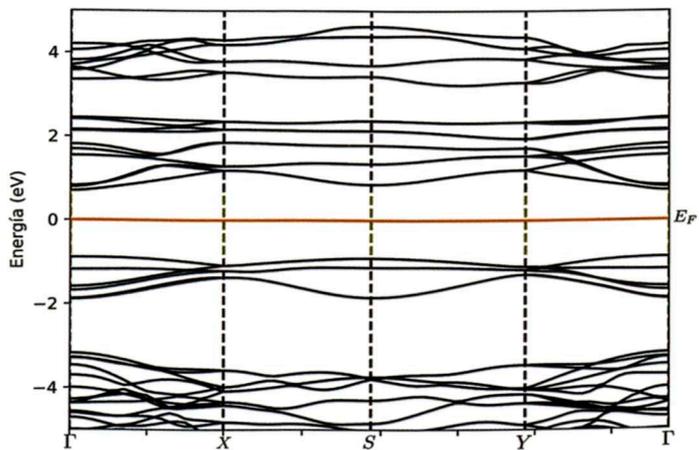


Figura 10: Estructura de bandas de energía del $YCrO_3$ con arreglo antiferromagnético de tipo G. La línea roja marca el nivel de fermi y la franja amarilla señala el gap de energía.

La figura 10 muestra la estructura de bandas de energía del arreglo antiferromagnético de tipo G, donde se observa un gap de energía indirecto de 1.6 eV. El gap se encuentra definido entre el punto más alto de la banda de valencia ubicado en el punto Γ y el punto más bajo de la banda de conducción ubicado en el punto S.

Las figuras 11, 12 y 13 muestran las densidades totales y parciales para los tres tipos de arreglos antiferromagnéticos, donde se observa que todos presentan simetría entre los espines up y down. Además en los tres casos cerca del nivel de fermi tanto en la banda de conducción como en la banda de valencia, el cromo tiene la mayor densidad de estados. Una diferencia importante entre los arreglos de tipo A y C respecto del tipo G, es la presencia de un gap en la banda de conducción del tipo G aproximadamente en 3 eV. También se observa que los estados de los distintos elementos se encuentran mezclados a lo largo de todo el rango de energía.

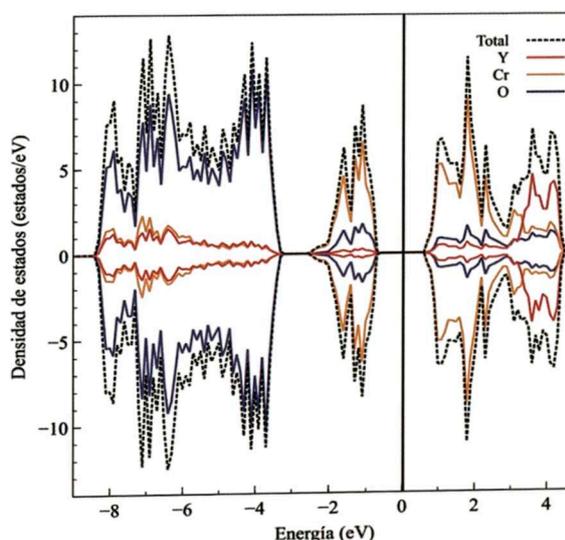


Figura 11: Densidad de estados total y parcial por cada elemento para el $YCrO_3$ del arreglo antiferromagnético tipo A.

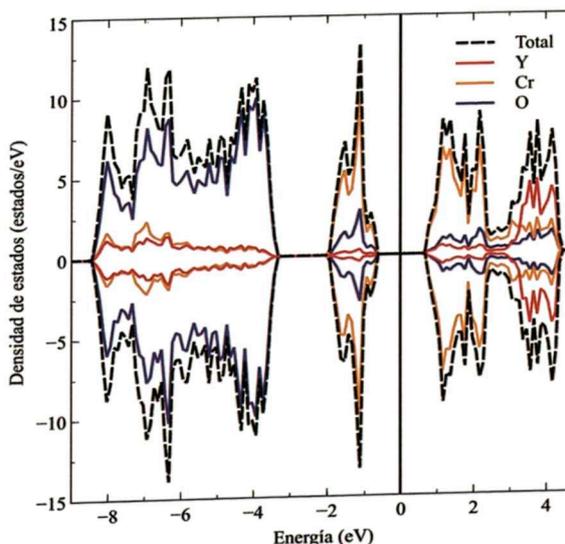


Figura 12: Densidad de estados total y parcial por cada elemento para el $YCrO_3$ del arreglo antiferromagnético tipo C.

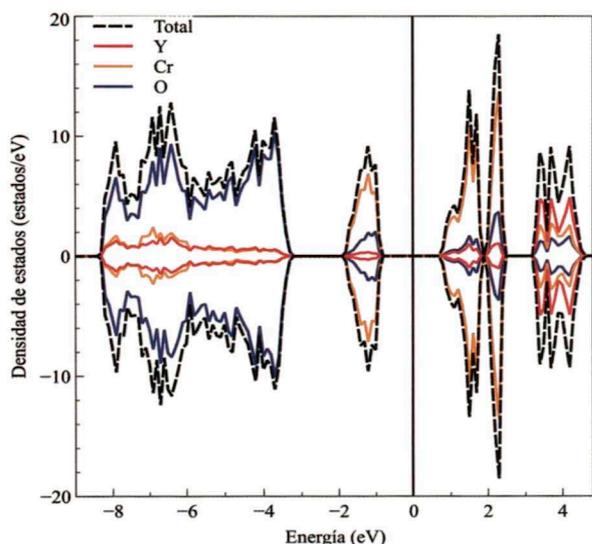


Figura 13: Densidad de estados total y parcial por cada elemento para el $YCrO_3$ del arreglo antiferromagnético tipo G.

La figura 14 muestra la densidad de estados del cromo para los arreglos antiferromagnéticos de tipo A, C y G, donde se observa que los estados del orbital d tienen la mayor densidad tanto en la banda de valencia como en la banda de conducción. En contraste los orbitales s y p presentan una densidad de estados casi nula en ambas bandas. Y en el caso del itrio y el oxígeno, los orbitales d y p respectivamente tienen la mayor densidad de estados.

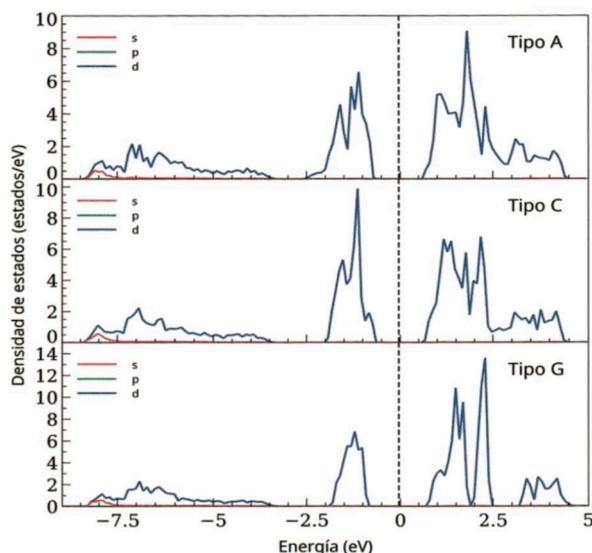


Figura 14: Densidad de estados del cromo para los tres arreglos antiferromagnéticos del $YCrO_3$

4 Comparación de resultados

La figura 15 muestra la comparación entre los gaps de energía obtenidos de los arreglos antiferromagnéticos tipo

A y G para el $BiFeO_3$ y $YCrO_3$. Donde se observa que el $YCrO_3$ tiene un gap de energía más pequeño en ambos casos, volviéndose un mejor candidato para una aplicación tecnológica. La gráfica también muestra que el arreglo tipo A tiene un gap de energía menor para ambos materiales, sin embargo el arreglo antiferromagnético tipo G es reportado con mayor frecuencia por estudios experimentales para ambos materiales.

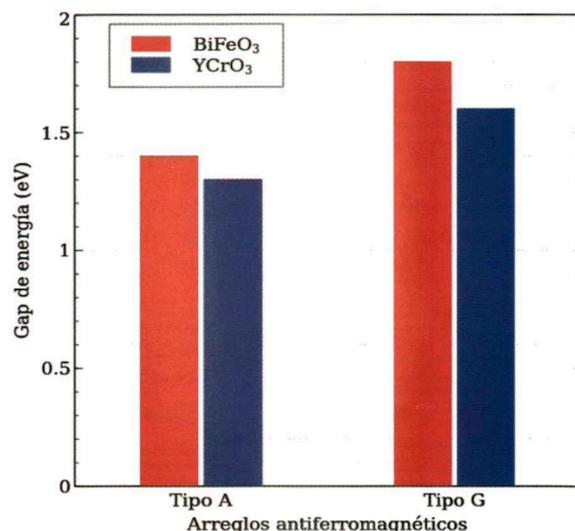


Figura 15: Comparación de los gap de energía del $BiFeO_3$ y $YCrO_3$ para los arreglos antiferromagnéticos de tipo A y G.

5 Conclusiones

Se aplicó el método de aproximación de densidad local con la corrección de Hubbard (LDA + U) implementado en Quantum ESPRESSO. Para obtener el valor de Hubbard se utilizó el método de respuesta lineal propuesta por Cococcioni, el cual se adecua al uso de Quantum ESPRESSO. Los valores obtenidos para Hubbard en ambos materiales difieren ligeramente de valores usados en otros estudios, esto es debido a que el parámetro de Hubbard es sensible a factores tales como: el paquete de simulación usado, la implementación del método de DFT + U, los pseudopotenciales usados, parámetros de red, entre otros.

Se observó que en ambas perovskitas el arreglo antiferromagnético de tipo G es el más estable. Además los orbitales d de los átomos de hierro y cromo del $BiFeO_3$ y $YCrO_3$ respectivamente, son los predominantes cerca del nivel de Fermi en la banda de conducción, y para el $YCrO_3$ dichos estados también son los predominantes cerca del nivel de Fermi en la banda de valencia. Este comportamiento muestra la importancia de usar la corrección de Hubbard para obtener resultados adecuados.

1. Sahu J.R., Serrao C.R., Ray N., Waghmare U.V., and Rao C.N.R. *J. Mater. Chem.* vol. 17, no. 1 42744 (2007).
2. Bibes M., Villegas J.E., and Barthelemy A. *Advances in Physics* vol. 60, no. 1 5784 (2011).
3. Guo R., You L., Zhou Y., Lim Z.S., Zou X., Chen L., Ramesh R., and Wang J. *Nature Communications* vol. 4, no. 1 (2013).
4. Ray N. and Waghmare U.V. vol. 77, no. 13 (2008).
5. Diéguez O., González-Vázquez O.E., Wojde I J.C., and Iñiguez J. *Physical Review B* vol. 83, no. 9 (2011).
6. Catalan G. and Scott J.F. *Advanced Materials* vol. 21, no. 24 2463-2485 (2009).
7. Wang J. *Science* vol. 299, no. 5613 1719-1722 (2003).
8. Nair V.G., Ganeshraj C., Santhosh P.N., and Subramanian V. pp. 8467847. *AIP* (2013).
9. Ramesha K., Llobet A., Proffen T., Serrao C.R., and Rao C.N.R. *Journal of Physics: Condensed Matter* vol. 19, no. 10 102202 (2007). *Physical Review B*.
10. Cococcioni M. and de Gironcoli S. *Physical Review B* vol. 71, no. 3 (2005).
11. Pfrommer B.G., Côté M., Louie S.G., and Cohen. M.L. *Journal of Computational Physics* vol. 131, no. 1 2337240 (1997).
12. Tomar R., Wadehra N., Gaikwad V.M., and Chakraverty S. *AIP Advances* vol. 8, no. 8 085306 (2018).
13. Lee J.H., Oak M.A., Choi H.J., Son J.Y., and Jang H.M. *J. Mater. Chem.* vol. 22, no. 4 1667-1672 (2012).
14. Gujar T.P., Shinde V.R., and Lokhande C.D. *Materials Chemistry and Physics* vol. 103, no. 1 142-146 (2007).
15. Remeika J.P. *Journal of the American Chemical Society* vol. 78, no. 17 4259-4260 (1956).

Fitting of stellar parameters of Cataclysmic Variable Stars

William Cori[†], Julio Tello[‡]

Grupo de Investigación en Astrofísica y Cosmología

Facultad de Ciencias

Universidad Nacional de Ingeniería

[†]*ecoric@uni.pe*, [‡]*jtello@uni.edu.pe*

Recibido el 15 de Agosto del 2018; aceptado el 2 de Octubre del 2018

Las estrellas variables cataclísmicas son sistemas binarios compuestos por una enana blanca y una enana roja. Alrededor de la enana blanca se crea un disco de acreción, producto de la masa transferida de las capas exteriores de la enana roja a través del primer punto de Lagrange del sistema. La masa que es transferida posteriormente colisiona con el disco, generándose una nueva fuente de luz en el sistema denominada *hot spot*. Sin embargo, la mayor parte del tiempo, las principales fuentes del brillo del sistema son la enana blanca y la enana roja, por lo que podemos asumir que un espectro observado de una estrella variable cataclísmica se puede reproducir mediante la suma de los espectros de una enana blanca y una enana roja. En observatorios virtuales es posible encontrar gran cantidad de espectros, tanto de enanas blancas, con diferentes valores de temperatura y gravedad superficial, así como de enanas rojas de tipo M con diversos subtipos. En este trabajo presentamos un método alternativo para la determinación de las características de las componentes del sistema a partir de sus espectros observados. Mediante un programa en Python evaluamos un test χ^2 en 32 bandas delgadas a lo largo de todo el espectro observado. Estas bandas se encuentran alrededor de las líneas de absorción de Balmer en los espectros de las enanas blancas, y bandas usadas para clasificar estrellas de tipo M en secuencia principal. Se muestra los resultados obtenidos tras la ejecución del programa sobre espectros de tres variables cataclísmicas.

Palabras Claves: Variable cataclísmica, enana blanca, enana roja, disco de acreción, *hot spot*, espectro.

Cataclysmic variable stars are binary systems composed by one white dwarf and one red dwarf. Around white dwarf an accretion disc is formed, product of transferred mass from the outer shells of the red dwarf through the first Lagrange point of the system. The subsequent transferred mass collides the disc, creating a new light source on the system, called *hot spot*. However, the most of the time, the major sources of brightness of the system are the white dwarf and the red dwarf, thus we can assume that a observed cataclysmic variable star spectrum can be reproduced by the sum of one spectrum of a white dwarf and one spectrum of a red dwarf. At virtual observatories is possible finding a lot of spectra, white dwarf spectra with different values of temperatures and superficial gravities, and M type red dwarf spectra with diverse sub-types. In this work, we present an alternative method to determine characteristics of components of the system from its observed spectra. Through a Python program we assess a χ^2 test in 32 narrow bands along all observed spectrum. These bands are around of Balmer lines in white dwarf spectrum, and bands used for classifying M type stars on mean sequence. It is shown the obtained results after the run of the program over three cataclysmic variable spectra.

Keywords: Cataclysmic variable, white dwarf, red dwarf, accretion disc, hot spot, spectrum.

1 Introduction

Cataclysmic variable (CV) stars are systems of binary stars composed by one white dwarf (WD) and one red dwarf (RD), where the RD has filled its Roche lobe, thus it transfers mass to the WD through the first Lagrange point. This transferred mass form a accretion disc around the WD if the magnetic field of the WD is weak. If a disc is formed, the subsequent flow of mass will collide it, and at the impact zone is created a new light source called *hot spot* [2].

When the magnetic field of the WD is strong the transferred mass does not form an accretion disc, but the flow is driven by the magnetic lines to the poles of the WD. If the magnetic field of WD is not so strong the accretion disc is formed partially, just the outer part of the disc is formed and what it had been the inner part of the disc is driven to the poles by the magnetic lines.

Occasionally, the two major sources of brightness of the system are the WD and the RD (in *low state* [8]), thus a spectrum of a CV can be considered approximately the sum of two spectra, one from a WD and one from a RD.

Nowadays, it is possible to access to big databases where one can find a lot of photometric and spectroscopic data of all kind of celestial objects. In our case, we found a big grid of synthetic spectra of WD, with a variety of combinations of temperature and superficial gravity, a sample of templates of M-type stars of mean sequence, and a sample of three observed spectra of CV.

Our work is finding the combination of one WD synthetic spectrum, of determined temperature and superficial gravity, and one RD spectrum, of determined M-type, that reproduce the observed spectrum of a CV. In this way, the stellar parameters of the components of the system will be determined.

2 Spectroscopic data

2.1 Observational CV spectra

Observational CV spectra were obtained from the database of the Sloan Digital Sky Survey (SDSS, [11]), data release 14 [1]. We got spectra of stars SDSSJ121130.94-024954.4, SDSSJ155712.05+151534.3, and SDSSJ212051.92-005827.3 from SDSS Sky Server webpage¹. The former two stars have spectra between 3800 and 9200 Å, and the last one from 3500 to 10300 Å.

2.2 Synthetic spectra of White Dwarfs

Synthetic spectra of WD were obtained from the Spanish Virtual Observatory website². These are models made by Detlev Koester [3]³, conformed by a grid of 1066 WD spectra between wavelengths of 900 and 30000 Å in flux units of $\text{erg}/\text{cm}^2/\text{s}/\text{Å}$, for temperatures between 5000 K and 80000 K with different steps, and superficial gravity values ($\log g$) between 6.5 and 9.5 with a uniform step of 0.25. A similar grid was provided by Koester by private communication.

Fig. 1 shows a couple of synthetic spectra, both of them with 20000 K of temperature but different superficial gravity (6.5 and 9.5).

Fig. 2 shows a sample of 6 synthetic spectra with $\log g = 8.00$ and temperatures from 10000 K to 60000 with steps of 10000 K.

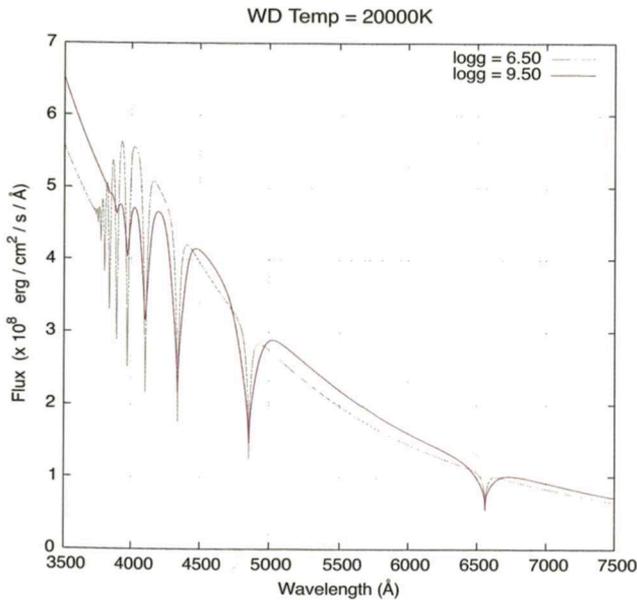


Figure 1: *WD Synthetic spectra (Koester [3]) with a constant temperature of 20000 K and different superficial gravity. We can see how the continuum changes with $\log g$. Absorption lines are Balmer lines.*

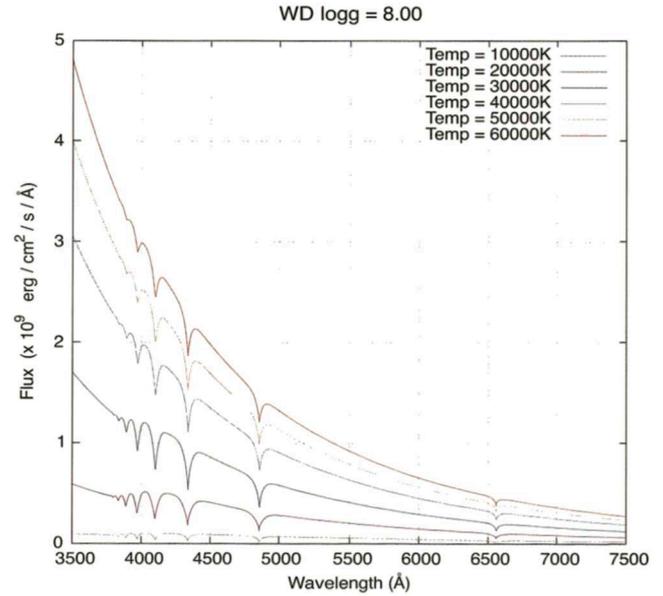


Figure 2: *WD Synthetic spectra (Koester [3]) with constant $\log g$. We can see the variation of the continuum with the temperature.*

2.3 Observational M-type star templates

M-types templates were obtained from the MILES project [9] library⁴. We have 10 spectra between wavelengths of 3525 and 7500 Å in flux units of $\text{erg}/\text{cm}^2/\text{s}/\text{Å}$, from M0V to M6V type with a step of 1 and a spectrum of a RD of M0.5V type. Fig. 3 shows six of them.

