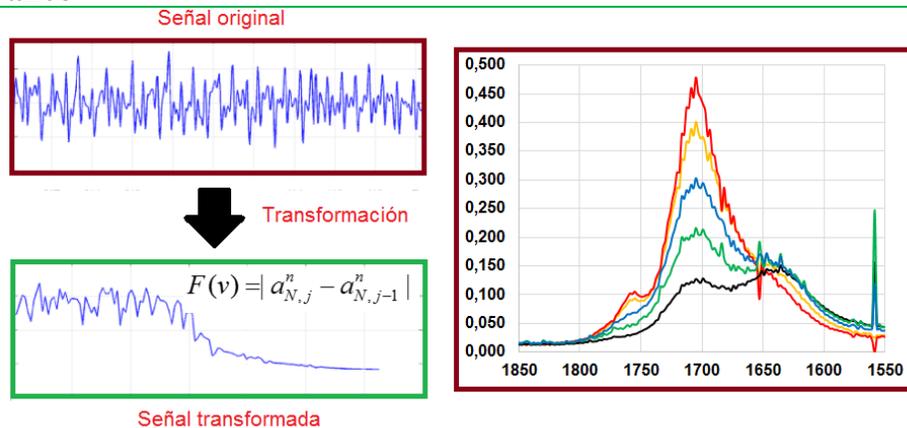


Víctor J. Palencia^{1*}, Jina M. Martínez¹

¹ Mindtech Research Group (Mindtech-RG), Mindtech S.A.S., Cali - Colombia

Corresponding author: vjpalencia1@gmail.com

Resumen gráfico



Análisis de la transformación de datos espectrales mediante funciones matemáticas simples: Espectro de infrarrojo por transformada de Fourier

Resumen

El espectro de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR) puede considerarse un conjunto de datos con información implícita procedente de la generación de señales resultantes de vibraciones a nivel molecular por la interacción de la materia con radiación infrarroja. El objetivo de este trabajo fue estudiar el efecto de los cambios espectrales como resultado de transformaciones matemáticas simples de los datos de absorbancia (a) en un espectro de FTIR, con el fin de obtener una o varias aproximaciones algorítmicas que permitan incrementar el aprovechamiento de la información contenida en el espectro de FTIR. Se concluyó que el uso de transformaciones secuenciales del espectro produce la obtención de espectros modificados con información inicialmente no disponible, y que puede ser de utilidad para comparaciones cualitativas, tras la adecuada estandarización del procedimiento de obtención del mismo. Una secuencia con buenos resultados fue: (i) transformar los valores punto a punto mediante el cálculo del inverso, (ii) calcular el espectro diferencial del espectro invertido, (iii) calcular el valor absoluto de cada punto,

Palabras claves

Espectroscopia de infrarrojo
Transformada de Fourier
Transformación de datos
Absorbancia

(iv) hallar la raíz cuadrada, (v) calcular el inverso y (vi) multiplicar por los valores de absorbancia u otro factor que mantenga la proporción relativa de los datos originales.

Spectral data transformation analysis by simple mathematical functions: Fourier transform infrared spectrum

Abstract

The Fourier transform infrared spectrum (FTIR) can be considered a data set with implicit information from the generation of signals resulting from vibrations at the molecular level by the interaction of matter with infrared radiation. The objective of this work was to study the effect of spectral changes as a result of simple mathematical transformations of the absorbance data in a FTIR spectrum, in order to obtain one or several algorithmic approximations that allow to increase the use of the information contained in the FTIR spectrum. It was concluded that the use of sequential transformations of the spectrum produces the obtaining of modified spectra with initially unavailable information, and that it can be useful for qualitative comparisons, after the adequate standardization of the obtaining procedure. A sequence with good results was: (i) transform the point-to-point values by calculating the inverse, (ii) calculate the differential spectrum of the inverted spectrum, (iii) calculate the absolute value of each point, (iv) find the root square, (v) calculate the inverse and (vi) multiply by the absorbance values or another factor that maintains the relative proportion of the original data.

Keywords

Infrared spectroscopy
Fourier transform
Data transformation
Absorbance

Received: 08-09-2017

Accepted: 02-10-2017

Publishing date: 15 - Noviembre - 2017

Revision Code: 20160908-MSPL [Pag. 44-55]

Corresponding author:

vjpalencia@gmail.com



Análisis de la transformación de datos espectrales mediante funciones matemáticas simples: Espectro de infrarrojo por transformada de Fourier

Víctor J. Palencia^{1*}, Jina M. Martínez¹

¹ *Mindtech Research Group (Mindtech-RG), Mindtech S.A.S., Cali - Colombia*

Corresponding author: vjpalencia1@gmail.com

Resumen

El espectro de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR) puede considerarse un conjunto de datos con información implícita procedente de la generación de señales resultantes de vibraciones a nivel molecular por la interacción de la materia con radiación infrarroja. El objetivo de este trabajo fue estudiar el efecto de los cambios espectrales como resultado de transformaciones matemáticas simples de los datos de absorbancia (a) en un espectro de FTIR, con el fin de obtener una o varias aproximaciones algorítmicas que permitan incrementar el aprovechamiento de la información contenida en el espectro de FTIR. Se concluyó que el uso de transformaciones secuenciales del espectro produce la obtención de espectros modificados con información inicialmente no disponible, y que puede ser de utilidad para comparaciones cualitativas, tras la adecuada estandarización del procedimiento de obtención del mismo. Una secuencia con buenos resultados fue: (i) transformar los valores punto a punto mediante el cálculo del inverso, (ii) calcular el espectro diferencial del espectro invertido, (iii) calcular el valor absoluto de cada punto, (iv) hallar la raíz cuadrada, (v) calcular el inverso y (vi) multiplicar por los valores de absorbancia u otro factor que mantenga la proporción relativa de los datos originales.

