

CAPÍTULO REIVINDICATORIO MODIFICADO

1. Método de comparación de espectros de un espectro de muestra y al menos un espectro de una biblioteca de referencia, caracterizado por que el método comprende las etapas de:
 - obtener al menos un pico espectral relevante del espectro de muestra, y
 - comparar cada uno de los picos espectrales relevantes con los espectros en la biblioteca de referencia,
 - en donde:
 - los picos espectrales relevantes se identifican a partir de un parámetro de variación del espectro de muestra, y
 - los picos espectrales relevantes se obtienen dentro de una región de interés en el espectro de muestra.
2. El método de comparación de espectros de acuerdo con la Reivindicación 1, en donde:
 - cada uno de los espectros de la biblioteca de referencia comprende al menos un pico espectral de referencia, y
 - el método además comprende la etapa de comparar cada uno de los picos espectrales relevantes de la muestra con cada uno de los picos espectrales de referencia de los espectros de referencia.
3. El método de comparación de espectros de acuerdo con la Reivindicación 2, caracterizado por que además comprende la etapa de:
 - comprobar si hay una equivalencia de uno de los picos espectrales relevantes de la muestra con los picos espectrales de referencia del espectro de referencia, y
 - si se detecta una equivalencia, correlacionar el espectro de la muestra con el espectro de la biblioteca de referencia alrededor del pico espectral relevante de la muestra y el pico espectral de referencia donde se detecta la equivalencia.
4. El método de comparación de espectros de acuerdo con la Reivindicación 3, en donde

la etapa de correlacionar el espectro de muestra con el espectro de la biblioteca de referencia alrededor del pico espectral relevante de la muestra y el pico espectral de referencia se realiza dentro de una ventana espectral, y

el método además comprende el paso de, dentro de la ventana espectral, considerar los valores de absorbancia del espectro de la muestra y del espectro del material de referencia durante la correlación del espectro de muestra con el espectro del material de referencia.

5. El método de comparación de espectros de acuerdo con la Reivindicación 3, en donde, si no se detecta una equivalencia entre uno de los picos espectrales relevantes de la muestra y los picos de referencia espectral de los espectros de referencia, el método además comprende el paso de correlacionar una segunda derivada del espectro de muestra con una segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia en una región de dispersión, la región de dispersión obtenida de la segunda derivada del espectro en la biblioteca de referencia.
6. El método de comparación de espectros de acuerdo con la Reivindicación 5, en donde la etapa de correlacionar el espectro de muestra con el espectro de la biblioteca de referencia y la etapa de correlacionar una segunda derivada del espectro de muestra con una segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia se realizan a través de uno de los siguientes métodos: fórmula de correlación de Pearson, similitud de coseno y coeficiente de correlación de Spearman.
7. Un método de comparación de espectros del espectro de una muestra y al menos un espectro de una biblioteca de referencia, caracterizado por que el método comprende las etapas de:
 - obtener una segunda derivada del espectro de muestra y del espectro en la biblioteca de referencia, y
 - correlacionar la segunda derivada del espectro de muestra con la segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia,
 - en donde la etapa de correlacionar la segunda derivada del espectro de muestra con la segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia se realiza en una región de dispersión, la región de dispersión siendo obtenida de la segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia.

8. El método de comparación de espectros de acuerdo con la Reivindicación 7, en donde la región de dispersión se determina calculando al menos un parámetro de dispersión relacionado con las longitudes de onda de la segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia, el parámetro de dispersión relacionado con un rango de dispersión del espectro de la biblioteca de referencia.
9. El método de comparación de espectros de acuerdo con la Reivindicación 8, en donde, dentro de la región de dispersión, se consideran los valores de absorbancia de la segunda derivada del espectro de muestra y de la segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia durante la correlación de la segunda derivada del espectro de muestra con la segunda derivada del espectro de la biblioteca de referencia.
10. El método de comparación de espectros con la identificación del componente principal de una muestra, caracterizado por que comprende las etapas de:
 - obtener un espectro de la muestra y de una referencia, previamente identificando el componente principal presente en la muestra,
 - correlacionar el espectro de muestra con el espectro de referencia, obteniendo un primer valor de correlación,
 - correlacionar el espectro de referencia con un espectro del componente principal, obteniendo un segundo valor de correlación, y
 - comparando el primer valor de correlación con el segundo valor de correlación.
11. El método de comparación de espectros con la identificación del componente principal de una muestra de acuerdo con la Reivindicación 10, en donde:
 - el método además comprende definir una región de dispersión a partir de una segunda derivada del espectro de referencia,
 - la región de dispersión se obtiene del cálculo de al menos un parámetro de dispersión relacionado con las longitudes de onda de la segunda derivada del espectro de referencia, y
 - los pasos para correlacionar el espectro de muestra con el espectro de referencia y correlacionar el espectro de referencia con el espectro del componente principal de la muestra se llevan a cabo dentro de los límites definidos por la región de dispersión.

12. El método de comparación de espectros con la identificación del componente principal de una muestra de acuerdo con la Reivindicación 11, caracterizado por que además comprende la etapa de restar del valor obtenido para la correlación entre el espectro de referencia con el espectro de la muestra, el valor obtenido en la correlación entre el espectro de referencia con el espectro del componente principal.
13. El método de comparación de espectros con la identificación del componente principal de una muestra de acuerdo con la Reivindicación 12, caracterizado por que además comprende la etapa de:
 - correlacionar, dentro de los límites definidos por la región de dispersión, la segunda derivada del espectro de muestra con la segunda derivada del espectro de referencia, y
 - correlacionar, dentro de los límites definidos por la región de dispersión, la segunda derivada del espectro de referencia con la segunda derivada del espectro del componente principal.
14. El método de comparación entre espectros con la identificación del componente principal de una muestra de acuerdo con la Reivindicación 13, caracterizado por que además comprende la etapa de restar del valor obtenido para la correlación entre la segunda derivada del espectro de muestra con la segunda derivada del espectro de referencia, el valor obtenido de la correlación entre la segunda derivada del espectro de referencia con la segunda derivada del espectro del componente principal.