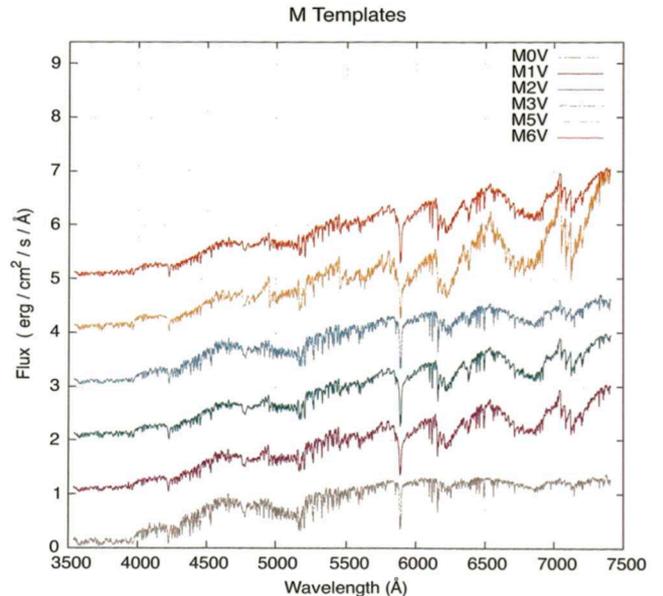


Figure 3: *M templates (MILES project [9]). We can see how the depth and form of absorption bands change for different M types. We added a constant value over the flux of each spectrum for better visualization.*

¹<http://skyserver.sdss.org/dr14/en/tools/quicklook/summary.aspx>

²<http://svo2.cab.inta-csic.es/theory/newov2/index.php>

³These models are for white dwarfs of spectral type DA with pure hydrogen atmospheres. They use LTE (local thermodynamic equilibrium), hydrostatic equilibrium and plane-parallel, one-dimensional structure. Basic methods and data are described in Koester (2010, Mem.S.A.It. Vol. 81, 921). Since then many improvements were implemented, most notably the hydrogen Stark profiles by Tremblay & Bergeron (2009, ApJ 696,1755), and Tremblay (2015, priv. comm).

⁴<http://www.iac.es/proyecto/miles/pages/stellar-libraries/miles-library.php>

3 Fitting program

On the premise that a CV spectrum is basically composed by the sum of a couple of spectra, one of a WD and one of a RD. We wrote a program in Python which finds such couple of spectra whose sum fit best the observed spectrum of a CV.

The program performs a χ^2 test between the sum of a couple of spectra WD–RD and the observed spectrum of a CV in 32 narrow bands. These selected bands could be separated in two groups, one of them is conformed by bands around the Balmer lines and the another one conformed by bands used by Lépine et al.[4] to calculate spectral indices whose values are used to classify M type stars.

When the program find the couple WD–RD that produces the minimum χ^2 value it generates a text file that contains the spectra of this couple WD–RD and that of the observed star. This program is a upgraded version of that used in William Cori and Julio Tello, 2018 [10].

4 Run and Results

The program was run over a sample of three observed CV spectra taken by SDSS (see section 2.1). The WD spectra are DA WD synthetic spectra by Koester (see section 2.2), and RD spectra are M templates from MILES project (see section 2.3).

For the CV star SDSSJ121130.94-024954.4 we found that its spectrum can be reproduced best by a DA WD synthetic spectrum with temperature of 18750 K and superficial gravity of 8.00, and a red dwarf template of M6V type. Thus we can say that the CV star SDSSJ121130.94-024954.4 is a binary system composed by a WD and a RD of those characteristics (see Fig. 4, top box).

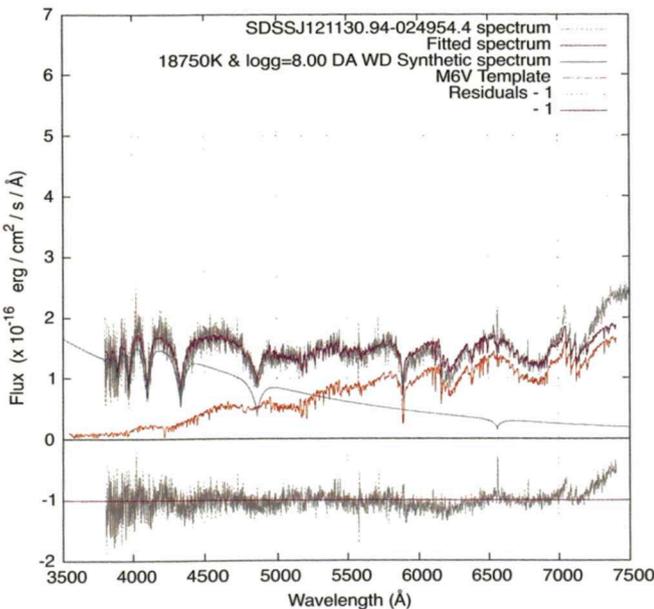


Figure 4: *Top box: observed spectrum of SDSSJ121130.94-024954.4 (grey), fitted spectrum (magenta), WD synthetic spectrum (light blue) and M6V star spectrum (red). Bottom box: Residuals (grey) and reference line (magenta).*

Similarly, we found that the CV star SDSSJ155712.05+151534.3 is composed by a WD of 45000 K and $\log g = 8.25$, and a RD M6V type (Fig. 5, top box); while the CV star SDSSJ212051.92-005827.3 is composed by a WD of 16000 K and $\log g = 8.00$, and a RD M5V type (Fig. 6, top box).

In all cases, residuals are shown too (Fig. 4, 5, 6, bottom boxes).

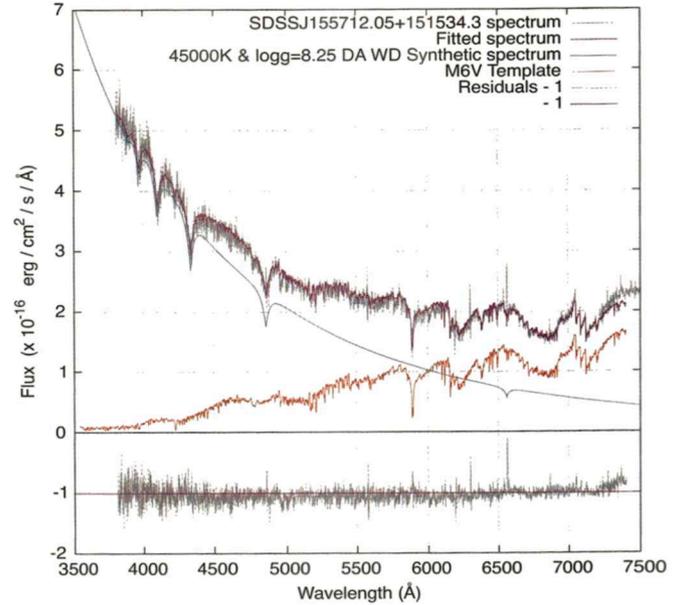


Figure 5: *Top box: observed spectrum of SDSSJ155712.05+151534.3 (grey), fitted spectrum (magenta), WD synthetic spectrum (light blue) and M6V star spectrum (red). Bottom box: Residuals (grey) and reference line (magenta).*

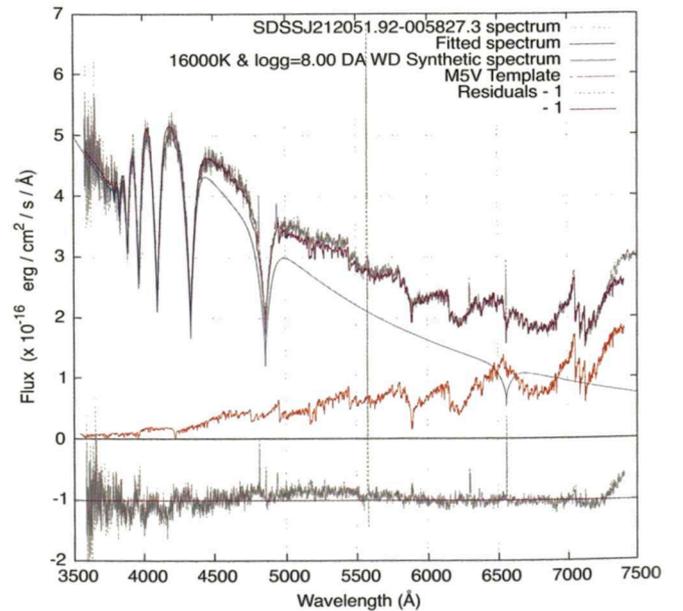


Figure 6: *Top box: observed spectrum of SDSSJ212051.92-005827.3 (grey), fitted spectrum (magenta), WD synthetic spectrum (light blue) and M5V star spectrum (red). Bottom box: Residuals (grey) and reference line (magenta).*

Table 1: Results in this work and literature.

CV Star	WD Temp (K)	WD log g	RD M type	Source
SDSSJ121130.94-024954.4	18750	8.00	M6.0V	This work
	13130	7.84	M2.5V	Rebassa-Mansergas et al., 2011 [7]
SDSSJ155712.05+151534.3	45000	8.25	M6.0V	This work
	40000	8.25	M2.0V	Morgan, 2017 [5]
SDSSJ212051.92-005827.3	16000	8.00	M5.0V	This work
	16336	8.04	M4.0V	Nebot Gómez-Morán et al., 2011 [6]

Table 1 shows a comparison between our results and what has been found in the literature about our sample of stars. We can see there that the best approximations between our results and those found in the literature occur for SDSSJ212051.92-005827.3. Furthermore, we also can see good approximations for superficial gravity values of the three white dwarfs (WD log g), followed by its temperatures (WD Temp). However, values of RD M type are appreciably different for SDSSJ121130.94-024954.4 and SDSSJ155712.05+151534.3. Complementary data in other bands could be determinant for getting stellar parameters values more precisely (data in ultraviolet for WD and in infrared for RD, for example).

5 Conclusions

It has been written a program that permit us calculate the stellar parameters of a CV system. We can calculate the temperature and superficial gravity of the WD and the M type of the RD. Table 1 shows that our re-

sults are close to those found in the literature, specially for WD stellar parameters, what indicates that our criteria to perform the χ^2 test and its implementation in the program are correct. As our program assesses the test on bands, it could obtain, without any change, better results if we had spectra with higher resolution. On the other hand, smaller steps in synthetic spectra of WD and templates of RD would be beneficial too.

Acknowledgments

This work was supported by Convenio 168-2015 UNIMINEDU-CONCYTEC (Doctorate scholarship for W.C. at Universidad Nacional de Ingeniería). This research has made use of the Spanish Virtual Observatory (<http://svo.cab.inta-csic.es>) supported from the Spanish MINECO/FEDER through grant AyA2014-55216. We thank to Dr. Detlev Koester for his disposition to answer our emails and provide us with his WD models.

1. Bela Abolfathi et al., *ApJS*, 235, 42, 2018.
2. Hellier C. *Cataclysmic Variable Stars*. Springer Praxis Books, 2001.
3. Koester D., *Memorie della Societa Astronomica Italiana*, 81, 921-931, 2010.
4. Lépine S., Rich R. & Shara M., *AJ*, 125, 1598, 2003.
5. Morgan D. P., Boston University, PhD Thesis, 2017.
6. Nebot Gómez-Morán A. et al., 2011, *A&A*, 536, A43.
7. Rebassa-Mansergas A. et al., *MNRAS*, 423, 320, 2011.
8. Rodríguez-Gil P. et al., *MNRAS*, 452, 146-157, 2015.
9. Sánchez-Blázquez P. et al., *MNRAS*, 371, 703, 2006.
10. William Cori and Julio Tello, *J. Phys.: Conf. Ser.* 1143 012010, 2018.
11. York, D. G., Adelman, J., Anderson, J. E., Jr., et al., *AJ*, 120, 1579, 2000.

Análisis e identificación de suelos a partir de imágenes hiperespectrales usando el PPI, PCA y K-medias

Dante Castillo Cc., Héctor Loro [†]

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, Perú

[†]*hloro@uni.edu.pe*

Recibido el 20 de Agosto del 2018; aceptado el 2 de Octubre del 2018

El uso de imágenes hiperespectrales es una importante herramienta tecnológica actual, la cual se aplica también al estudio de suelos y permite entre otras cosas la elaboración de mapas litológicos y una biblioteca espectral. En esta investigación, se trabajó con 7 muestras de suelos de 2 regiones del Perú (Cusco - Región kastanosólica y Madre de Dios- Región acrisólica) con el fin de identificar y analizar su firma espectral. Los espectros de reflectancia muestran que es posible identificar estos suelos a partir del comportamiento de la reflectancia para 1415 nm. Además se usó la técnica PPI (Pixel Purity Index) usando el software ENVI para identificar píxeles puros (con distintas firmas en las imágenes analizadas). Los resultados muestran que es posible identificar suelos diferentes dentro de una misma imagen hiperespectral.

Palabras claves: imagen hiperespectral, PPI, MNF, PCA y K-medias

The use of hyperspectral images is an important current technological tool, which is also applied to the study of soils and allows, among other things, the elaboration of lithological maps and a spectral library. In this research, we worked with 7 soil samples from 2 regions of Peru (Cusco - Kastanosol Region and Madre de Dios Acrisolic Region) in order to identify and analyze its spectral signature. The reflectivity spectra shows that it is possible to identify these soils from the behavior of the reflectance for 1415 nm. In addition, the PPI (Pixel Purity Index) technique was used using the software ENVI to identify pure pixels (pixels with different signatures in the images analyzed) Results show that it is possible to identify different soils within the same hyperspectral image.

Keywords: hyperspectral imaging, PPI, MNF, PCA y K-means.

1 Introducción

El uso de cámaras hiperespectrales en el análisis de suelos, minerales y productos orgánicos es un importante avance en los estudios de suelos. La coloración de la superficie terrestre representa una característica básica para su identificación, y puede hacerse con suficiente precisión a partir de mediciones realizadas incluso con solo cinco longitudes de onda [1][2]. A partir de la reflectancia se puede obtener firmas espectrales que ayudan a determinar las concentraciones de carbonatos, óxidos de hierro y aluminio en suelos áridos y semiáridos [3][4][5][6]. El suelo es un componente crítico del ecosistema de la Tierra y juega un papel importante en roles de la producción agrícola de alimentos, cambio climático global, ciclo hidrológico, diversidad biológica y protección ambiental [7]. En las últimas décadas, debido a la disminución en la cantidad y calidad del suelo [8], la necesidad de monitorear y evaluar el suelo a diferentes escalas temporales y espaciales ha aumentado.

La información espectral de un cuerpo es el resultado de la interacción de la radiación incidente con los objetos en estudio. La información obtenida es consecuencia principalmente de cuatro factores: i) contenido de materia orgánica; ii) humedad del suelo; iii) contenido de minerales, y iv) textura [9].

La reflectancia del suelo, es uno de los atributos más útiles para delinear las diferencias entre los suelos y describir las características de un perfil de suelo [10], sin embargo su medida se dificulta debido a la complejidad de los factores ambientales [11], especialmente en regiones montañosas cubiertas de vegetación densa. Asimismo para apoyar este trabajo, es necesario un análisis en el laboratorio de estos suelos con el fin de identificarlos en escenarios de grandes áreas.

Dentro de las cámaras hiperespectrales disponibles, resulta de particular interés las cámaras con capacidad de detección en el infrarrojo cercano (NIR, por sus siglas en inglés), lo cual resulta importante al estudiar elementos orgánicos como los que se encuentran en los suelos [12]-[21]).

El objetivo de este trabajo es obtener perfiles espectrales de suelos de interés en condiciones controladas en el laboratorio que resulta útil para una posterior identificación y clasificación de suelos.

La información espectral de los suelos fue obtenida con la cámara hiperespectral Pika NIR 320, entre (900 - 1700 nm), con 168 bandas y software Spectron Pro, analizando 7 muestras de suelos representativos de dos

departamentos; Cusco (4) y Madre de Dios (3), con un patrón de calibración (teflón) al 100% de reflectancia. Para representar los perfiles espectrales de cada suelo, se utilizó la técnica del algoritmo PPI (Pixel Purity Index), que da solución al problema habitual que se tiene cuando se procesa y analiza una imagen hiperespectral, “Mezcla de píxeles” [22]. Al ejecutar este algoritmo sobre la serie de datos reales, obtenidos de las imágenes hiperespectrales de cada muestra se pudo identificar las firmas espectrales o miembros finales (endmembers) extraídos después de la ejecución del algoritmo. Estos resultados fueron contrastados con otros métodos de análisis, y guarda una estimación confiable entre ellos.

2 Visión hiperespectral

2.1 Imagen hiperespectral

Una imagen hiperespectral, proporciona un conjunto de datos para cada uno de los píxeles que la forman. En estas imágenes cada píxel viene descrito por un vector de valores espectrales que se corresponden con la contribución de la luz detectada en ese punto para diferentes longitudes de onda que pueden ser detectadas por la cámara que registró la imagen [23].

La figura 1, muestra la salida de datos sin procesar y se visualiza a menudo como un “data cube”, que es la estructura de una imagen hiperespectral, en esta figura el eje X es el indicador de las líneas, el eje Y es el indicador de las muestras y representan la ubicación espacial de un píxel, el eje Z representa la singularidad espectral de cada píxel y es el número de banda, es decir, la longitud de onda de esa banda o canal.

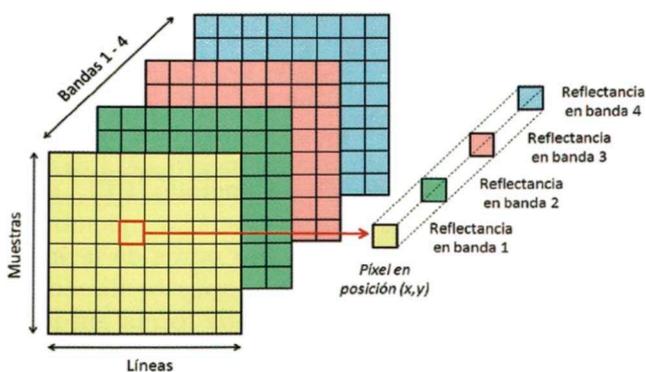


Figura 1: Estructura de una imagen hiperespectral [23].

En el laboratorio las imágenes pueden obtenerse usando un sistema como el mostrado en la figura 2, manteniendo la cámara fija y desplazando la muestra en estudio a una velocidad pre-definida.

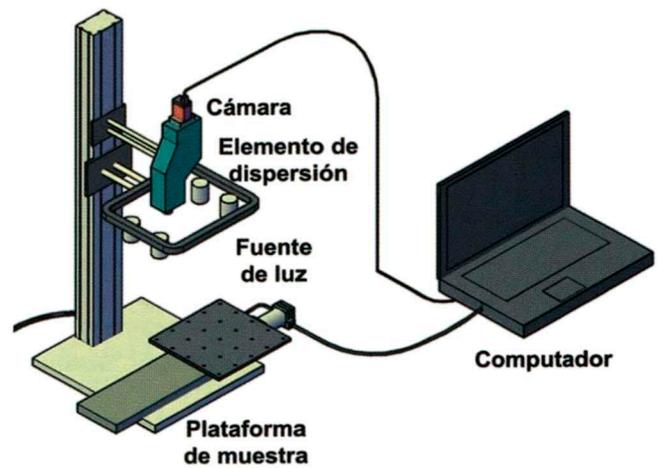


Figura 2: Sistema para el registro de una imagen hiperespectral [23].

2.2 Pre-procesamiento de una imagen hiperespectral

El pre-procesamiento de una imagen hiperespectral busca eliminar elementos ajenos que perturban el análisis de las mismas. Dentro de los procedimientos de un pre-procesamiento de las imágenes están la eliminación de las bandas correspondientes a longitudes de onda extremas, su normalización, el suavizado de los espectros y la eliminación del ruido.

El ruido engloba información ajena a los materiales en estudio, formado por sombras o puntos ciegos de la superficie en estudio. Dos técnicas útiles para la identificación del ruido son *PCA* y *MNF*. También se presentan píxeles mezcla o mixtos por la presencia de materiales distintos.

2.3 Análisis de Componentes Principales (PCA)

Principal Component Analysis (PCA) es un método estadístico que permite reducir la complejidad de espacios muestrales con muchas dimensiones conservando su información. Para una muestra con n elementos (píxeles), cada uno con p variables (longitudes de onda o bandas), espacio muestral p -dimensional, PCA permite reducir las dimensiones a z ($z < p$) reproduciendo aproximadamente lo mismo que las p variables originales. Donde antes se necesitaban p valores para caracterizar a cada muestra, ahora bastan z valores. Cada una de estas z nuevas variables recibe el nombre de componente principal. PCA pertenece a la familia de técnicas conocida como *unsupervised learning*.

Cada componente principal (z_i) se obtiene por combinación lineal de las variables originales, buscando maximizar la varianza. para la componente.

z_1 :

$$z_1 = \phi_{11}x_1 + \phi_{21}x_2 + \dots + \phi_{p1}x_p$$

Los términos $\phi_{11}, \dots, \phi_{p1}$ reciben en el nombre de loadings y son los que definen a la componente principal. Los

loadings pueden interpretarse como el peso/importancia que tiene cada variable en cada componente y, por lo tanto, ayudan a conocer que tipo de información recoge cada una de las componentes.