Palabras Claves

Espectroscopia de infrarrojo
Transformada de Fourier
Transformación de datos
Absorbancia

1. Introducción

El espectro de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR) es una transformación matemática de señales cuyo dominio describe la frecuencia de dichas señales [1]. A diferencia de otras transformaciones típicamente usadas en la transformación de datos, por ejemplo, las denominadas “*wavelets*”, los espectros de FTIR no consideran la evolución temporal de las señales [1-5]. El espectro de FTIR puede considerarse como una función espectral F en el dominio de la frecuencia (f), longitud de onda (λ) o, como es comúnmente usado en química, número de onda (ν). El rango de dicha función viene dado

por valores de absorbancia que dependerán, además de la energía vibracional, de la concentración y características instrumentales propias del procedimiento experimental. $F(\nu_j)$ para un espectro FTIR, es una función continua en su representación y de gran complejidad, la cual no puede ser planteada en forma analítica para sistemas simples. Desde otro punto de vista, $F(\nu_j)$ puede considerarse como una función discontinua cuyos valores en el dominio estarán separados por la resolución del instrumento de medida y cuyo rango no puede ser, en principio, predicho por una ecuación matemática simple.

Por otro lado, el conjunto de valores de absorbancia se ve afectado, en mayor o menor medida, por

contaminación resultante del ruido experimental, solapamiento de señales u ocultamiento de las mismas por ensanchamiento de bandas adyacentes [6, 7].

En el procesamiento de señales digitales se emplean transformaciones matemáticas de relativamente alta complejidad para extraer información de un conjunto de datos resultante de alguna respuesta, en función de algún parámetro de interés [8]. La técnica de transformada de Fourier en sí misma es una técnica de procesamiento de señales digitales. En el caso de señales de origen espectral, la transformada de Fourier es el método más popular y generalizado, siendo un caso típico la FTIR.

En sentido estricto, la FTIR puede ser considerada una señal a partir de la cual se puede extraer información mediante la implementación de transformaciones matemáticas. En este sentido, el solapamiento de señales, la discriminación entre una señal “verdadera” y el ruido, y la diferenciación espectral pueden ser mejoradas mediante el reconocimiento de alternativas de transformación de datos.

Tabla 1. Familia de funciones de transformación (Ec. denota la familia de funciones con una estructura semejante, a_N es la absorbancia normalizada respecto a la absorbancia máxima del conjunto de datos y n es el parámetro de especificidad que define la forma explícita de uso de cada función)

Ec.	Función	Parámetro n
1	$F(v) = a_N^n$	$n = 2, 3, 4$ y 5
2	$F(v) = \sqrt[n]{a_N}$	$n = 2, 3, 4$ y 5
3	$F(v) = \frac{1}{a_N^n}$	$n = 1, 2, 3$ y 4
4	$F(v) = \cos^n(a_N)$	$n = 1, 2, 3$ y 4
5	$F(v) = \text{sen}^n(a_N)$	$n = 1, 2, 3$ y 4
6	$F(v) = \exp(a_N^n)$	$n = -1, -2, 1$ y 2
7	$F(v) = \frac{a_N^n}{1 + a_N^n}$	$n = 1, 2, 3$
8	$F(v) = \frac{\exp(a_N^n)}{1 + \exp(a_N^n)}$	$n = -1, -2, 1$ y 2
9	$F(v) = a_{N,j}^n - a_{N,j-1}^n$	$n = 1$ y 2
10	$F(v) = a_{N,j}^n - a_{N,j-1}^n $	$n = -1$ y -2

Para lo anterior, un primer paso para poder establecer los cambios es la evaluación del comportamiento de las características espectrales frente a transformaciones matemáticas simples. Aunque estas pueden ser racionalizadas para un conjunto de datos reducido, y tendencias definidas, cuando los datos muestran un comportamiento relativamente complejo la mejor estrategia consiste de tres pasos: (i) aplicar la transformación de datos punto a punto, (ii) analizar el efecto de la transformación contra características de interés y (iii) racionalizar la transformación o construir transformaciones más complejas mediante la combinación de transformaciones simples.

Con el fin de definir una o varias aproximaciones algorítmicas que permitan incrementar el aprovechamiento de la información contenida en el espectro de FTIR, el objetivo de este trabajo fue estudiar el efecto de los cambios espectrales como resultado de transformaciones matemáticas simples de los datos de absorbancia (a).

2. Sección experimental

2.1 Obtención de los espectros de infrarrojo

Como sustancia de prueba se usó ácido acético glacial (Aldrich). Los espectros fueron obtenidos usando un espectrofotómetro de infrarrojo con transformada de Fourier mediante la técnica de reflectancia total atenuada (FTIR-ATR), siendo colectados en la región del infrarrojo medio, entre 500 y 4000 cm^{-1} .

2.2 Funciones de transformación y análisis de datos

Las funciones de transformación seleccionadas se describen en la Tabla 1. En términos generales se emplearon transformaciones simples que permitieran, mediante su combinación, direccionar transformaciones de mayor complejidad.

Las funciones descritas por las ecuaciones 1, 2 y 3 corresponden a expresiones de potencia, ecuaciones 4 y 5 a expresiones trigonométricas, la ecuación 6 a expresiones exponenciales, ecuaciones 7 y 8 a expresiones de mayor complejidad, mientras que las ecuaciones 9 y 10 al análisis de las transformaciones a partir de los cambios a lo largo del espectro.

Debido a que durante la obtención del espectro de ATR se hace un blanco instrumental corres-

pondiente al análisis en ausencia de muestra, pueden obtenerse valores negativos de absorbancia. Para evitar el error que esto genera en alguna de las familias de funciones como, por ejemplo, las funciones descritas por la ecuación 2, los valores de absorbancia se transformaron mediante:

$$a_j = \begin{cases} 0 & \text{si } a_i < 0 \\ a_i & \text{si } a_i \geq 0 \end{cases} \quad (11)$$

donde a_i es el i -ésimo elemento del conjunto de datos de absorbancia de un espectro en particular. Otra alternativa es definir un mínimo, calcular su valor absoluto y posteriormente sumar este valor a todos los valores.

