

Título: DISSENY I APLICACIÓN D'EINES QUIMIOMÈTRIQVES PER A L'ANÀLISI D'IMATGES HIPERESPECTRALS

Nombre: Piqueras Solsona, Sara

Universidad: Universidad de Barcelona

Departamento: C- QUIMICA ANALITICA

Fecha de lectura: 09/11/2015

Programa de doctorado: Química Analítica del Medio Ambiente y la Polución

Dirección:

- > **Director:** ROMÀ TAULER FERRÉ
- > **Director:** ANNA MARIA DE JUAN CAPDEVILA

Tribunal:

- > **presidente:** MIQUEL ESTEBAN CORTADA
- > **secretario:** Ricard Boqué Martí
- > **vocal:** Cyril Ruckebusch

Descriptor:

- > QUIMICA ANALITICA
- > ANALISIS MULTIVARIANTE
- > ESPECTROSCOPIA RAMAN
- > ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJOS

El fichero de tesis no ha sido incorporado al sistema.

Resumen: Les imatges hiperespectrals són una mesura instrumental singular i de gran interès, ja que proporcionen informació química (espectral) i de distribució espacial (imatge) dels constituents de les mostres. Aquest fet les fa especialment interessants en aplicacions de la indústria farmacèutica, dels camps mediambiental i biomèdic i en la recerca i identificació de materials.

L'objectiu d'aquesta tesi ha estat el coneixement de la naturalesa de la mesura de les imatges hiperespectrals amb la finalitat de dissenyar o adaptar eines d'anàlisi de dades més específiques i de proporcionar protocols d'actuació per a la interpretació d'aquest tipus de mesura en funció del tipus de tècnica espectroscòpica utilitzada i del problema químic d'interès.

De manera específica, aquest treball s'ha centrat en l'estudi del potencial del mètode de resolució multivariant de corbes per mínims quadrats alternats, MCR-ALS, per a l'anàlisi d'imatges hiperespectrals, que proporciona mapes de distribució i espectres purs dels constituents de les imatges a partir únicament del coneixement de la mesura original. S'ha treballat amb l'anàlisi d'imatges individuals i l'anàlisi conjunta d'imatges obtingudes amb la mateixa tècnica o amb diferents plataformes espectroscòpiques.

A partir de l'estudi d'imatges Raman i IR associades a problemes químics de diferents tipologies, s'han proposat protocols d'anàlisi que inclouen el preprocessat de les dades originals, l'obtenció dels mapes de

distribució i espectres purs dels constituents de la imatge i el postprocessat dels mapes i espectres resolt per a l'obtenció d'informació addicional. L'ús dels mapes i espectres resolt proporciona informació molt diversa, com és ara la identificació, la quantificació i la caracterització de l'heterogeneïtat dels constituents de la imatge o la interpretació global i local d'un procés. Els mapes resolt han estat també una informació de partida excel·lent en altres tipus d'anàlisi, com la segmentació de la imatge o en procediments de superresolució, orientats a millorar la resolució espacial de les imatges instrumentals.

La combinació de l'anàlisi multiconjunt de resolució i segmentació s'ha revelat de gran utilitat per a distingir poblacions de mostres de teixits biològics amb diferents estats patològics. Per últim, s'ha proposat un procediment per a la fusió i anàlisi d'imatges adquirides amb diferents tècniques espectroscòpiques i de diferent resolució espacial mitjançant una nova variant del mètode MCR-ALS per a estructures multiconjunt incompletes, que permet aprofitar la informació complementària de les tècniques acoblades i preservar la màxima resolució espacial.