El proceso que se sigue para encontrar las componentes principales es:

- 1.- Centrado de las variables: se resta a cada valor la media de la variable a la que pertenece. Con esto se consigue que todas las variables tengan media cero.
- 2.- Se encuentran los loadings de z_1 diagonalizando la matriz de covarianza.
- 3.- Una vez hallada la primera componente z_1 se calcula la segunda z_2 repitiendo el mismo proceso, pero añadiendo la condición de que la combinación lineal no puede estar correlacionada con la primera componente. Esto equivale a decir que z_1 y z_2 tienen que ser perpendiculares. EL proceso se repite de forma iterativa hasta calcular todas los posibles autovectores. El orden de importancia de las componentes se relaciona con la magnitud de los autovalores.
- 4.- Finalmente si se desea obtener una imagen remarcando los pixeles donde prevalece la primera componente principal se proyecta el vector intensidad $I = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + \dots + a_px_p$ de cada pixel sobre el vector z_1 .

2.4 El método Minimum Noise Fraction (MNF)

Una transformación por componentes principales (PCA) no siempre produce imágenes que muestran una calidad de imagen sostenidamente decreciente al incrementarse el número de la componente. Lo que se busca entonces es una transformación lineal que haga esta tarea. Una de las formas más comunes de medir la calidad de una imagen es la relación ruido-síñal. Así en vez de escoger nuevas componentes para maximizar la varianza, como en la transformación por componentes principales, ahora se escogen de tal manera que se maximice la relación ruido-síñal, logrando de este modo el deseado ordenamiento óptimo en términos de la calidad de imagen. [24].

Para un conjunto de datos multivariado de p -bandas con niveles de intensidad $Z_i(x)$, con $i = 1, \dots, p$ donde x da las coordenadas de la muestra. Asumimos que

$$\mathbf{Z}(x) = \mathbf{S}(x) + \mathbf{N}(x)$$

donde $\mathbf{Z}^T(x) = Z_1(x), \dots, Z_p(x)$ y $\mathbf{S}(x)$ y $\mathbf{N}(x)$ son las componentes de señal y ruido no correlacionados.

Luego,

$$\text{Cov}(\mathbf{Z}(x)) = \Sigma = \Sigma_S + \Sigma_N$$

donde Σ_S y Σ_N son las matrices de covarianza de $\mathbf{S}(x)$ y $\mathbf{N}(x)$ respectivamente.

Se define la fracción de ruido de la i -ésima banda como la razón de la varianza total de la banda, a la varianza del ruido, es decir como:

$$\text{Var}(Z_i(x))/\text{Var}(N_i(x))$$

Los autovectores obtenidos usando la fracción de ruido son los mismos que los obtenidos por el procedimiento de maximizar la razón ruido-síñal.

Sea $Y_i(x) = a_i^T \mathbf{Z}(x)$, $i = 1, \dots, p$, la transformación de máxima fracción de ruido (MNF), con Y_i máxima entre todas las transformaciones ortogonales a Y_j , $j = 1, \dots, i$

Los a_i son los autovectores de $Z_N Z^{-1}$ y si μ_i son los autovalores correspondientes a a_i ,

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_p$$

Expresamos la transformación MNF como:

$$\mathbf{Y}(x) = \mathbf{A}^T \mathbf{Z}(x)$$

con: $\mathbf{Y}^T(x) = Y_1, \dots, Y_p$; $\mathbf{A}(x) = a_1, \dots, a_p$

Generalmente, Σ_S se estima utilizando la matriz de covarianza muestral de $\mathbf{Z}(x)$ mientras que para estimar Σ_N se usa el método MAF (minimum/maximum autocorrelation factors). También se puede estimar Σ_N , primero identificando las fuentes de ruido, que puede ser desde un fondo conocido hasta las sombras presentes en las muestras estudiadas y relacionando el ruido con datos evaluados previamente o obtenidos a partir de las mismas imágenes estudiadas.

2.5 El método PPI

Describimos en esta sección el método PPI, el cual permite identificar los endmembers o miembros finales, componentes espectralmente puros de la imagen. Durante la última década, se han propuesto algunos algoritmos con el propósito de extraer de forma automática los endmembers espectrales presentes en imágenes hiperespectrales, uno de los algoritmos ampliamente usado es el método PPI.

Un procedimiento para hallar los endmembers o elementos puros de las imágenes se detalla en [25]. La figura 3 muestra el proceso de identificación de los elementos extremos de un conjunto de pixeles en algunas direcciones denominadas skewers.

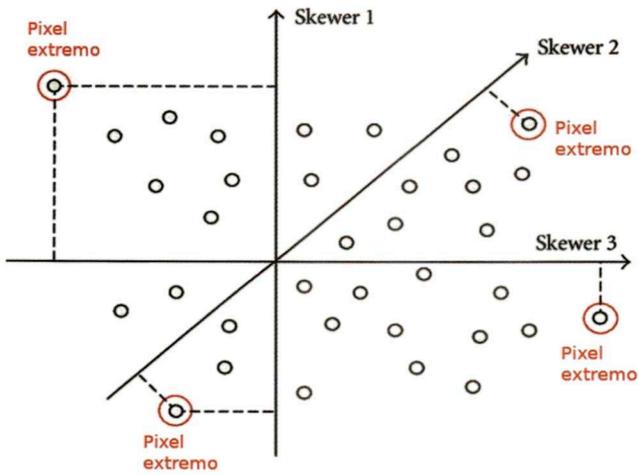


Figura 3: Ejemplo de juguete que ilustra la extracción de los endmembers por PPI en un espacio de dos dimensiones [25].

En este trabajo se usa ENVI [26], que tiene implementada una rutina para identificar los endmembers.

2.6 K-means Clustering

K-Means (traducido como K-Medias en español), es un método de agrupamiento o clustering no supervisado. La idea principal del algoritmo se basa en la selección de un centroide para cada Cluster del conjunto de datos dado. Esta selección es inicialmente aleatoria. Para saber si los datos son parecidos o diferentes el algoritmo K-medias utiliza la distancia entre los datos. Las observaciones que se parecen tendrán una menor distancia entre ellas. En general, como medida se utiliza la distancia euclídeana aunque también se pueden utilizar otras funciones. Una vez agrupados los puntos se calcula la media en cada grupo los cuales definen los nuevos centroides. Este proceso se repite hasta que no hay cambios en los centroides. Este algoritmo tiene como objetivo minimizar el error cuadrático medio,

$$\sum_{i=1}^k \sum_{x \in S} \|x - \mu\|^2$$

para cada elemento x dentro de un grupo S_i con valor medio μ , donde i va desde 1 hasta k .

Así, los elementos que comparten características semejantes estarán juntos en un mismo grupo, separados de los otros grupos con los que no comparten características.

3 Resultados

3.1 Adquisición de imágenes hiperespectrales

Los datos se obtuvieron en el laboratorio usando un equipo que incluye una cámara Hiperespectral Pika NIR - 320, marca Resonon, con un sistema integral de hardware y el software Spectronon Pro para la adquisición y análisis de datos hiperespectrales. Los espectros de reflectancia registrados están en el rango NIR, entre 900 y

1700 nm. El montaje experimental es similar al reportado en [27].

3.2 Muestras de suelos, proceso de preparación

Para una mejor identificación de las muestras estudiadas, se implementó una etiqueta para nombrar a las muestras de suelo, así se asignará a los cuatro tipos de suelo de Cusco estudiados los nombres Cus1, Cus2, Cus3 y Cus4 y a los tres tipos de suelo de Madre de Dios estudiados los nombres MD1, MD2 y MD3. La tabla 1 indica las características de los distintos tipos de suelo estudiados. Los suelos han sido tomados según la clasificación de regiones geodáficas identificadas por la FAO [28], la cual también es usada en el Perú por el Minagri (Ministerio de Agricultura) [29], La tabla 1 muestra las clasificaciones de las muestras de suelo estudiadas.

Tabla 1: Descripción de las muestras de suelo a tratar

Nombre	Descripción
Cus1	Tipo: Mollisol - Kastanozems (cálcicos) Suelos limosos calcáreos de color pardo rojizo. Porcentaje de humedad: 19.4%
Cus2	Tipo: Mollisol-Kastanozems (húmicos) suelos limosos ricos en materia orgánica y ácidos de color negro humo. Porcentaje de humedad: 21.8%
Cus3	Tipo: Oxisol-Alisol (argílica) suelos arcillosos de color rojo pardo. Porcentaje de humedad: 30.8%
Cus4	Tipo: Ultisol-Acrisol (argílica) suelos arcillosos de color negro oscuro. Porcentaje de humedad: 40.8%
MD1	Tipo: Inceptisol-Cambisol. Suelos de textura más fina que la arena con abundante material orgánico de color grisáceo. Porcentaje de humedad: 35.4%
MD2	Tipo: Entisol-Arenosol (fluviosol) Suelos muy infértiles, contextura arenosa color blanco arena. Porcentaje de humedad: 6.3%
MD3	Tipo: Ultisol-Acrisol (plánticos). Suelos arcillosos podsólicos de color rojo amarillo. Porcentaje de humedad: 29.1%



Figura 4: Muestras Cus1, Cus2, Cus3, Cus4 de suelos de Cusco y muestras MD1, MD2, MD3 de Madre de Dios.

Las muestras fueron secadas y empastilladas. Para ello se colocó las muestras de suelo en distintas cápsulas de cerámica para luego ser secadas en un horno a 110°C por 24 horas siguiendo la norma técnica peruana NTP 339.127. Una vez secada la muestra, se hace el empastillado con el objetivo de generar una superficie plana y homogénea. Debido a la textura y contenido del suelo MD2, no pudo ser empastillada.

3.3 Espectros de reflectancia

Se obtuvieron los espectros de reflectancia de las distintas muestras de suelo estudiadas. La figura 5 muestra los espectros de reflectancia obtenidos para los suelos de Cusco.

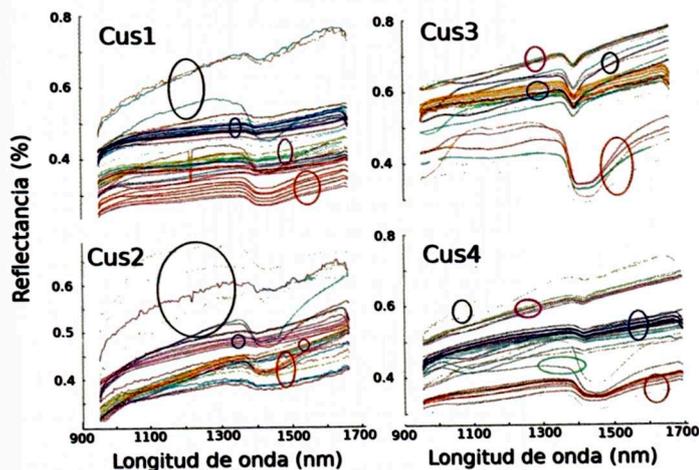


Figura 5: Espectros de reflectancia de las muestras Cus1, Cus2, Cus3 y Cus4 en diferentes condiciones.

La figura 6 muestra los espectros de reflectancia obtenidos para los suelos de Madre de Dios. Los círculos de color rojos corresponden a espectros de reflectancias de varios puntos de muestras sin ningún tratamiento. Los círculos de color azul corresponden a espectros de reflectancia de muestras secadas y empastilladas. Los círculos de color fucsia corresponden a espectros de reflectancia de muestras solamente secadas. Los círculos de color negro corresponden a espectros de reflectancia de pixeles que a simple vista son diferentes a los pixeles de la mayor parte de la muestra cuyos espectros identificamos como correspondientes a mezclas de suelo y material orgánico. En algunas figuras aparecen espectros marcados con un círculo verde los cuales corresponden a espectros de vegetación, mientras que en otras figuras aparecen espectros marcados con un círculo amarillo que corresponden a espectros de reflectancia con una pendiente típica del mineral galena.

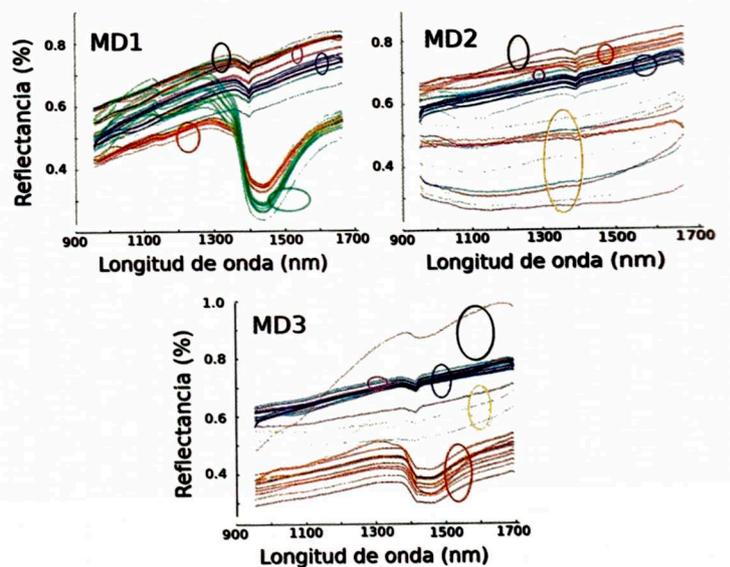


Figura 6: Espectros de reflectancia de las muestras MD1, MD2 y MD3 en diferentes condiciones.

En las muestras de Cusco los espectros sin ningún tratamiento térmico presentan una banda de absorción ancha típica del agua alrededor de 1450 nm, la cual se muestra más intensa en los espectros de reflectancia de la muestra Cus3. Los espectros de las muestras secadas y empastilladas presentan la absorción típica del Fe_2O_3 alrededor de 1415 nm. Esta banda es más intensa en los espectros de reflectancia de la muestra arcillosa Cus3 y la menos intensa se observa en el espectro de la muestra Cus1. Los espectros de las muestras secadas sin empastillar muestran una reflectancia similar a las muestras empastilladas aunque con una pendiente ascendente con la longitud de onda. Por último los espectros de reflectancia de pixeles que a simple vista se ven diferentes de la mayoría de los pixeles en las imágenes de las muestras secadas y empastilladas, son diferentes y corresponden a material orgánico como vegetación, raíces u otros materiales no identificados.

En los espectros de reflectancia de las muestras de Madre de Dios sin ningún tratamiento, la banda de absorción asociada al agua es muy intensa en el espectro de la muestra MD1, mientras que la muestra MD3 presenta esta banda con una intensidad similar a lo observado en las muestras de Cusco. La muestra MD2 correspondiente a arena de río no presenta esta banda de absorción. Los espectros de reflectancia de muestras secadas y empastilladas presentan una banda de absorción asociada Fe_2O_3 con la misma intensidad. Los espectros de reflectancia de muestras que fueron solamente secadas son muy similares a los espectros de las muestras que fueron secadas y empastilladas. Los espectros marcados con un círculo de color corresponden a muestras que asociamos a vegetación mientras que los espectros marcados con un círculo amarillo presentan una marcada pendiente para longitudes de onda cercanas

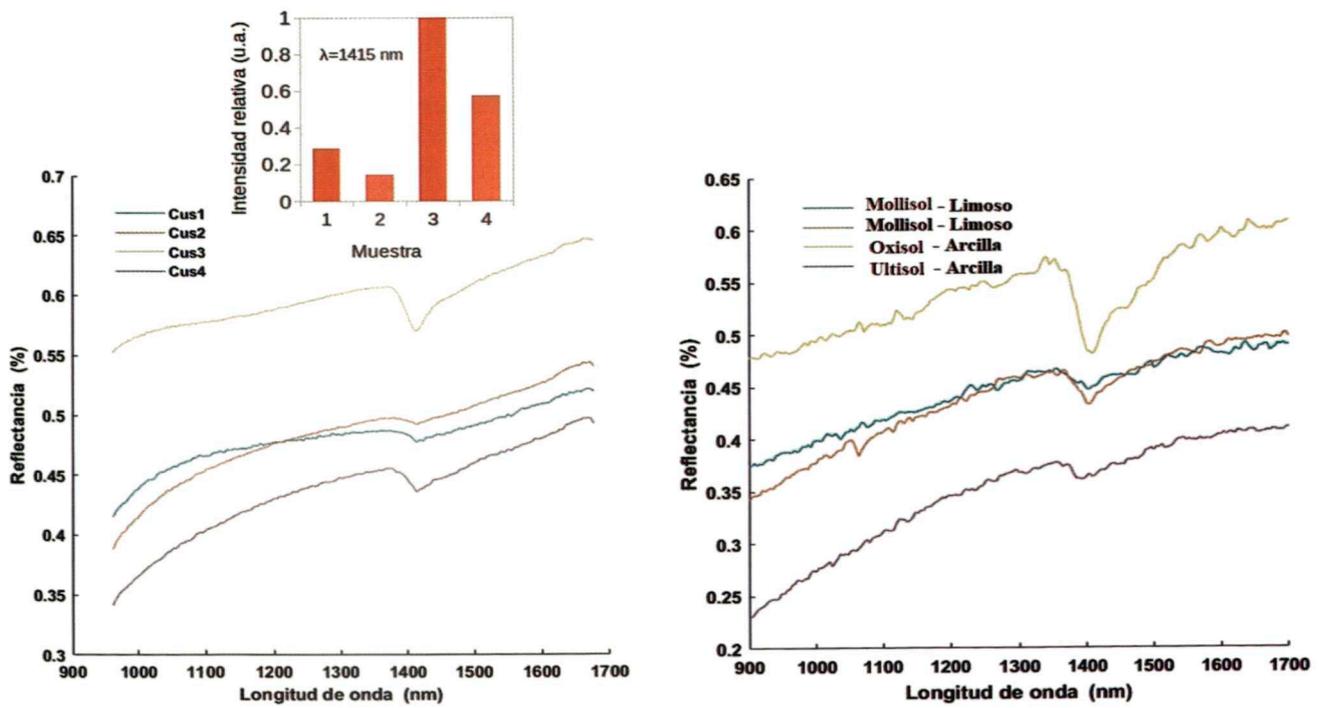


Figura 7: Espectros de reflectancia estandarizados de las muestras estudiadas de Cusco. El gráfico insertado muestra la intensidad relativa de las absorciones de las muestras para $\lambda = 1415$ nm.

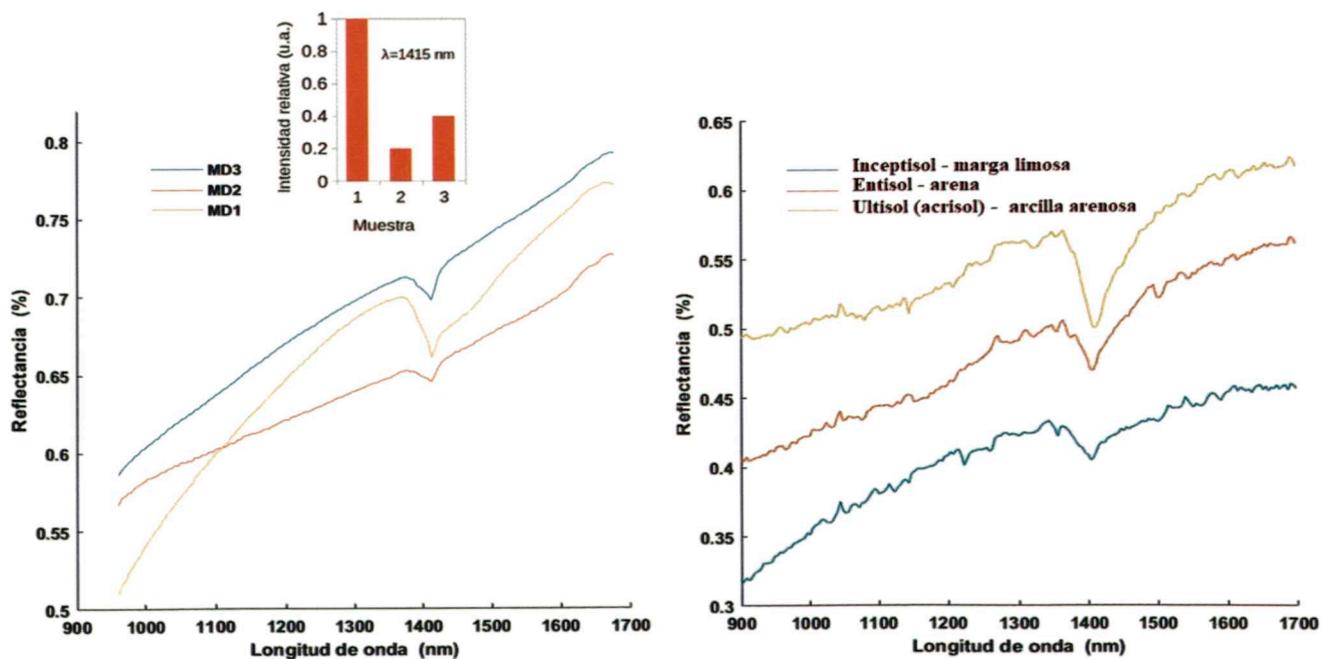


Figura 8: Espectros de reflectancia estandarizados de las muestras estudiadas de Madre de Dios. El gráfico insertado muestra la intensidad relativa de las absorciones de las muestras para $\lambda = 1415$ nm.

a 1680 nm lo cual es típico de espectros de galena.