Par la familia de funciones definida por la ecuación 3, los valores de absorbancia se transformaron mediante:

$$a_j = 1 + a_i \quad (12)$$

En todos los casos, la absorbancia normalizada se calculó mediante la expresión

$$a_{N,j} = \frac{a_j}{a_{\max}} \quad (13)$$

Con el objetivo de establecer el efecto de la transformación sobre el ruido (r) presente en los espectros se estableció como medida de la relación señal-ruido (S/R) la siguiente relación:

$$\frac{S}{R} = \frac{a_{N,prom}}{s} = \frac{\frac{1}{M} \sum_{j=1}^j a_{N,j}}{\sqrt{\frac{1}{M-1} \sum_{j=1}^j (a_{N,j} - a_{N,prom})^2}} \quad (14)$$

Donde $a_{N,prom}$ es la absorbancia normalizada promedio, M el número de datos y s la desviación estándar calculadas sobre todos los datos del espectro. Así, si los valores de S/R incrementan, se asociará con un incremento en el promedio de las señales y/o una disminución de la desviación estándar global. En el mismo sentido, una disminución se asociaría con la disminución del promedio y/o un incremento en la desviación estándar global de los datos.

Por otro lado, la desviación estándar promedio entre tres datos consecutivos se utilizó como una medida del error asociado a la sensibilidad (s_3) y que se pone de manifiesto en el espectro por la oscilación de los valores alrededor de un valor medio. Así, s_3 viene dado por:

$$s_3 = \sqrt{\frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 (a_{N,j} - a_{N,prom})^2} \quad (15)$$

3. Resultados y discusión

3.1 Transformaciones 1, 2 y 3

En la Figura 1 se muestran las transformaciones funcionales del espectro de FTIR-ATR correspondientes a las ecuaciones 1, 2 y 3. En primer lugar, en relación a los valores de s_3 para las transformaciones definidas por las ecuaciones 1, 2 y 3, se puede observar que los valores de s_3 es incrementado a medida que n aumenta para las ecuaciones 2 y 3, mostrando el comportamiento diferente en el caso de la ecuación 1.

En la Figura 1A se puede observar que la función correspondiente a la ecuación 1 elimina las señales de menor intensidad. En términos generales, la transformación puede entenderse como un incremento de la señal respecto al máximo valor de absorbancia. Al estar normalizados los datos, los valores menores que la unidad disminuyen a medida que el valor de n aumenta. En la Tabla 2, se puede observar la S/N en función de n . En general, S/N disminuye con el aumento de n y respecto al espectro original; lo anterior sugiere que esta transformación no es conveniente.

En la Figura 1B, se puede observar que la función correspondiente a la ecuación 2 incrementa los valores de absorbancia a medida que n incrementa y a su vez reduce la diferencia respecto al máximo (ver Tabla 1). Para esta transformación, los valores de S/N incrementan a medida que n aumenta. Por otro lado, en la Figura 1C, el espectro se invierte, correspondiendo a un espectro de transmitancia; sin embargo, las diferencias relativas entre las señales de los espectros normalizados no se corresponden con las del espectro original. Los valores de S/N se incrementan significativamente, disminuyéndose a medida que el parámetro de amplificación disminuye a valores menores de 1 (ver ecuación 12).