Para las muestras secadas y empastilladas Cus1, Cus2, Cus3 y Cus4, se obtuvieron los promedios de los espectros de reflectancia de los pixeles de las imágenes de las muestras. Estos espectros promedio denominados espectros estandarizados se muestran en la figura 7 a) y se compara con los espectros tomados de la librería ASTER [30]. Estos espectros aparecen en la figura 7 b). Para identificar estos espectros en la librería ASTER, se tomo en cuenta la clasificación según [31].

Asimismo se obtuvo los promedios de los espectros de reflectancia para cada muestra de Madre de Dios, MD1, MD2 y MD3. Estos espectros y su comparación con espectros tomados de la librería ASTER se muestran en las figuras 8 a) y 8 b) respectivamente.

3.4 Análisis de los suelos usando el algoritmo PPI.

Otra de las técnicas usadas para distinguir entre cada muestra de suelos de Cusco y Madre de Dios fué la técnica PPI. Las muestras fueron dispuestas en recipientes y ubicadas tal como se muestra en la figura 9. El conocimiento de la ubicación de las muestras permite validar las clasificaciones obtenidas luego del análisis de las imágenes.

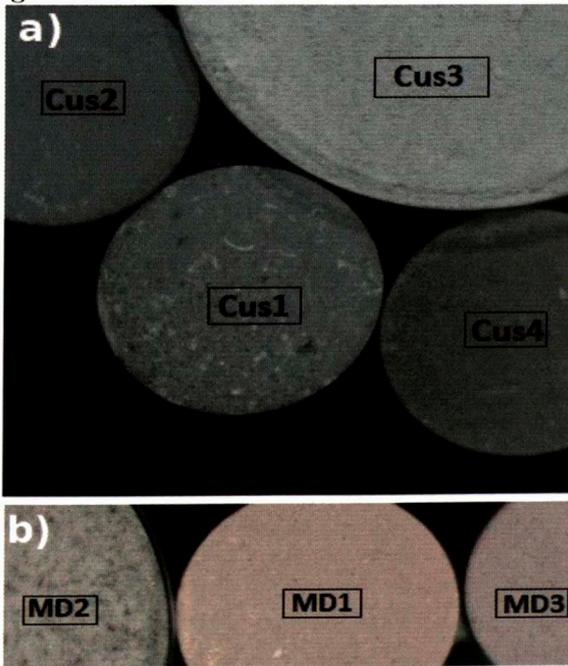


Figura 9: a) Imagen hiperespectral en falso color entre las bandas iniciales 15, 16 y 17, de los 4 suelos de Cusco. b) Imagen hiperespectral en falso color entre las bandas iniciales 15, 35 y 79, de los 3 suelos de Madre de Dios.

La imagen mostrada en la figura 9 se generó usando los datos iniciales de las imágenes hiperespectrales tomadas entre 900 y 1700 nm. Para generar la imagen de las muestras de suelos de Cusco se usaron las bandas 15, 16 y 17 mientras que para generar las imágenes de

las muestras de suelos de Madre de Dios se usaron las bandas 15, 35 y 79. La imagen de las muestras de Cusco muestra una tonalidad de color muy similar para las cuatro muestras, presentando un color ligeramente más claro solo para la muestra Cus3. El objetivo al usar distintas técnicas de análisis de imágenes es lograr una imagen que muestre un fuerte contraste entre los componentes de esta imagen. La imagen de las muestras de suelos de Madre de Dios son también bastantes similares, siendo la muestra MD2 la que presenta una tonalidad algo más oscura.

La reducción de ruido de estas imágenes se hizo usando la técnica MNF implementada en el software Environment for Visualizing Images (ENVI). Luego de la diagonalización de la matriz de covarianza, no se consideraron las bandas con valores propios por debajo de 1. El número final de bandas fue de 54 en ambos casos.

A continuación se hizo un análisis de las bandas resultantes usando PPI, el cual permite identificar los endmembers o elementos principales en las imágenes analizadas. Para generar estas imágenes que identifican los endmembers con distintas tonalidades de colores se usó también el software Environment for Visualizing Images (ENVI). La figura 10 muestra la visualización de de las imágenes usando cuatro bandas de los endmembers: las bandas 24, 33, 43 y 53 para las muestras de Cusco y las bandas 24, 32, 42 y 52 para las muestras de Madre de Dios.

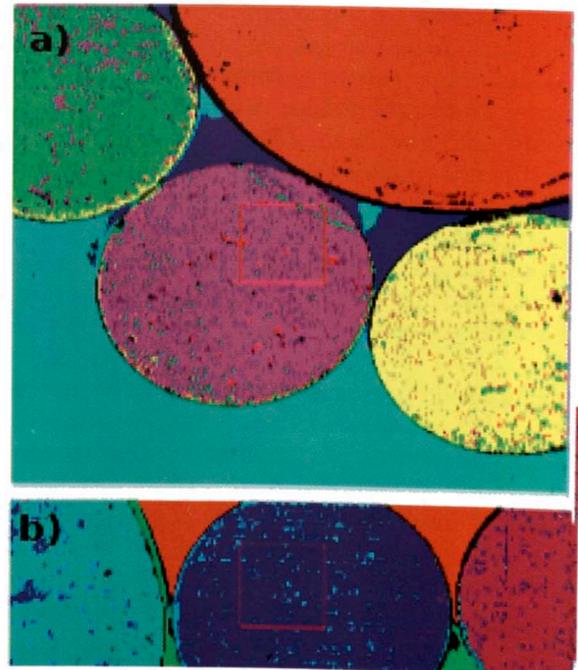


Figura 10: Clasificación e identificación de los endmembers para a) las muestras de Cusco y b) las muestras de Madre de Dios.

La figura 10 muestra una tonalidad de colores marcadamente diferente para todas las muestras de suelos, de Cusco y Madre de Dios, analizadas. Esto contrasta

con la imagen obtenida usando solamente los datos originales. Se puede observar la presencia de algunos píxeles de impurezas presentes en las muestras de suelos estudiadas. Los resultados obtenidos muestran que el método de análisis de imágenes PPI, es una herramienta muy eficiente para distinguir entre distintas muestras de suelos. Con el fin de comprobar la invariabilidad de los espectros de reflectancia luego de aplicar este método a los datos originales se tomaron los datos para regiones representativas de los distintos suelos se promediaron sus espectros de reflectancia. Los resultados se muestran en la figura 11. Los espectros muestran ser muy similares a los registrados para los datos originales.

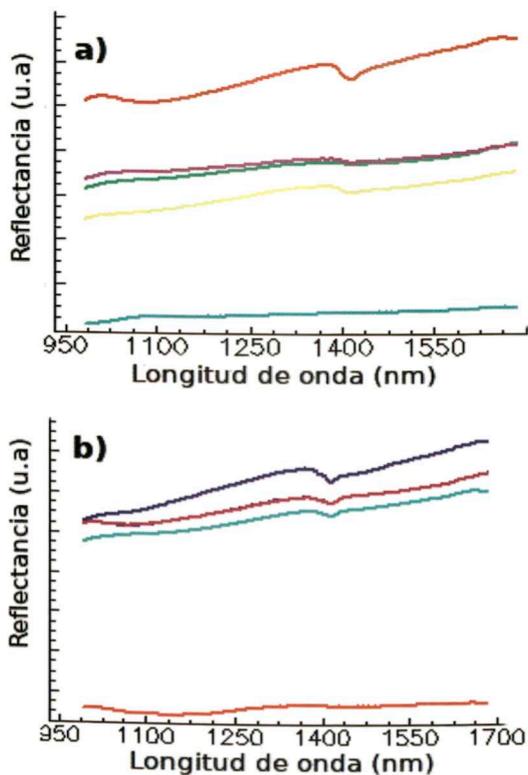


Figura 11: a) Firmas espectrales de los endmembers extraídos de la imagen hiperespectral de los suelos de Cusco. b) Firmas espectrales de los endmembers extraídos de la imagen hiperespectral de los suelos de Madre de Dios.

3.5 Análisis de componentes Principales (PCA)

Las imágenes también fueron analizadas usando el método PCA, considerando ahora las componentes más representativas correspondientes a los valores propios de mayor valor. Debemos mencionar que inicialmente en el método MNF también se usó el método PCA para identificar las componentes menos significativas que corresponden al ruido en las imágenes. Este método se aplicó usando el software estadístico R. Luego de obtener los componentes principales de las imágenes con los suelos de Cusco y Madre de Dios, se proyectaron sobre PC1 para obtener una imagen que contraste los suelos en una sola imagen. Los resultados se muestran en la figura 12.

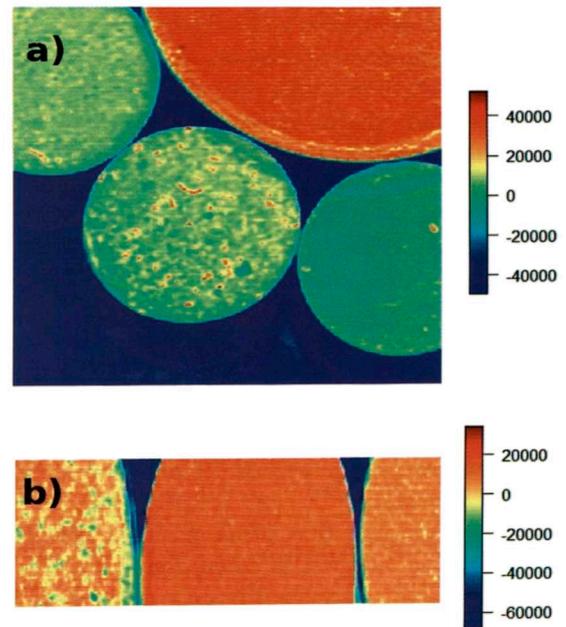


Figura 12: a) Imagen PC1 de las muestras de suelo de Cusco. b) Imagen PC1 de las muestras de suelo de Madre de Dios.

A diferencia de la imagen obtenida luego de aplicar el método PPI aparecen tonalidades de colores similares al comparar los colores asociados a las distintas muestras de los suelos estudiados.

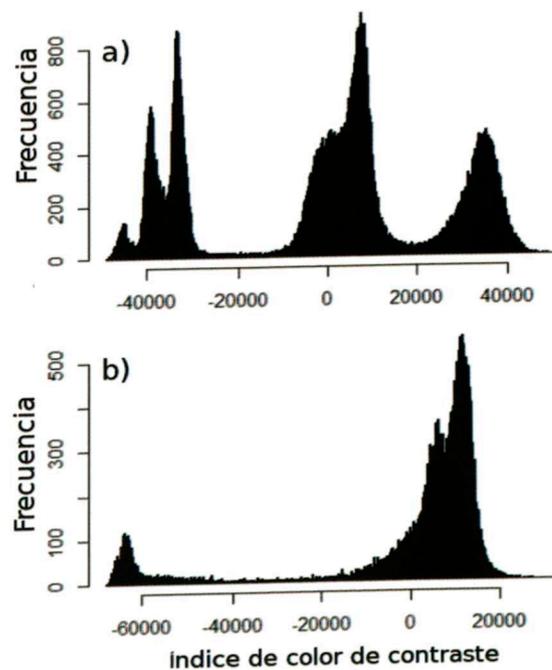


Figura 13: a) Histograma para las muestras de los suelos de Cusco obtenido a partir de un análisis usando PCA. b) Histograma para las muestras de los suelos de Madre de Dios obtenido a partir de un análisis usando PCA.

Las muestras de Cusco muestran una marcada diferencia entre Cus3 y el resto de las muestras. La muestra Cus1 muestra algunos píxeles con tonalidades similares a los

de la muestra Cus2, observándose la presencia de algunos píxeles con tonalidades de colores rojizos en Cus1. Las muestras de Madre de Dios presentan marcadas diferencias, observándose que la muestra MD2 presenta píxeles con tonalidades similares a la muestra MD3.

A partir de las imágenes anteriores es posible obtener un histograma mostrando la dependencia de la frecuencia de aparición con respecto al color de contraste de la imagen. El histograma de las muestras de Cusco muestra la presencia de hasta cinco picos asociados a las cuatro muestras estudiadas y el fondo. Los cuatro picos correspondientes a las muestras de suelos se presentan agrupados. En la imagen de Madre de Dios también se observan los píxeles correspondientes a las muestras de los suelos agrupados observándose una superposición entre los píxeles de la muestra MD1 y MD3.

En general se observa que PCA permite distinguir los suelos estudiados, aunque la tonalidad de colores de las muestras de suelos no es tan diferente como en la imagen obtenida usando el método PPI.

3.6 Clustering por K-medias

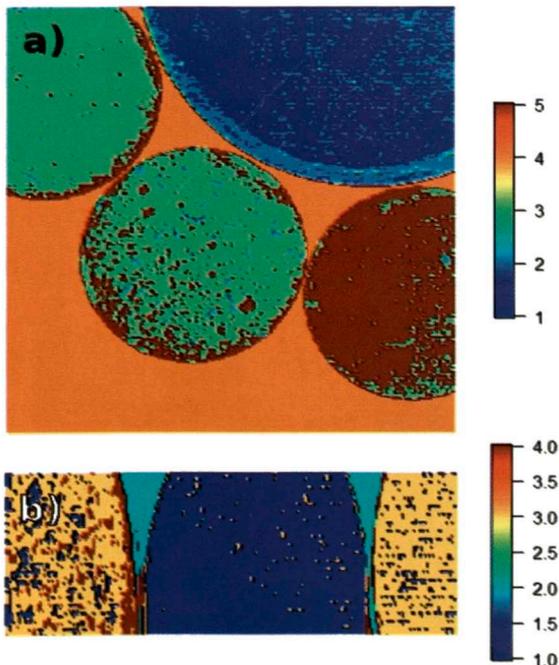


Figura 14: a) Imagen k-medias de las muestras de suelo de Cusco. b) Imagen k-medias de las muestras de suelo de Madre de Dios.

El procesamiento de las imágenes usando k-medias se hizo obteniendo primero las componentes principales, PCA, de los datos originales luego del procesamiento por MNF. Se tomaron 8 componentes principales para la imagen de las muestras de Cusco y 6 componentes principales para las muestras de Madre de Dios. Usando estos componentes principales se procedió a realizar un procesamiento k-medias usando 5 centroides para la muestra de Cusco y 4 centroides para la muestra de Madre de Dios. El procesamiento se hizo usando la librería *signal* en el software estadístico R.

Las imágenes obtenidas muestran tonalidades de colores diferentes aunque menos diferenciadas que en la imagen resultante luego de la aplicación del método PPI. Al igual que en el método PCA, las tonalidades de colores de las muestras Cus1 y Cus2 son similares. Para las muestras de Madre de Dios, se observa que las tonalidades de colores de las muestras MD2 y MD3 son también similares (figura 14).

En general se observa que el método k-medias resulta ligeramente más eficiente que el método PCA aunque con contraste de colores menos eficiente que lo observado en la imagen obtenida por el método PPI.

4 Conclusiones

La preparación de las muestras (secado y empastillado), permitió eliminar las bandas de absorción del agua, y reducir la cantidad de ruido o píxeles de sombra.

Los espectros de reflectancia de las muestras estudiadas muestran que la absorción de las muestras a 1415 nm es una característica que permite diferenciar las diferentes muestras de suelos estudiados.

El algoritmo PPI mostró una mejor performance al momento de diferenciar las diferentes muestras en una imagen. Los espectros de reflectancia obtenidos a partir de esta imagen son similares a los registrados inicialmente.

5 Agradecimientos

Dante Castillo agradece por la beca Maestría dentro del convenio Nro 167 FONDECYT-UNI gracias a lo cual se realizó este trabajo.

1. Condit, H.R. The spectral reflectance of American soils. *Photogramm. Eng.* 36, 955-966, 1970.
2. Stoner, E.R. y M.F. Baumgardner. Characteristic variations in reflectance of surface soils. *Soil Sci. Soc. Amer. J.* 45, 1161-1165, 1981.
3. Ben-Dor, E. y A. Banin. Visible and near-infrared (0.4-1.1 μm) analysis of arid and semiarid soils. *Remote Sens. Environ.* 48, 261-274, 1994
4. Hill, J. y B. Schütt. Mapping complex patterns of erosion and stability in dry Mediterranean ecosystems. *Remote Sens. Environ.* 74, 557-569, 2000.
5. Ben-Dor, E., K. Patkin, A. Banin y A. Karnieli. Mapping

- of several soil properties using DAIS -7915 hyperspectral scanner data - a case study over clayey soils in Israel. *Int. J. Remote Sens.* 23, 1043-1062, 2002.
6. Dematte, J.A.M., R.C. Campos, M.C. Alves, P.R. Fiorio y M.R. Nanni. Visible-NIR reflectance: a new approach on soil evaluation. *Geoderma* 121, 95-112, 2004.
 7. FAO, ITPS. Status of the world's Soil Resources (SWSR) - Main Report. Food and Agriculture Organization of the United Nations and Intergovernmental Technical Panel on Soils. Rome, Italy, 2015.
 8. Farzeen Chaudhry, Chao-Cheng Wu, Weimin Liul, Chein-I Chang and Antonio Plaza. Pixel purity index-based algorithms for endmember extraction from hyperspectral imagery. ISBN: 81-7895-218-1, 2006.
 9. Van der Meer, F. Can we map swelling clays with remote sensing? *Int. J. Appl. Earth Observ. Geoinfor.* 1(1), 27-35, 1999.
 10. Baumgardner, M.F., Silva, L.F., Biehl, L.L., Stoner, E.R. Reflectance properties of soils. *Adv. Agron.* 38, 1-44, 1986.
 11. McBratney, A.B., Mendonca Santos, M.L., Minasny, B. On digital soil mapping. *Geoderma* 117, 3-52, 2003.
 12. Krishnan, P., Alexander, J.D., Butler, B.J., Hummel, J.W. Reflectance technique for predicting soil organic matter. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44, 1282-1285, 1980.
 13. Dalal, R.C., Henry, R.J. Simultaneous determination of moisture, organic carbon and total nitrogen by near infrared reflectance spectrophotometry. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 50, 120-123, 1986.
 14. Ben-Dor, E., Banin, A. Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 59, 364-372, 1995.
 15. Chang, C.W., Laird, D.A., Mausbach, M.J., Hurburgh Jr., C.R. Near-infrared reflectance spectroscopy - Principal component regression analyses of soil properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 65, 480-490, 2001.
 16. Shepherd, K.D., Walsh, M.G. Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 66, 988-998, 2002.
 17. Brown, D.J., Shepherd, K.D., Walsh, M.G., Dewayne, M.M., Reinsch, T.G. Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma* 132, 273-290, 2006.
 18. Terhoeven-Urselmans, T., Schmidt, H., Joergensen, R.G., Ludwig, B. Usefulness of near-infrared spectroscopy to determine biological and chemical soil properties: importance of sample pre-treatment. *Soil Biol. Biochem.* 40, 1178-1188, 2008.
 19. Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma* 158, 46-54, 2010.
 20. Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T., Ben-Dor, E., Brown, D.J., Dematte, J.A.M., Shepherd, K.D., et al. A global spectral library to characterize the world's soil. *Earth-Sci. Rev.* 155, 198-230, 2016.
 21. Xian-Li Xie., An-Bo Li., 2018. Identification of soil profile classes using depth-weighted visible-near-infrared spectral reflectance. *Geoderma* 325 (2018) 90-101.
 22. Canet, C., Camprubí I Cano, A. Yacimientos minerales: Los tesoros de la Tierra. FCE, SEP CONACyT CAB. Colección: La ciencia para todos, México, 214 p, 2006.
 23. Carlos González Calvo, "Procesamiento a bordo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre mediante hardware reconfigurable", Tesis doctoral, 2011.
 24. Andrew A. Green, Mark Berman, Paul Switzer, Aand Maurice D. Craig Vol. 26, No. 1, January 1988.
 25. Carlos González, Javier Resano, Daniel Mozos, Antonio Plaza, and David Valencia, Hindawi Publishing Corporation EURASIP Journal on Advances in Signal Processing Volume 2010, Article ID 969806, 2010.
 26. ENVI. Tutorials better solutions Consulting Limited Liability Company Lafayette, Colorado, USA, 1977.
 27. Ronald Barrientos, Héctor Loro, REVCUNI, Vol 20, 1, 2017.
 28. FAO-UNESCO, Mapa mundial de suelos. Volumen IV América del Sur, 1971.
 29. Brack, Antonio y Mendiola, Cecilia, "Enciclopedia Ecológica del Perú.", <http://www.peruecologico.com.pe/libro.htm>, 1997. [Accedido: 29-abr-2019].
 30. Baldridge, A. M., S. J. Hook, C. I. Grove, and G. Rivera. *Remote Sensing of Environment* 113 (4): 711-715, 2009
 31. USDA NRCS, "United States Department of Agriculture Natural Resources Conservation Service". *Soil Taxonomy: A Basic System of Soil Classification for Making and Interpreting Soil Surveys*, USDA Natural Resources Conservation Service, vol. 436, Edition 2, 1999.
 32. Haiqing Yang and Abdul M. Mouazen, Chapter 1, *Infrared spectroscopy*, InTech, 2013.

Identificación de mezclas de suelos con derivados de petróleo a partir de imágenes hiperespectrales

Ricardo Flores, Héctor Loro[†]

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Perú

[†]*hloro@uni.edu.pe*

Recibido el 25 de Julio del 2018; aceptado el 11 de Setiembre del 2018

En este trabajo se usa la técnica de imágenes hiperespectrales y análisis multivariable para obtener información a partir de los espectros de reflectancia para clasificar mezclas de tres tipos de suelo (limoso, arcilloso y arenoso) con crudo de petróleo y diésel. Las imágenes fueron adquiridas por un sistema de imágenes hiperespectral (HSI) en el infrarrojo cercano (NIR) de 900 a 1750 nm. Las 15 muestras de suelo (5 limosa, 5 arcillosa y 5 arenosa) se mezclaron en el laboratorio con petróleo y diesel de forma separada usando tres niveles de concentración: no contaminado, 1ml y 6ml. Los datos espectrales fueron pre-procesados, con las técnicas: Normalización Max, Savitzky-Golay con primera derivada y sin primera derivada, variable normal estándar (SNV). Luego fueron clasificados usando análisis de componentes principales (PCA). Los resultados muestran que las imágenes hiperespectrales son una herramienta rápida y no invasiva para estudiar la contaminación de suelos con crudo de petróleo o diésel.

Palabras claves: Imágenes hiperespectrales, Infrarrojo cercano, Análisis multivariado, Análisis de componentes principales.

In this work the technique of hyperspectral imaging and multivariate analysis is used to obtain information from the reflectance spectra to classify mixtures of three types of soil (silty, clayey and sandy) with crude oil and diesel. The images were acquired by a near-infrared (NIR) hyperspectral imaging (HSI) system of 900 to 1750 nm. The 15 soil samples (5 silty, 5 clayish and 5 sandy) were mixed in the laboratory with oil and diesel in a separated form using three levels of concentration: uncontaminated, 1ml and 6ml. The spectral data were pre-processed with Max normalization, Savitzky-Golay with first derivative and without first derivative and normal standard variable (SNV). After that data were classified using principal component analysis (PCA). Results show that it is possible to use hyperspectral images as a quick and non-invasive tool to study contamination of soils with crude oil or diesel.

were mixed in the laboratory by in a separated form with oil and diesel using three levels of concentration: uncontaminated, 1ml and 6ml. The spectral data were pre-processed with Max normalization, Savitzky-Golay with first derivative and without first derivative and normal standard variable (SNV). After that data were classified using principal component analysis (PCA). Results show that it is possible to use hyperspectral images as a quick and non-invasive tool to study contamination of soils with crude oil or diesel.

Keywords: Hyperspectral images, Near infrared, Multivariate analysis, Analysis of main components.

1 Introducción

La contaminación de suelos, es una amenaza latente producida por el desarrollo económico y social de las comunidades. En la actualidad la actividad petrolera es una de las industrias que genera mayor impacto ambiental en la biodiversidad [1]. Los derrames de hidrocarburos son comunes durante los procesos de producción de crudo, así como también durante su comercialización, transporte y almacenamiento en sitios de acopio y distribución [2]. La contaminación del suelo con petróleo o sus derivados tiene efectos negativos entre otras cosas en la estructura de la comunidad microbiana [3] [4], en la capacidad de las plantas para desarrollar una relación simbiótica con los hongos para establecer las micorrizas [5], en la germinación de la vegetación [6], así como en la estructura del suelo [7].

Además, los suelos contaminados con hidrocarburos son peligrosos debido a la volatilización de los productos derivados de ellos, aumentando el riesgo de explosión o incendios en las áreas contaminadas [8], siendo necesario

desarrollar una metodología de respuesta rápida que permita controlar la calidad del suelo.

En la literatura se pueden encontrar estudios basados en sistemas hiperespectrales para cuantificar y caracterizar el contenido de hidrocarburos en suelos. Los resultados mostraron que fue posible determinar la respuesta espectral entre el suelo limpio y algunos de los suelos contaminados [9] [8] [10] [11] [12]. Las imágenes hiperespectrales de los suelos resultan una herramienta muy útil en el estudio de derrames de petróleo debido a su alta resolución espectral que permite la identificación directa de hidrocarburos en la superficie proporcionando la ubicación de derrames de petróleo y su alcance de propagación que pueden ayudar en las operaciones de contención y limpieza.

Este trabajo está enfocado en usar imágenes hiperespectrales (HSI) en el infrarrojo cercano (NIR, por sus siglas en inglés) registradas por una cámara hiperespectral marca RESONON en el laboratorio.

Se analizan las HSI utilizando técnicas de análisis mul-

tivariado como el análisis por componentes principales (PCA), poniendo énfasis en el pre-procesamiento de las imágenes.

2 Marco teórico

2.1 Imágenes hiperespectrales (HSI)

Las imágenes hiperespectrales (HSI) empezaron con las aplicaciones en remote sensing, expandiéndose luego en diferentes disciplinas como investigación farmacéutica, producción farmacéutica, ciencias de la alimentación, garantía de calidad de los alimentos, ciencias forenses, bioquímica y biomedicina [13], patrimonio cultural, medio ambiental, entre otros [14][15] [16][8].

La tecnología de HSI combina las ventajas de la visión por ordenador tradicional con la espectroscopia, lo que permite adquirir imágenes digitales con una gran cantidad de canales espectrales muy cercanos entre sí y obtener para cada porción de la escena o píxel, una firma espectral característica de cada material [14].

Esta tecnología permite medir simultáneamente la variación espacial y espectral de una muestra [17].

Dicha variación espectral es producto de la interacción de la radiación de la materia para cientos de longitudes de ondas y puntos de muestreo simultáneamente y puede ser cuantificada por reflectancia, la cual es definida como el porcentaje de luz emitida por una muestra con relación a la luz total que incide en ella [18] [19].

2.1.1 Estructura de una imagen hiperespectral

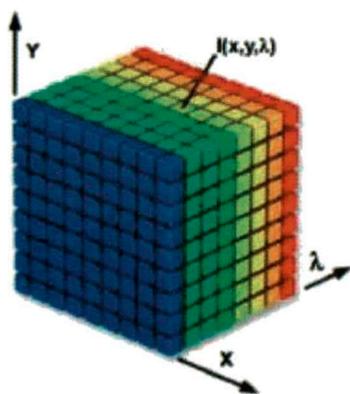


Figura 1: Estructura de un hipercubo

La estructura de un hipercubo es un conjunto de datos $H(X, Y, \lambda)$ donde X y Y representan la información espacial y λ representa la información espectral. La cámara hiperespectral NIR produce un hipercubo que tiene hasta 320 píxeles de ancho (Y -dimensión) con 168 longitudes de onda λ , denominadas bandas. La dimensión de X

es arbitraria y depende del campo de visión y tiempo de integración de el sensor. Para cada punto (X_i, Y_i) le corresponde un espectro con 168 longitudes de onda λ_i (figura 1).

El objetivo final del análisis de imágenes hiperespectrales es obtener una imagen que contenga información selectiva y específica (cuantitativa, grupos o distribución espacial) de los compuestos que conforman la superficie medida.

El análisis hiperespectral está inherentemente vinculado al análisis de datos multivariados. siendo necesario la implementación de diferentes algoritmos para manejar los datos obtenidos para una sola imagen.

2.2 Pre-procesamiento

2.2.1 Normalización

El primer paso en el proceso de normalización es corregir la escala de los datos de trabajo. Para realizar esto usamos el método denominado *Max*, se formula como:

$$x_{ij}^* = x_{ij}/\max(x_{ij})$$

donde x_{ij} es un elemento del hipercubo correspondiente al píxel i , banda j y $\max(x_{ij})$ es la máxima reflectancia para estos píxeles.

Con el fin de hacer más notoria la diferencia entre los espectros analizados en algunos casos representaremos al espectro por su derivada. A este proceso lo denominamos *dev*. Esto permite obtener datos que representan a las muestras estudiadas, marcadamente diferentes.

2.2.2 Corrección normal estándar variada (SNV)

Uno de los factores que deben considerarse en el pre-procesamiento de las imágenes es el efecto de la dispersión de la muestra en los espectros de reflectancia. Los diferentes tamaños de las partículas en el material, así como las irregularidades en la superficie de la muestra, causarán que los haces de luz se desvien a diferentes ángulos dependiendo de su longitud de onda. Estos son los llamados efectos de dispersión y constituyen la mayor causa de las variaciones de los espectros. La técnica *SNV* es una técnica de pre-procesado que corrige los efectos de dispersión.

$$x_{ij}(SNV) = \frac{x_{ij} - \bar{x}_i}{SDev}$$

donde i es el contador del espectro, j es el contador de del i -ésimo espectro, $x_{ij}(SNV)$ es el valor de la reflectancia corregida, x_{ij} es el valor de la reflectancia medida y \bar{x}_i es el valor medio del espectro de reflectancia del i -ésimo espectro. $SDev$ es la desviación estandar de los valores de reflectancia del i -ésimo espectro.

2.2.3 Filtros Suavizantes Savitzky-Golay

Un filtro Savitzky-Golay es un filtro digital que se puede aplicar a un conjunto de puntos de datos digitales con el

fin de suavizar los datos, es decir, aumentar la relación señal/ruido sin distorsionar en gran medida la señal [20]. Este método se basa en el cálculo de una regresión polinomial local (de grado k), con al menos $k + 1$ puntos equiespaciados, para determinar el nuevo valor de cada punto. El resultado será una función similar a los datos de entrada, pero suavizada.

2.2.4 Primera derivada y cuantificación

Asimismo, con el fin de cuantificar las bandas de reflectancia de interés se obtuvo la primera derivada (1D) de los espectros de reflectancia usando un procesamiento Max/SV-G-1D. Estos espectros permiten cuantificar las bandas de reflectancia de interés al variar la concentración del crudo o diesel en los diferentes suelos estudiados. La figura 2 muestra el proceso de cuantificación.

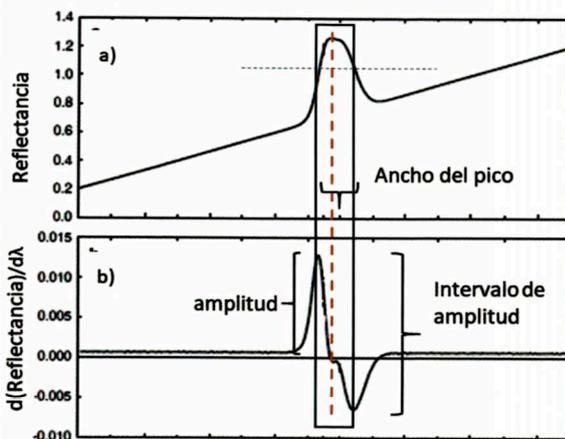


Figura 2: Cuantificación de la banda de absorción usando la primera derivada del espectro de reflectancia.

2.3 Pre-procesamiento espacial

2.3.1 Imagen mosaico

En el análisis de imágenes de muestras similares es útil presentarlas en una sola imagen formando un mosaico con el fin de hacer un análisis en conjunto y así poder resaltar una característica especial de cada una de las imágenes que forman el mosaico y así poder compararla. El mosaico de imágenes puede acelerar el análisis de las muestras pues el algoritmo y evaluación de la clasificación usa un solo hipercubo ya que se fusionan múltiples imágenes hiperespectrales en una sola [15].

2.3.2 Análisis de componentes principales (PCA)

El análisis de componentes principales (PCA) identifica combinaciones lineales de las variables originales que contienen la mayor parte de la información, en el sentido de variabilidad, contenida en los datos originales. La suposición general es que la información útil es proporcional a la variabilidad. Este análisis nos permite seleccionar las componentes que no forman parte del problema a estudiar como por ejemplo el entorno de la

muestra [21].

El espectro de reflectancia de una región en estudio, en general está formado por la contribución de espectros de reflectancia de los diferentes elementos que forman dicha región. En una imagen hiperespectral se registra la reflectancia para diferentes longitudes de onda (denominadas variables) para cada pixel. Es lógico suponer que las reflectancias de pixeles asociados a un mismo elemento, estarán correlacionados. La siguiente figura muestra las intensidades de tres variables x_1 , x_2 y x_3 para distintos pixeles donde se observa la correlación entre ellos.

Se busca entonces estas direcciones en el espacio formado por las n variables o longitudes de onda. Estas direcciones vienen dadas por los autovectores de la matriz de covarianza de los datos que forman el hipercubo y las varianzas son proporcionales a sus autovectores. Ordenando los autovectores con respecto a los autovalores, se obtienen los componentes principales que se buscan. Proyectando los datos sobre estos componentes se encuentran lo que se denomina "scores". Así al proyectar el hipercubo sobre la primera componente principal se obtendrán un valor para cada pixel que permitirá diferenciar los pixeles de la imagen destacando aquellos de la primera componente.

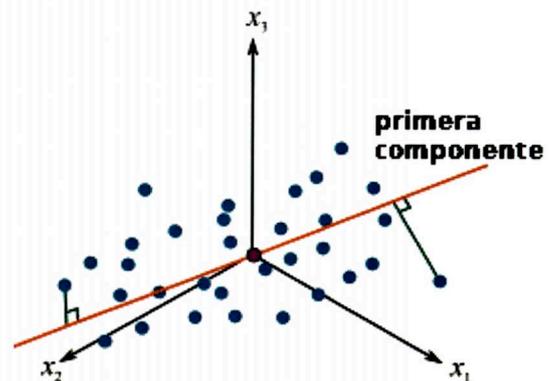


Figura 3: Se muestra la correlación y la dirección de máxima varianza o primera componente principal considerando las tres bandas x_1 , x_2 y x_3 . Se muestran también las proyecciones de dos puntos sobre esta componente [22].

3 Resultados

3.1 Preparación y clasificación de las muestras

Las muestras de suelo se clasificaron según la textura en limoso, arcilloso y arenoso. Todas las muestras de suelo se tamizaron para que sean uniformes, luego se eliminó la mayor parte de la humedad con el objetivo de tener los poros de los suelos libres de cualquier líquido. El proceso de secado fue progresivo manteniendo la temperatura a 120°C por una hora. En todos los casos se tomó 8 gr de los diferentes tipos de suelo con los que

se trabajó y fueron colocados en recipientes circulares para luego ser mezclados con 1 ml y 6 ml de derivados de petróleo.

Las muestras estudiadas se agruparon como se muestra en la tabla 1.

Tabla 1: Mezclas de suelos y derivado de petróleo.

	mezcla	suelo	derivado	volumen
grupo 1	lim	limosa		
	lim-cr-1	limosa	crudo	1ml
	lim-cr-6	limosa	crudo	6ml
	lim-di-1	limosa	diésel	1ml
	lim-di-6	limosa	crudo	6ml
grupo 2	arc	arcillosa		
	arc-cr-1	arcillosa	crudo	1ml
	arc-cr-6	arcillosa	crudo	6ml
	arc-di-1	arcillosa	diésel	1ml
	arc-di-6	arcillosa	crudo	6ml
grupo 3	are	arenosa		
	are-cr-1	arenosa	crudo	1ml
	are-cr-6	arenosa	crudo	6ml
	are-di-1	arenosa	diésel	1ml
	are-di-6	arenosa	crudo	6ml

3.2 Procesamiento de las imágenes

Las imágenes fueron obtenidas usando una cámara marca RESONON, modelo Pika NIR que registra imágenes entre 900 nm y 1700 nm, usando 168 canales. la cámara usa el software SpectrononPro [23] para manipular las imágenes.

Los datos originales fueron depurados para eliminar los bordes del espectro de reflectancia. Finalmente se trabajó solo con 136 bandas luego de eliminar los bordes.

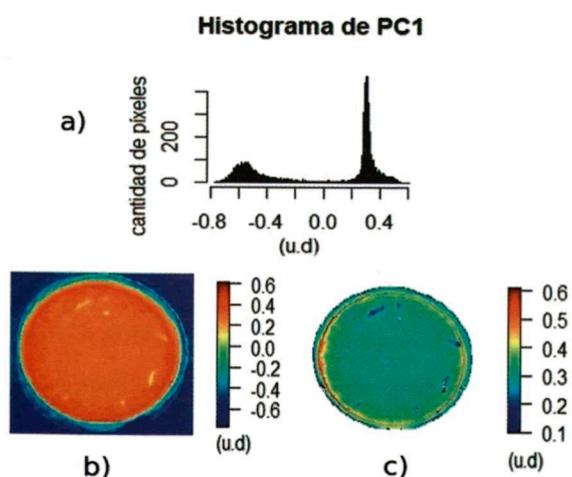


Figura 4: Eliminación del fondo para unidad digital de píxeles menores de 0.1 con su respectivo histograma.

Los hipercubos de las muestras estudiadas están formados por imágenes de 150 por 150 píxeles, para

cada una de las 136 bandas. La descripción de los pre-procesamientos usados se muestran en la tabla 2.

Sobre cada una de las imágenes obtenidas se hizo un análisis de componentes principales (PCA) para obtener la primera componente (PC1) y luego se proyectan los datos sobre esta primera componente para obtener los *scores*. La imagen proyectada permite diferenciar entre los diferentes elementos que conforman la imagen analizada. Una herramienta útil para cuantificar la información de la imagen proyectada sobre una componente principal es el histograma del número de píxeles asociado a cada valor de la proyección. Esto se usará para obtener una imagen de la muestra descartando el fondo de la imagen.

Para eliminar el fondo, las imágenes se proyectaron sobre la componente principal PC1. A manera de ejemplo la figura 4 muestra la imagen de suelo mezclado con derivado de petróleo.

En (a) se observa el histograma de la imagen donde se representa el número de píxeles con reflectancias normalizadas en unidades arbitrarias denominadas unidades digitales (u.d.). Los valores menores de 0 u.d. representan píxeles que corresponden al fondo y al portamuestra de plástico. En (b) se observa la imagen antes de eliminar los píxeles con reflectancias menores que 0 u.d. En (c) se observa la imagen luego de eliminar píxeles con reflectancias menores de 0 u.d. en una nueva escala en colores.

Los espectros de reflectancia de cada muestra fueron normalizados usando Max. Los espectros fueron luego procesados usando el filtro SV-G y el método SNV. Los espectros se tomaron considerando una región de interés de 150 filas por 150 columnas para las 136 bandas entre 968 a 1630nm. Los espectros de reflectancia fueron pre-procesadas usando Max/SV-G/SNV. Finalmente, con el fin de obtener la máxima información de los espectros se obtuvo la primera derivada siguiendo el proceso Max/SV-G-1D/SNV.

3.3 Suelo limoso

Las tres muestras lim, lim-cr-1 y lim-cr-6 fueron colocadas una al lado de las otras y se registró su imagen hiperespectral con el fin de observar sus diferencias. A esta imagen se le realizó un pre-procesamiento Max/SV-G/PCA y proyectando sobre PC1. El valor obtenido se asoció a un color con el fin de visualizar las diferencias en la imagen. El resultado obtenido se muestra en la figura 5 a). Asimismo se elaboró un histograma mostrado en la figura 5 b), con el fin de identificar el número de píxeles correspondientes a cada color. En el histograma se observa una marcada diferencia entre las intensidades que corresponden a cada una de las muestras. El mismo procedimiento se siguió para tratar las muestras lim, lim-di-1 y lim-di-6 y se muestran en la figura 5 c) y 5 d).

Tabla 2: Pre procesamientos aplicados a Las combinaciones de suelos con derivados de petróleo.

Nombre	Descripción
Max/SVG/PCA	Normalización máxima-Savitzky Golay-corrección por PCA.
Max/SV-G/SNV	Normalización máxima-Savitzky Golay-corrección por SNV.
Max/SV-G-1D/SNV	Normalización máxima -Savitzky Golay con primera derivada con corrección por SNV.

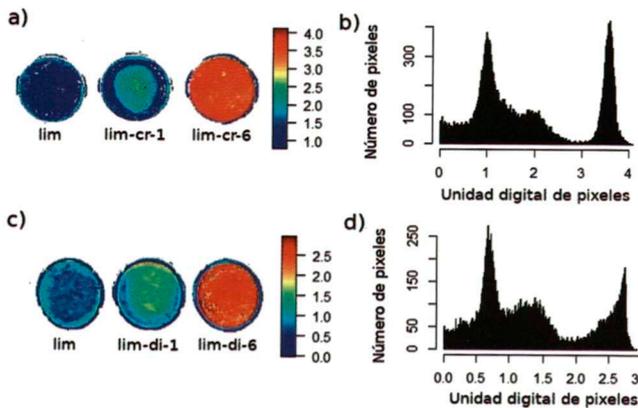


Figura 5: a) Imagen de muestras de suelo limoso, con 1ml y 6ml de crudo (lim, lim-cr-1 y lim-cr-6), procesamientos Max/SV-G/PCA, b) Histograma de la imagen a). c) Imagen de muestras de suelo limoso, con 1ml y 6ml de diésel (lim, lim-di-1 y lim-di-6), procesamientos Max/SV-G/PCA, d) Histograma de la imagen c).