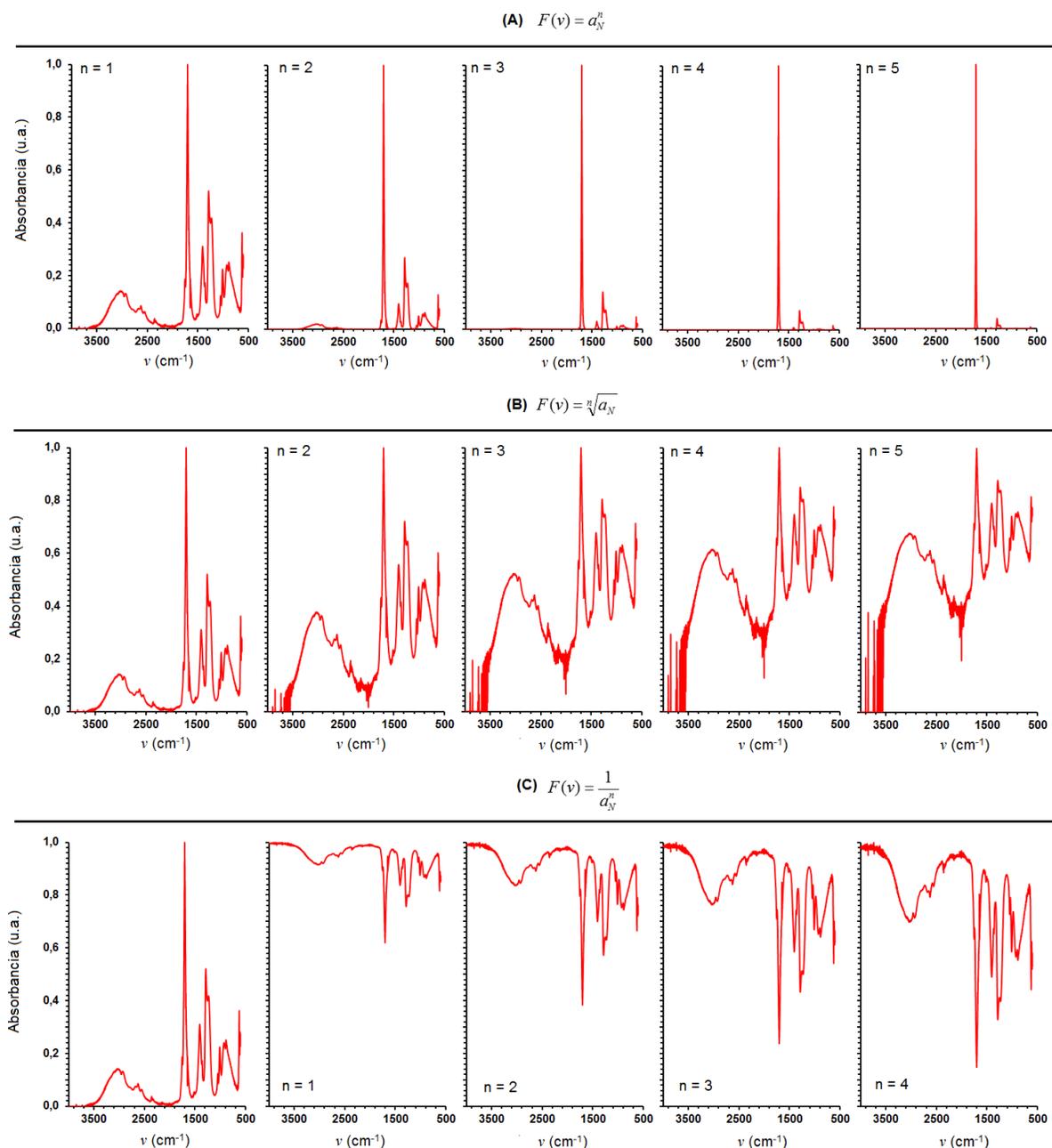


Figura 1. Transformaciones del espectro de FTIR del ácido acético mediante diferentes familias de funciones. (A) ecuación 1, (B) ecuación 2 y (C) ecuación 3 según Tabla 1

3.2 Transformaciones 4, 5 y 6

En la Figura 2 se muestran las transformaciones funcionales del espectro de FTIR-ATR correspondientes a las ecuaciones 4, 5 y 6. En la Figura 2A se puede observar que los espectros son invertidos como resultado de las transformaciones resultantes de aplicar la función coseno, pero, además, el valor máximo se incrementa en sentido

inverso con el incremento en el valor de n . En contraste con la función seno, el valor de normalización se incrementa trayendo como consecuencia la eliminación de bandas. En particular, para $n = 2$, esta función invierte el espectro (ver Figura 2B). Por otro lado, la función exponencial presenta dos comportamientos distintos en función de si n es positivo o negativo. Para valores positivos, se desaparecen las bandas,

mientras que, para valores negativos, el resultado es similar, pero con la inversión del espectro (ver Figura 2C). Para estas ecuaciones ningún cambio significativo fue observado en los valores de s_3 ; sin embargo, en todos los casos se observó un incremento de los valores de S/N.

3.3 Transformaciones 7 y 8

En la Figura 3 se puede observar las transformaciones asociadas con las ecuaciones 7 y 8. En general se puede observar que se desaparecen

bandas y, en particular, para la ecuación 7 con $n = 1$, se incrementa el ruido significativamente. Sólo se muestran las transformaciones más representativas ya que se evidencia que la complejidad puede llevar a redundancia de efectos en comparación con ecuaciones más simples. Para la ecuación 7 se observó una disminución de los valores de S/N desde 0,46 a 0,19 para los diferentes valores de n . Por el contrario, para la ecuación 8, los valores de S/N fueron 228,9, 29,6, 37,7 y 43,5 para $n = 1, 2, -1$ y -2 , respectivamente.

Tabla 2. Relación señal-ruido (S/N) para las transformaciones definidas por las ecuaciones 1, 2 y 3. Para la ecuación 3, se incluyen los valores correspondientes a diferentes valores de amplificación.

Ecuación	Parámetro	Original	TF-1	TF-2	TF-3	TF-4
1	n	-	2	3	4	5
	S/N	0,78	0,31	0,16	0,11	0,09
	s_3	0,004	0,002	0,002	0,001	0,001
2	n	-	2	3	4	5
	S/N	0,78	1,45	1,88	2,16	2,35
	s_3	0,004	0,007	0,009	0,011	0,012
3	n	-	1	2	3	4
	S/N ₁	15,11	17,62	9,38	6,61	5,21
	S/N ₂	7,94	10,13	5,54	3,98	3,18
	S/N ₃	4,36	6,16	3,44	2,51	2,03
	S/N ₄	2,21	3,45	1,96	1,44	1,18
	S/N ₅	1,49	2,34	1,33	0,98	0,81
	s_3	0,004	0,010	0,014	0,015	0,016

Tabla 3. Relación señal-ruido (S/N) para las transformaciones definidas por las ecuaciones 4, 5 y 6.

Ecuación	Parámetro	Original	TF-1	TF-2	TF-3	TF-4
4	n	-	1	2	3	4
	S/N	0,78	29,43	16,89	12,66	10,49
	s_3	0,004	0,001	0,002	0,002	0,003
5	n	-	2	3	4	5
	S/N	0,78	26,19	0,34	0,19	0,13
	s_3	0,004	0,002	0,002	0,002	0,001
6	n	-	-1	-2	1	2
	S/N	0,78	7,02	10,24	10,04	18,11
	s_3	0,004	0,002	0,001	0,003	0,002

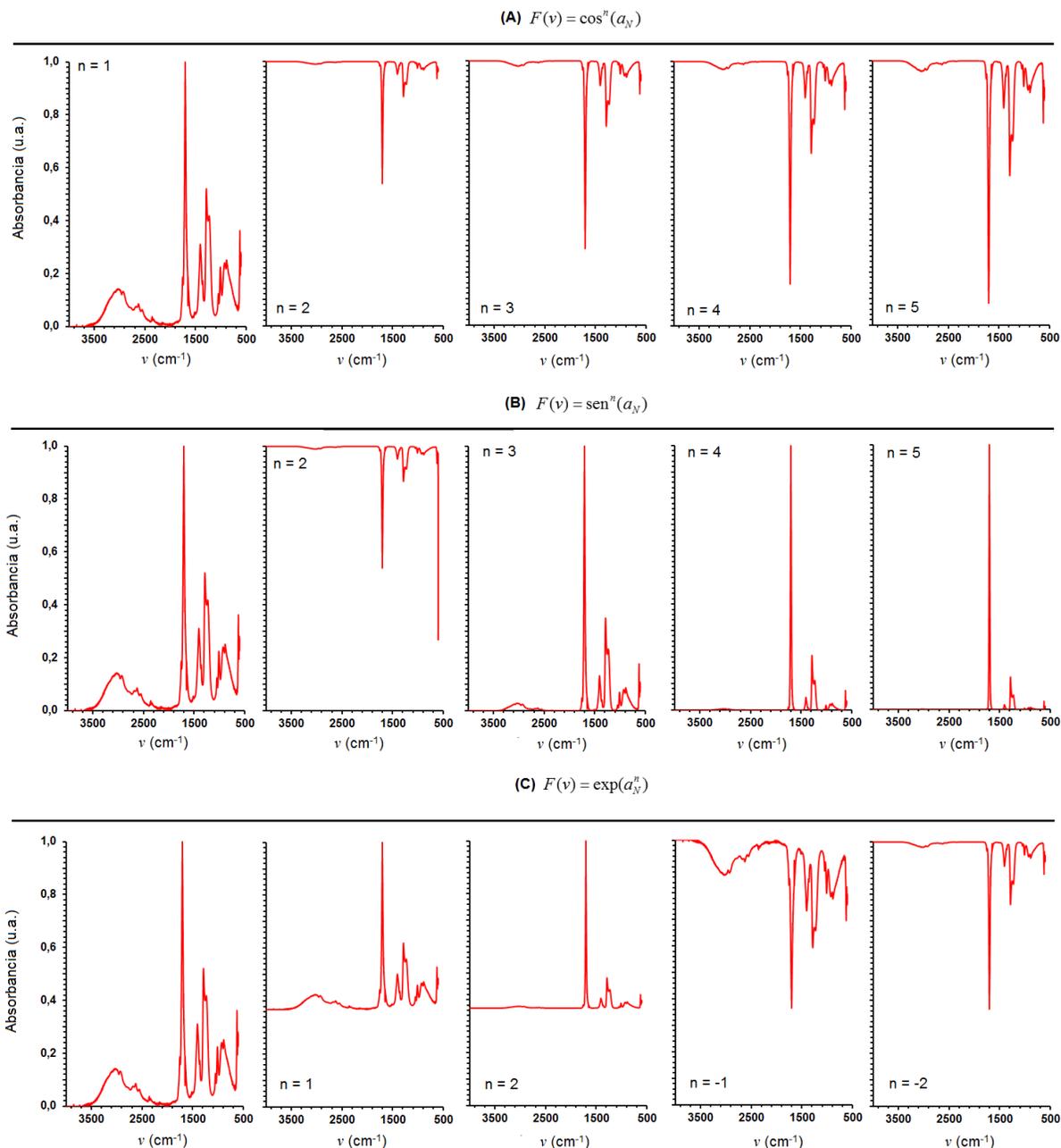


Figura 2. Transformaciones del espectro de FTIR del ácido acético mediante diferentes familias de funciones. (A) ecuación 4, (B) ecuación 5 y (C) ecuación 6 según Tabla 1.

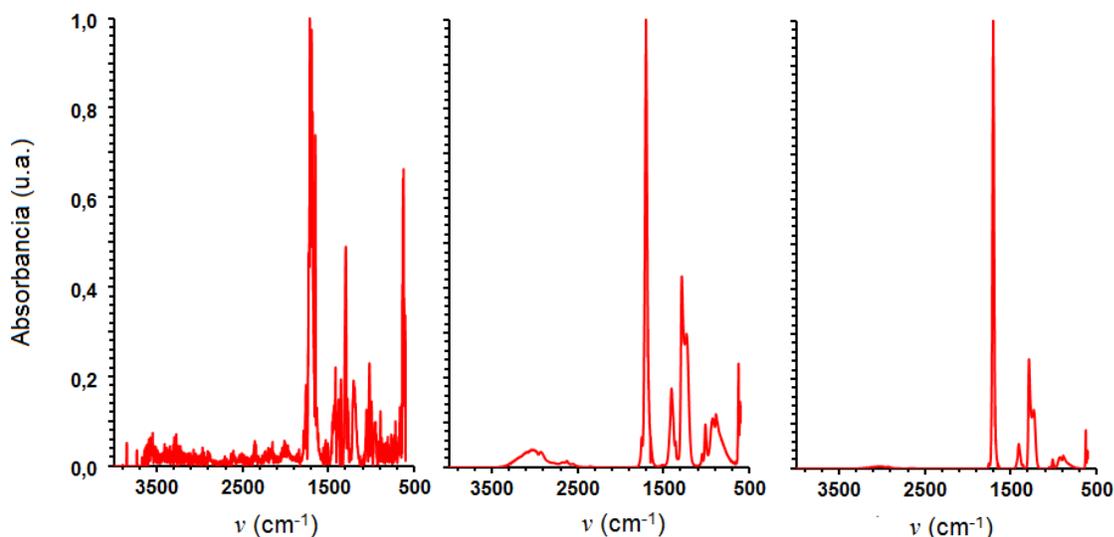
3.4 Transformaciones 9 y 10

En particular, las transformaciones asociadas con las ecuaciones 9 y 10 involucran dos etapas, primero la transformación mediante la aplicación de las ecuaciones 1 y 3, y posteriormente la evaluación del cambio. La importancia de la combinación de estas transformaciones radica en que el cambio contiene la información reflejada inicialmente en el espectro

y es el cálculo fundamental en espectroscopia diferencial (*i.e.*, análisis de los cambios a medida que cambia ν).