La figura 5 muestra que es posible identificar con bastante certeza, la presencia de crudo y de diésel en suelo limoso. En la figura 5 a) se observa una marcada diferencia entre los colores de la muestra con suelo limoso puro y las muestras con crudo pasando del color azul al color rojo. Esta diferencia en colores también se observa para la muestra de suelo limoso con diésel. En ambas figuras las muestras con 1ml (crudo o petróleo) muestra una tonalidad celeste en el centro y una tonalidad azul en los bordes. En la figura 5 b) se observan tres picos, asociados a los tres elementos de la figura. La muestra con 1ml de crudo se asocia al pico central de 2 u.d. mientras que el pico de 3,6 u.d. se asocia a la muestra de 6ml. Esta separación también se observa en las imágenes para el diésel. Es interesante remarcar la agudeza de los picos para las muestras de 6ml, con un mayor ensanchamiento para la muestra de 6ml.

Los espectros de reflectancia para el suelo limoso con crudo y limoso con diésel se muestran en las figuras 6 a), y 7 a) respectivamente. En estos espectros se observan absorciones en 1205 y 1415 nm cuyas intensidades crecen con la cantidad de crudo en la muestra, sin embargo las absorciones en 1415 nm también aparecen en el espectro del suelo limoso puro. Usando las absorciones para 1205 nm se

Para cuantificar estas absorciones se tomó la primera derivada de estos espectros. Los resultados se muestran en las figuras 6 b) y 7 b).

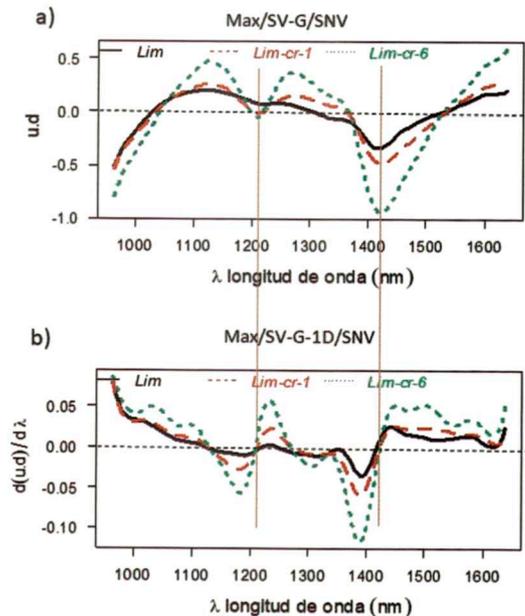


Figura 6: Espectros de suelo limosos con crudo a) con procesamiento Max/SV-G/SNV b) con procesamiento Max/SV-G-1D/SNV.

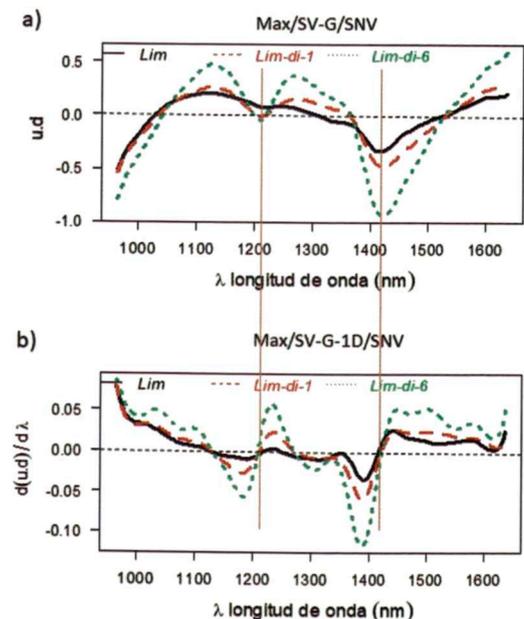


Figura 7: Espectros de suelo limoso con diésel a) con procesamiento Max/SV-G/SNV b) con procesamiento Max/SV-G-1D/SNV.

3.4 Suelo arcilloso

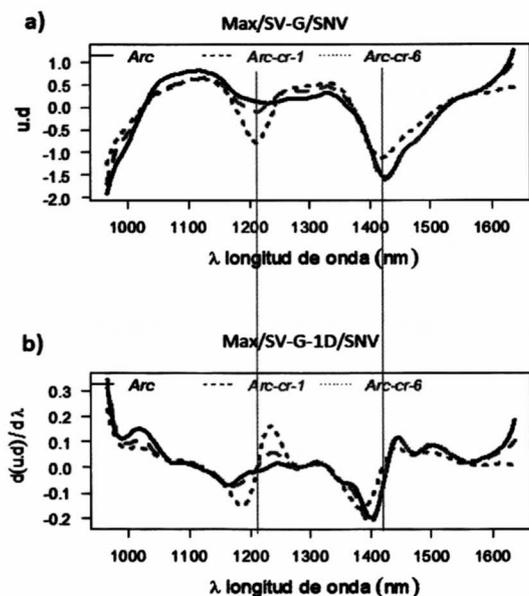


Figura 8: Espectros de suelo arcilloso con crudo a) con procesamiento Max/SV-G/SNV b) con procesamiento Max/SV-G-1D/SNV.

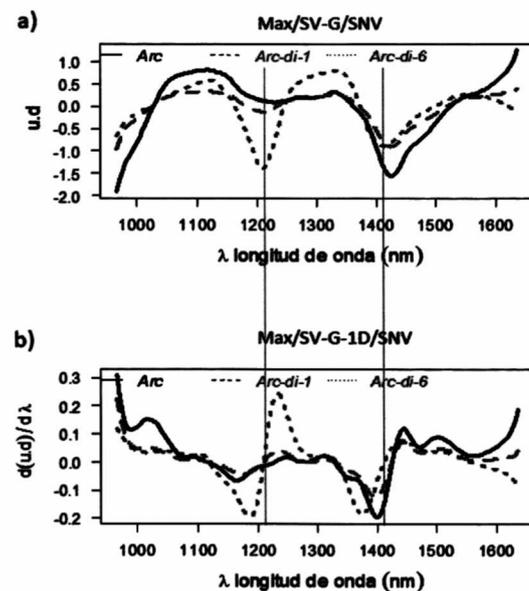


Figura 9: Espectros de suelo arcilloso con diesel a) con procesamiento Max/SV-G/SNV b) con procesamiento Max/SV-G-1D/SNV.

Se registraron también los espectros de reflectancia de los suelos arcillosos con crudo. Los resultados obtenidos se muestran en la figura 8 a) Las derivadas de estos espectros nos permiten cuantificar las bandas de absorción en estas muestras y se muestran en la figura 8 b). Los espectros de reflectancia de suelo arcilloso puro y contaminado con diesel se muestran en la figura 9 a) y las derivadas de estos espectros se muestran en la figura 9 b). Los espectros de reflectancia mostrados en la figura 9 muestran también una marcada diferencia de los espec-

tros arc-di-6 y arc-cr-6 con respecto a los demás. En estos espectros se observa un crecimiento en las absorciones alrededor de las bandas 54 de 1200 nm y 97 de 1414 nm, siendo la banda 54 aún más pronunciada para el lim-di-6.

3.5 Suelo arenoso

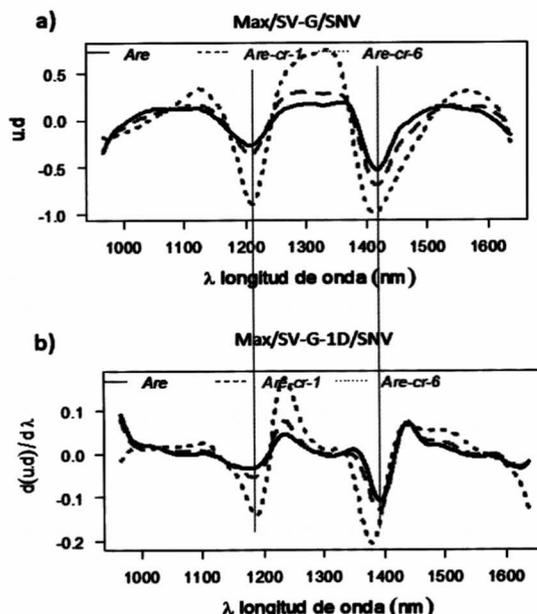


Figura 10: Espectros de suelo arenoso con crudo a) con procesamiento Max/SV-G/SNV b) con procesamiento Max/SV-G-1D/SNV.

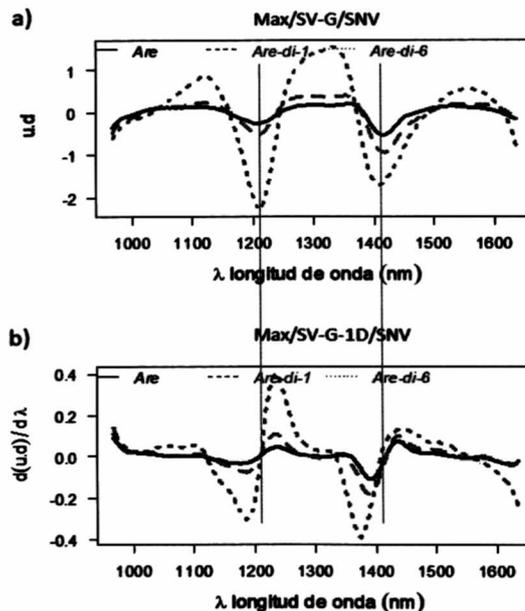


Figura 11: Espectros de suelo arenoso con diesel a) con procesamiento Max/SV-G/SNV b) con procesamiento Max/SV-G-1D/SNV.

Los espectros de reflectancia de las muestras de suelo arenoso puro y contaminado con crudo se presentan en

la figura 10 a) y sus correspondientes derivadas se muestran en la figura 10 b). Los espectros de reflectancia de las muestras de suelo arenoso puro y contaminado con diesel se presentan en la figura 11 a) y sus correspondientes derivadas se muestran en la figura 11 b).

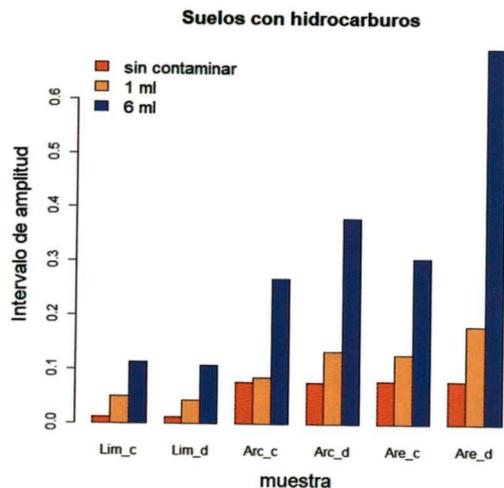


Figura 12: Muestras de suelos limoso, arcilloso y arenoso sin contaminar, 1ml y 6ml de hidrocarburo.

Para poder comparar los resultados obtenidos para los suelos estudiados, se presenta la figura 12 donde se observa el incremento del intervalo de amplitud para las muestras no contaminadas, contaminadas con 1ml y con-

taminadas con 6ml. La diferencia más pronunciada es para la muestra de suelo arenoso. El suelo donde se observa un menor incremento en el intervalo de amplitud es el suelo limoso. Asimismo se observa una variación en las reflectancias para los suelos no contaminados, siendo el suelo arenoso el que presenta una mayor reflectancia.

4 Conclusiones

Las imágenes hiperespectrales de suelos estudiados contaminados con distintas cantidades de crudo o petróleo muestran una marcada diferencia al ser analizadas por las técnicas de PCA. Los suelos limoso, arcilloso y arenoso presentan distintas características, presentando bandas de absorción cercanas a las bandas 54, y 97. Los suelos contaminados con diesel son los que presentaron las bandas de absorción más intensas.

De los resultados obtenidos se afirma que las imágenes tratadas con técnicas de análisis de imágenes resultan muy útiles al momento de identificar el grado de contaminación de suelos.

5 Agradecimientos

Ricardo Flores agradece por la beca Maestría dentro del convenio Nro 167 FONDECYT-UNI gracias a lo cual se realizó este trabajo.

- Rodríguez, Manzur and Piere, Jherson, Universidad Científica del Perú, 2018.
- Guzmán, María Fernanda Serrano and Gómez, Luz Marina Torrado and Ruiz, Diego Darío Pérez, Revista Científica General José María Córdova, 11, 12, 2013.
- Labud, Valeria and Garcia, Carlos and Hernandez, Teresa, Chemosphere, 66, 10, 2007.
- Cheema, Simrita and Lavania, Meeta and Lal, Banwari, Annals of microbiology, 65, 1, 2015.
- Leyval, C and Binet, Ph, Journal of environmental quality, 27, 2, 1998.
- Smith, MJ and Flowers, TH and Duncan, HJ and Alder, J, Environmental pollution, 141, 3, 2006.
- Amellal, N and Portal, J-M and Berthelin, J, Applied Geochemistry, 16, 14, 2001.
- Reséndez-Hernández, Laura A and Prudencio-Csapek, Daniel and Lozano-García, Diego Fabián, Geocarto International, Taylor & Francis 2018.
- Asadzadeh, Saeid and de Souza Filho, Carlos Roberto, Remote sensing of environment, 173, 2016.
- El-Rahman, Sahar A and Zolait, Ali Hussein Saleh, International Journal of Computing Science and Mathematics, 9, 2, 2018.
- Scafutto, Rebecca Del'Papa Moreira and de Souza Filho, Carlos Roberto and de Oliveira, Wilson José, ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 128, 2017.
- Lassalle, Guillaume and Credo, Anthony and Hédacq, Rémy and Fabre, Sophie and Dubucq, Dominique and Elger, Arnaud, Environmental science & technology, 52, 4, 2018,
- Lu, Guolan and Fei, Baowei, Journal of biomedical optics, 19, 1, 2014.
- Amigo, José Manuel and Babamoradi, Hamid and Elcoroaristizabal, Saioa, Analytica chimica acta, 896, 2015.
- Park, Bosoon and Lu, Renfu, Hyperspectral imaging technology in food and agriculture, Springer, 2015.
- Martínez, Eugenio Ivorra, Desarrollo de técnicas de visión hiperespectral y tridimensional para el sector agroalimentario, 2015.
- Dai, Qiong and Cheng, Jun-Hu and Sun, Da-Wen and Zeng, Xin-An, Journal of Food Engineering, 136, 2014.
- Hecht, Eugene, Óptica, Pearson Educación, 2000.
- Physics for scientists and engineers with modern physics, Serway, Raymond A and Jewett, John W, Cengage learning, 2018.
- Savitzky, A.; Golay, M.J.E. Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures. Analytical Chemistry. 36 (8) (1964)
- Bajorski, Peter, Statistics for imaging, optics, and photonics, John Wiley & Sons, 2011.
- Martín Guareño, Juan José, Support vector regression: propiedades y aplicaciones, 2016.
- Resonon Inc, SpectronPro Manual, Release 5.1, 2017.

Análisis y procesamiento de imágenes hiperespectrales para identificar contaminantes plásticos

Walter Sullivan Felipe Gaspar, Héctor Loro[†]

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Perú

[†]*hloro@uni.edu.pe*

Recibido el 24 de Setiembre del 2018; aceptado el 31 de Octubre del 2018

Las imágenes hiperespectrales representan una combinación de la visión por computador y espectroscopía, a través de las cuales se puede llegar a conseguir información espacial y espectral de los objetos incluidos en la imagen, esta última nos permite identificar y cuantificar los componentes de una muestra o escena. Estas imágenes pueden usarse para estudiar escenas con contaminantes como plásticos. A través de métodos de procesamiento se pueden obtener por comparación, características de los componentes de la imagen. En este artículo se analizan imágenes hiperespectrales que contienen plásticos usando técnicas supervisadas como el análisis de componentes principales (PCA), Spectral Angle Mapper (SAM), Support Vector Machine (SVM), así como la técnica no supervisada K-Means Clustering. Las imágenes se registraron en la región NIR de 900 a 1700 nm. Los resultados obtenidos muestran que la identificación de plásticos a través de imágenes hiperespectrales es una excelente alternativa que sin duda será de gran utilidad en la solución de problemas medioambientales.

Palabras claves: Plásticos, componentes principales, cubo hiperespectral, Support Vector Machine, Clusters, Spectral Angle Mapper.

Hyperspectral images represent a combination of computer vision and spectroscopy which allow us to get spatial and spectral information of the objects included in an image, the latter allows us to identify and quantify the components in a sample or scene. These images can be used to study scenes with contaminants such as plastics. Through processing methods, characteristics of the image components can be obtained by comparison. This article discusses hyperspectral images that contain plastics using supervised techniques such as principal component analysis (PCA), Spectral Angle Mapper (SAM), Support Vector Machine (SVM), as well as the unsupervised technique K - Means Clustering. The images were recorded in the NIR region from 900 to 1700 nm. The results obtained show that the identification of plastics through hyperspectral images is an excellent alternative that is very useful in solving environmental problems.

Keywords: Plastics, Principal components, hyperspectral cube, Support Vector Machine, Clusters, Spectral Angle Mapper.

1 Introducción

La técnica de imágenes hiperespectrales (HSI) se viene implementando como herramienta para el estudio de diversos problemas como la calidad de alimentos [1][2], identificación de tumores cancerígenos, agricultura, medio ambiente [3], y recientemente se han reportado trabajos relacionados con la contaminación de plásticos [4].

El análisis de las imágenes hiperespectrales es mediante el uso de algoritmos meramente estadísticos [5], identificando componentes independientes relacionados con características útiles de las muestras estudiadas. Existen algoritmos espectro-espaciales con modelos de aprendizaje supervisado como Support Vector Machine (SVM)[6] que permiten la clasificación de datos de alta dimensión como lo son las imágenes hiperespectrales.

La aplicación de estas técnicas al estudio de imágenes hiperespectrales que contengan residuos plásticos resulta de mucho interés en la actualidad. La gran cantidad de residuos plásticos que son arrojados al medio ambiente

como basura después de su uso representan un problema mundial por las grandes dimensiones del daño que causa a los ecosistemas y como consecuencia a la salud de las personas.

Dentro de los métodos de identificación y clasificación actualmente utilizados para la gestión de residuos sólidos y más específicamente de residuos plásticos en el entorno ambiental, la inspección visual todavía se utiliza ampliamente, a pesar que es una tarea complicada, que implica un enorme esfuerzo y sobre todo que está sujeta a errores propios de la fisiología humana. Otros métodos muy utilizados son los métodos termoquímicos, electrostáticos, cromatográficos, clasificación por aire y clasificación en húmedo [6] cuya desventaja se fundamenta en que son métodos destructivos que demandan mucho tiempo, no manejan gran cantidad de muestras y sobre todo, son costosos [5].

En este trabajo se aplica la técnica de HSI al estudio de escenas que contengan diferentes tipos de plásticos así como plásticos en presencia de otros materiales como

madera, vegetación u otros. Se aplica la técnica de Spectral Angle Mapper (SAM) a la clasificación de los tipos de plásticos, mostrando resultados medianamente óptimos, debido a una alta dependencia del ángulo umbral entre cada material. Otra técnica que se aplica es la de Support Vector Machine (SVM), siendo una herramienta potente de Machine Learning para el manejo de datos de alta dimensión. Se realizó el reconocimiento y diferenciación de clases (tipos de materiales), con alta precisión, teniendo un conjunto de muestras de referencia (vectores de soporte) que funcionaron de manera óptima mediante un Kernel lineal. Finalmente se usó el método no supervisado K-Means Clustering, con lo que se realizó un agrupamiento de clases similares que permitieron la identificación de plásticos con respecto a otros materiales aunque mostró no ser muy precisa para clasificar los tipos de plásticos dentro de una imagen. Las imágenes fueron obtenidas mediante un sistema hiperespectral NIR cuya resolución espectral fue de 900 a 1700 nm con ancho de banda de 4.9 nm, y una resolución espacial de 300×320 píxeles.

2 Materiales y métodos

2.1 Sistema hiperespectral

Se implementó un sistema de adquisición de imágenes hiperespectrales como el mostrado en la figura 1. La cámara usada para la adquisición de imágenes es la cámara RESONON Pika-NIR 320 [7] registra imágenes para longitudes de onda entre 900 y 1700 nm con un ancho de banda de 4.9 nm.

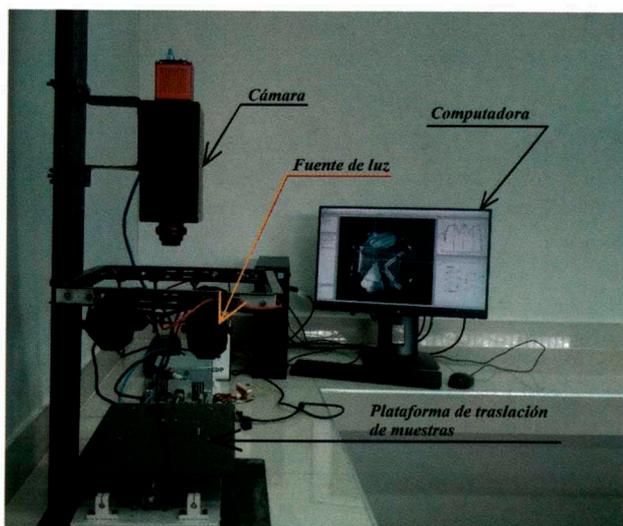


Figura 1: Disposición general del sistema de adquisición de imágenes hiperespectrales.

La adquisición de las imágenes, se realizó usando el software SpectrononPro 2.83, RESONON Inc.-US [7] Este software ha tenido avances significativos, para realizar un análisis rápido de imágenes hiperespectrales, tales como el cálculo de índices de reflectancia, mejoramiento vegetativo fotoquímico, entre otros. También es

útil para realizar la clasificación rápida de imágenes mediante métodos más sofisticados como, el Spectral Angle Mapper (SAM), Discriminante Lineal (LD), Regresión Logística (LR), entre otros. Sin embargo, para un análisis más exhaustivo, personalizado e interactivo, y sobretodo enfocado al reconocimiento de plásticos, como es nuestro caso, fue necesario desarrollar y/o adaptar rutinas de software para conseguir los objetivos trazados.

2.2 Métodos de clasificación usados

En el análisis de imágenes hiperespectrales se hizo primero un análisis de componentes principales (PCA), seguido de un procesamiento supervisado así como no supervisado. Los métodos supervisados usados son el Spectral Angle Mapper (SAM) y Support Vector Machine (SVM). Se usó K-Means Clustering como método no supervisado para la determinación automática de características.

2.2.1 Análisis de Componentes Principales (PCA)

El análisis de componentes principales (PCA), es uno de los métodos estadísticos de mayor uso para reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos [8] basado en el hecho de que en los hipercubos, las bandas vecinas están frecuentemente correlacionadas y contienen alguna información similar sobre el objeto. Este análisis es usado para transformar la data original en una de igual o menor cantidad de bandas, removiendo la correlación entre las bandas originales. Todas las transformaciones lineales que se realizan en PCA, están basadas en el mismo principio matemático conocido como descomposición en vectores y valores propios de la matriz de covarianza de la imagen hiperespectral en estudio. Los autovalores de la matriz de covarianza de los datos analizados dan la información de la varianza de las nuevas bandas. Tomando las bandas con la mayor varianza se reduce la dimensionalidad del problema. La figura 2 muestra como cambia la varianza porcentual VR% para 10 bandas (PC's) en una muestra arbitraria.

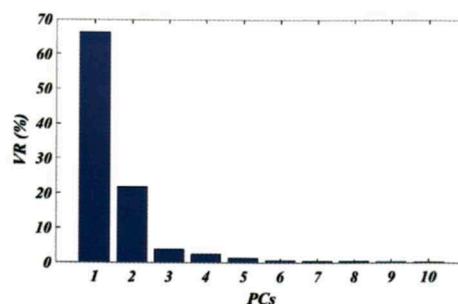


Figura 2: Porcentaje de varianza de las primeras 10 PC's de una imagen arbitraria.

2.2.2 Spectral Angle Mapper (SAM)

SAM es un modelo de clasificación espectral basado físicamente en el uso de un ángulo p-dimensional para hacer coincidir los espectros de cada pixel con los espectros de referencia. Este algoritmo determina la similitud espectral entre dos espectros calculando el ángulo entre ambos [5]. La figura 3 muestra el ángulo t de separación entre dos espectros.

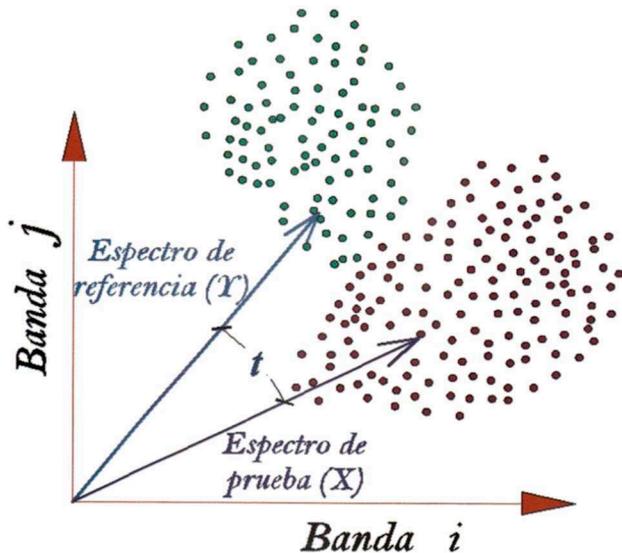


Figura 3: Representación del ángulo umbral t , para el cálculo de la similitud espectral.

2.2.3 Support Vector Machine (SVM)

SVM se basa en el ajuste de un hiperplano de separación óptimo, que clasifique claramente los puntos de datos según sus clases [8], centrándose en las muestras de entrenamiento que se encuentran en el borde de las distribuciones de dichas clases, a los que se les llama vectores de soporte. La figura 4 muestra esquemáticamente como los vectores de soporte definen un hiperplano que separa los diferentes pixeles asociados a dos muestras diferentes.

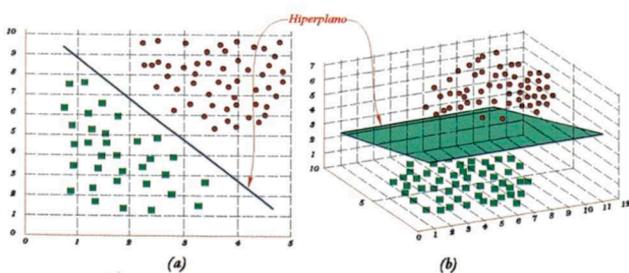


Figura 4: Representación de un hiperplano en el espacio. Bidimensional (a) y tridimensional (b).

2.2.4 K-Means Clustering

K-Means permite la agrupación de datos en grupos similares llamados clusters los cuales definen un centroide, a partir de un conjunto de datos [9]. El resultado del agrupamiento es la asignación de cada pixel a una clase espectral contenida dentro de la imagen que se analiza. La figura 5 muestra el agrupamiento de pixeles en clusters definidos por centroides.

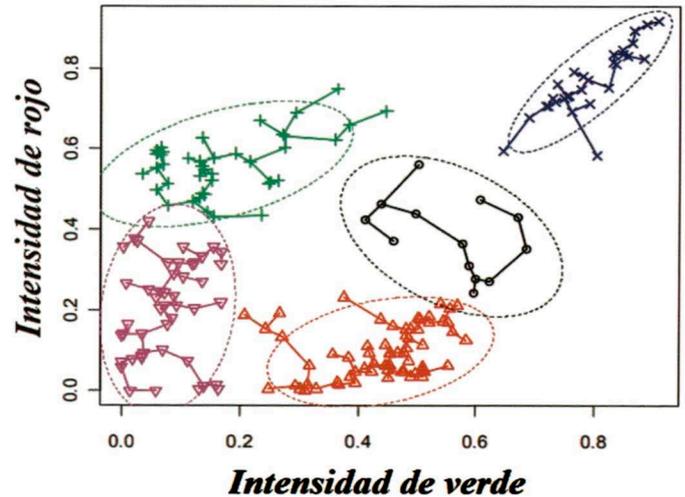


Figura 5: Distribución espacial de clusters conseguidos con el modelo K-Means [9].

2.3 Muestras de plásticos usados en los experimentos

Las muestras de plástico utilizadas fueron obtenidas a partir de residuos caseros. Las formas de cada tipo de plástico han sido configuradas manualmente.

Los plásticos tienen un símbolo de reciclaje que hemos tomado en cuenta para su respectiva clasificación, figura 6.



Figura 6: Símbolos de reciclaje de los plásticos [10][11]

Los materiales usados fueron: polietileno tereftalato (PET), polietileno de alta densidad (HDPE), poli cloruro de vinilo (PVC), polietileno de baja densidad (LDPE), polipropileno (PP) y poliestireno (PS). Las imágenes de los plásticos usados se muestran en la figura 7.

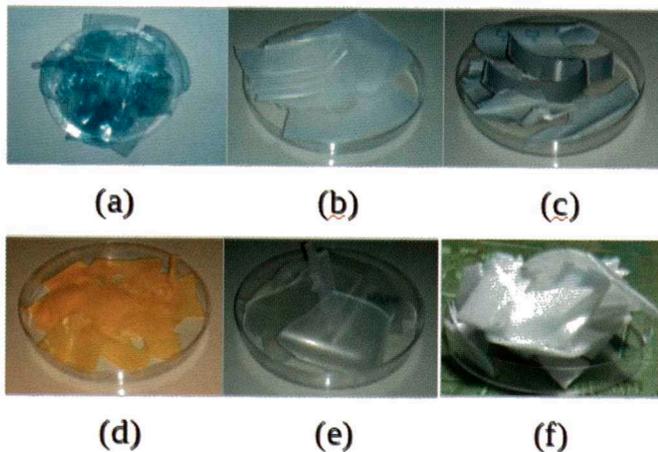


Figura 7: Muestras de plásticos PET, HDPE, PVC, LDPE, PP y PS, (a)-(f).

2.4 Pre-procesamiento

Muchos de los tratamientos previos que usualmente se realizaban como parte del pre procesamiento, actualmente han sido incorporados a los instrumentos de medición; así por ejemplo, con la cámara Resonon Pika NIR 320, los cubos hiperespectrales obtenidos, ya han sido tratados bajo ciertas correcciones como la corriente oscura, obteniéndose espectros en términos de reflectancia relativa, con respecto al patrón de blanco estándar con el que se calibró para medir la cantidad de luz entrante hacia el sensor. Las imágenes son espectros de reflectancia escalada por un factor de 10000, lo que permite apreciar los detalles de los picos de absorción de los materiales.

3 Resultados y Discusiones

Se analizaron los espectros de reflectancia de las 6 muestras de plásticos, los 4 tipos de suelos, agua de mar y petróleo crudo.

La figura 8 muestra los espectros de reflectancia de los plásticos HDPE, PVC, PP y PS obtenidos en el laboratorio y el reportado en la literatura [12][13]. Las posiciones de los picos de absorción para los diferentes plásticos estudiados se enumeran en la Tabla 1. Los picos listados son similares para los diferentes materiales y corresponden a las absorciones asociados a los enlaces C-H.

Tabla 1: Posiciones de los picos de absorción en nm identificados a partir de los espectros de reflectancia obtenidos usando una cámara Resonon Pika NIR- 320.

Material	Picos de absorción (nm)
HDPE	1220, 1382, 1718
PP	1178, 1382, 1694
PET	1118, 1406, 1616
PVC	1181, 1418, 1700
PS	1130, 1370, 1664

3.1 Análisis de las muestras de plásticos

En primer lugar se analizaron imágenes que contenían las 6 muestras de plásticos. Estas se analizaron usando los métodos SAM, SVM y K-Mean Clustering, con el fin de identificar cual de estas técnicas permite una mejor identificación de los plásticos. Antes de analizar las imágenes por alguno de estos métodos, en primer lugar se buscó reducir la dimensionalidad. Es así que el primer análisis de las imágenes fue usando PCA. Este análisis se hizo usando el software Matlab. A continuación se describen los resultados obtenidos.

3.1.1 Aplicación de PCA

Debido a que el orden de cada componente principal está dado en función de la mayor variabilidad de la información, el mismo que está cuantificado por la varianza, se calculó este parámetro (VR), y su proporción acumulada (CVR) de las primeras cinco PCs, de las tres imágenes en estudio, cuyos valores se muestran en la tabla 2, donde se observa que la proporción de varianza acumulada de las primeras cinco componentes es mayor al 99.5% de la información, lo cual es aceptable ya que la información restante es casi nula, en consecuencia la dimensión se redujo solo a cinco PCs.

Tabla 2: Varianza (VR), y su proporción acumulada (CVR) para las primeras cinco PCs.

PC	VR	CVR(%)
PC1	0.9670	96.70
PC2	0.0147	98.17
PC3	0.0090	99.08
PC4	0.0030	99.38
PC5	0.0013	99.51

Luego se generó una proyección de todos los píxeles sobre cada componente para visualizar cada raster en escala de grises y verificar como está distribuida la variabilidad en cada una. Se incluyó también a las componentes PC6, PC7 y PC8 para visualizar la pérdida de variabilidad de la información, teniendo un total de ocho rasters, mostrados en la figura 9, donde se observa que a partir de PC6 las componentes pierden diferencias notorias de los fragmentos de plástico, llegando a componerse de ruido la totalidad de píxeles.

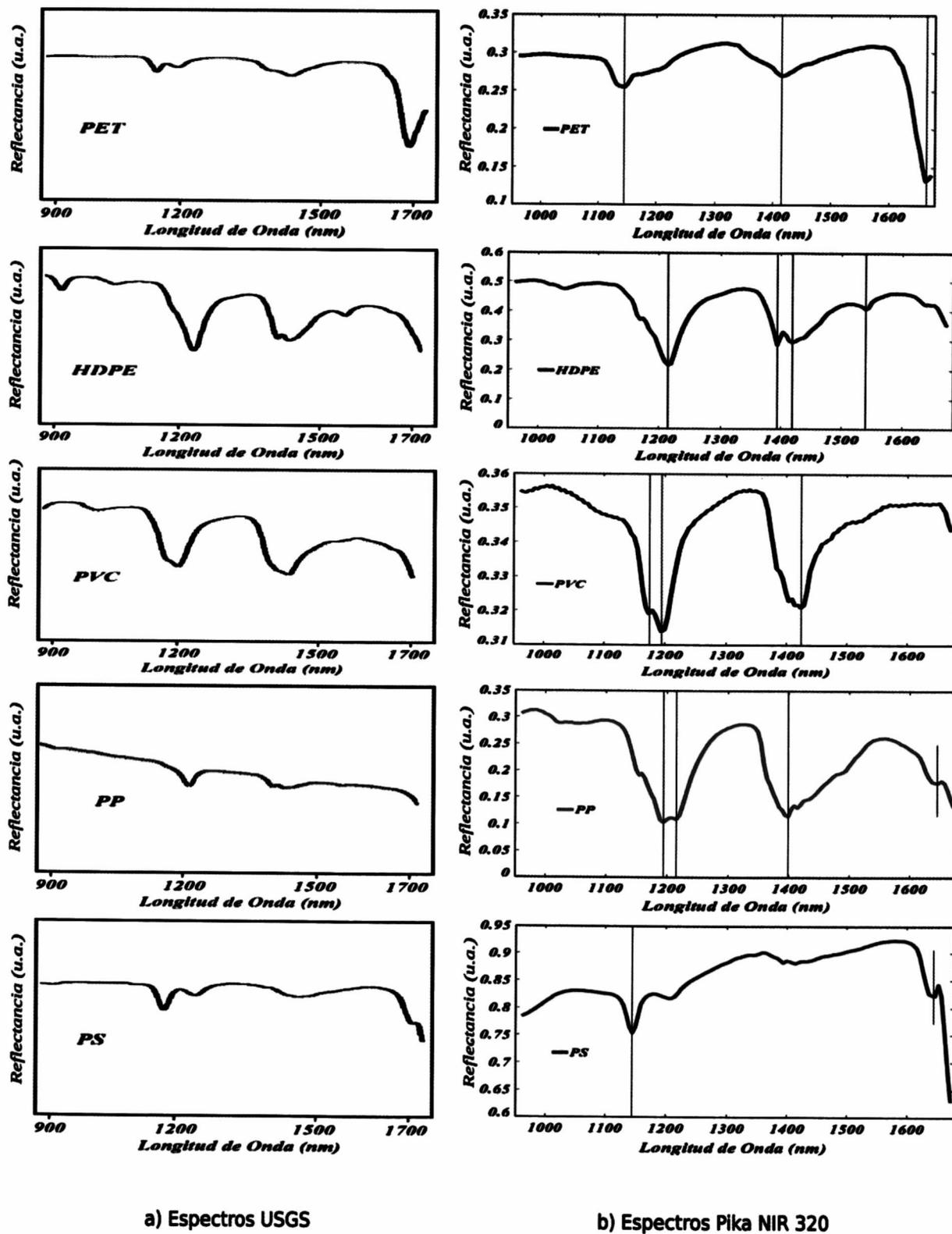


Figura 8: Comparación de los espectros de la librería USGS (a), con los espectros obtenidos en el laboratorio (b).

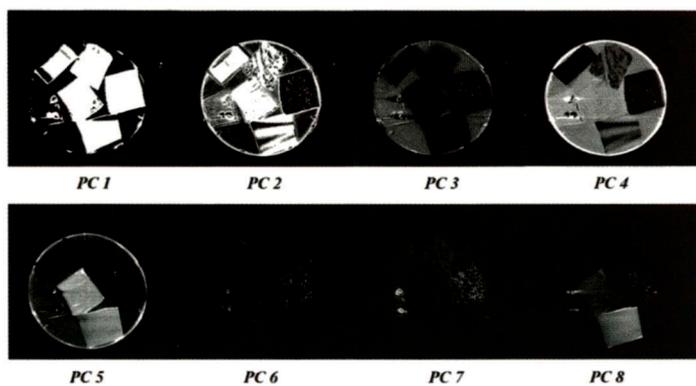


Figura 9: Visualización de las ocho primeras PCs en escala de grises de las imágenes.

También se observa que las componentes PC2, PC3, PC4 y PC5, contienen ruido en la parte correspondiente al plato Petri, y disperso en toda la imagen, el cual se visualiza como puntos blancos. Una diminuta región de píxeles de ruido se observa en la parte derecha fuera del plato Petri de la componente PC1. Por lo tanto, solo se utilizó la componente PC1 para el análisis, y sobre las cual se aplicó un filtro no lineal para remover los píxeles de ruido, previo a la aplicación de la máscara de pseudo color que permitió distinguir los objetos en cada escena. Las máscaras de pseudo color aplicadas a PC1, permitieron la identificación de las clases presentes en la escena, las cuales estuvieron asociadas a un espectro promedio con el mismo color correspondiente. El resultado se muestra en la figura 10.

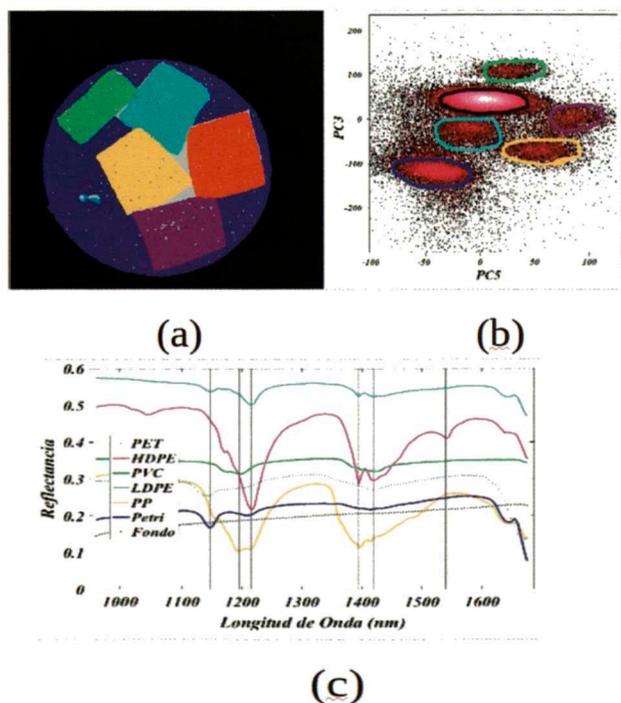


Figura 10: (a) Componentes en la imagen de PC1 en pseudocolor. (b) Correlaciones PC5 vs PC3 donde se muestra la distribución espacial de los píxeles. (c) Espectros promedio asociado a cada color.

Para la cuantificación de cada material se utilizó la clasi-

ficación de PC1 en la figura 10, con cuyo histograma de frecuencias de los niveles de color normalizados, se obtuvo la cantidad de píxeles de cada clase, los cuales se muestran en la tabla 3, y a partir de estos se obtuvo la abundancia superficial porcentual de cada clase en la escena (PAS).

Tabla 3: Cantidad de píxeles de cada material clasificados por PCA en la imagen con plásticos.

Clase	Color	Píxeles	PAS(%)
PET	Celeste*	441	0.46
HDPE	Lila	4113	4.28
PVC	Verde	2649	2.76
LDPE	Celeste	4130	4.30
PP	Amarillo	4313	4.49
PS	Rojo	4781	4.98
Fondo Petri	-	13143	78.72
Fondo Negro	-	55930	58.26
Sin clasificar	Gris	6500	6.77
Total	-	96000	100.00

3.1.2 Spectral Angle Mapper (SAM)

SAM es un modelo de clasificación supervisada y para aplicarlo se establecieron espectros de referencia a partir de regiones de interés (ROIs) específicas. Estas regiones fueron establecidas en cada una de las imágenes de los plásticos puros, cuyos espectros fueron verificados con los espectros de referencia de la librería espectral. Los espectros de referencia utilizados, en el contexto de clasificación supervisada, son considerados datos de entrenamiento, es decir, se entrena al algoritmo SAM con los espectros de referencia (llegando a un reconocimiento de píxeles) para luego compararlos con los píxeles de prueba, de las imágenes con los plásticos y mediante un ángulo umbral t , el ángulo máximo entre los espectros de referencia y los espectros de prueba.

La figura 11 muestra las regiones de interés clasificadas con SAM de la imagen con plásticos. En esta se observa que todos los plásticos han sido clasificados a excepción del PET, pues en esta región solo se observa una pequeña cantidad de píxeles amarillos, los cuales se originaron por el alto nivel de brillo en la región. Los demás píxeles fueron influenciados por el fondo del plato Petri, demostrándose así que las características del PET dependen de su forma y muy en particular de sus propiedades de transparencia.