En la Figura 4 se muestra el espectro diferencial y su congruencia con las señales del espectro de FTIR original, así como los valores de $n = -2$ y 2 . Se puede observar que la transformación se ve altamente influenciada por la oscilación de los valores alrededor de la señal promedio.

$$(A) F(\nu) = \frac{a_N^n}{1 + a_N^n}$$



$$(B) F(\nu) = \frac{\exp(a_N^n)}{1 + \exp(a_N^n)}$$

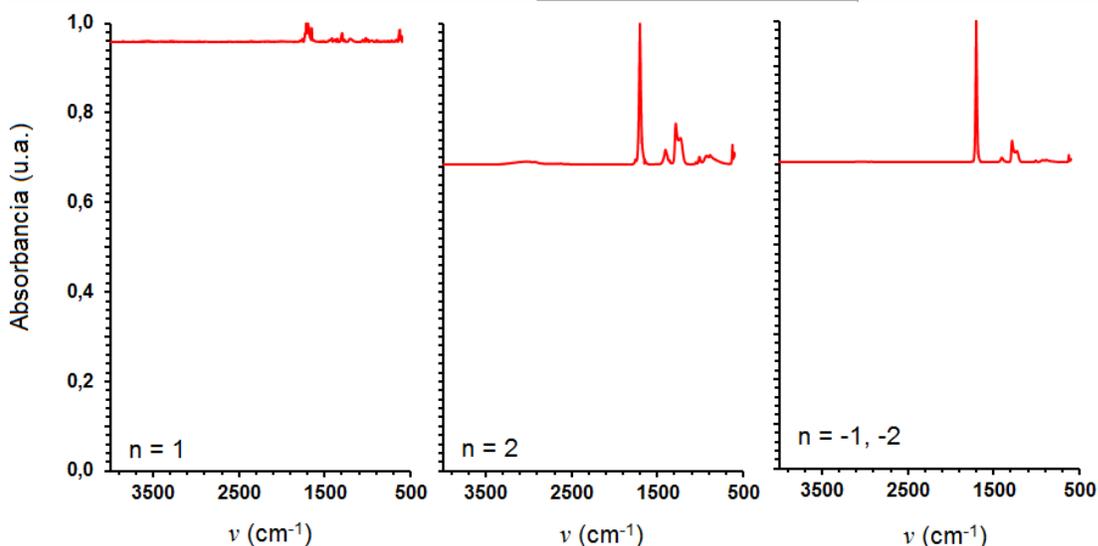


Figura 3. Transformaciones del espectro de FTIR del ácido acético mediante diferentes familias de funciones. (A) ecuación 7 y (B) ecuación 8 según Tabla 1.

También, se puede observar que el incremento en el $|n|$ conlleva a una disminución de la intensidad de las señales con la consecuente pérdida de información (comparar las Figuras 4a y 4b). Estas observaciones permiten inferir dos aspectos importantes: (i) se hace necesario una disminución del valor de s_3 mediante alguna técnica de reducción del ruido con el fin de disminuir el número de

puntos críticos resultantes de la transformación (en la Figura 1A, sub-figura a, se puede ver que entre 2000 y 4000 cm^{-1} a parecen más de 100 puntos críticos resultado de la fluctuación de la señal); el otro aspecto importante es, (ii) la disminución de la intensidad de la señal respecto al espectro de FTIR original trae consigo un aumento de la relación S/R.

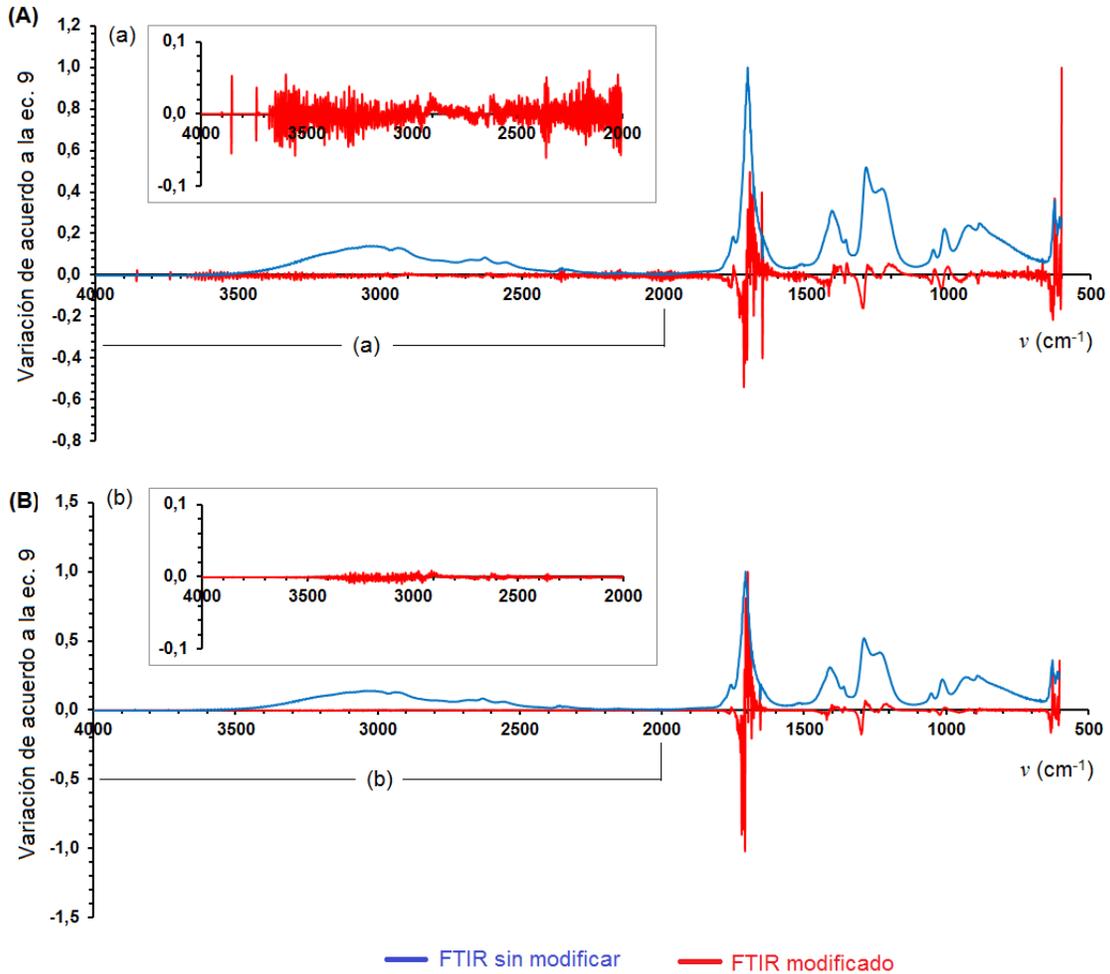


Figura 4. Transformaciones del espectro de FTIR del ácido acético mediante diferentes funciones definidas por la ecuación 9 según Tabla 1. En (a) y (b) se muestra las respectivas amplificaciones de la región entre 2000 y 4000 cm^{-1} .

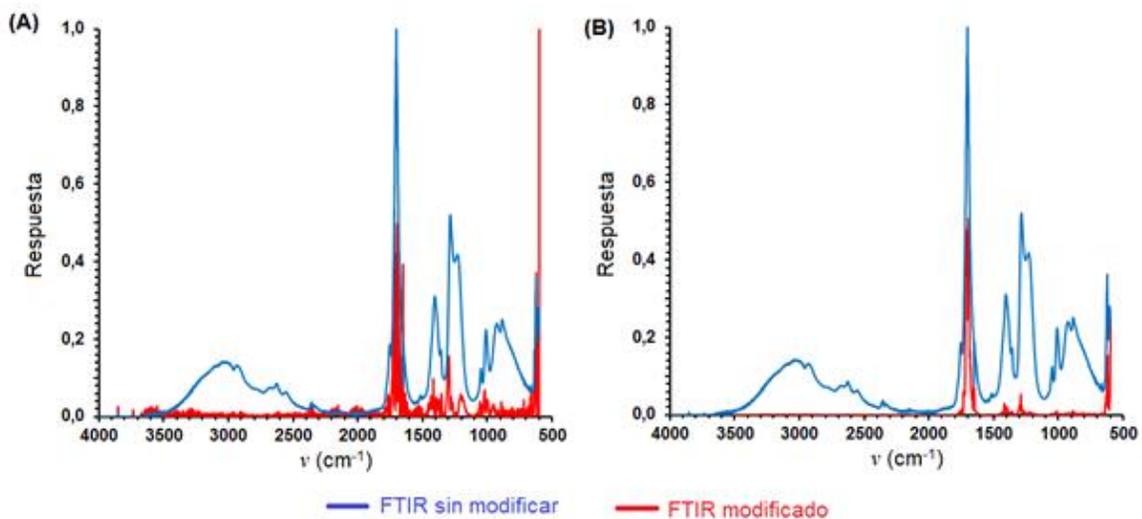


Figura 5. Transformaciones del espectro de FTIR del ácido acético mediante diferentes funciones definidas por la ecuación 10 según Tabla 1. En (a) y (b) se muestra las respectivas amplificaciones de la región entre 2000 y 4000 cm^{-1} .

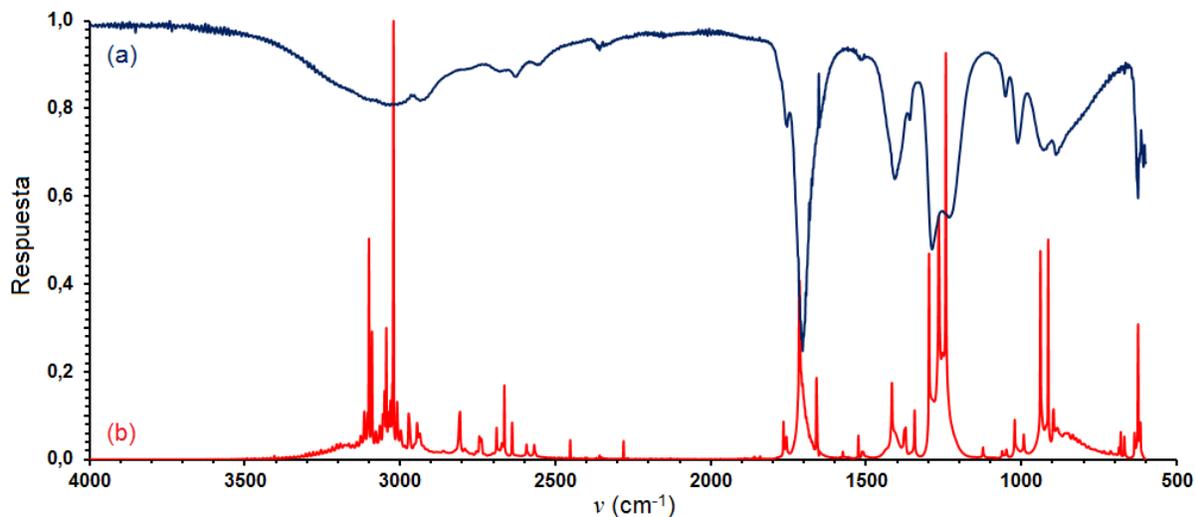


Figura 6. Comparación del espectro FTIR-ATR del ácido acético y el espectro modificado por transformaciones consecutivas a partir de las observaciones realizadas (ecuación 11).

Por otro lado, en la Figura 5 se muestra la transformación resultante de aplicar inicialmente el inverso del valor absoluto de la señal y, posteriormente, efectuar el cálculo de la variación de la señal a lo largo del espectro. Se puede observar que, para $n = -1$, la intensidad de las señales disminuye, sin embargo, se mantiene una correspondencia de las señales con el espectro original. La dificultad resultante de esta transformación radica en lograr la diferenciación de las señales “verdaderas” de las correspondientes al ruido. Para $n = -2$, la disminución de la intensidad de las señales se hace más marcada y la correspondencia en las señales se hace más limitada.