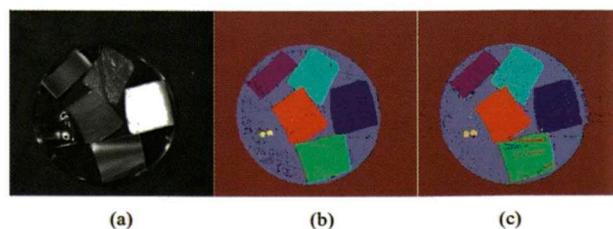


Figura 11: Clasificación SAM de la imagen con plastics, (a) imagen de referencia, banda 120 (b) imagen clasificada con parámetros normales, (c) imagen clasificada con un aumento del ángulo umbral $\Delta t = 0.02$ rad.

3.1.3 Support Vector Machine (SVM)

La gran variedad de funciones Kernel existentes pueden generar diversos resultados, algunos con mayor precisión que otros, que se reflejan en la cantidad de píxeles clasificados en cada clase. Así, para la clasificación de todas las muestras de este estudio, se utilizó un Kernel lineal. Con SVM se obtuvo mejores resultados, pues este logró diferenciar los tipos de plásticos, y esto fue gracias a la elección adecuada de los vectores de soporte en la fase de entrenamiento del algoritmo. En la figura 12, se muestra la casi perfecta identificación de todas las clases de plástico, a excepción del PET que por su transparencia fue influenciado por el plato Petri y no se identificó. Por otro lado, la presencia de ruido sobre algunas clases fue casi nulo, lo cual hizo posible la identificación y cuantificación casi perfecta de cada material.

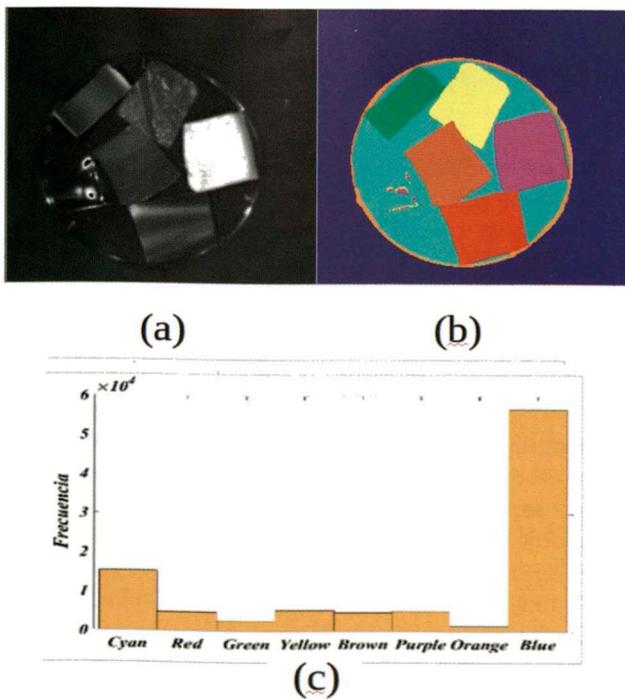


Figura 12: Clasificación de plásticos mediante el modelo SVM. (a) Imagen de referencia en escala de grises usando la Banda 60. (b) Plásticos clasificados por SVM. (c) Histograma de frecuencias de cada color.

A partir del histograma de frecuencias mostrado en la figura 12(c) se determinó la abundancia superficial de cada material presente en la imagen, los cuales se muestran en la tabla 4. Se precisa que en esta tabla, la ausencia de algunos valores se debe a que en la imagen correspondiente no se encontró esa clase. Además se verifica que en cada muestra se completa el total de píxeles de la imagen, el cual es 96000.

Tabla 4: Abundancia superficial de cada material clasificado por SVM en la imagen con solo plásticos.

Clase	Color	Píxeles	PAS(%)
HDPE	Rojo	4821	5.021
PVC	Verde	2659	2.76
LDPE	Amarillo	5397	5.62
PP	Marrón	4858	5.06
PS	Magenta	5147	5.36
Filo Petri	Anaranjado	1338	1.39
Fondo Petri	Celeste	15187	15.81
Fondo	Azul	56593	58.95
Total	-	96000	100.00

3.1.4 K-Means Clustering

Se aplicó el algoritmo K-Means considerando solo las cinco primeras componentes principales, esto debido a que luego de la quinta PC cada raster estuvo compuesto principalmente por píxeles de ruido. Sin embargo los resultados mostrados solo son de la primera componente las componentes PC2, PC3, PC4 y PC5 no lograron una clasificación trascendental, más bien, se resaltó la variación de la cantidad de clusters.

Debido a que, a priori se conoce la cantidad de materiales que hay en la imagen, se escogió ocho clusters, a fin de que todos los tipos de plásticos (PET, HDPE, PVC, LDPE, PP y PS) más la cartulina negra de fondo y el plato Petri sean clasificados. Así, en la figura 13 se muestra la componente PC1 clasificada por K-Means con ocho clusters, donde se observa la clara identificación de la cartulina de fondo (verde) y el filo del plato Petri (lila), sin embargo estos píxeles no están clasificados completamente (la región completa del filo) y la parte interna del plato Petri se clasificó como si se tratase de la cartulina de fondo, además ya dentro del plato Petri los plásticos están clasificados con más de dos clases en un mismo material, incluso en ciertas regiones como el PET, hay acumulación de píxeles de ruido. Todo esto imposibilita la identificación de cada tipo de plástico.

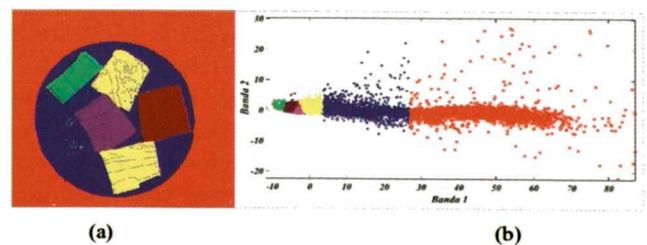


Figura 13: Clasificación K-Means de la componente PC1 de la imagen All plastics; (a) es la imagen clasificadas con seis clusters y (b) es la distribución espaciales de los clusters en un sistema bidimensional.

En la figura 13(b), se ilustra la distribución tridimensional de los clusters donde se observa la concentración

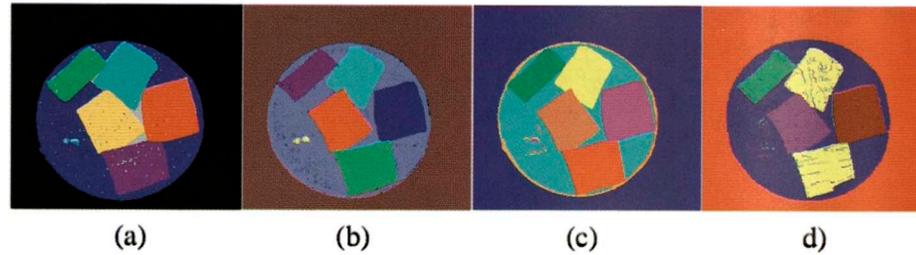


Figura 14: Comparación de los modelos (a) PCA, (b) SAM, (c) SVM y (d) K- Means en la clasificación de la imagen solo con plásticos.

de píxeles alrededor de los centroides bien definidos de las clases más relevantes, siendo una de ellas la clase verde, perteneciente a la cartulina de fondo. Los demás clusters se observan con dificultad, incluso algunas no logran visualizarse debido a su reducida cantidad. En líneas generales, la elección de ocho clusters no es la más idónea ya que hay una gran distorsión entorno a la superposición de clases.

Para realizar la cuantificación de los materiales en la escena, se determinó la cantidad de píxeles de cada uno de los componentes a partir del histograma de frecuencias de la imagen clasificada en la figura 13 (a), además de la abundancia superficial porcentual. Los resultados se muestran en la tabla 5.

Tabla 5: Cuantificación de la abundancia superficial porcentual de cada material clasificado por K-Means en la componente PC1 de la imagen solo con plásticos.

Clase	Color	Píxeles	PAS(%)
PVC	Verde	2315	2.41
LDPE	Amarillo	8124	8.46
PP	Lila	3507	3.65
PS	Guinda	4274	4.45
Petri	Azul	22540	23.48
Fondo	Rojo	55240	57.54
Total	-	96000	100.00

En la figura 14 se muestran las cuatro imágenes con solo plásticos con el fin de compararlas. Se observa que las clasificaciones supervisadas son las que mejor identifican a los plásticos siendo SAM y SVM los que mejor clasificaron los tipos de plásticos e incluso las fronteras del plato Petri en el caso de SVM. A pesar que PCA y K-Means no lograron clasificar con claridad todas las clases (filo Petri y diferenciar los polietilenos), PCA permite identificar los elementos presentes en las escenas. Consecuencia directa que recae sobre K-Means, ya que este se aplicó sobre las componentes principales que contienen más información.

3.2 Plásticos PVC y PP con vegetación y madera

Con el fin de verificar las diferencias entre las características de los plásticos PVC y PP al compararlos con madera y vegetación, se generó una muestra con estos

componentes. En el análisis PCA de esta muestra, lo primero que se realizó fue evaluar la variabilidad de las primeras componentes considerando su proporción de varianza, y desviación estándar, cuyos valores numéricos se muestran en la tabla 6.

Tabla 6: Parámetros principales de las PCs de la imagen de plásticos con otros materiales.

PC	VR	VSR
PC1	0.9338	93.38
PC2	0.0331	96.62
PC3	0.0126	97.89
PC4	0.0119	99.08
PC5	0.00182	99.26

A partir de los datos obtenidos en la tabla 4.38, se observa que las cinco primeras PCs contienen el 99.26% de toda la información, por lo que se puede reducir la dimensión a estas cinco PCs.

3.2.1 Spectral angle Mapper

La figura 15 muestra la clasificación de los elementos de la imagen de plásticos con otros materiales para diferentes ángulos umbral. Se observa que para $t = 0.06$ se comenzaron a definir los materiales sin embargo las fronteras de separación aún no quedaba bien definidas y se observa una gran cantidad de píxeles sin clasificar. En la misma figura, para $t = 0.08$ los plásticos comenzaron a notarse más (clases roja y azul), también el fondo marrón se definió completamente. Para un umbral $t = 0.12$, la clasificación obtenida fue óptima, ya que los plásticos se diferenciaron completamente de los demás materiales, y las fronteras de separación no están superpuestas. Ante un mayor aumento del ángulo umbral, se comenzó a evidenciar la superposición de píxeles y distorsión de clases, como se observa en 15(d), donde la esquina saliente del plato Petri adoptó el color de la clase PVC.

Una vez diferenciados los diferentes elementos presentes en la imagen se registraron los espectros promedio de los materiales clasificados. Los resultados se muestran en la figura 16. Como se puede ver en esta figura, los espectros obtenidos muestran las características esperadas de los elementos presentes.

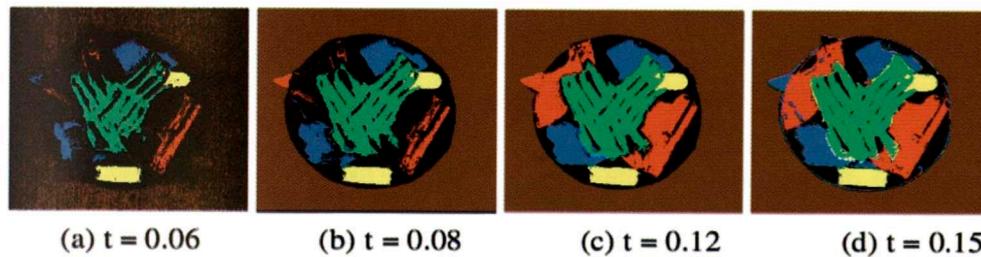


Figura 15: Clasificación SAM de la imagen de plásticos mezclados con madera y vegetación.

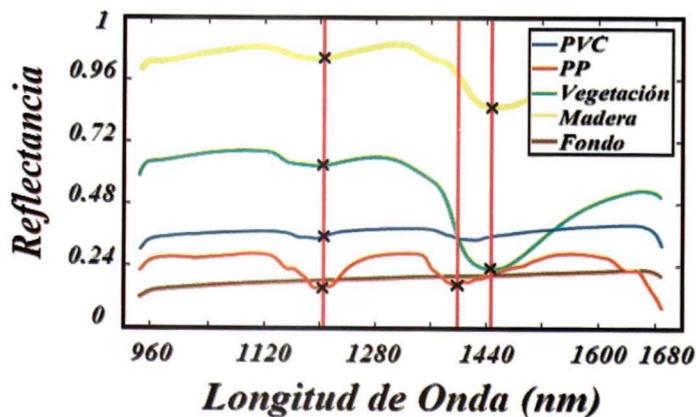


Figura 16: Espectros promedio característicos de los materiales clasificados por SAM en la imagen de plásticos mezclados con madera y vegetación.

3.2.2 Support Vector Machine

La figura 17, muestra la clasificación de plásticos (clase roja), vegetación y madera (verde y amarillo respectivamente) a partir de las imágenes de esta mezcla. En la figura se observa que incluso hubo una marcada diferencia entre los tipos de plásticos PVC y PP. Cabe mencionar que en esta muestra se incorporó un tipo de plástico no identificado, por la ausencia de su símbolo de reciclaje, sin embargo, con este modelo se clasificó con la clase PP, lo que indica que es un material familia del polipropileno.

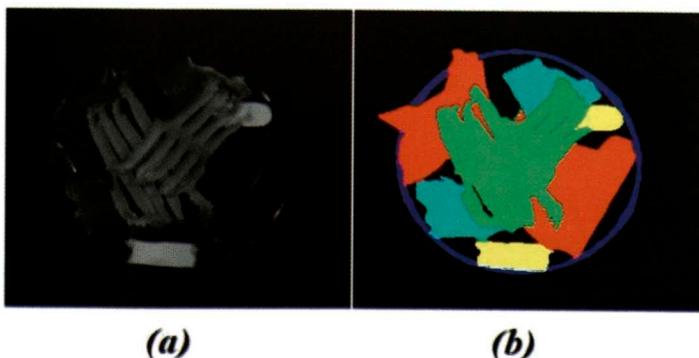


Figura 17: Clasificación SVM de la imagen de plásticos mezclados con madera y vegetación. (a) Banda 80 en escala de grises e, (b) Imagen clasificada.

3.2.3 K-Means Clustering

El análisis de la imagen de la mezcla de plásticos con vegetación y madera se inició usando seis clusters, buscando la clasificación incluso del plato Petri. Sin embargo, en todas las pruebas no se logró identificar los tipos de plásticos, pues estos fueron clasificados con la misma clase. Con cuatro clusters, se pudo evitar el ruido dispersado sobre la cartulina de fondo, y se clasificó con marcadas diferencias los cuatro materiales, plásticos, madera, vegetación y cartulina de fondo, como se muestra en la figura 18(b). Las clases obtenidas difieren muy bien como puede observarse con los colores obtenidos en la imagen RGB de la figura 18(a), generada por las componentes PC1, PC2 y PC3.

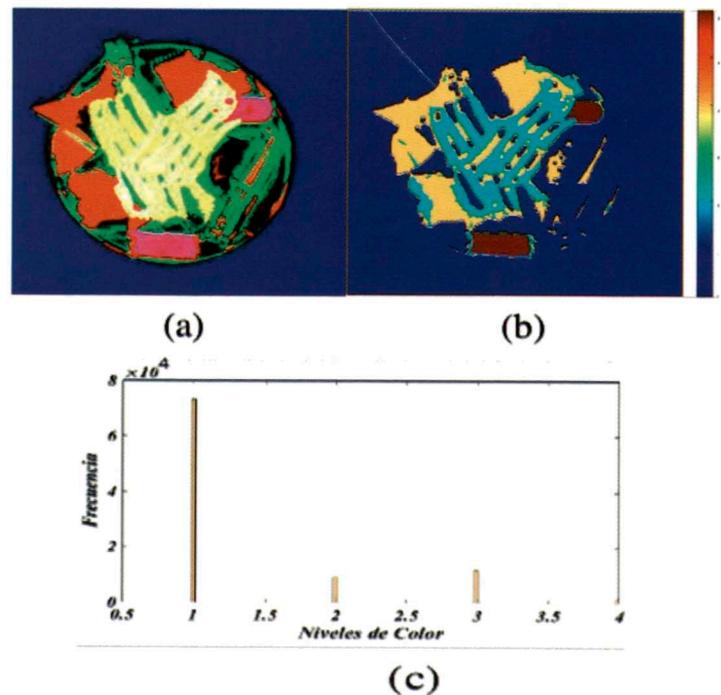


Figura 18: Clasificación K-Means de PP, PVC, madera y vegetación en la imagen con estos elementos. (a) Imagen RGB generada por PC1, PC2 y PC3, (b) imagen clasificada y (c) histograma de frecuencias de la imagen clasificada.

4 Conclusiones

Con muestras simples, basura doméstica y residuos industriales, y con una configuración adecuada de

laboratorio, métodos de clasificación PCA, hemos demostrado que el método de las imágenes hiperespectrales es aplicable para clasificar plásticos, incluso en presencia de vegetación y madera.

Hemos ampliado la cantidad de muestras, simulando el ambiente en el que los plásticos se encuentran, así hemos

logrado mezclarlos con agua de mar, petróleo, tipos de tierras. Por los resultados obtenidos y la aplicabilidad de las HSI, este es un método completamente viable para detectar en primera instancia, y limpiar los plásticos del océano y ambiente en general, tan pronto como sea posible.

1. D.W. Sun, *Hyperspectral Imaging for food quality analysis and control*. Elsevier Inc., Ch. 4, *Hyperspectral Image Processing*, 2010.
2. W. Castro, "Aplicación de la tecnología de imágenes hiperespectrales al control de calidad de productos agroalimentarios de la región de amazonas (Perú)", tesis doctoral, Univ. Pol. de Valencia, Valencia, España, 2015.
3. M. Borengasser, W. S. Hungate and R. Watkins, *Hyperspectral Remote Sensing: Principles and applications*, 1st. edition. Indiana, U.S: Taylor & Francis Group, 2008.
4. T. Maes, R. Jessop, N. Wellner, K. Haupt and A. G. Mayes, "A rapid screening approach to detect and quantify microplastics based on fluorescent tagging with Nile Red", *Scientific Reports*, vol. 7, no. 44501, 2017. DOI: 10.1038/srep44501
5. N. Falco, "Advanced Spectral and Spatial Techniques for Hyperspectral Image Analysis and Classification", Ph. D. dissertation, Univ. of Iceland, Reykjavik, Iceland, 2015.
6. Y. Tarabalka, "Classification of hyperspectral data using spectral -spatial approaches", doctoral thesis, Univ. of Iceland and Grenoble Institute of Technology, Grenoble, France, 2011.
7. Resonon Inc., *SpectrononPro manual release 5.0*, Ch. 4, *Basic Data Acquisition*, 2016.
8. Ch. I. Chang, *Hyperspectral data processing: Algorithm Design and Analysis*. University of Maryland, Maryland, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2013.
9. P. Bajorski, *Statistics for Imaging, Optics, and Photonics*, Hoboken, New Jersey, U. S.: John Wiley & Sons, Inc., 2011.
10. International Association of plastics distribution, disponible en <https://www.iapd.org/>.
11. A. Mertes, (2019). *Types of Plastic and Their Recycle Codes*. [Online]. Available: <http://bit.ly/2lZ0YkX>
12. R. F. Kokaly et al., "USGS Spectral Library Version 7", U.S. Geological Survey, Reston, Virginia, Rep. Data Series 1035, 61 p., 2017.
13. "Base Spectra (splib07a)", U. S. Geological Survey, [Online], Available: <https://on.doi.gov/2m1CPdm>

CONTENIDO

- **El Movimiento Browniano con Reflexión como un Problema de Martingala.** 1 - 5
Herberth Paucar Romero, Gonzalo Panizo García
- **Revisión del método Híbrido de Alto Orden para un problema de difusión variable** 6 - 14
Rommel Bustinza, Jonathan Munguía La Cotera
- **Densidad de puntos no transitivos asociados a semiflujos** 15 - 18
Andrés Vicente Chulluncuy Centeno
- **Comparación del rendimiento de clústeres de computadoras construidos con fines académicos en la UNI** 19 - 22
César Martín Cruz Salazar y Yuri Nuñez Medrano
- **Nanotermómetro por espectroscopia resuelta en el tiempo con longitudes de onda de emisión en 543, 655 y 1 550 nm** 23 - 29
David W. Puma, Rubén Puga, José Manuel Hernández, Héctor Loro
- **Estudio comparativo a partir de cálculos de primeros principios de la estructura electrónica del BiFeO_3 y YCrO_3** 30 - 35
Shigueru Nagata, Hector Loro
- **Fitting of stellar parameters of Cataclysmic Variable Stars** 36 - 39
William Cori & Julio Tello
- **Análisis e identificación de suelos a partir de imágenes hiperespectrales usando el PPI, PCA y K-medias** 40 - 49
Dante Castillo Cc., Héctor Loro
- **Identificación de mezclas de suelos con derivados de petróleo a partir de imágenes hiperespectrales** 50 - 56
Ricardo Flores, Héctor Loro
- **Análisis y procesamiento de imágenes hiperespectrales para identificar contaminantes plásticos** 57 - 66
Walter Sullivan Felipe Gaspar, Héctor Loro