3.5 Combinación de las transformaciones

A partir de los resultados obtenidos es posible establecer transformaciones del espectro que, en principio, minimicen la pérdida de información y facilite la visualización de información no evidente. El procedimiento concluido sugiere que: (i) se debe minimizar el error manifiesto en la fluctuación de los datos. Esto es posible mediante filtros o técnicas de suavizado.

A manera de ejemplo, al espectro de prueba se le aplicó la técnica de promedios consecutivos dentro de un rango fijo, a lo largo de todo el espectro y un número definido de ciclos (10 ciclos).

Posteriormente, se realizó la siguiente transformación:

$$a_{2,j} = \frac{a_j}{\sqrt{\left| \frac{1}{a_j} - \frac{1}{a_{j-1}} \right|}} = a_j \sqrt{\frac{a_j \times a_{j-1}}{a_{j-1} - a_j}} \quad (16)$$

donde $a_{2,j}$ es la absorbancia transformada correspondiente al espectro diferencial modificado. El resultado de la transformación se muestra en la Figura 6. El efecto de esta transformación muestra que es posible obtener un espectro donde los puntos críticos y las señales se pongan de manifiesto mediante señales estrechas. En principio, este tipo de transformaciones pueden ser de utilidad para el análisis cualitativo de sistemas de mayor complejidad. Desde un punto de vista cuantitativo, no se observa una correspondencia entre los valores de absorbancia, lo que pone de manifiesto una desventaja para el análisis cuantitativo.

En las transformaciones realizadas se calcula la derivada del inverso de los valores de absorbancia ya que esto trae consigo un incremento de las señales al estar estas definidas entre 0 y 1. Como se mostró previamente el espectro se invierte y la posición de las señales no se altera, así, al calcular el cambio a lo largo de todo el espectro, los puntos críticos puestos de manifiesto en el espectro modificado se corresponden con los obtenidos en el espectro original. Por lo tanto, el efecto de la transformación es más bien hacer pequeño los valores grandes e incrementar los valores pequeños.

Además, el cálculo del cambio trae asociado un efecto en función del cambio, el cual puede entenderse como un aumento de las señales asociadas con cambios pequeños.

Las transformaciones posteriores tienen como fin la eliminación de valores negativos (obtención del valor absoluto de los cambios), cálculo de la raíz cuadrada (para números menores que cero esto conlleva a una amplificación de los valores) y cálculo del inverso (para de este modo hacer pequeño los valores numéricos grandes y grandes los valores pequeños. Dado que los valores de menor absorbancia se habían transformado en valores grandes, estos se transformarán en valores pequeños haciendo que las señales iniciales del espectro con una proporción respecto al máximo apreciable se incrementen en intensidad). Finalmente, el hecho de que la transformación dependa de los cambios más que de los valores, hace que regiones del espectro correspondientes a mínimos relativos se incrementen. Para compensar este efecto, los valores obtenidos son multiplicados por las respectivas absorbancias haciendo que los valores correspondientes a mínimos relativos disminuyan mientras que los valores correspondientes a máximos relativos aumenten.

4. Conclusiones

Se puede concluir que:

El espectro de FTIR puede ser modificado mediante la combinación de transformaciones matemáticas simples. Las transformaciones simples en su mayoría producen un aumento del error, pérdida de información y perturbación de la intensidad relativa de los valores de absorbancia.

La transformación del espectro diferencial de FTIR mediante funciones matemáticas simple tiene asociado la ganancia de información al permitir trabajar con los cambios, los puntos críticos relativos y absolutos presentes en el espectro.

Se debe minimizar el ruido experimental previo a la transformación matemática del espectro diferencial para evitar la contaminación de las señales mediante la amplificación del ruido.

Finalmente, el uso de transformaciones secuenciales del espectro lleva a la obtención de espectros que contienen mayor información y que puede ser de utilidad para comparaciones cualitativas, tras la

adecuada estandarización del mismo. Una secuencia con buenos resultados es: (i) transformar los valores punto a punto mediante el cálculo del inverso, (ii) calcular el espectro diferencial del espectro invertido, (iii) calcular el valor absoluto de cada punto, (iv) hallar la raíz cuadrada, (v) calcular el inverso y (vi) multiplicar por los valores de absorbancia u otro factor que mantenga la proporción relativa de los datos originales.

Agradecimientos

Autores agradecen a Mindtech s.a.s. por los recursos suministrados.

Conflicto de intereses

Los autores declaran no tener conflicto de intereses de ningún tipo en relación a la publicación.

Referencias

1. Lórenz-Fonfría V, Padrós E. The Role and Selection of the Filter Function in Fourier Self-Deconvolution Revisited. *Appl Spectrosc.* 2009; 63:791-799
2. Stuart B. *Infrared spectroscopy: Fundamentals and applications.* Wiley, 2004, pp. 221
3. Nishikida K, Nishio E, Hannah R. *Selected Applications of Modern FT-IR Techniques.* Gordon and Breach Publishers. Tokio, 1995, pp. 281
4. Liu H, Liu S, Huang T, Zhang Z, Hu Y, Zhang T. Infrared spectrum blind deconvolution algorithm via learned dictionaries and sparse representation. *Appl Opt.* 2016; 55:2813-8
5. Trautmann L, Rabenstein R. Functional Transformation Method. In: *Digital Sound Synthesis by Physical Modeling Using the Functional Transformation Method.* Springer, Boston, MA 2003;95-187
6. Gautam R, Vanga S, Ariese F, Siva Umapathy S. Review of multidimensional data processing approaches for Raman and infrared spectroscopy. *EPJ Techniques and Instrumentation* 2015; 8:2-38
7. Povar IG. Functional transformation of experimental data and the chemical model of equilibrium for polynuclear systems-1. Family of auxiliary concentration functions curves with common cross-over point. *Talanta* 1994; 41:1363-1368
8. Rabenstein R. Functional Transformation Method. In: *Digital Sound Synthesis by Physical Modeling Using the Functional Transformation Method.* Springer, Boston, MA 2003;95-187